

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS**  
**CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA**  
**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA**

**LILIANA DE LUCA XAVIER AUGUSTO**

**APLICAÇÃO DA FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL (CFD) NO**  
**ESTUDO DO ESCOAMENTO DE AR E DEPOSIÇÃO DE PARTÍCULAS**  
**EM VIAS AÉREAS PULMONARES**

**SÃO CARLOS – SP**  
**FEVEREIRO, 2014**

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS**  
**CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA**  
**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA**

**LILIANA DE LUCA XAVIER AUGUSTO**

**APLICAÇÃO DA FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL (CFD) NO**  
**ESTUDO DO ESCOAMENTO DE AR E DEPOSIÇÃO DE PARTÍCULAS**  
**EM VIAS AÉREAS PULMONARES**

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de São Carlos como requisito para obtenção do grau de Mestre em Engenharia Química.

Orientador: Prof. Dr. José Antônio Silveira Gonçalves

Co-orientadora: Profa. Dra. Gabriela Cantarelli Lopes

**SÃO CARLOS – SP**

**FEVEREIRO, 2014**

**Ficha catalográfica elaborada pelo DePT da  
Biblioteca Comunitária da UFSCar**

A923af Augusto, Liliana de Luca Xavier.  
Aplicação da fluidodinâmica computacional (CFD) no estudo do escoamento de ar e deposição de partículas em vias aéreas pulmonares / Liliana de Luca Xavier Augusto. -- São Carlos : UFSCar, 2014.  
107 f.

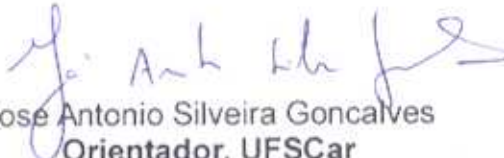
Dissertação (Mestrado) -- Universidade Federal de São Carlos, 2014.

1. Engenharia química. 2. Vias respiratórias humanas. 3. Aerossóis - deposição. 4. Fluidodinâmica computacional. I. Título.


CDD: 660 (20<sup>a</sup>)

MEMBROS DA BANCA EXAMINADORA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE LILIANA DE LUCA XAVIER AUGUSTO APRESENTADA AO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS, EM 28 DE FEVEREIRO DE 2014.

BANCA EXAMINADORA:

  
José Antonio Silveira Gonçalves  
Orientador, UFSCar

  
Gabriela Cantarelli Lopes  
Coorientadora, UFSCar

  
Vádila Giovana Guerra Béttega  
UFSCar

  
Rodrigo Béttega  
UFSCar

  
Cintia Soares  
UFSC

# Agradecimentos

Agradeço a minha família pelo apoio e incentivo nas decisões, em especial a meus pais, Braz e Marília, pelo amor incondicional.

Aos professores Dr. José Antônio Silveira Gonçalves e Dra. Gabriela Cantarelli Lopes pela oportunidade, orientação e ensinamentos fundamentais para o desenvolvimento deste trabalho. Ao professor Dr. Thiago Faggion de Pádua, pelas ideias e discussões sempre interessantes.

Aos amigos de CFD Gabriel, Gladson, Maribel, Christian e Conrado pela alegre companhia e troca de conhecimentos essenciais para o desenvolvimento das atividades. Aos amigos Paula, Marcos Paulo, Juliana, Filipe, Samirys, João Victor, Tatiane, Priscila, Carlos Eduardo e João pela amizade construída durante este tempo em São Carlos.

Ao Rodolpho, por tornar todos os dias mais especiais e me apoiar sempre.

Ao Departamento de Engenharia Química (DEQ) e ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química (PPGEQ) pela infraestrutura e recursos disponibilizados para o desenvolvimento da dissertação.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pela bolsa de estudos.

A todos aqueles que de alguma forma contribuíram para a realização das atividades.

*“De tudo, ficaram três coisas:  
A certeza de que estamos sempre recomeçando...  
A certeza de que precisamos continuar...  
A certeza de que seremos interrompidos antes de terminar...  
Portanto devemos fazer da interrupção um caminho novo...  
Da queda, um passo de dança...  
Do medo, uma escada...  
Do sonho, uma ponte...  
Da procura, um encontro” ...*

**Fernando Pessoa**

# Resumo

O processo de industrialização e o rápido crescimento dos centros urbanos levaram a uma maior incidência de doenças respiratórias e, conseqüentemente, ao início dos estudos envolvendo deposição de partículas nas vias respiratórias humanas. Este trabalho utilizou a Fluidodinâmica Computacional (CFD) para avaliar o escoamento de ar e a deposição de partículas nos brônquios do sistema respiratório humano, considerando três ramificações. O modelo foi validado através da comparação com dados experimentais disponíveis na literatura. Foram consideradas quatro vazões de entrada, correspondendo às condições de sono, repouso, atividade moderada e atividade intensa de um indivíduo homem adulto, com diâmetro de partícula variando de 1 a 10  $\mu\text{m}$ . Foi observado que o fluxo de ar foi mais intenso região interna do modelo, uma vez que foi utilizado um perfil parabólico na entrada, e a presença de escoamento secundário. A deposição da partícula aumentou com a intensidade da atividade do indivíduo devido a uma maior quantidade de movimento das partículas, resultando em uma maior deposição por impactação inercial. Além disso, as técnicas de CFD foram utilizadas para comparar o processo de deposição das partículas durante a inalação seguida de suspensão da respiração e expiração, separadamente. Foi observada uma maior deposição durante a suspensão da respiração, justificando as recomendações médicas para suspender a respiração durante alguns segundos depois da inalação de aerossóis farmacêuticos. Por fim, os mecanismos físicos de sedimentação gravitacional, difusão Browniana e impactação inercial foram avaliados e indicaram que a sedimentação gravitacional é mais atuante para partículas maiores, enquanto o mecanismo difusional tem maior importância para partículas com diâmetros menores, de forma que ambos têm maior influência em situações envolvendo baixa velocidade. Dessa forma, pode-se concluir que as ferramentas de CFD são viáveis e podem ser utilizadas para representar o fenômeno físico de escoamento de ar e de deposição de partículas na porção do sistema respiratório considerada neste trabalho.

**Palavras-chave:** Vias respiratórias humanas; Deposição de partículas; Fluidodinâmica computacional (CFD).

# Abstract

The industrialization process and the fast growth of cities lead to an increase of respiratory diseases and, therefore, lead to the beginning of studies involving particle deposition in human lung airways. This work used Computational Fluid Dynamics (CFD) to evaluate the air flow and particle deposition process in three bifurcations of human respiratory system bronchia, considering three ramifications. The model has been validated by the comparison with experimental data available in the literature. It was considered four inlet rates, which correspond to sleep, resting, moderate activity and intense activity breathing conditions of adult male, with particles diameters varying from 1 to 10  $\mu\text{m}$ . It was observed that the air flow is more intense in the inner region of the model, since it was used a parabolic velocity profile at the inlet, and the presence of secondary motion. The particle deposition increased with the intensity of the activity due to higher momentum of the particles, resulting in greater deposition by inertial impaction. Furthermore, CFD techniques were used to compare the particle deposition process during inhalation and further breath holding and exhalation, separately. It was observed a higher number of deposited particles during breath holding when compared with exhalation, justifying the medical recommendations to hold the breath during few seconds after the inhalation of pharmaceutical aerosols. Lastly, the physical mechanisms of gravitational sedimentation, Brownian diffusion and inertial impaction were evaluated and indicated that gravitational sedimentation is more active for bigger particles, while Brownian diffusion has more importance for particles with smaller diameters, and both have more influence in situations involving low speed. Therefore, it can be concluded that CFD is a viable technique and it can be used to represent the physical phenomena of air flow and particle deposition in the portion of respiratory system considered in this work.

**Keywords:** Human airways; Particle deposition; Computational fluid dynamics (CFD).



# Lista de Figuras

Figura 3.1 - Regiões do sistema pulmonar. ....	19
Figura 3.2 - Gerações da árvore respiratória a partir da traqueia. ....	20
Figura 3.3 - Deposição fracionada para diferentes regiões do sistema respiratório: lobos superior esquerdo (LU), inferior esquerdo (LL), superior direito (RU), intermediário direito (RM), inferior direito (RL).....	23
Figura 3.4 - Mecanismos de deposição de material particulado.....	25
Figura 3.5 - Exemplo de malha estruturada.....	36
Figura 3.6 - Identificação em uma malha estruturada em (a) 2D e (b) 3D.....	36
Figura 3.7 - Exemplos de malhas não-estruturadas.....	37
Figura 3.8 - Volume de controle centrado no (a) centro e (b) vértice da célula.....	38
Figura 3.9 - Abordagens para escoamentos multifásicos. ....	41
Figura 4.1 - Esquema de (a) quatro gerações e (b) três bifurcações.....	47
Figura 4.2 - Dimensões do modelo morfométrico tridimensional. ....	48
Figura 4.3 - Geometrias (a) completa e (b) considerando simetria. ....	49
Figura 4.4 - Comparação de perfil de velocidade considerando (a) simetria e (b) geometria completa.....	50
Figura 4.5 - Monitoramento da deposição no teste de independência de malha. ....	51
Figura 4.6 - Detalhes da malha numérica nas (a) sextas e (b) terceira gerações. ....	52
Figura 4.7 - Detalhes da malha numérica nas (a) quarta e (b) quintas gerações. ....	53
Figura 4.8 - Esquema do sistema utilizado por Kim e Fisher (1999).....	54
Figura 4.9 - Validação do modelo para a primeira bifurcação. ....	55
Figura 4.10 - Validação do modelo para a segunda bifurcação.....	56
Figura 5.1 - Perfil de velocidade na entrada da terceira geração.....	60
Figura 5.2 - Campos de velocidade para condições de (a) sono, (b) repouso e atividades (c) moderada e (d) intensa. ....	62
Figura 5.3 - Escoamento secundário para condições de (a) sono e (b) repouso.....	63
Figura 5.4 - Escoamento secundário para condições de atividade (c) moderada e (d) intensa.....	63
Figura 5.5 - Eficiências de deposição para situações de (a) sono, (b) repouso e atividades (c) moderada e (d) intensa. ....	67
Figura 5.6 - Linhas de corrente do fluido e trajetória das partículas para condições de (a) sono e (b) repouso. ....	69
Figura 5.7 - Linhas de corrente do fluido e trajetória das partículas para condições de atividades (a) moderada e (b) intensa. ....	70
Figura 5.8 - Campos de velocidade no início da suspensão da respiração.....	74
Figura 5.9 - Deposição de partículas para período de inspiração.....	75
Figura 5.10 - Comparação para situações de expiração e suspensão da respiração. ....	76
Figura A.1 - Identificação das gerações. ....	94

# Lista de Tabelas

Tabela 1.1 - As dez maiores causas de morte no mundo.....	14
Tabela 4.1 - Dimensões do modelo adotado por Zhang et al. (2002).....	49
Tabela 5.1 - Condições respiratórias. ....	59
Tabela 5.2 - Vazões mássicas de ar nas gerações 4 e 5. ....	65
Tabela 5.3 - Valores das constantes para o cálculo de $C_D$ .....	72
Tabela 5.4 - Comparação da deposição para diferentes mecanismos físicos, para condição respiratória de sono. ....	79
Tabela 5.5 - Comparação da deposição para diferentes mecanismos físicos, para condição respiratória de atividade intensa. ....	79
Tabela A.1 - Números adimensionais de Reynolds, Stokes e Froude para condição de sono.....	94
Tabela A.2 - Números adimensionais de Reynolds, Stokes e Froude para condição de repouso .....	96
Tabela A.3 - Números adimensionais de Reynolds, Stokes e Froude para condição de atividade moderada.....	99
Tabela A.4 - Números adimensionais de Reynolds, Stokes e Froude para condição de atividade intensa .....	101

# Lista de Abreviaturas e Siglas

AI	Região Alveolar
AVC	Acidente Vascular Cerebral
bb	Região Bronquiolar
BB	Região Bronquial
CFD	Fluidodinâmica Computacional ( <i>Computational Fluid Dynamics</i> )
CETESB	Companhia Ambiental do Estado de São Paulo
CHAM	<i>Concentration Head and Momentum Limited</i>
CONAMA	Conselho Nacional do Meio Ambiente
DE	Eficiência de Deposição Média por Ramificação
DEP's	Partículas Provenientes da Emissão de Diesel ( <i>Diesel exhaust particulate</i> )
DF	Eficiência de Deposição Fracionada
DPM	<i>Discrete Phase Model</i>
DPOC	Doença Pulmonar Obstrutiva Crônica
ET	Região Extratorácica
ET1	Subdivisão Anterior da Região Extratorácica
ET2	Subdivisão Posterior da Região Extratorácica
G1	Primeira Geração de Vias Respiratórias
G3	Terceira Geração de Vias Respiratórias
G4	Quarta Geração de Vias Respiratórias
G5	Quinta Geração de Vias Respiratórias
G6	Sexta Geração de Vias Respiratórias
LU	Lobo Superior Esquerdo
LL	Lobo Inferior Esquerdo
RU	Lobo Superior Direito
RM	Lobo Intermediário Direito
RL	Lobo Inferior Direito
MDF	Método das Diferenças Finitas
MP2,5	Partículas Inaláveis Finas
MP10	Partículas Inaláveis

MVF	Método dos Volumes Finitos
OMS	Organização Mundial da Saúde
PISO	<i>Pressure-Implicit with Splitting of Operators</i>
PRIME	<i>Pressure Implicit Linked Equations</i>
PTS	Partículas Totais em Suspensão
QUICK	<i>Quadratic Upstream Interpolation Convective Scheme Kinetics</i>
RMS	Média quadratic ( <i>Root Mean Square</i> )
SIMPLE	<i>Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations</i>
SIMPLEC	<i>SIMPLE-Consistent</i>
UDF	Função Definida pelo Usuário ( <i>User Defined-Function</i> )
VC	Volume de Controle

**Números Adimensionais:**

Co	Número de Courant
Fr	Número de Froude
Kn	Número de Knudsen
Re	Número de Reynolds
Re <sub>p</sub>	Número de Reynolds da Partícula
St	Número de Stokes

# Lista de Símbolos

$C_C$	Fator de Escorregamento ou de Correção de Cunningham [-]
$C_D$	Coefficiente de Arraste [-]
$d$	Diâmetro da Via Respiratória [m]
$d_p$	Diâmetro da Partícula [m]
$D$	Difusividade da Partícula no Fluido [ $m^2 s^{-1}$ ]
$F_B$	Força Relativa ao Mecanismo de Difusão Browniana [N]
$F_D$	Força de Arraste [N]
$\mathbf{F}_{total}$	Vetor Somatório de Forças [N]
$g$	Aceleração da Gravidade [ $m s^{-2}$ ]
$K$	Constante de Proporcionalidade [-]
$k_B$	Constante de Boltzmann [ $J K^{-1}$ ]
$L$	Comprimento Característico [m]
$m_p$	Massa de Uma Única Partícula [kg]
$\dot{m}$	Massa de Gás Deslocada [ $kg s^{-1}$ ]
$n$	Número de Partículas [-]
$p$	Pressão [Pa]
$S$	Vetor Posição da Partícula no Espaço [m]
$T$	Temperatura absoluta [K]
$T$	Tempo [s]
$v$	Velocidade [ $m s^{-1}$ ]
$v_f$	Velocidade do Fluido [ $m s^{-1}$ ]
$v_p$	Velocidade da Partícula [ $m s^{-1}$ ]
$U$	Vetor Velocidade do Fluido [ $m s^{-1}$ ]
$U_{m\acute{a}x}$	Velocidade Máxima do Fluido [ $m s^{-1}$ ]
$U_p$	Vetor Velocidade da Partícula [ $m s^{-1}$ ]
$V_S$	Velocidade Terminal [ $m s^{-1}$ ]
$x_p$	Distância Percorrida pela Partícula [m]

## Letras Gregas:

$\zeta_i$  Números Randômicos, segundo distribuição Gaussiana

$\lambda$	Percurso Livre Médio [m]
$\mu$	Viscosidade Dinâmica do Fluido [Pa s]
$\nu$	Viscosidade Cinemática [ $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$ ]
$\rho$	Massa Específica [ $\text{kg m}^{-3}$ ]
$\rho_p$	Massa Específica da Partícula [ $\text{kg m}^{-3}$ ]
$\rho_f$	Massa Específica do Fluido [ $\text{kg m}^{-3}$ ]
$\tau_v$	Tempo de Resposta da Partícula [s]

# Sumário

<b>Capítulo 1 Introdução</b> .....	13
<b>Capítulo 2 Objetivos de Estudo</b> .....	16
<b>Capítulo 3 Revisão Bibliográfica</b> .....	17
3.1 Respiração e Deposição de Partículas .....	17
3.2 Modelos Morfométricos Pulmonares.....	18
3.3 Classificação das Partículas .....	21
3.4 Eficiência de Deposição.....	22
3.5 Mecanismos Físicos de Deposição .....	24
3.5.1 Sedimentação Gravitacional.....	25
3.5.2 Impactação Inercial .....	27
3.5.3 Difusão Browniana.....	30
3.6 Fluidodinâmica Computacional (CFD) .....	31
3.6.1 Código Computacional.....	33
3.6.2 Malha Numérica.....	35
3.6.3 Métodos Numéricos .....	37
3.6.4 Abordagens Matemáticas .....	40
3.7 Estudos Relacionados .....	41
<b>Capítulo 4 Malha Numérica e Validação do Modelo</b> .....	47
4.1 Confeção da Configuração Geométrica .....	47
4.2 Geração da Malha Numérica .....	50
4.3 Validação do Modelo.....	53
<b>Capítulo 5 Simulações</b> .....	57
5.1 Influência do Diâmetro da Partícula e da Condição Respiratória.....	57
5.1.1 Modelagem Matemática e Configuração da Simulação.....	57
5.1.2 Resultados .....	61
5.2 Comparação da Deposição de Partículas na Inspiração, Suspensão da Respiração e Expiração .....	71
5.2.1 Modelagem Matemática e Configuração da Simulação.....	71
5.2.2 Resultados .....	74
5.3 Análise da Ação dos Mecanismos Físicos .....	78
5.3.1 Resultados .....	79
<b>Capítulo 6 Considerações Finais</b> .....	81
<b>Sugestões para Trabalhos Futuros</b> .....	82
<b>Referências</b> .....	83
<b>APÊNDICE A</b> .....	94
<b>APÊNDICE B</b> .....	104

# Capítulo 1

## Introdução

O processo de industrialização e o rápido crescimento das cidades começaram a afetar a qualidade de vida da população e despertaram o interesse pelo estudo da qualidade do ar na década de 1970, sobretudo em interiores (monitoramento *indoor*), segundo exposto por Brickus e Aquino Neto (1999).

Dentre os principais poluentes do ar estão o material particulado, o ozônio ( $O_3$ ), o dióxido de nitrogênio ( $NO_2$ ), o dióxido de enxofre ( $SO_2$ ), os hidrocarbonetos e o monóxido de carbono ( $CO$ ). O material particulado é uma mistura complexa de partículas sólidas com diâmetro reduzido de substâncias orgânicas e inorgânicas suspensas no ar, provenientes da queima de combustíveis fósseis e de biomassa vegetal, emissões de amônia na agricultura e de obras e pavimentação de vias urbanas.

A deposição de partículas no trato respiratório é responsável por uma série de doenças respiratórias, como carcinomas, enfisemas e silicoses. O tipo e a severidade da enfermidade estão ligados à concentração, composição química e forma de distribuição das partículas depositadas nas vias aéreas. Segundo a Organização Mundial da Saúde (OMS, 2013), além de doenças respiratórias, a inalação crônica de materiais particulados pode causar também doenças cardiovasculares. Ainda de acordo com a OMS, dentre as dez maiores causas de morte no mundo, três são relacionadas a doenças respiratórias, como apresentado na Tabela 1.1: infecção do trato inferior respiratório, doença pulmonar obstrutiva crônica (DPOC) e câncer de traqueia, brônquios e pulmão. Os dados revelam que estudos relacionados ao padrão de deposição de partículas nas vias aéreas pulmonares são necessários para auxiliar na compreensão das doenças respiratórias e evitar que estas atinjam grande número de pessoas.

Além disso, o processo de deposição de partículas consiste na forma pela qual algumas enfermidades são tratadas, através de inaladores e broncodilatadores utilizados por pacientes que sofrem de asma e bronquite, por exemplo. Para evitar perdas de



medicamento e garantir que os locais afetados pela doença sejam atingidos, é importante conhecer como estas partículas escoam e se depositam nas vias respiratórias.

Além do prejuízo relacionado à saúde da população, a poluição atmosférica também acarreta maiores gastos ao estado ou município, pois com o aumento de pessoas afetadas por doenças respiratórias, há um maior número de atendimentos médicos e internações hospitalares.

**Tabela 1.1 - As dez maiores causas de morte no mundo.**

<b>Causa da morte</b>	<b>Mortes (em milhões)</b>	<b>Porcentagem de mortes</b>
Cardiopatia isquêmica	7,0	12,9
Acidente vascular cerebral (AVC)	6,2	11,4
Infecção do trato inferior respiratório	3,2	5,9
Doença pulmonar obstrutiva crônica (DPOC)	3,0	5,4
Diarreia	1,9	3,5
HIV/AIDS	1,6	2,9
Câncer de traqueia, brônquios e pulmão	1,5	2,7
Diabete Mellitus	1,4	2,6
Acidentes de trânsito	1,3	2,3
Nascimentos prematuros	1,2	2,2

**Fonte: Adaptado de OMS Fact Sheet nº 310, 2013.**

O estudo do escoamento de ar e da deposição de material suspenso têm grandes aplicações nos campos de medicina e de monitoramento da qualidade do ar. A capacidade de prever os locais onde há maior deposição de partículas, conhecidos como *hot spots*, pode auxiliar no desenvolvimento de inaladores e nebulizadores mais eficazes, capazes de atingir os locais afetados pela doença. Além disso, é fundamental conhecer a forma com que o material particulado proveniente de poeira ou poluição em geral se deposita nas vias aéreas, a fim de evitar que isto seja um risco à saúde da população, e permitir que diagnósticos mais precisos sejam fornecidos. Segundo a OMS (2011), a poluição do ar é o principal risco a saúde, sendo que a poluição *outdoor* (em ambientes externos) é apontada como causa de 1,3 milhões de mortes por ano, enquanto a *indoor* (em ambientes internos) é responsável por aproximadamente 2 milhões mortes

prematuras nos países em desenvolvimento, sendo que quase metade destas mortes ocorre devido à pneumonia em crianças abaixo dos cinco anos.

O perfil do escoamento de ar e o diâmetro das partículas são fatores que influenciam na concentração e no padrão de deposição, de forma que o destino das partículas inaladas depende de seu comportamento aerodinâmico, governado pelo tamanho destas. De acordo com o diâmetro, a partícula ou gota é exposta a diferentes mecanismos de coleta, que a força a deixar as linhas de corrente do fluido inalado e, então, se chocar com as paredes das vias respiratórias, permanecendo depositada. Os principais mecanismos de deposição que atuam nos casos de escoamento no interior das vias aéreas são: difusão Browniana, impactação inercial e sedimentação gravitacional.

Em alguns casos, a determinação do local de deposição de partículas é realizada *in vivo*, em pulmões de indivíduos humanos, através de técnicas de imagens, como realizado nos trabalhos de Bennett (1991) e de Möller et al. (2009). Um método utilizado para conseguir essas imagens é pela inalação de gases traçadores radioativos, que permitem a obtenção do local onde o material particulado presente no gás permanece retido. Porém, esta técnica pode ser prejudicial à saúde dos indivíduos envolvidos na pesquisa e, dessa forma, a Fluidodinâmica Computacional (CFD) pode ser uma alternativa nos estudos de deposição, uma vez que não envolve experimentos *in vivo*, além de acarretar em uma redução do custo e do tempo, como é o caso dos experimentos *in vitro*, nos quais o tempo de execução pode ser alto, assim como o gasto financeiro envolvido. Os métodos que utilizam recursos computacionais para obter os resultados são chamados experimentos *in silico* e vêm sendo utilizados com cada vez mais frequência nas pesquisas relacionadas a sistemas biológicos de alta complexidade, como é o caso do aparato respiratório humano.

Há algumas décadas, as técnicas de CFD eram restritas apenas a áreas da engenharia com alta tecnologia, como a aeronáutica, mas atualmente está expandindo seu campo de atuação para diversos outros ramos. Esta ferramenta é capaz de prever perfis de velocidade, pressão e temperatura de fluidos em escoamento, além de transferência de massa entre fases, através de simulação numérica, sendo uma alternativa promissora para o aperfeiçoamento de projetos de engenharia e pesquisa. A modelagem do escoamento de ar e da deposição de partículas no pulmão humano envolve diversas áreas do conhecimento uma vez que utiliza ferramentas matemáticas e conhecimentos de engenharia aplicados a um sistema biológico.

# Capítulo 2

## Objetivos de Estudo

Este trabalho tem como objetivo geral o estudo do escoamento de ar e da deposição de partículas em uma porção do pulmão humano através da aplicação das técnicas da Fluidodinâmica Computacional (CFD), com o auxílio do pacote comercial de CFD ANSYS® 14.0 e 14.5.

Como objetivos específicos, tem-se:

- a análise da deposição de partículas de diâmetro 1 a 10  $\mu\text{m}$  e em quatro condições respiratórias (sono, repouso, atividade moderada e intensa), durante o movimento de inspiração;
- a comparação da deposição de partículas em situações de expiração e suspensão da respiração, após um período de inspiração;
- a análise da atuação de cada mecanismo físico na deposição de partículas de 1, 5 e 10  $\mu\text{m}$ ;
- a comparação dos resultados numéricos com dados experimentais encontrados na literatura.

# Capítulo 3

## Revisão Bibliográfica

Neste capítulo será apresentada uma revisão dos conceitos relevantes para o entendimento do trabalho e dos principais trabalhos relacionados ao tema, englobando estudos experimentais e numéricos.

### 3.1 Respiração e Deposição de Partículas

A respiração tem a função de repor o oxigênio ( $O_2$ ) gasto pelas células do corpo humano e eliminar o gás carbônico ( $CO_2$ ) produzido durante algumas etapas do metabolismo. Esta troca de ar entre o ambiente e os alvéolos é uma função desempenhada pelo pulmão. Durante a respiração, diversas partículas são inaladas e, quando depositadas nas paredes dos vasos respiratórios, podem ocasionar doenças. Pope e Dockery (2006) apresentaram um breve histórico sobre os efeitos que a matéria fina suspensa no ar tem sobre a saúde, ressaltando aspectos do tempo de exposição às partículas, suas características e a mortalidade relacionada às enfermidades que a inalação destas partículas pode causar.

As doenças causadas pela inalação das partículas variam de acordo com a composição química, tamanho e local de deposição. As partículas provenientes da emissão de diesel, conhecidas como DEPs (do inglês *diesel exhaust particulates*) são compostas, principalmente, por óxidos de nitrogênio e precursores do ozônio e podem acarretar a inflamação das vias respiratórias, além de dar início à asma e a alergias (BERNSTEIN et al., 2004). Outro importante agente causador de doenças respiratórias é a fumaça proveniente do cigarro, responsável por 80% dos casos de bronquite crônica e por grande parte dos casos de enfisema e de doença pulmonar obstrutiva crônica, abreviada por DPOC (BRUCE; PADILLA-PEREZ; ALBALAK, 2000). Em 2005, a OMS apontou a DPOC como causa da morte de 5,4 milhões de pessoas usuárias de tabaco por ano e ainda estima que o número de mortes por DPOC ligadas ao tabaco

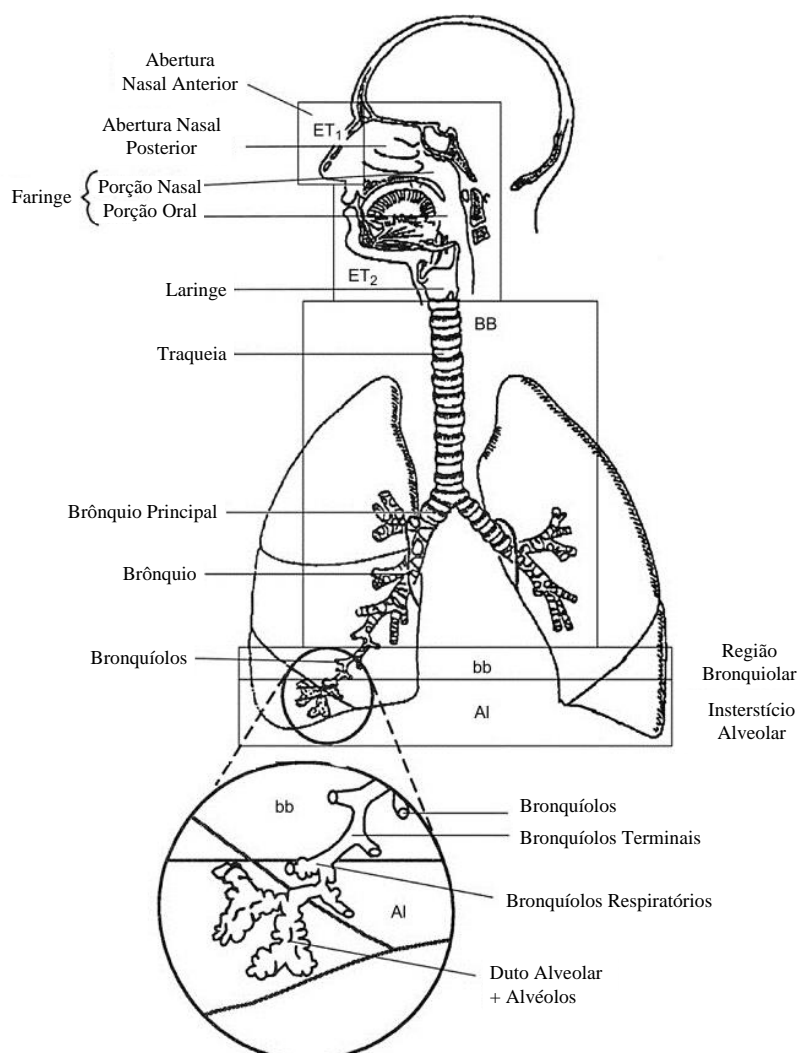
aumentará cerca de 8,3 milhões por ano até 2030. Esta doença também pode ser causada por poluição *indoor*, principalmente em comunidades que ainda utilizam biomassa e carvão como fonte de energia dentro das residências.

O tratamento de algumas dessas doenças respiratórias é realizado com o auxílio de dispositivos inaladores de fármacos, como é o caso da asma e da DPOC e, recentemente, da gripe e do diabetes (IMAI et al., 2012). Assim, é necessário conhecer a forma como as partículas do medicamento se depositam nas vias aéreas. Coates et al. (2004) e Coates et al. (2005) estudaram o efeito do *design* do dispositivo sobre a eficiência de deposição e avaliaram quais são os parâmetros relevantes na performance do aparelho, utilizando as técnicas de CFD e comparando os dados obtidos na simulação numérica com resultados experimentais. Os dados revelados pelas duas metodologias se mostraram próximos, o que demonstra a possibilidade da aplicação de CFD para estes fins.

### **3.2 Modelos Morfométricos Pulmonares**

A análise quantitativa do tamanho e formato é chamada morfometria e é largamente aplicada nos estudos e padronizações em organismos vivos. Uma das principais escolhas na simulação do escoamento de ar no pulmão humano é o modelo morfométrico utilizado para representar as vias respiratórias, que pode resultar em diferenças na velocidade do gás e, conseqüentemente, da deposição de partículas. Geralmente, o aparato respiratório é dividido em quatro regiões: extratorácica (ET), bronquial (BB), bronquiolar (bb) e alveolar (AI). A região ET é subdividida em cavidade nasal anterior (ET1), cavidade nasal posterior, laringe, faringe e boca (ET2), enquanto a região BB consiste na traqueia e brônquios, e a divisão bb em bronquíolos e bronquíolos terminais. Já a região AI é composta pelos dutos alveolares (ICRP, 1994). Todas essas regiões estão apresentadas na Figura 3.1. O termo modelo morfométrico pulmonar está relacionado com as regiões bronquial, bronquiolar e alveolar, enquanto a região extratorácica age como um filtro, a qual determina a fração de partículas que, de fato, atingem o pulmão (HOFMANN, 2011).

**Figura 3.1 - Regiões do sistema pulmonar.**



**Fonte: Adaptado de ICRP, 1994.**

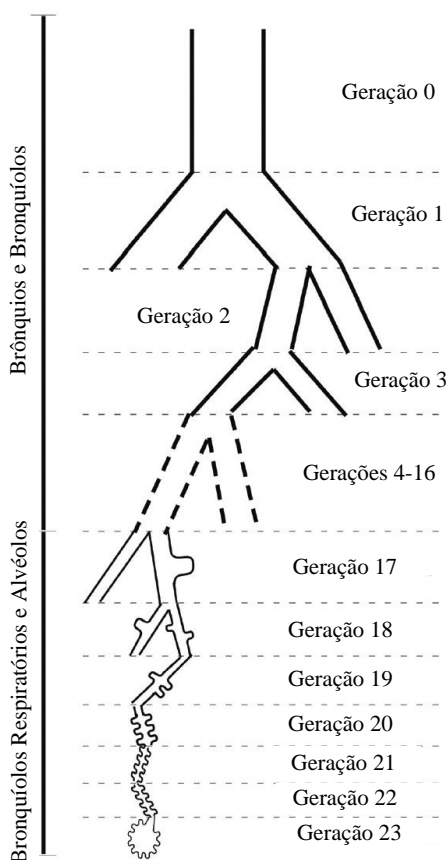
O modelo da bifurcação de uma via respiratória em outras duas pode ocorrer de forma simples e simétrica, como mostrado em ICRP (1994) e por Weibel<sup>1</sup> (1963 apud HOFMANN, 2011), ou considerando observações experimentais, resultando em bifurcações assimétricas, como estudado por Koblinger e Hofmann (1985). De forma simplificada, a rede das vias respiratórias é composta por bifurcações sucessivas aproximadamente cilíndricas em formato de Y. O modelo simétrico é bastante utilizado em simulações numéricas e, apesar de ser simples e idealizado, pode ser suficiente para a análise da deposição de material sólido nas ramificações. A assimetria representa de forma mais realista as vias aéreas de um pulmão humano, porém torna-se mais complexo obter as dimensões das ramificações para esta situação. Além de Weibel<sup>1</sup>

<sup>1</sup> WEIBEL, E. R. **Morphometry of The Human Lung**, 1ª ed. New York: Springer Verlag, 1963, 151 p.

(1963 apud HOFMANN, 2011), Raabe et al. (1976) também apresentaram um vasto banco de dados com as características morfométricas das bifurcações da região bronquial da árvore pulmonar humana, além de dados para o sistema respiratório para ratos, cachorros e hamsters.

De forma a facilitar a localização e identificação das vias respiratórias no sistema respiratório, Weibel<sup>1</sup> (1963 apud HOFFMAN, 2011) criou um sistema de numeração destas vias em relação à traqueia, completando diversas gerações, como ilustrado na Figura 3.2. A traqueia é tipicamente identificada pelo número 0, pela convenção apresentada em ICRP (1994) e por Weibel<sup>1</sup> (1963 apud HOFMANN, 2011), ou pelo número 1, como é o caso dos trabalhos de Koblinger e Hofmann (1985) e Yeh e Schum (1980). O modelo mais utilizado para a representação de um pulmão humano é aquele proposto por Weibel<sup>1</sup> (1963, apud HOFMANN, 2011), que é composto por 23 gerações de vias aéreas.

**Figura 3.2 - Gerações da árvore respiratória a partir da traqueia.**



**Fonte: Adaptado de George e Hlastala (2011).**

<sup>1</sup> WEIBEL, E. R. **Morphometry of The Human Lung**, 1ª ed. New York: Springer Verlag, 1963, 151 p.

O avanço da medicina nas últimas décadas permitiu a obtenção de imagens da árvore pulmonar de indivíduos específicos através das técnicas de ressonância magnética e tomografia computadorizada. Takano et al. (2006), Xi e Longest (2007) e Imai et al. (2012) realizaram estudos utilizando um modelo específico e realista das vias respiratórias, obtidas através de métodos computadorizados disponíveis no campo da medicina. Geralmente, estas técnicas limitam a porção do aparato respiratório a ser reproduzida, uma vez que a região alveolar é composta por vias muito pequenas, difíceis de serem reproduzidas em imagens obtidas por tomografia computadorizada ou por ressonância magnética.

### **3.3 Classificação das Partículas**

Segundo a Companhia Ambiental do Estado de São Paulo (CETESB) e o Conselho Nacional do Meio Ambiental (CONAMA), poluente é considerado qualquer substância presente no ar que possa torná-lo impróprio, nocivo ou ofensivo à saúde, interferindo no bem-estar público e causar danos aos materiais, à fauna e à flora.

A CETESB classifica os poluentes do ar como compostos de enxofre, compostos de nitrogênio, compostos orgânicos, monóxido de carbono, compostos halogenados, metais pesados, oxidantes fotoquímicos e material particulado. Esta última classe representa um conjunto de poluentes constituídos por poeiras, fumaças e quaisquer materiais sólidos ou líquidos suspensos no ar, provenientes das mais diversas fontes, e pode ser subdividida em quatro subclasses:

- partículas totais em suspensão (PTS) são aquelas cujo diâmetro aerodinâmico é menor que 50  $\mu\text{m}$ , sendo que parte delas pode ser inalada e causar problemas à saúde, e outra parte pode afetar a qualidade de vida, pois interfere nas características estéticas do ambiente;
- partículas inaláveis (MP10) correspondem ao grupo de partículas que possuem diâmetro aerodinâmico menor que 10  $\mu\text{m}$  e, dependendo do tamanho, podem penetrar até os alvéolos ou ficarem retidas na parte superior do sistema respiratório;
- partículas inaláveis finas (MP2,5) são o conjunto de partículas com diâmetro aerodinâmico menor que 2,5  $\mu\text{m}$ . Devido ao pequeno tamanho, elas penetram até os alvéolos pulmonares;
- fumaça é o material particulado suspenso no ar proveniente da combustão.



A OMS (1999) também classifica as partículas em frações de acordo com o tamanho. As partículas inaláveis são todas aquelas que podem ser respiradas pelo nariz ou pela boca e estão ligadas ao câncer nasal. Já as partículas torácicas são capazes de penetrar nas primeiras gerações do trato respiratório e podem ser apontadas como causa de algumas doenças respiratórias. As partículas que penetram até os bronquíolos terminais, nas regiões de trocas gasosas, são chamadas partículas respiráveis e oferecem grande risco à saúde.

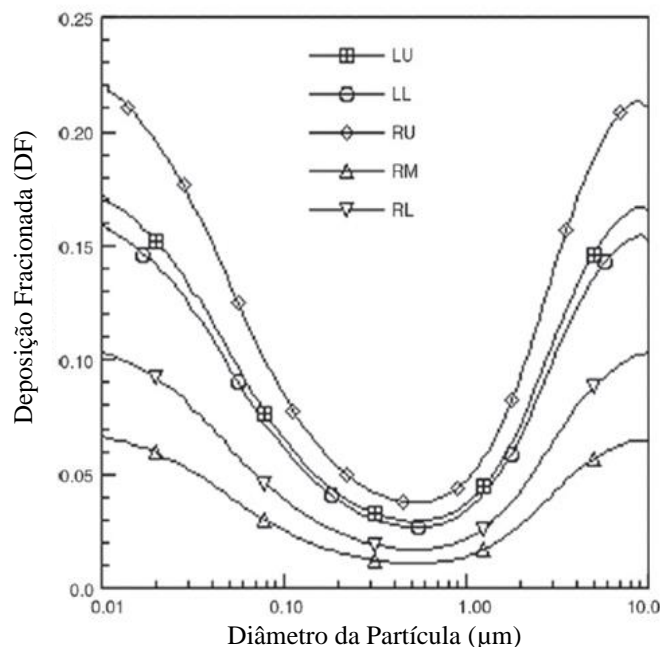
### **3.4 Eficiência de Deposição**

Uma forma de se relacionar a quantidade de partículas que permaneceram retidas nas paredes das vias aéreas com as partículas que entraram no sistema respiratório é avaliar a eficiência de deposição. Esta estimativa pode ser feita baseando-se em todo o sistema respiratório ou em determinados grupos de gerações. Segundo Hofmann (2011), a deposição pode ser quantificada de quatro diferentes formas: deposição total, regional, por geração e lobar.

A deposição total é aquela que leva em consideração o material depositado em todas as regiões do aparato respiratório, podendo ser determinada experimentalmente pela medida da concentração de aerossóis inalados e expirados, em condições específicas e controladas (HINDS, 1999). Para este caso, as curvas de eficiência de deposição em função do diâmetro da partícula têm um formato em U, de forma que, para diâmetros pequenos, menores que  $0,1 \mu\text{m}$  a deposição é governada pelo movimento Browniano e para partículas maiores que  $1 \mu\text{m}$ , o mecanismo de sedimentação gravitacional é mais atuante na coleta das partículas (HOFMANN, 2011). A deposição regional é expressa para cada região do aparato respiratório (extratorácica ou bronquial, por exemplo). Da mesma forma que a deposição total, as curvas deste tipo de deposição em função do tamanho das partículas também apresentam formato em U, como mostra a Figura 3.3.

Apesar de muitos estudos retratarem somente a deposição total, a deposição local tem grande importância na avaliação dos riscos à saúde, uma vez que a localização das partículas inaladas depositadas tem relação direta com enfermidades respiratórias (HINDS, 1999).

**Figura 3.3 - Deposição fracionada para diferentes regiões do sistema respiratório: lobos superior esquerdo (LU), inferior esquerdo (LL), superior direito (RU), intermediário direito (RM), inferior direito (RL).**



Fonte: Adaptado de Asgharian, Hoffman e Bergmann (2001).

A eficiência de deposição média por ramificação (DE) está relacionada com as partículas que penetraram em uma determinada via respiratória e lá permaneceram depositadas (LONGEST e VINCHURKAR, 2009), sendo definida por:

$$DE = \frac{\text{partículas depositadas na bifurcação } i}{\text{partículas que entraram na bifurcação } i} \quad (3.1)$$

A deposição fracionada (DF) corresponde à quantidade de partículas depositadas em uma bifurcação específica, em relação à quantidade de partículas que entraram em toda a região pulmonar considerada (LONGEST e VINCHURKAR, 2009), que pode ser calculada como:

$$DF = \frac{\text{partículas depositadas na bifurcação } i}{\text{partículas que entraram na região}} \quad (3.2)$$

Pelas definições, observa-se que os valores de DE não podem ser somados diretamente, como é o caso da DF, que pode ser obtida pela soma das DF's de cada bifurcação individual.

Chen et al. (2012a) e Chen et al. (2012b) estimaram a eficiência de deposição média por ramificação em seus estudos pela relação entre a massa depositada e a massa que entrou em um volume específico do trato respiratório.

A deposição lobar é aquela analisada em cada um dos cinco lobos pulmonares (esquerdo superior, esquerdo inferior, direito superior, direito médio e direito inferior) separadamente. Asgharian, Hofmann e Bergmann (2001) apresentaram dados da eficiência lobar e verificaram que esta também exibe um formato em U, em função do tamanho da partícula.

### **3.5 Mecanismos Físicos de Deposição**

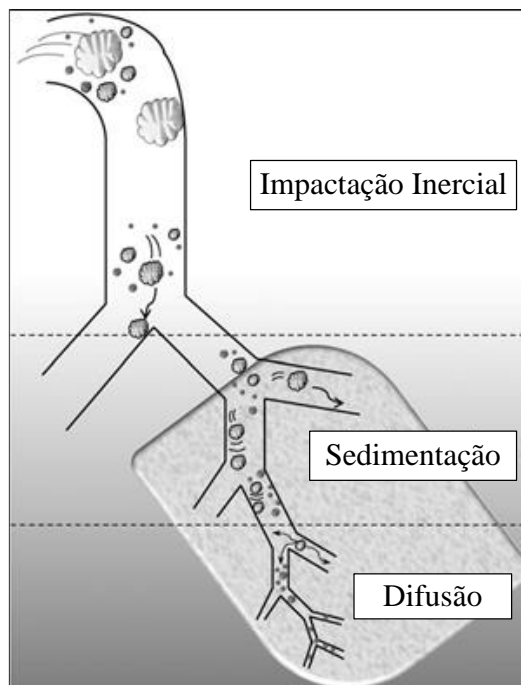
A probabilidade de inalação de partículas suspensas no ar está relacionada com diversos fatores, como movimento do ar ao redor da partícula, taxa de respiração e propriedades físicas da partícula. Este último governa o mecanismo físico ao qual a partícula está sujeita quando se movimenta ao longo das vias aéreas, podendo fazer com que ela deixe as linhas de corrente do fluido e, eventualmente, se deposite nas superfícies das vias pulmonares. Segundo Hofmann (2011), os principais fatores que regem os mecanismos que irão agir sobre as partículas são:

- diâmetro, forma e massa específica da partícula;
- parâmetros geométricos da via respiratória, como raio e angulação da ramificação, e do campo gravitacional;
- aspectos da respiração, como umidade, tempo de residência e velocidade do escoamento.

A Figura 3.4 ilustra os mecanismos de sedimentação gravitacional, impactação inercial e difusão, conhecido como difusão Browniana, que são os que mais influenciam na deposição quando se trata da inalação de partículas suspensas no ar. Além destes, existem também os mecanismos eletroforético e interceptação direta. O mecanismo eletroforético tem maior influência quando a partícula ou o coletor (no caso, a parede da via respiratória) possuem carga elétrica. Logo, este mecanismo tem pouca ou nenhuma influência no caso particular da deposição de partículas em vias pulmonares. A interceptação direta ocorre quando a partícula se choca com a parede da via enquanto

segue a linha de corrente, sendo mais importante nos casos envolvendo fibras alongadas.

**Figura 3.4 - Mecanismos de deposição de material particulado.**



Fonte: Adaptado de Carvalho, Peters e Williams III (2011).

A seguir serão apresentados alguns detalhes dos mecanismos de deposição citados neste item e suas principais características.

### 3.5.1 Sedimentação Gravitacional

A sedimentação gravitacional é resultado da ação da gravidade sobre a partícula e pode causar um desvio da sua trajetória. É um mecanismo dominante em regiões onde a velocidade é baixa e o tempo de residência é alto (COURY, 1983). Quando uma partícula é solta em um fluido, ela é acelerada pela ação da gravidade até atingir velocidade de queda constante, chamada velocidade terminal. Para que o mecanismo seja considerável, as partículas devem possuir massa suficiente para atingir uma velocidade terminal apreciável em relação à velocidade das linhas de corrente do gás pela qual a partícula viaja no interior das vias respiratórias. No caso de um escoamento lento horizontal, a força gravitacional altera a direção do material particulado de forma a sedimentá-lo na superfície inferior. Em um escoamento vertical, a gravidade pode

acentuar a deposição das partículas se as linhas de corrente estiverem na mesma direção do campo gravitacional; caso contrário, este mecanismo tende a dificultar a deposição (LICHT, 1988).

No caso específico da deposição em vias aéreas pulmonares, este mecanismo é mais importante nas vias menores e na região alveolar, onde o tempo de residência é maior, pois a velocidade é baixa nestes casos, possibilitando que partículas menores atinjam a velocidade terminal e se depositem pelo mecanismo de sedimentação gravitacional. Nas vias horizontais, a sedimentação gravitacional também tem grande influência, uma vez que a velocidade de sedimentação da partícula encontra-se na mesma direção da ação da gravidade.

Um balanço de forças pode ser realizado em uma esfera, juntamente com a segunda lei de Newton, para fornecer a relação que permite calcular a velocidade terminal (CONCHA, 2009):

$$V_s = \frac{\Delta\rho d_p^2 g}{18\mu} \quad (3.3)$$

em que  $V_s$  é a velocidade terminal,  $d_p$  é o diâmetro da partícula,  $\mu$  é a viscosidade dinâmica do fluido,  $g$  é a aceleração da gravidade e  $\Delta\rho = (\rho_p - \rho_f)$ , sendo  $\rho_p$  a massa específica da partícula e  $\rho_f$  a massa específica do fluido.

A Equação (3.3) é conhecida como equação de Stokes, sendo válida para baixos valores de número de Reynolds ( $Re < 1$ ), definido pela Equação (3.4), e partículas com diâmetro maior que  $1 \mu\text{m}$ . Pode-se observar que o tamanho da partícula tem grande influência na velocidade terminal e, conseqüentemente, quanto maior for o material a ser coletado, maior será a deposição pelo mecanismo de sedimentação gravitacional. A consideração de que a massa específica da partícula é muito maior que a massa específica do fluido é razoável e a equação pode ser reescrita substituindo-se  $\Delta\rho$  por  $\rho_p$  (HINDS, 1999):

$$Re = \frac{\rho_f v L}{\mu} \quad (3.4)$$

em que  $v$  é a velocidade do fluido e  $L$  é o comprimento característico (no caso de tubos ou de partículas esféricas, considera-se o diâmetro).

### 3.5.2 Impactação Inercial

A impactação inercial é o fenômeno pelo qual as partículas de aerossóis tendem a continuar sua trajetória devido à inércia e não seguem as linhas de corrente do fluido ou as curvaturas das vias aéreas. Nesses casos, quando há mudança de direção repentina, a força centrífuga age nas partículas que possuem momento suficiente, ocasionando a colisão com as paredes das vias respiratórias. Esse mecanismo é observado, principalmente, nas bifurcações das vias superiores, onde a velocidade é mais alta e, em alguns casos, o escoamento é considerado turbulento (TENA e CLARÀ, 2012). Em geometrias curvas, é comum a ocorrência do escoamento secundário, uma vez que as partículas do centro da via respiratória possuem velocidades mais altas e, por isso, estão sujeitas a uma força centrífuga de maior intensidade do que aquelas próximas à parede (GRADOŃ e ORLICKI, 1990).

O aumento da massa de uma partícula faz com que sua tendência de seguir as linhas de corrente do gás diminua devido à sua inércia (COURY, 1983). Portanto, o mecanismo de impactação inercial é observado com maior frequência quando a matéria suspensa é mais densa e é composta por partículas com diâmetros maiores.

Segundo Hinds (1999), a equação que descreve a força de resistência ao movimento de uma esfera através de um gás foi desenvolvida por Newton a partir da avaliação da balística em bolas de canhão. Dessa forma, a equação é válida para altos valores de número de Reynolds e não poderia ser aplicada a partículas de aerossóis. Newton observou que em um segundo, uma esfera com diâmetro  $d_p$  desloca um volume de gás igual a área projetada da esfera vezes sua velocidade  $v$  (HINDS, 1999). Assim, a massa de gás deslocada ( $\dot{m}$ ) é:

$$\dot{m} = \frac{\pi}{4} \rho_f d_p^2 v \quad (3.5)$$

A força necessária para mover uma esfera através de um gás é conhecida como força de arraste ( $F_D$ ) que, por definição, é igual à taxa de mudança de momento. Esta mudança de momento por unidade de tempo é proporcional ao produto da quantidade de gás deslocada por unidade de tempo e da velocidade relativa do fluido e da esfera sólida (HINDS, 1999):

$$F_D = \frac{\text{mudança de momento}}{\text{tempo}} \propto \dot{m}v \quad (3.6)$$

Assim, substituindo a Equação (3.5) na Equação (3.6) (HINDS, 1999):

$$F_D = K \frac{\pi}{4} \rho_f d_p^2 v^2 \quad (3.7)$$

em que  $K$  é a constante de proporcionalidade.

Para altos valores de Reynolds ( $Re > 1000$ ), a constante de proporcionalidade é independente da velocidade. Uma relação mais geral é dada quando esta constante é substituída pelo coeficiente de arraste ( $C_D$ ), cujo valor depende do número de Reynolds. Esta substituição possibilita o uso da equação proposta por Newton para diversas faixas do adimensional Reynolds e estendendo sua aplicação para diversos casos, desde escalas maiores, como no caso das bolas de canhão, quanto para escalas menores, como é o caso das partículas de aerossóis (HINDS, 1999):

$$F_D = C_D \frac{\pi}{4} \rho_f d_p^2 v^2 \quad (3.8)$$

O parâmetro que governa a eficiência de deposição por impactação inercial é o número adimensional de Stokes, que representa a relação entre os tempos característicos do fluido e da partícula. O tempo do fluido pode ser estimado pela razão entre um comprimento característico e a velocidade do fluido (CROWE et al., 2012). De forma geral, o número de Stokes pode ser calculado pela seguinte equação:

$$St = \frac{\rho_p d_p^2 v}{18\mu d} \quad (3.9)$$

em que  $d$  representa o diâmetro da via respiratória.

Para baixos valores do número de Stokes ( $St \ll 1$ ), o tempo de resposta das partículas é menor do que o tempo característico do fluido, correspondendo a uma demora na mudança de velocidade do fluido e fazendo com que as fases contínua e dispersa tenham velocidades semelhantes. Para valores altos ( $St \gg 1$ ), o tempo de resposta a alguma alteração na velocidade do fluido é alto, fazendo com que as

partículas não sigam as linhas de corrente do fluido, uma vez que possuem velocidade diferente àquela da fase contínua.

Em alguns casos, a Equação (3.9) é multiplicada por um fator de correção que leva em consideração a não-continuidade do meio gasoso em relação às partículas com diâmetro da mesma ordem de grandeza do percurso livre médio das moléculas do fluido, como é o caso das nanopartículas (TANABE, 2011). Este fator é chamado fator de escorregamento ou fator de correção de Cunningham ( $C_C$ ). Davies (1945) propôs uma equação baseada em dados experimentais, largamente utilizada para estimar o fator de escorregamento a partir do número de Knudsen ( $Kn$ ):

$$C_C = 1 + Kn \left[ 2,514 + 0,8 \exp \left( - \frac{0,55}{Kn} \right) \right] \quad (3.10)$$

A relação entre a dimensão da partícula e o percurso livre médio das moléculas é representada pelo número de Knudsen ( $Kn$ ). Este número adimensional indica a interação que existe entre as moléculas do gás e as partículas e pode ser estimado como segue, segundo Crowe et al. (2012):

$$Kn = \frac{\lambda}{d_p} \quad (3.11)$$

em que  $\lambda$  é o percurso livre médio, que pode ser definido como o caminho que uma molécula de gás percorre antes de se chocar com alguma outra. O percurso livre médio varia de acordo com a temperatura, pressão e viscosidade do gás (BEARD, 1976), segundo a equação:

$$\lambda = \frac{2,15 \times 10^{-4} \mu T^{1/2}}{p} \quad (3.12)$$

em que  $\mu$  é a viscosidade do fluido em  $\text{kg m}^{-1}\text{s}^{-1}$ ,  $T$  a temperatura absoluta em K e  $p$  é a pressão em bar.

Segundo Zhang, Asgharian e Anjilvel (1997), a trajetória de uma partícula esférica através da impactação inercial e, desprezando outros mecanismos de coleta, pode ser descrita pela equação:



$$\frac{d^2S}{dt^2} = \frac{dv_p}{dt} = \frac{18\mu}{\rho_p d_p^2 C_C} (v_f - v_p) \quad (3.13)$$

em que  $S$  é o vetor posição da partícula no espaço,  $v_f$  é a velocidade do fluido e  $v_p$  é a velocidade da partícula.

A posição da partícula pode ser obtida, para qualquer instante de tempo, resolvendo a Equação (3.13) através de algum método numérico. Zhang, Asgharian e Anjilvel (1997) utilizaram o método de Runge-Kutta de quarta ordem para obter soluções para esta equação e consideraram que a velocidade inicial do material particulado no brônquio principal é nula e que a deposição ocorre quando a distância do centro da partícula até a parede equivale ao raio da partícula.

### 3.5.3 Difusão Browniana

Quando existem partículas se movimentando através de um gás, colisões entre estas partículas suspensas e as moléculas do gás ocorrem, resultando em uma troca de quantidade de movimento entre as mesmas. Em alguns casos, o diâmetro da partícula é pequeno o suficiente para ocasionar colisões que resultam em uma mudança significativa de direção. Esse movimento é conhecido como Browniano. A deposição em superfícies adjacentes ao escoamento do gás é consequência da mudança de direção das partículas, o que cria um gradiente de concentração e promove a difusão em direção à superfície (LICHT, 1988).

A concentração de partículas em uma determinada posição, em qualquer espaço de tempo, deve satisfazer a segunda lei de Fick da difusão. Em coordenadas retangulares esta variação da concentração de partículas pode ser obtida pela seguinte equação (HINDS, 1999):

$$\frac{dn}{dt} = D \left[ \frac{d^2n}{dx^2} + \frac{d^2n}{dy^2} + \frac{d^2n}{dz^2} \right] \quad (3.14)$$

em que  $n$  é o número de partículas e  $D$  é a difusividade da partícula no fluido.

A difusividade  $D$  é um parâmetro físico que depende de propriedades do fluido, como temperatura e viscosidade, e do diâmetro da partícula. Este coeficiente pode ser

estimado através da equação de Stokes-Einstein para uma partícula esférica (COURY, 1983):

$$D = \frac{k_B T C_C}{3\pi\mu d_p} \quad (3.15)$$

em que  $k_B$  é a constante de Boltzmann. Se o fator de escorregamento ( $C_C$ ) for desconsiderado, como nos casos em que o diâmetro da partícula for muito maior que o caminho livre médio do gás, conforme descrito no item 3.5.2, a Equação (3.15) é conhecida como equação de Stokes-Einstein-Sutherland (SEINFELD e PANDIS, 2006).

A trajetória das partículas sob ação dos mecanismos citados nos itens 3.5.1 e 3.5.2 (impactação inercial e sedimentação gravitacional) pode ser calculada deterministicamente por um balanço de forças. A força Browniana pode ser modelada pelo produto da massa de uma partícula por uma aceleração randômica, causada pelo choque entre as moléculas do gás e as partículas suspensas (SEINFELD e PANDIS, 2006).

Pela natureza do movimento Browniano, observa-se que a deposição pelo mecanismo difusional é mais atuante em partículas submicrométricas. Segundo Hinds (1999), a deposição em vias aéreas pulmonares é mais influenciada por este mecanismo físico nas vias com menor diâmetro, pois a distância entre as partículas e a superfície é menor e, também, pelo fato de nestas regiões as velocidades serem menores, o que corresponde a um tempo de residência maior.

### **3.6 Fluidodinâmica Computacional (CFD)**

A Fluidodinâmica Computacional (CFD) consiste em um conjunto de ferramentas e técnicas usadas na análise de sistemas envolvendo escoamento de fluidos, transferência de calor e massa e fenômenos associados, como reações químicas, através de simulação numérica. Trata-se de uma técnica abrangente que pode ser aplicada a áreas industriais e acadêmicas, como a análise aerodinâmica de espaçonaves e veículos, otimização de reatores e bombas, distribuição de poluentes e efluentes, combustão em motores e turbinas a gás e em engenharia biomédica para avaliação do fluxo sanguíneo em artérias e veias (VERSTEEG e MALALASEKERA, 2007).

A CFD é um ramo da engenharia que emprega conceitos relacionados às disciplinas de fenômenos de transporte, matemática e informática. A primeira estuda os fluidos em movimento, como eles se comportam durante o escoamento e respondem a influências como reações químicas e transferência de calor. As características dos fluidos podem ser representadas por equações matemáticas fundamentais, geralmente na forma diferencial, chamadas equações governantes. A informática atua no âmbito de facilitar a resolução dessas equações através de linguagens computacionais de alto nível, convertendo as equações diferenciais em algébricas (TU; YEOH; LIU, 2008).

Por volta de 1960, a indústria aeronáutica integrou as técnicas de CFD na produção das aeronaves e alguns anos depois esse método começou a ser aplicado no projeto de máquinas de combustão e turbinas a gás. Posteriormente, a indústria automobilística começou a empregar esta técnica para prever forças de arraste e a aerodinâmica sob a superfície dos carros. A partir deste ponto, a Fluidodinâmica Computacional passou a ser utilizada com frequência nos mais diversos ramos da engenharia (VERSTEEG e MALALASEKERA, 2007).

O primeiro *software* comercial para aplicação das técnicas de CFD foi desenvolvido pela empresa CHAM (*Concentration Head and Momentum Limited*) em 1981. O pacote comercial em questão é o PHOENICS, que iniciou a implementação das técnicas matemáticas e modelos físicos amplamente aplicados atualmente na indústria, como os efeitos de turbulência, o escoamento multifásico e reações químicas (CHAM, 2011). Além do PHOENICS, existem outros pacotes comerciais, tais como o CFX e o Fluent da ANSYS Inc.<sup>®</sup> e o *software* livre OPENFOAM<sup>®</sup>.

Tu, Yeoh e Liu (2008) apresentam algumas vantagens relacionadas ao uso de CFD:

- em alguns casos, no desenvolvimento teórico, muitos termos são desprezados para que a resolução das equações seja possível. No caso da utilização de algoritmos computacionais, é possível resolver as equações diferenciais completas, tornando a análise do escoamento mais próxima da realidade;
- o estudo de um certo sistema em diversas configurações é facilitado, o que implica em um menor custo quando comparado com experimentos laboratoriais;
- diversos valores para números adimensionais podem ser avaliados durante o trabalho, fornecendo mais flexibilidade e eficiência nas primeiras etapas do projeto de um sistema de escoamento;

- torna-se possível a obtenção de dados de regiões de difícil acesso para obtenção de resultados experimentais, tais como locais onde ocorreram acidentes nucleares ou locais remotos ou geofisicamente impossíveis de atingir.

### 3.6.1 Código Computacional

Os códigos de CFD são estruturados em torno de algoritmos que tornam possível a resolução de um problema de escoamento. De modo a facilitar a interação com o usuário, os pacotes comerciais incluem interfaces sofisticadas, nas quais os parâmetros do problema são inseridos e os resultados para análise são mostrados.

As técnicas de CFD envolvem três principais etapas: pré-processamento, solução e pós-processamento. A etapa de pré-processamento consiste na formulação do problema através de uma interface com o usuário e a subsequente transformação dos dados fornecidos inicialmente para um código reconhecido pelo *solver*. As principais etapas são (VERSTEEG e MALALASEKERA, 2007):

- definição da geometria da região de interesse (domínio computacional);
- geração da malha: subdivisão do domínio em partes menores, chamadas células, elementos ou volumes de controle;
- definição das propriedades dos fluidos e materiais envolvidos;
- seleção dos fenômenos físicos e químicos a serem modelados;
- especificação das condições de contorno apropriadas para as células que coincidem ou que tocam a fronteira do domínio computacional.

O domínio computacional deve ser especificado cuidadosamente, pois exerce grande influência no escoamento. Após definido o domínio computacional, é necessário gerar a malha, que consiste em subdividir todo o domínio em células menores, de forma que a solução das variáveis de interesse (velocidade, pressão, temperatura, etc.) ocorra nos nós que existem entre as células. A qualidade dos resultados depende fortemente da malha construída, sendo que, em geral, um maior número de células corresponde a uma solução mais precisa do problema. Em contrapartida, uma malha densa ou bastante refinada tem um custo computacional elevado por envolver maior tempo para a simulação. Estima-se que aproximadamente 50% do tempo gasto em um projeto de

CFD é utilizado para a criação da geometria e da malha (TU; YEOH; LIU, 2008; VERSTEEG e MALALASEKERA, 2007).

Depois de gerada a malha, é necessário definir as condições físicas do escoamento, ou seja se o mesmo ocorre em regime transiente ou estacionário, laminar ou turbulento, compressível ou incompressível e se o fluido é invíscido ou viscoso. A relevância da transferência de calor também deve ser avaliada, para definir sua influência no escoamento. Alguns *softwares* possuem uma lista de propriedades físicas de diversos fluidos, porém o usuário tem a opção de adicionar mais materiais, caso o fluido de interesse não esteja listado. As condições de contorno também são escolhidas na etapa de pré-processamento, na qual são fixados valores de pressão, temperatura ou velocidade, por exemplo, em regiões específicas do problema. Geralmente, são definidas condições de entrada ou saída do domínio computacional e na superfície do sólido (TU; YEOH; LIU, 2008).

Na etapa do *solver* ou processamento, a técnica de solução numérica dos volumes finitos é a mais empregada pelos pacotes comerciais, como é o caso do CFX e Fluent da ANSYS Inc<sup>®</sup>. Os principais passos percorridos pelos algoritmos numéricos nos códigos de CFD para a resolução de um problema são (VERSTEEG e MALALASEKERA, 2007):

- integração das equações governantes do escoamento em todos os volumes de controle do domínio computacional;
- discretização, ou seja, conversão das equações integrais resultantes em um sistema de equações algébricas;
- solução do sistema de equações através de um método iterativo.

O usuário deve ser capaz de entender o procedimento adotado por estes algoritmos, com o objetivo de utilizar as ferramentas oferecidas pelo *solver* e conhecer as operações “caixa-preta” que existem nos códigos comerciais (TU; YEOH; LIU, 2008). Os principais passos que compõe esta etapa são a inicialização, o controle e o monitoramento da solução, o cálculo das propriedades físicas e a convergência da solução.

A etapa de inicialização se baseia em fornecer ao *software* uma solução inicial arbitrária. Se as condições iniciais forem condizentes com o problema, a convergência ocorrerá de forma mais rápida, diminuindo o esforço computacional e evitando

procedimentos iterativos divergentes. O controle da solução envolve, por exemplo, a escolha do método de interpolação das equações que serão resolvidas. O sucesso de uma simulação em CFD depende, principalmente, da convergência do processo iterativo e do estudo de independência da malha. A convergência pode ser analisada seguindo os resíduos durante os cálculos da simulação numérica, sendo que o processo é considerado convergente quando os valores dos resíduos encontram-se abaixo de um critério de convergência ou tolerância, imposto pelo usuário. O estudo de independência da malha consiste em realizar inicialmente uma simulação em uma malha grosseira e então, progressivamente, refiná-la até que os resultados não apresentem mudanças em relação a variáveis locais e globais, indicando que a solução não depende da malha utilizada. Caso a convergência não seja atingida, é importante avaliar os parâmetros da solução ou modificar a malha (TU; YEOH; LIU, 2008).

A etapa do pós-processamento consiste em colocar na forma gráfica os resultados obtidos em vários pontos do domínio computacional. As ferramentas necessárias para a visualização gráfica dos dados geralmente estão incluídas nos pacotes comerciais de CFD. A solução pode ser representada por gráficos vetoriais, mapas de contorno, gráficos X-Y, gráficos de superfícies bi e tridimensionais, representação em escala de cores e animações dinâmicas (TU; YEOH; LIU, 2008; VERSTEEG e MALALASEKERA, 2007). A escolha da forma de representação mais apropriada depende do tipo de dados e da intenção do usuário.

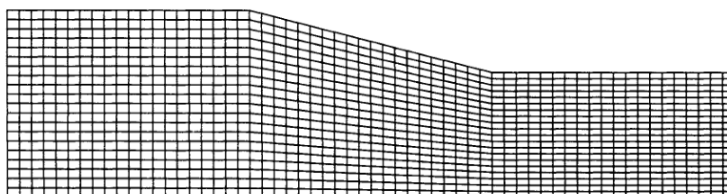
### **3.6.2 Malha Numérica**

A malha numérica consiste em uma representação discreta do domínio computacional através da sua divisão em subdomínios (elementos ou células) e tem influência direta nos resultados da simulação numérica, sendo que uma boa malha é capaz de evitar instabilidade e divergência da solução. A construção da malha é uma etapa complexa e alguns códigos comerciais têm seu próprio pacote para construção da malha, de forma a facilitar sua criação, porém isso não exclui a necessidade que o usuário tem de conhecer e analisar a qualidade da malha (FERZIGER e PERIĆ, 2002; TU; YEOH; LIU, 2008).

De acordo com a topologia, a malha pode ser classificada como estruturada, não-estruturada e híbrida. As malhas estruturadas ou regulares são constituídas por famílias

de linhas de forma que os membros de uma mesma família não se cruzam entre si e se cruzam com membros de outra família apenas uma vez (Figura 3.5) (FERZIGER e PERIĆ, 2002).

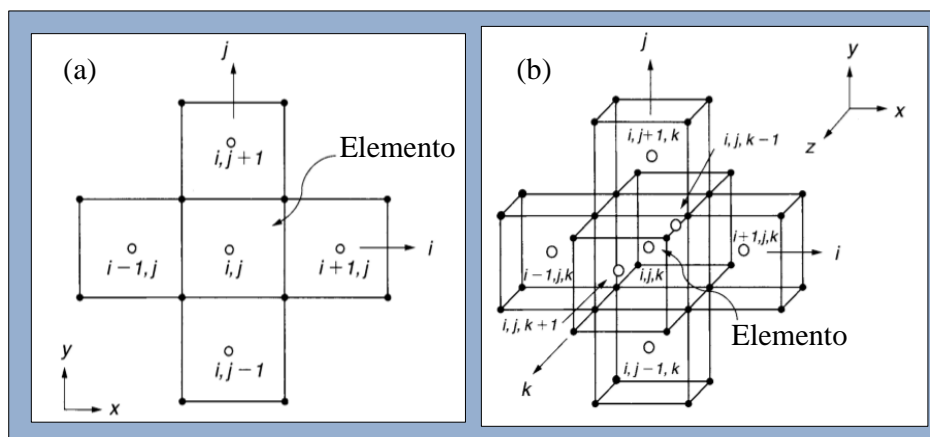
**Figura 3.5 - Exemplo de malha estruturada.**



Fonte: TU; YEOH; LIU (2008).

Este tipo de estruturação permite que as linhas de um determinado conjunto possam ser numeradas consecutivamente, de forma que cada volume de controle passa a ser identificado por dois (i,j) ou três índices (i,j,k), nos casos bidimensional ou tridimensional, respectivamente (FERZIGER e PERIĆ, 2002). Cada elemento central possui quatro vizinhos, em uma representação bidimensional, e seis vizinhos, no caso tridimensional (Figura 3.6).

**Figura 3.6 - Identificação em uma malha estruturada em (a) 2D e (b) 3D.**

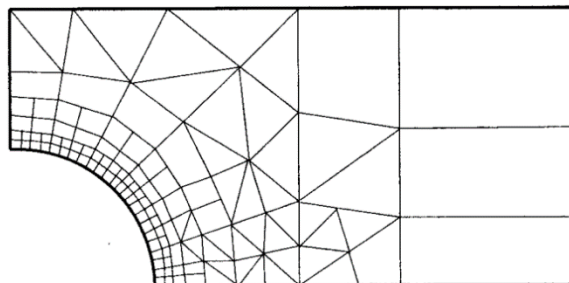


Fonte: Adaptado de Tu, Yeoh e Liu (2008).

A malha não-estruturada é composta por elementos triangulares e quadriláteros, em duas dimensões, ou tetraédricas e hexaédricas, em três dimensões, sendo empregada em geometrias mais complexas (Figura 3.7). Ao contrário da malha estruturada, não há restrição para o número de vizinhos ou nós entre as células, sendo um tipo flexível que

pode ser ajustado a qualquer geometria (FERZIGER e PERIĆ, 2002; TU; YEOH; LIU, 2008).

**Figura 3.7 - Exemplos de malhas não-estruturadas.**



**Fonte: FERZIGER e PERIĆ (2002).**

As vantagens de se utilizar uma malha não-estruturada consistem no fato de que ela se adapta a qualquer tipo de geometria e o adensamento da malha em determinada região é possível, sem comprometer o restante do domínio computacional. A dificuldade de se nomear as células faz com que a programação seja mais complexa e o fato da matriz das equações algébricas não ser regular torna o uso da malha não-estruturada mais complicado.

As malhas híbridas são aquelas que combinam as malhas estruturadas e não-estruturadas. Elas são excelentes quando é necessário um detalhamento maior em certas regiões, onde podem ser construídas malhas não-estruturadas. Nos demais locais nos quais não é preciso uma análise detalhada do escoamento, pode-se utilizar uma malha estruturada, poupando recursos computacionais.

### **3.6.3 Métodos Numéricos**

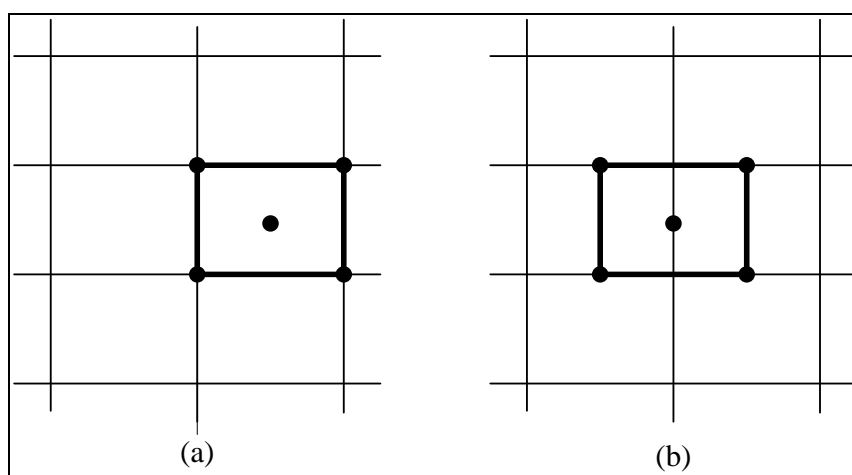
Para que as equações sejam resolvidas computacionalmente, elas devem ser expressas na forma de equações aritméticas, sendo necessário discretizar a equação diferencial (FORTUNA, 2012). Este processo envolve duas etapas principais: o primeiro é conhecido como discretização e envolve a conversão das equações diferenciais parciais e auxiliares em um sistema de equações algébricas. O segundo estágio se resume na implementação dos métodos numéricos para obter a solução do sistema de equações algébricas. As técnicas de discretização espacial mais comuns são o método das diferenças finitas (MDF) e o método dos volumes finitos (MVF) (TU; YEOH; LIU, 2008).



O MDF é o mais antigo para resolução de equações diferenciais parciais, utilizado por Euler em 1768. A cada nó da malha que descreve o domínio computacional, expansões em série de Taylor são utilizadas para gerar aproximações por diferenças finitas para as equações governantes. Pode ser aplicado em qualquer tipo de malha, porém é mais eficiente para malhas com certo grau de regularidade. O MVF envolve a discretização do domínio computacional em volumes de controle finitos, nos quais as equações são aproximadas, de forma que elas satisfaçam o balanço de cada propriedade dentro do volume de controle (TU; YEOH; LIU, 2008). Os *softwares* comerciais da ANSYS Inc.<sup>®</sup>, CFX e Fluent, utilizam este método para aproximação das equações diferenciais.

O primeiro passo para a utilização do MVF envolve a discretização do domínio computacional em volumes de controle (VC) finitos, nos quais as equações serão integradas, satisfazendo o balanço da propriedade em questão em cada VC. Estas equações podem ser compostas por termos convectivos, devido à velocidade do fluido, e os difusivos, que levam em consideração a não-uniformidade da distribuição espacial da variável em questão (FORTUNA, 2012). Os VC podem estar localizados de forma que o centro do mesmo coincida com o centro do elemento da malha numérica ou de forma que o centro do VC esteja localizado na face da célula, como mostra a Figura 3.8 (BLAZEK, 2001).

**Figura 3.8 - Volume de controle centrado no (a) centro e (b) vértice da célula.**



**Fonte: BLAZEK (2001).**

Para que as variáveis estejam corretamente localizadas no espaço (nas faces ou no centro do elemento), as funções de interpolação são utilizadas. Diferentes métodos

podem ser utilizados neste caso, como interpolação de Rhie and Chow, *upwind* de primeira ordem, *upwind* de segunda ordem, QUICK (*Quadratic Upstream Interpolation Convective Scheme Kinetics*) e interpolação polinomial (TU; YEOH; LIU, 2008; FORTUNA, 2012).

Após a integração e interpolação das variáveis, cada VC fornece uma equação algébrica, dando origem a um sistema de equações. A complexidade e a dimensão da matriz obtida a partir do sistema de equações dependem da geometria e dos fenômenos a serem considerados no problema. Para a resolução deste sistema, existem métodos diretos e iterativos. Eliminação Gaussiana, regra de Cramer e algoritmo de Thomas são alguns exemplos de métodos diretos e podem ser utilizados para a resolução de qualquer tipo de sistema. Na maioria dos casos de CFD, as equações resultam em sistemas não-lineares de grande dimensão e o custo computacional para a utilização dos métodos diretos seria alto. Assim, uma alternativa nestes casos são os métodos iterativos, como Jacobi e Gauss-Siedel, que são técnicas baseadas em aplicações repetidas de um algoritmo até atingir um critério de convergência pré-estabelecido. Geralmente, os métodos iterativos são mais econômicos, pois apenas os elementos não-nulos da matriz algébrica são armazenados na memória computacional, o que representa uma grande vantagem, considerando que as matrizes resultantes das discretizações por diferenças finitas e por volumes finitos são esparsas (TU; YEOH; LIU, 2008). No caso particular dos *softwares* ANSYS CFX® e ANSYS Fluent®, a técnica Multigrid Algébrico é empregada e envolve iterações na malha original e, posteriormente, em uma malha virtual mais grosseira, de forma que as equações resultantes são somadas àquelas da malha fina. O processo segue com o refinamento da malha até que uma precisão da solução seja atingida (ANSYS-CFX SOLVER THEORY GUIDE, 2012).

Quando o escoamento é compressível, a equação de estado que relaciona a massa específica com pressão e temperatura é empregada para o fechamento do problema para determinar os campos de velocidade. No caso de escoamento incompressível, a massa específica não varia com pressão e temperatura e, assim, não existe uma equação explícita para o cálculo da pressão. Neste caso, existem basicamente duas abordagens para resolver este problema. Uma delas é a solução acoplada, que consiste em resolver as equações da continuidade e da quantidade de movimento em uma única matriz para o cálculo das pressões e velocidades simultaneamente. Uma segunda alternativa é utilizar a abordagem segregada, a qual envolve a criação de uma

equação explícita para a pressão a partir da equação da continuidade. Neste caso, é necessário determinar um campo de pressão que origine um campo de velocidades que satisfaça a equação da conservação de massa, quando inserido nas equações de quantidade de movimento. Este cálculo é feito iterativamente até que a solução seja encontrada. Hanby, Silvester e Chew (1996) realizaram uma comparação entre estas duas abordagens para um escoamento incompressível e observaram que no método acoplado a convergência foi atingida com um menor número de iterações. A solução acoplada é mais robusta e estável, porém exige mais esforço computacional, pois necessita de maior armazenamento e processamento. Já a solução segregada resulta em sistemas de equações menores, mas podem causar instabilidade e dificultar a convergência da solução. No caso da solução segregada, diversos métodos podem ser empregados, como: SIMPLE (*Semi IMPLICIT Linked Equations*), SIMPLEC (*SIMPLE-Consistent*), PRIME (*PRessure IMPLICIT Momentum EXPLICIT*) e PISO (*Pressure-IMPLICIT with Splitting of Operators*) (MALISKA, 2004).

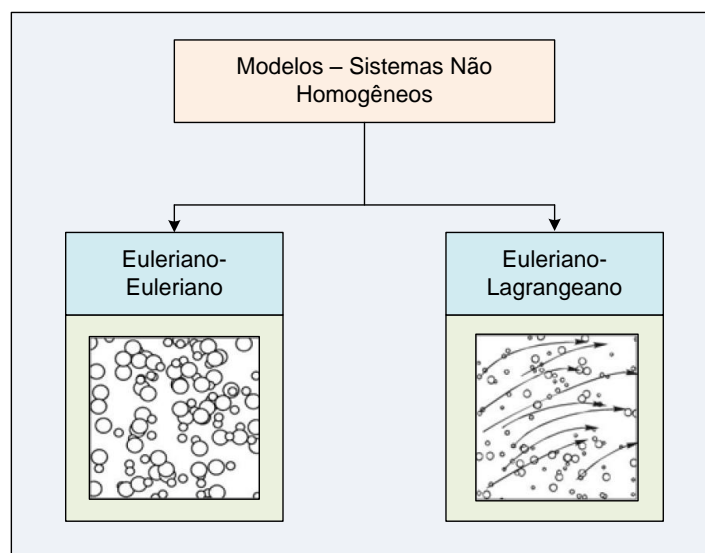
#### **3.6.4 Abordagens Matemáticas**

Duas abordagens matemáticas podem ser utilizadas para representar a dispersão do material particulado em escoamentos multifásicos: Euleriana-Lagrangeana e Euleriana-Euleriana (Figura 3.9). No segundo caso, as fases fluida (contínua) e sólida (dispersa) são consideradas meios contínuos, sendo a abordagem mais utilizada quando se trata de escoamentos multifásicos. Esta tem boa aplicação em problemas nos quais as fases estão misturadas e as velocidades relativas entre as fases são consideráveis. Neste caso, a equação da conservação da massa é resolvida em uma malha fixa no espaço, fornecendo valores médios de concentração das partículas (PALADINO, 2005).

A abordagem Euleriana-Lagrangeana envolve a resolução das equações de Navier-Stokes para a fase contínua (Euleriana) e, a partir dos campos de velocidade da fase fluida, são calculadas as forças que agem sobre cada partícula, sendo possível obter a trajetória individual das mesmas (Lagrangeana). Segundo Cullen (2009), este método tem boa aproximação nos casos em que a fase dispersa ocupa uma fração de volume baixa, de até 10%, de forma que as interações partícula-partícula podem, então, ser desprezadas. A abordagem Lagrangeana desconsidera o volume das partículas da fase

dispersa, tratando-as como pontuais (ANSYS-CFX SOLVER THEORY GUIDE, 2012; ANSYS-FLUENT THEORY GUIDE, 2012).

**Figura 3.9 - Abordagens para escoamentos multifásicos.**



**Fonte: Adaptado de Paladino (2005).**

### 3.7 Estudos Relacionados

Desde sua primeira constatação por Tyndall<sup>2</sup> (1881 apud HEYDER et al., 1986), a deposição de partículas em vias respiratórias tem sido alvo de diversos estudos. A partir deste ponto, dada a necessidade de se conhecer o escoamento de ar e o padrão de partículas depositadas nas vias aéreas pulmonares, diversos estudos foram realizados, envolvendo testes experimentais e simulações numéricas. Porém, é importante que o desenvolvimento dos testes numéricos que ocorre devido ao avanço da informática e das técnicas de CFD seja concomitante ao desenvolvimento de novas técnicas experimentais, uma vez que a comparação entre os resultados numéricos e experimentais é indispensável.

Clay e Clarke (1987), Mitchell et al. (1987), Bennet (1991), Cheng et al. (1996) e Möller et al. (2009) realizaram experimentos envolvendo indivíduos humanos para a determinação dos locais nos quais ocorre a deposição de partículas nas vias aéreas pulmonares. Os dois primeiros trabalhos envolveram a inalação de radioaerossol por pacientes que sofrem de asma, para a obtenção de imagens da distribuição de partículas

<sup>2</sup> TYNDALL, J. *Essays on the Floating Matter of the Air*. 2ª ed. Londres: Lognmans Green. 1881. 338 p.

depositadas nos pulmões. Clay e Clarke (1987) observaram que a maior parte da massa de aerossol depositada nos pulmões dos pacientes que sofrem de asma leve foi constituída de partículas de diâmetro menor que 2  $\mu\text{m}$ . Mitchell et al. (1987) constatou que o perfil de deposição e os efeitos de bronquiodilatação foram semelhantes para partículas de diâmetro 1,4 e 5,5  $\mu\text{m}$  em pacientes asmáticos severos. Segundo Laube et al.<sup>3</sup> (1986 apud BENNET, 1991), a deposição de partículas pequenas pode ocorrer nas vias respiratórias superiores, que possuem diâmetro maior, devido à obstrução que ocorre nas ramificações em pacientes que sofrem de asma grave, fazendo com que a distribuição de partículas depositadas de diâmetro 1,4 e 5,5  $\mu\text{m}$  seja semelhante. Cheng et al. (1996) também realizaram experimentos *in vivo* em 10 indivíduos para prever o escoamento na região nasal e pulmonar e a deposição de partículas ultrafinas, com diâmetro na região de 4 a 150 nm. Os resultados mostraram que o perfil de deposição variou significativamente entre os indivíduos devido à diferença que existe na área da seção transversal, área superficial e à complexidade do perfil de escoamento. Assim, estas diferenças devem ser consideradas na dosimetria de medicamentos inaláveis para cada tipo de paciente. Bennet (1991) e Möller et al. (2009) utilizaram aerossóis marcados com isótopos radioativos para avaliar a deposição de partículas nos pulmões de indivíduos humanos.

Kim et al. (1993) e Kim e Fisher (1999) estudaram o padrão de deposição de partículas através de experimentos *in vitro*, nos quais as vias respiratórias foram representadas por tubos cilíndricos de vidro e os aerossóis foram gerados a partir de ácido oleico e marcados com uranina, um sal de coloração verde fluorescente. Em ambos os trabalhos, os autores concluíram que a deposição aumenta com o número adimensional de Stokes. Os dados experimentais fornecidos por Kim e Fisher (1999) são largamente utilizados para validação de modelos computacionais. Zhang e Kleinstreuer (2004), Zhang, Kleinstreuer e Kim (2002), Longest e Vinchurkar (2009), Longest e Vinchurkar (2007), Chen et al. (2012a), Chen et al. (2012b) e Piglione, Fontana e Vanni (2012) são exemplos de autores que compararam os resultados de simulações com os dados experimentais fornecidos por Kim e Fisher (1999).

Os testes *in silico* (que envolvem técnicas numéricas computacionais) foram importantes na evolução nos estudos de escoamentos gás-sólido em vias aéreas

---

<sup>3</sup> LAUBE, B. L.; SWIFT, D. L.; WAGNER, H. N.; NORMAN, P. S.; ADAMS, G. K. The Effect of Bronchial Obstruction on Central Airway Deposition of a Saline Aerosol in Patients with Asthma. **American Review of Respiratory Disease**, v. 133, n. 5, p. 740-743, 1986.

pulmonares, uma vez que permitiram uma análise mais detalhada do problema, por se tratar de uma região de difícil acesso para investigação experimental.

Os primeiros trabalhos realizados nesta área, utilizando métodos computacionais, tiveram como objetivo o desenvolvimento de métodos para a geração das bifurcações da árvore pulmonar. Horsfield e Thurlbeck (1984) desenvolveram modelos matemáticos capazes de criar bifurcações pulmonares através dos parâmetros que determinam a forma da árvore pulmonar humana, como o raio e ângulo da bifurcação, raio e comprimento das vias aéreas. Mais tarde, Wang (1992) desenvolveu uma técnica para a geração da distribuição das bifurcações da árvore respiratória baseada no método de Monte Carlo, um método estatístico utilizado para aproximar funções de interesse baseado na observação de distribuições de probabilidades. Heistracher e Hofmann (1995) apresentaram medidas capazes de gerar um modelo tridimensional fisiologicamente realista de uma bifurcação, que não é baseado em técnicas matemáticas ou estatísticas. Segundo os autores, esta representação mais realista da geometria garante uma maior precisão no escoamento de ar e, conseqüentemente, na deposição de partículas, uma vez que ambos são fortemente influenciados pela geometria.

Poucos foram os trabalhos para obtenção dos perfis de velocidade e distribuição de partículas depositadas em configurações bidimensionais empregando a técnica de CFD. Ferron et al. (1991) utilizaram o pacote comercial FIDAP<sup>®</sup>, baseado no método dos elementos finitos, para determinar os perfis de velocidade do ar em três bifurcações, considerando transferência de calor e transporte entre água e vapor. Martonen, Yang e Xue (1994) analisaram o efeito propagado pelo formato da carina (região de encontro entre as três vias respiratórias de uma bifurcação, uma anterior e duas posteriores) de uma bifurcação simples sobre o perfil de escoamento de ar. Os autores concluíram que um formato assimétrico da carina implica em uma maior queda de pressão e resistência ao escoamento, sendo que, à medida que a vazão de ar aumenta (da condição de sedentarismo para atividade intensa), o perfil parabólico tende a se tornar mais achatado, uma vez que não há tempo suficiente para se formar um escoamento completamente desenvolvido.

A eficiência de deposição pode ser calculada em cada região do sistema respiratório através das técnicas de CFD. Nos estudos de Kesavanathan e Swift (1998), Schroeter et al. (2001), Zhang e Kleinstreuer (2004), Kleven et al. (2005), Zhu et al.

(2011), Moghadas et al. (2011), Agnihotri et al. (2014) e Ghahramani et al. (2014) a eficiência de deposição foi avaliada para a região extratorácica. Em geral, nesta região ocorre maior deposição das partículas menores que 0,01  $\mu\text{m}$  e maiores que 1  $\mu\text{m}$ , de forma que o movimento Browniano é predominante para as menores partículas e, para as maiores, a sedimentação gravitacional assume um importante papel. Zhang, Kleinstreuer e Kim (2002), Yin et al. (2010), Chen et al. (2012a), Chen et al. (2012b), Piglione, Fontana e Vanni (2012), Saber e Heydari (2012) e Imai et al. (2012) analisaram o escoamento de ar e o padrão de deposição das partículas na região bronquial e bronquiolar. Nestas regiões, a deposição varia com a geração e o tamanho, de forma que nas vias aéreas superiores são depositadas as partículas maiores e nas vias inferiores, aquelas com menor diâmetro. Saber e Heydari (2012) consideraram as gerações 0 (traqueia) a 3 e concluíram que para partículas com diâmetro menor que 1  $\mu\text{m}$  a deposição é baixa, atingindo um valor máximo de 10% quando a condição de atividade intensa é considerada. Além disso, foi constatado que para as partículas com diâmetro de 5  $\mu\text{m}$ , a eficiência tem valor máximo de 30% na mesma condição, enquanto aquelas de 10  $\mu\text{m}$  apresentam eficiência de até 80%. Comportamento semelhante foi encontrado por Piglione, Fontana e Vanni (2012), que utilizaram as gerações 4 a 15 nas simulações, ou seja, para as partículas maiores (10  $\mu\text{m}$ ), a deposição foi aproximadamente 70%, enquanto que aquelas com diâmetro menor (1  $\mu\text{m}$ ) praticamente não se depositam nesta porção do sistema respiratório, sendo transferidas para as regiões alveolares. Balásházy, Hofmann e Farkas (2002) observaram o mesmo comportamento nas gerações 3 e 4. A diferença observada na coleta de partículas menores na traqueia e vias superiores quando comparada com a deposição nas regiões de 4 a 15 pode ser explicada pelo fato de que nas gerações iniciais o escoamento é turbulento, o que pode aumentar significativamente a eficiência de deposição, mesmo quando as partículas são pequenas, como aquelas de 1  $\mu\text{m}$  de diâmetro.

A eficiência de deposição também pode ser calculada de acordo com o mecanismo de deposição que age sobre as partículas. No caso de partículas submicrométricas, a difusão Browniana deve ser considerada, como realizado por Heyder et al. (1986), Balásházy, Hofmann e Farkas (2002), Piglione, Fontana e Vanni (2012), Saber e Heydari (2012). Segundo Hofmann (2011), este mecanismo tem grande atuação na região alveolar e em condições respiratórias de repouso ou baixa atividade, situações nas quais as velocidades são baixas e os tempos de residência são altos. A

sedimentação gravitacional tem maior efeito sobre as partículas maiores que 1  $\mu\text{m}$ , aumentando sua atuação com o tamanho e massa específica das partículas. Imai et al. (2012), Piglione, Fontana e Vanni (2012) e Saber e Heydari (2012) incluíram este mecanismo para analisar a deposição de material sólido nas vias aéreas e observaram seu efeito mais pronunciado para partículas com maior massa, ou seja, para aquelas de maior diâmetro e/ou massa específica. Assim como o mecanismo de difusão Browniana, a sedimentação gravitacional é observada com mais frequência em situações com baixas velocidades e alto tempo de residência, de acordo com Hofmann (2011). Segundo Tena e Clarà (2012), as partículas com momento suficiente são afetadas por forças centrífugas nas curvaturas das vias respiratórias e colidem com a superfície. Esta tendência que as partículas têm de continuar a trajetória quando sujeitas a geometrias curvas é representada pela impactação inercial, de forma que a deposição ocasionada por este mecanismo físico ocorre, principalmente, nas vias aéreas superiores, onde a velocidade do fluido é mais alta. Além da velocidade, o diâmetro e a massa específica da partícula também influenciam na coleta por impactação inercial, uma vez que a quantidade de movimento da fase sólida aumenta com a massa da partícula. Nowak, Kakade e Annapragada (2003), Zhang, Kleinstreuer e Kim (2002), Radhakrishnan e Kassinos (2009) e Longest e Vinchurkar (2009) consideraram a ação da impactação inercial sobre a deposição de partículas, além dos autores citados anteriormente que consideraram os mecanismos de sedimentação gravitacional e difusão Browniana.

Na traqueia e primeiras bifurcações do sistema respiratório, o escoamento é turbulento, como considerado por Zhang e Kleinstreuer (2004), Lin et al. (2009), Radhakrishnan e Kassinos (2009) e Yin et al. (2010). Entretanto, em geral, a partir da terceira geração, os efeitos da turbulência podem ser desprezados, segundo Nowak, Kakade e Annapragada (2003), Xi, Longest e Martonen (2008) e Piglione, Fontana e Vanni (2012). Nestes casos, um perfil parabólico de velocidade para o fluido pode ser utilizado na entrada das gerações. Nos casos em que a turbulência deve ser incluída, um perfil mais achatado é utilizado como condição de entrada na via respiratória.

Diversos estudos foram realizados na área farmacêutica com o objetivo de conhecer melhor a deposição de aerossóis farmacêuticos, além dos estudos relacionados à dosimetria de partículas em vias aéreas pulmonares. Longest e Holbrook (2012) apresentaram um breve histórico sobre a utilização de técnicas computacionais aplicadas a esta finalidade. Stahlhofen, Rudolf e James (1989) apresentaram equações



empíricas para a estimativa da eficiência de deposição de partículas de medicamentos nas vias aéreas considerando técnicas experimentais, enquanto Finlay e Martin (2008) apresentaram equações empíricas para a mesma finalidade baseadas em CFD. Esta última técnica também pode ser empregada para a otimização de nebulizadores e dispositivos inaladores, como realizado por Longest e Hindle (2009) e Xie et al. (2010). Além disso, alguns trabalhos estão relacionados à análise de distribuição de partículas depositadas e de escoamento de ar nas bifurcações pulmonares que apresentam alguma alteração característica de doenças respiratórias. Um exemplo é o trabalho de Chen et al. (2012b), no qual a técnica de CFD foi utilizada para o estudo de escoamento gás/sólido em vias aéreas obstruídas, caso recorrente em pacientes da DPOC. Os autores concluíram que o escoamento nas vias obstruídas e nas inferiores a ela apresentou uma redução devido à formação de zonas de recirculação e estagnação, de forma que o escoamento secundário pode contribuir de forma significativa para a deposição de material nas paredes das vias. No estudo desenvolvido por Sturm e Hofmann (2004), modelos estocásticos foram desenvolvidos para vias pulmonares afetadas por DPOC e por vários tipos de enfisema. Foi observada uma redução na deposição alveolar nas vias afetadas pelo enfisema, quando comparado com bifurcações saudáveis, de forma que o mecanismo de impactação inercial tem sua atuação diminuída, ao contrário da difusão e da sedimentação gravitacional. Son et al. (2013) propuseram alterações em cinco marcas de inaladores, do tipo DPI (do inglês *dry powder inhalers*), através de uma estratégia que gera os aerossóis farmacêuticos em tamanhos submicrométricos e aumenta o tamanho durante a inalação, a fim de minimizar a perda de medicamento por deposição na região da boca e garganta. Esta técnica é chamada *excipient enhanced growth* (EEG). Foram realizados testes em CFD para avaliar a deposição na região da boca e garganta, que indicaram uma diminuição significativa na quantidade de medicamento depositado nesta porção do aparato respiratório.

Todos os trabalhos que empregaram as técnicas de CFD citados anteriormente utilizaram a abordagem Euleriana-Lagrangeana, para as fases contínua e dispersa, respectivamente, evidenciando que esta abordagem é mais usual para este tipo de estudos, uma vez que, geralmente, a fração volumétrica das partículas é baixa, quando comparada com a de fluido.

# Capítulo 4

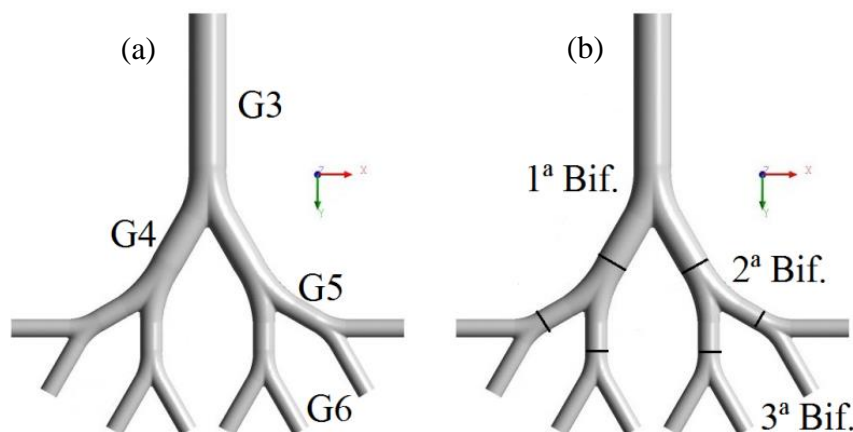
## Malha Numérica e Validação do Modelo

Este capítulo apresentará as etapas iniciais do trabalho: construção da configuração geométrica das vias respiratórias, geração da malha numérica sobre o domínio computacional e validação do modelo, nas quais os pacotes comerciais de CFD ANSYS® 14.0 e 14.5 foram utilizados.

### 4.1 Confeção da Configuração Geométrica

Para a análise do escoamento de ar e da deposição de material sólido foram escolhidas as gerações 3 a 6 (G3 a G6) do modelo simétrico de Weibel<sup>1</sup> (1963 apud HOFMANN, 2011), compondo uma geometria com quatro gerações e três bifurcações, localizadas na região bronquial do sistema respiratório (Figura 4.1).

Figura 4.1 - Esquema de (a) quatro gerações e (b) três bifurcações.



Fonte: Acervo pessoal.

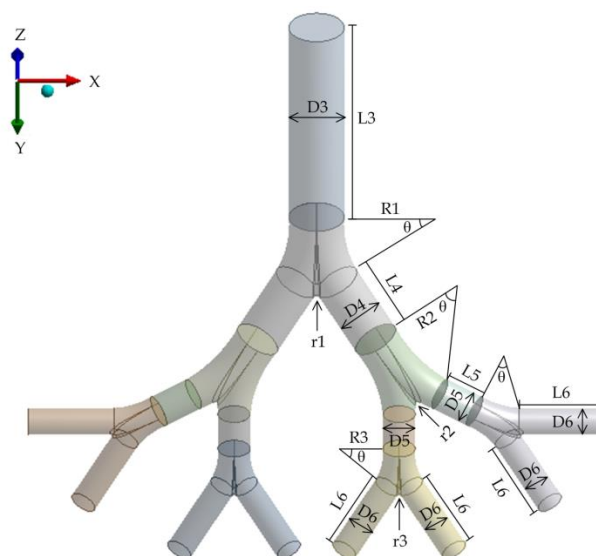
No total, podem ser observadas uma G3, duas G4, quatro G5 e oito G6. A escolha das gerações foi baseada nos dados experimentais disponíveis para validação do

<sup>1</sup>WEIBEL, E. R. Morphometry of The Human Lung, 1ª ed. New York: Springer Verlag, 1963, 151 p.

modelo por comparação com os dados fornecidos por Kim e Fisher (1999), um dos trabalhos mais utilizados para validação de modelos computacionais de vias aéreas pulmonares. Os autores avaliaram a deposição de partículas em tubos de vidros correspondentes às gerações 3 a 5, com as mesmas dimensões consideradas neste trabalho, cujas paredes foram mantidas úmidas para garantir que as partículas se depositem. Além disso, nas gerações consideradas, os efeitos ocasionados pelos anéis cartilagosos existentes na laringe, traqueia e brônquio principal (G1) sobre o escoamento podem ser desprezados, como observado por Oho e Amemiya<sup>4</sup> (1980 apud ZHANG; KLEINSTREUER; KIM, 2002). As irregularidades causadas por estes anéis podem exercer grande influência no escoamento e no transporte de partículas na laringe, traqueia e G1, porém são fatores difíceis de serem mensurados e considerados em simulações computacionais.

Para a confecção da geometria deste trabalho, foi empregado o *software* ANSYS Design Modeler<sup>®</sup> 14.0, que consiste na construção de esquemas bidimensionais e, a partir destes, sólidos podem ser gerados. A Figura 4.2 apresenta um esquema das medidas das gerações em questão e seus respectivos valores estão mostrados na Tabela 4.1. Os valores utilizados por Zhang, Kleinstreuer e Kim (2002) para construção da geometria foram baseados no modelo de Weibel, que obteve as dimensões através de relações matemáticas que descrevem a estrutura das vias aéreas pulmonares.

**Figura 4.2 - Dimensões do modelo morfométrico tridimensional.**



**Fonte: Acervo pessoal.**

<sup>4</sup> OHO, K.; AMEMIYA, R. Practical Fiberoptic Bronchoscopy, 1ª ed. Tokyo: Igaky-Shoin.

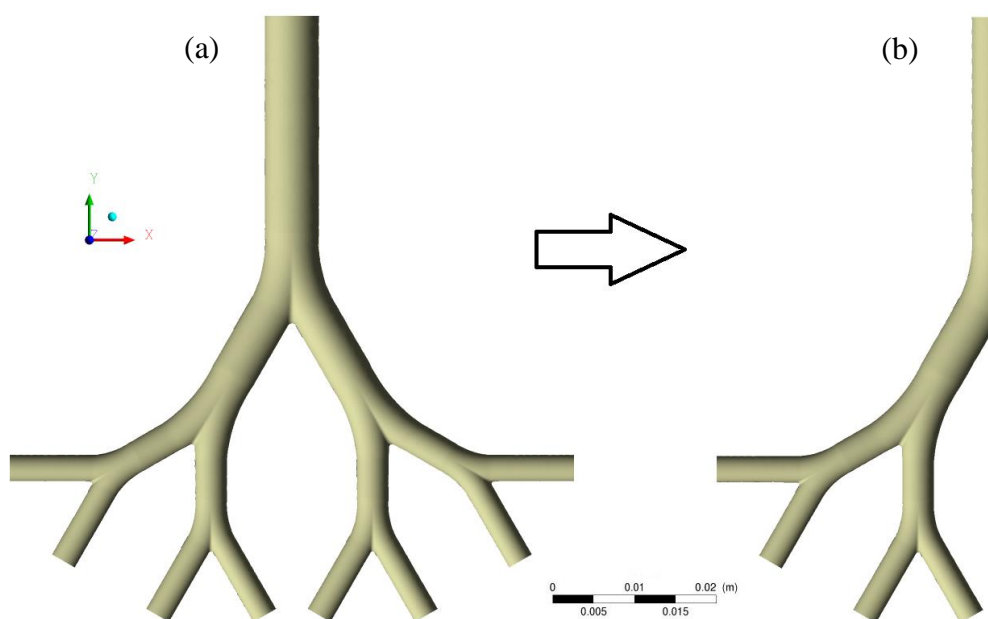
Tabela 4.1 - Dimensões do modelo.

Geração	Diâmetro (cm)	Comprimento (cm)	Raio da bifurcação (cm)	Raio da carina (cm)	Ângulo
G3	D1 = 0,6	L1 = 2,4	R <sub>b1</sub> = 1,35	r <sub>c1</sub> = 0,05	$\theta = 30^\circ$
G4	D2 = 0,5	L2 = 0,836	R <sub>b2</sub> = 1,645	r <sub>c2</sub> = 0,035	
G5	D3 = 0,35	L3 = 0,437	R <sub>b3</sub> = 0,783	r <sub>c3</sub> = 0,029	
G6	D4 = 0,29	L4 = 0,928	-	-	

Fonte: Adaptado de Zhang, Kleinstreuer e Kim (2002).

A Figura 4.3 apresenta o domínio computacional completo construído neste trabalho. Porém, uma vez que a configuração possui simetria geométrica e de fenômenos físicos, somente parte do domínio computacional foi utilizado, considerando simetria no plano YZ (Figura 4.3).

Figura 4.3 - Geometrias (a) completa e (b) considerando simetria.

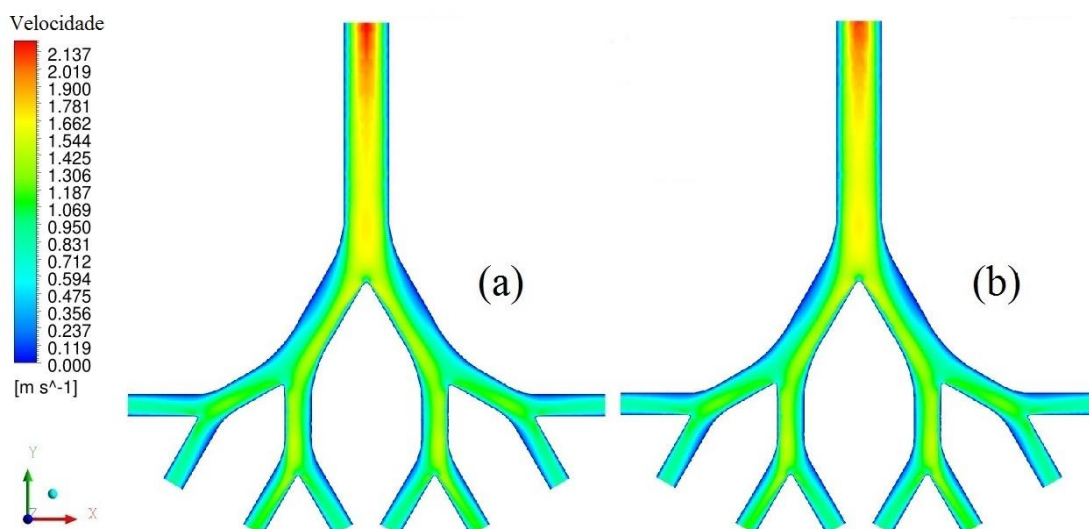


Fonte: Acervo pessoal.

Foram realizados testes com as mesmas condições de contorno e para a solução nos dois casos no *software* ANSYS CFX<sup>®</sup> 14.0 para verificar a consideração de simetria. Para comparação, foi utilizado ar, considerando escoamento laminar, em regime permanente. Foi utilizada uma vazão de 15 L min<sup>-1</sup> de ar na traqueia, de forma que foi considerado um perfil parabólico de velocidade na entrada da terceira geração. Mais detalhes sobre a modelagem serão apresentados no Capítulo 5. A Figura 4.4

mostra uma comparação entre os perfis de velocidade resultantes de simulações em geometrias completa e considerando apenas metade da original, evidenciando que os perfis são semelhantes e que a condição de simetria pode, então, ser utilizada. Além disso, foi realizada uma simulação gás-sólido, na qual foram injetadas uniformemente 1.000 partículas, igualmente espaçadas ao longo da entrada da G3, com diâmetro variando de 1 a 10  $\mu\text{m}$ . Os resultados indicaram uma deposição de 2,75% para o caso da geometria completa e 2,71% considerando apenas metade da original, o que também justifica a simetria no plano YZ. A condição de simetria tem como principal vantagem a utilização de um menor número de elementos da malha numérica, diminuindo, assim, o aporte computacional e, conseqüentemente, o tempo de simulação, uma vez que quanto maior o número de nós de uma malha, maior o número de vezes que as equações governantes devem ser resolvidas.

**Figura 4.4 - Comparação de perfil de velocidade considerando (a) simetria e (b) geometria completa.**



Fonte: Acervo pessoal.

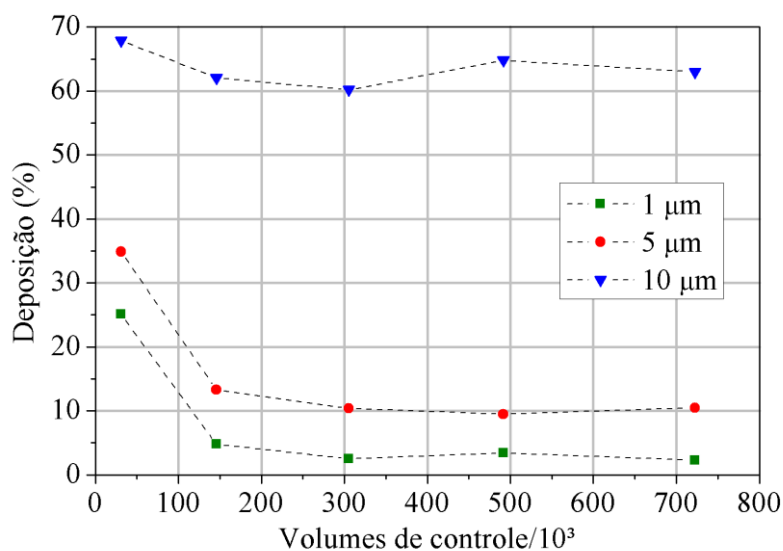
## 4.2 Geração da Malha Numérica

Após criada a geometria, a malha numérica foi gerada utilizando o pacote ANSYS ICEM CFD<sup>®</sup> 14.0. Inicialmente foi construída uma malha com elementos hexaédricos e, então, foi realizado um teste de independência da malha para avaliar o grau de influência que esta possui sobre os resultados de acordo com seu refino. As

condições utilizadas para as simulações foram: diâmetros de partícula iguais a 1, 5 e 10  $\mu\text{m}$ , sob ação da força de arraste e gravitacional, e vazão de ar de 50  $\text{L min}^{-1}$ . Assim como na etapa de verificação da condição de simetria, foi considerado escoamento laminar e em regime permanente. A entrada das partículas no domínio computacional foi realizada de forma uniforme na terceira geração, de modo que foram realizados testes para cada diâmetro de partícula e cada malha separadamente. Foram geradas cinco malhas hexaédricas contendo aproximadamente 30.000, 140.000, 300.000, 490.000 e 720.000 volumes de controle. A variável escolhida para avaliar os erros associados à malha foi a porcentagem de partículas depositadas.

Na Figura 4.5, é possível observar que a partir de aproximadamente 300.000 elementos não há diferença significativa na eficiência de deposição. Dessa forma, a malha escolhida para as simulações propostas neste trabalho possui 305.158 elementos hexaédricos e 321.654 nós. Um refino próximo à parede e nas bifurcações foi usado por serem regiões com maiores gradientes de velocidade e de grande interesse quando se trata do fenômeno de deposição de partículas às superfícies das vias respiratórias (Figura 4.6 e 4.7).

**Figura 4.5 - Monitoramento da deposição no teste de independência de malha.**

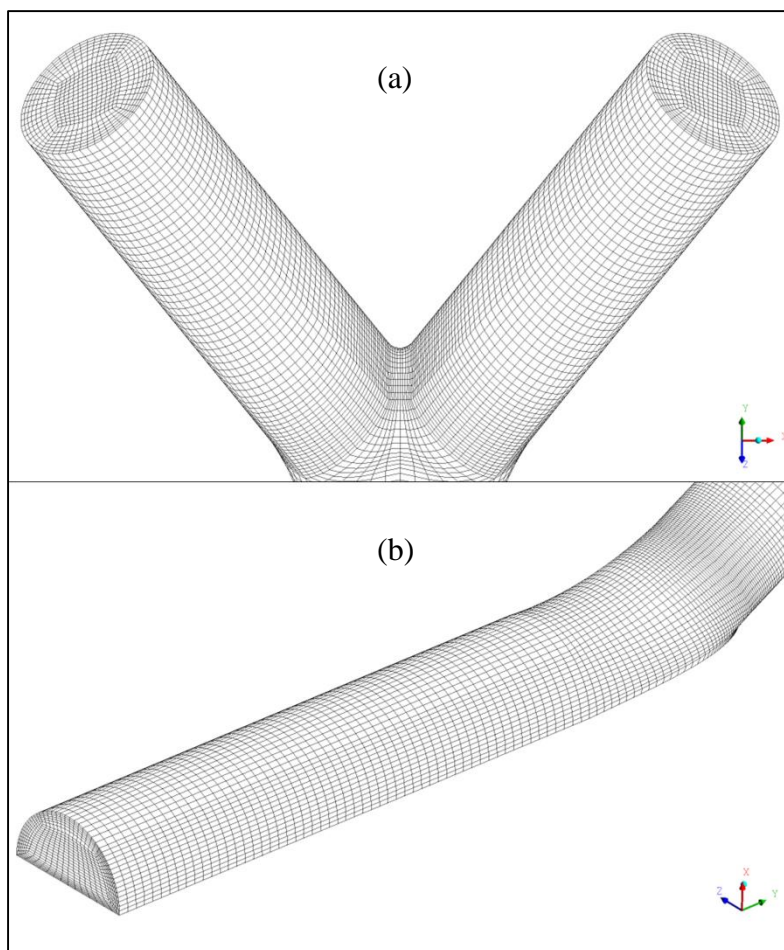


**Fonte: Acervo pessoal.**

Apesar da complexidade de se construir uma malha estruturada hexaédrica, esta possui as vantagens de permitir fácil ordenação dos volumes de controle e, portanto,

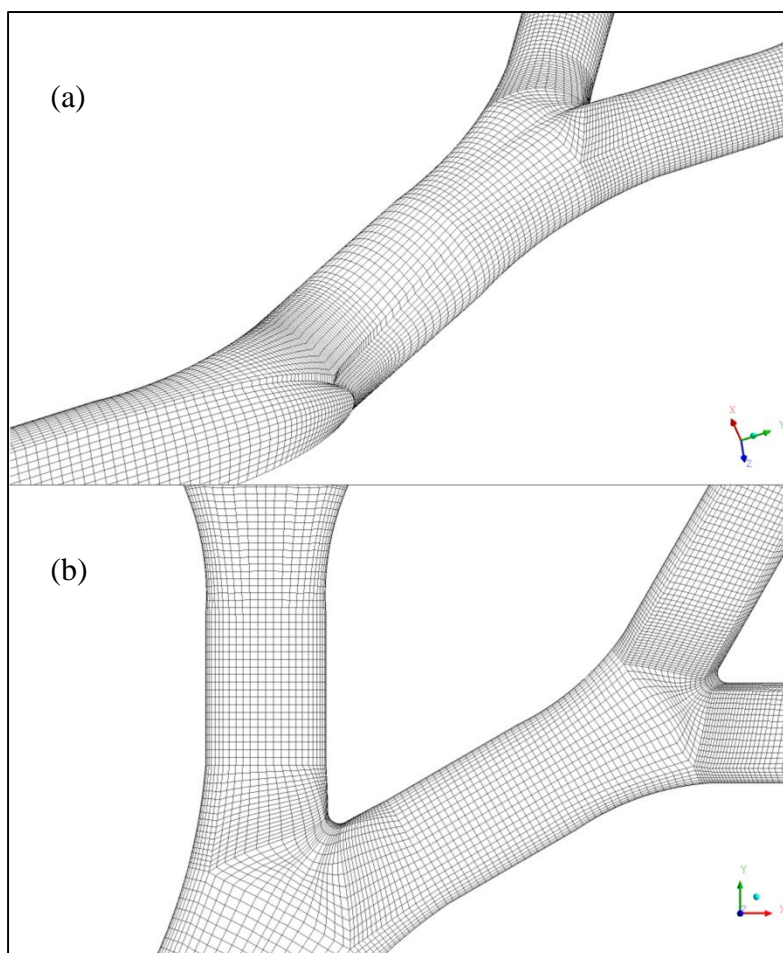
obter matrizes diagonais que permitem que os processos de solução sejam mais rápidos e eficientes, segundo Maliska (2004). As malhas tetraédricas podem ser geradas automaticamente por alguns *softwares* comerciais, como o pacote ANSYS Meshing Application®, porém este tipo de malha pode causar difusão numérica, efeito comumente encontrado em tubos cilíndricos e longos, como é o caso de alguns sistemas biológicos. A principal razão para isto reside no fato de que a direção predominante do escoamento não está alinhada com os elementos que compõe a malha. Longest e Vinchurkar (2007) mostraram que, para o caso de uma bifurcação dupla composta pelas gerações 3 a 5, os resultados apresentaram melhor qualidade e melhor convergência quando se utilizou uma malha hexaédrica, pois, ao contrário da malha tetraédrica, a direção predominante do escoamento pode ser alinhada aos elementos, além de possibilitar uma melhor interpolação para os fluxos de fluido e para as posições das partículas.

**Figura 4.6 - Detalhes da malha numérica nas (a) sextas e (b) terceira gerações.**



**Fonte: Acervo pessoal.**

**Figura 4.7 - Detalhes da malha numérica nas (a) quarta e (b) quintas gerações.**



**Fonte: Acervo pessoal.**

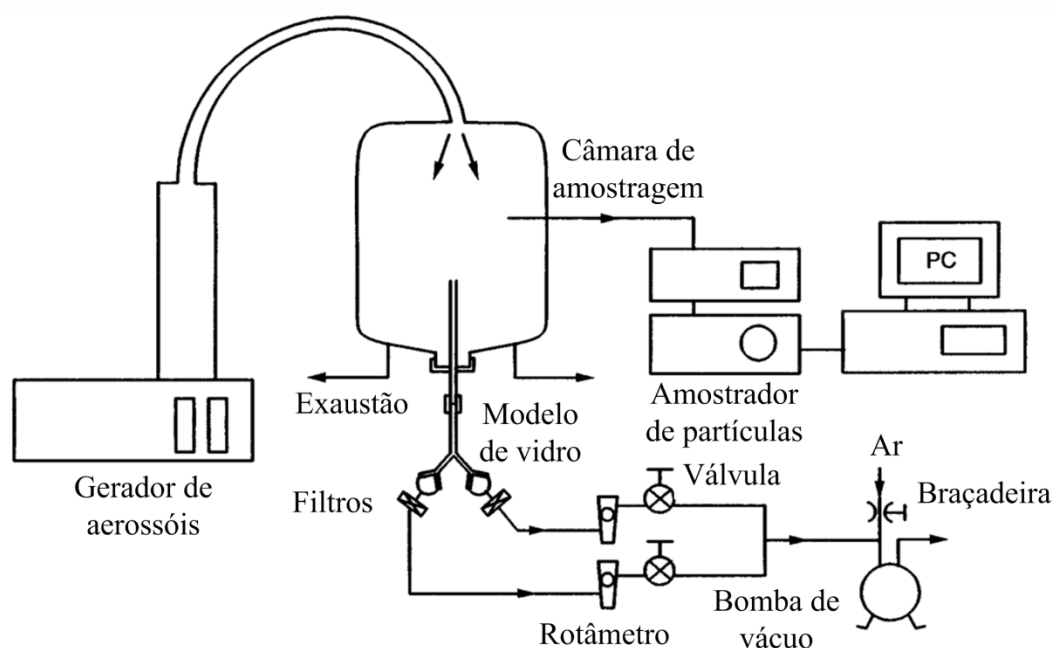
### **3.3 Validação do Modelo**

A validação do modelo consiste em comparar dados numéricos e experimentais a fim de garantir que os modelos escolhidos na simulação para representar os fenômenos físicos são coerentes com o que realmente ocorre. Como explicado anteriormente, os dados fornecidos por Kim e Fisher (1999) foram escolhidos para este fim. Os autores apresentaram os dados da eficiência de deposição separadamente para cada uma das duas bifurcações em função do número de Stokes, que pode ser calculado pela Equação (3.9). Kim e Fisher (1999) utilizaram tubos de vidro para mimetizar as gerações 3 a 5, com as mesmas dimensões consideradas para construção do modelo geométrico deste trabalho. Além disso, os autores utilizaram ácido oléico marcados com uranina, um sal bastante empregado para coloração e como traçadores em fluxos de água, para representar os aerossóis que iriam se depositar nas superfícies dos tubos de



vidro. O gerador de aerossóis foi acoplado a uma mangueira flexível localizada na parte superior de uma câmara, na qual o tubo de vidro que representa a terceira geração foi situado. Para garantir a consistência do experimento, um medidor da distribuição do diâmetro aerodinâmico das partículas foi ligado à câmara de entrada dos aerossóis. Na saída do modelo de vidro (quintas gerações) foram conectados a filtros, seguidos por um rotâmetro e por uma bomba de vácuo, para controlar a vazão de ar de acordo com as condições respiratórias. A Figura 4.8 mostra um diagrama esquemático do sistema utilizado no trabalho de Kim e Fisher (1999) durante o procedimento experimental. Para avaliar a deposição, o modelo de vidro foi desmontado em duas bifurcações e os tubos correspondentes a cada uma das bifurcações foram lavados com água deionizada, de modo que este procedimento foi repetido cinco vezes para garantir a remoção completa da uranina em cada seção. Da mesma forma, foi realizada a lavagem dos filtros localizados na parte inferior do modelo de vidro. A uranina da solução resultante da lavagem de cada seção e dos filtros foi quantificada por um fluorímetro, e a deposição foi calculada pela razão de uranina coletada na seção de interesse pelo total de uranina que foi inserida em todo o aparato que representa as vias respiratórias. A quantidade total deste material injetada no modelo de vidro foi obtida pela soma da uranina presente em cada seção e nos filtros localizados no fim do aparato.

**Figura 4.8 - Esquema do sistema utilizado por Kim e Fisher (1999).**



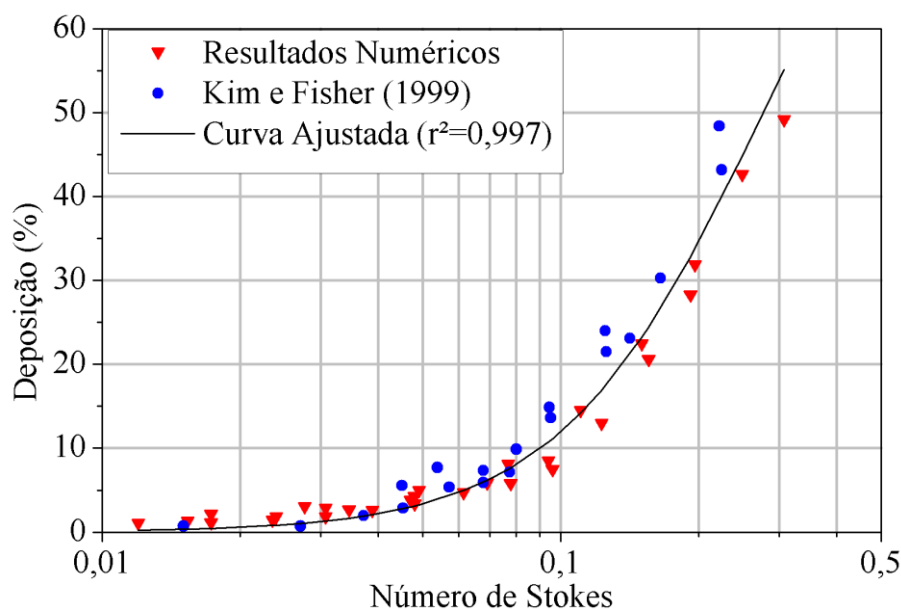
**Fonte: Adaptado de Kim e Fisher (1999).**

Para a obtenção da eficiência de deposição para diversos valores deste número adimensional, foram variados diâmetro de partícula e velocidade de entrada do fluido, e o software ANSYS CFX® 14.0 foi utilizado nesta etapa. Foram consideradas vazões de ar iguais a 15, 30, 60 e 96 L min<sup>-1</sup> na traqueia para representar as mesmas velocidades de entrada na G3 utilizadas por Kim e Fisher (1999), e diâmetros de partícula 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9 e 10 µm, com 891 kg m<sup>-3</sup> de massa específica, que também foram características utilizadas pelos autores do trabalho utilizado para validação. Com estas variáveis, o número de Stokes foi calculado pela Equação (3.9), sendo que para a primeira bifurcação foi considerada a velocidade média na entrada da G3 e, para a segunda, a velocidade média na entrada da G4. Na Figura 4.9, uma curva da forma da Equação (4.1) foi ajustada aos dados da simulação pelo método dos mínimos quadrados (r<sup>2</sup> = 0,997):

$$\% \text{Deposição} = 100 \left( 1 - \frac{1}{a \text{St}^b + 1} \right) \quad (4.1)$$

em que a e b são constantes do modelo e não possuem significado físico.

**Figura 4.9 - Validação do modelo para a primeira bifurcação.**

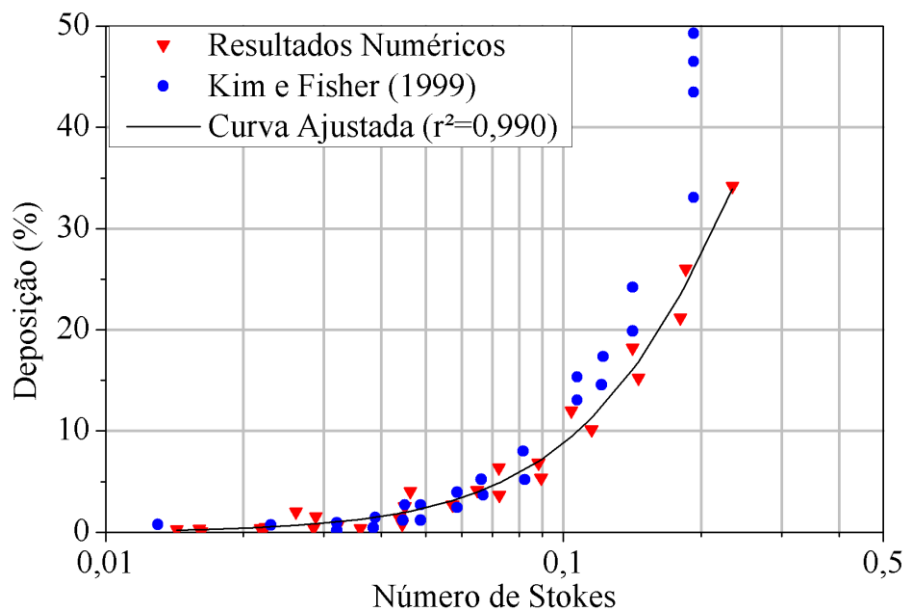


**Fonte: Acervo Pessoal.**

A Figura 4.10 apresenta os dados para a segunda bifurcação. Da mesma forma que para a primeira bifurcação, uma curva foi ajustada através do método dos mínimos

quadrados e uma boa concordância também foi observada neste caso ( $r^2 = 0,990$ ). Chen et al. (2012a) obtiveram comportamentos semelhantes aos apresentados nesta seção e relacionaram as diferenças que existem entre os dados numéricos e experimentais com possíveis pequenas flutuações na vazão de ar e no diâmetro das partículas e leves variações na geometria e na determinação da eficiência de deposição nos ensaios laboratoriais. Apesar destas pequenas diferenças, os resultados obtidos para ambas as bifurcações apresentam boa concordância com os dados experimentais e seguiram a mesma tendência, indicando que o modelo pode ser validado e utilizado para representar o escoamento de ar e a deposição de partículas nas gerações consideradas (G3 a G6).

**Figura 4.10 - Validação do modelo para a segunda bifurcação.**



Fonte: Acervo pessoal.

# Capítulo 5

## Simulações

### 5.1 Influência do Diâmetro da Partícula e da Condição Respiratória

Nesta seção, serão apresentadas as etapas de pré-processamento e os resultados da avaliação do tamanho das partículas e da condição respiratória no padrão de deposição de material sólido.

#### 5.1.1 Modelagem Matemática e Configuração da Simulação

As simulações para avaliação do tamanho das partículas e das condições respiratórias foram realizadas utilizando o pacote ANSYS CFX<sup>®</sup> 14.5, que utiliza o método dos volumes finitos para a solução numérica das equações de transporte. Para obter os campos de velocidade, as equações da continuidade, Equação (5.1), e de quantidade de movimento, Equação (5.2), foram resolvidas para escoamento incompressível, laminar, isotérmico e regime estacionário:

$$\frac{\partial \rho_f}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_f \mathbf{U}) = 0 \quad (5.1)$$

$$\frac{\partial (\rho_f \mathbf{U})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_f \mathbf{U} \otimes \mathbf{U}) = -\nabla p + \mu (\nabla^2 \mathbf{U} + (\nabla \mathbf{U})^T) + \rho_f \mathbf{g} \quad (5.2)$$

em que  $\mathbf{U}$  é o vetor velocidade do fluido e  $\mathbf{g}$  é o vetor aceleração da gravidade. Considerando a temperatura corporal normal de aproximadamente 37°C, os respectivos valores de massa específica ( $\rho_f$ ) e viscosidade dinâmica do ar ( $\mu$ ) usados foram 1,23 kg m<sup>-3</sup> e 1,90×10<sup>-5</sup> Pa s, segundo Perry e Green (1999).

A consideração de escoamento laminar foi assumida frente a uma análise dos valores médios do número de Reynolds para cada geração e para cada condição respiratória. Foram calculadas as velocidades médias do fluido em cada geração e, a

partir destes valores, foi possível obter o número de Reynolds, que variou de 46 a 1.309, descartando a necessidade da utilização de modelos de turbulência na simulação. Os valores detalhados para cada geração e cada condição respiratória estão resumidos nas Tabelas A.1 a A.4, no Apêndice A.

Uma vez que a fração volumétrica ocupada pelos sólidos é de  $8,31 \times 10^{-4} \%$  em relação a de fluido, mesmo para as partículas maiores, o acoplamento de uma via (ou *one-way coupling*), que considera que as partículas não influenciam no escoamento de ar, foi utilizado. Assim, a trajetória das partículas ao longo do domínio computacional pode ser calculada a partir dos campos de velocidade do fluido. Aplicando a segunda lei de Newton sobre a partícula, chega-se a:

$$m_p \frac{d\mathbf{U}_p}{dt} = \mathbf{F}_{\text{total}} \quad (5.3)$$

em que  $m_p$  é a massa da partícula,  $\mathbf{U}_p$  é a velocidade da partícula e  $\mathbf{F}_{\text{total}}$  corresponde ao somatório de todas as forças que agem sobre a partícula. Considerando as forças de arraste e gravitacional, obtém-se a equação que fornece a trajetória da partícula, pela abordagem Lagrangeana (ANSYS-CFX SOLVER THEORY GUIDE, 2012):

$$m_p \frac{d^2 \mathbf{x}_p}{dt^2} = \frac{1}{8} \pi C_D \rho_f d_p^2 (\mathbf{U} - \mathbf{U}_p) |\mathbf{U} - \mathbf{U}_p| + m_p \mathbf{g} \left( \frac{\rho_p - \rho_f}{\rho_p} \right) \quad (5.4)$$

em que  $\mathbf{x}_p$  é o vetor deslocamento da partícula. O coeficiente de arraste ( $C_D$ ) para partículas esféricas foi estimado pela correlação de Schiller e Naumann, dada pela Equação (5.5) (ANSYS-CFX SOLVER THEORY GUIDE, 2012):

$$C_D = \frac{24}{Re_p} (1 + 0,015 Re_p^{0,687}) \quad (5.5)$$

em que  $Re_p$  é o número de Reynolds da partícula, definido como:

$$Re_p = \frac{\rho_f |\mathbf{U} - \mathbf{U}_p| d_p}{\mu} \quad (5.6)$$

Foram realizadas simulações considerando partículas de 1, 2 e 3  $\mu\text{m}$  e quatro velocidades de entrada diferentes para verificar a influência do fator de escorregamento ( $C_c$ ) sobre a deposição de material sólido. Foi construída uma subrotina em linguagem

Fortran baseada em uma rotina semelhante encontrada em Ansys-CFX Solver Modeling Guide (2012), apresentada no Apêndice B, para corrigir o fator de arraste na Equação (5.4), considerando a mesma correlação de Schiller e Naumann, dada pela Equação (5.5). A correção é feita através da divisão do fator de arraste pelo fator de escorregamento. Os resultados da deposição de partículas considerando e desconsiderando o fator de correção de Cunningham mostraram uma diferença de 0,03% e, dessa forma, considera-se que não há necessidade de incluir este fator no cálculo da trajetória das partículas ao longo das vias aéreas.

Quatro vazões de entrada de ar foram consideradas, correspondendo às condições respiratórias em situações de sono, repouso, atividade moderada e atividade intensa. A Tabela 5.1 mostra as vazões de ar na entrada da traqueia para cada uma destas condições, de forma que a velocidade na G3 (entrada do domínio computacional) foi calculada dividindo a vazão de ar na traqueia por um fator de  $2^3$ , uma vez que ocorrem três bifurcações desde a traqueia até a geração em questão. As velocidades médias na entrada da G3 também são indicadas na Tabela 5.1. Os dados foram obtidos com base em ICRP (1994) para um indivíduo adulto, saudável e do sexo masculino.

**Tabela 5.1 - Condições respiratórias.**

<b>Condição Respiratória</b>	<b>Vazão de ar na traqueia (L min<sup>-1</sup>)</b>	<b>Velocidade média do ar na G3 (m s<sup>-1</sup>)</b>
Sono	7,5	0,55
Repouso	9,0	0,66
Atividade Moderada	25,0	1,84
Atividade Intensa	50,0	3,69

**Fonte: ICRP (1994).**

Para cada condição respiratória da Tabela 5.1 e para cada diâmetro de partícula (1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9 e 10  $\mu\text{m}$ ), foi realizada uma única injeção na entrada da terceira geração, contendo 20.000 partículas esféricas igualmente espaçadas, com massa específica de  $2.000 \text{ kg m}^{-3}$ . As simulações foram realizadas variando-se o cada diâmetro, totalizando 40 simulações diferentes, a fim de avaliar a influência do tamanho das partículas e da vazão de ar sobre a eficiência de deposição.

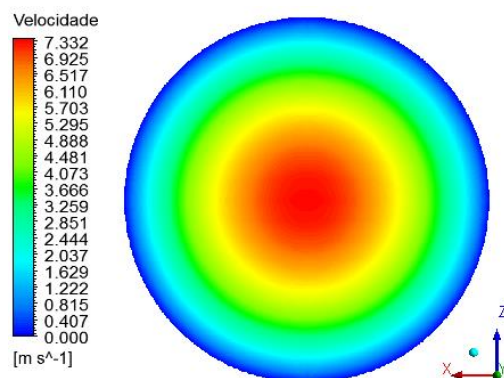
Na entrada da terceira geração, foi implementada uma expressão interna no *software* para considerar um perfil parabólico de velocidade que varia com o raio da

geração, para o fluido e para as partículas como condição de contorno de entrada, conforme:

$$U = U_{\text{máx}} \left[ 1 - \left( \frac{r}{R} \right)^2 \right] \quad (5.7)$$

em que  $r$  é a porção radial,  $R$  é o raio da terceira geração (0,3 cm) e  $U_{\text{máx}}$  é a velocidade máxima, calculada pela dobro da velocidade média da geração de entrada, indicadas na Tabela 5.1. A velocidade média foi calculada pela razão entre a vazão de ar na entrada da terceira geração e a área da mesma. Este perfil de velocidade é característico de escoamento laminar e completamente desenvolvido. A Figura 5.1 ilustra o perfil de velocidade na entrada para a condição respiratória de atividade intensa. Para as outras situações, apenas a magnitude da velocidade é diferente.

**Figura 5.1 - Perfil de velocidade na entrada da terceira geração.**



**Fonte: Acervo pessoal.**

Na saída das quatro sextas gerações, foi utilizada uma condição de saída “aberta,” com pressão relativa igual a zero, pois foram observadas zonas de recirculação na saída do domínio computacional, fazendo com que pequenas parcelas de fluido possam não ter velocidade normal à saída e retornar para o interior do domínio, pelas sextas gerações. Caso uma condição de saída, como pressão nula, por exemplo, fosse utilizada, o *software* consideraria a existência de paredes artificiais, impedindo o fluxo para o interior do domínio computacional e alterando os fenômenos físicos envolvidos no escoamento.

Nas superfícies interiores das vias respiratórias, foi usada uma condição de parede estacionária e não-deslizamento para o gás, a qual implica uma velocidade zero

do fluido na superfície. Para a fase dispersa, foi considerado que as partículas ficam retidas quando se chocam com a parede e, para isto, os coeficientes de restituição paralelo e perpendicular, que descrevem a ação de uma partícula quando se choca com a parede, foram zerados. Esta última consideração é razoável, uma vez que as superfícies internas das vias respiratórias são levemente rugosas e possuem umidade suficiente para capturar as partículas sólidas que eventualmente entram em contato com a parede.

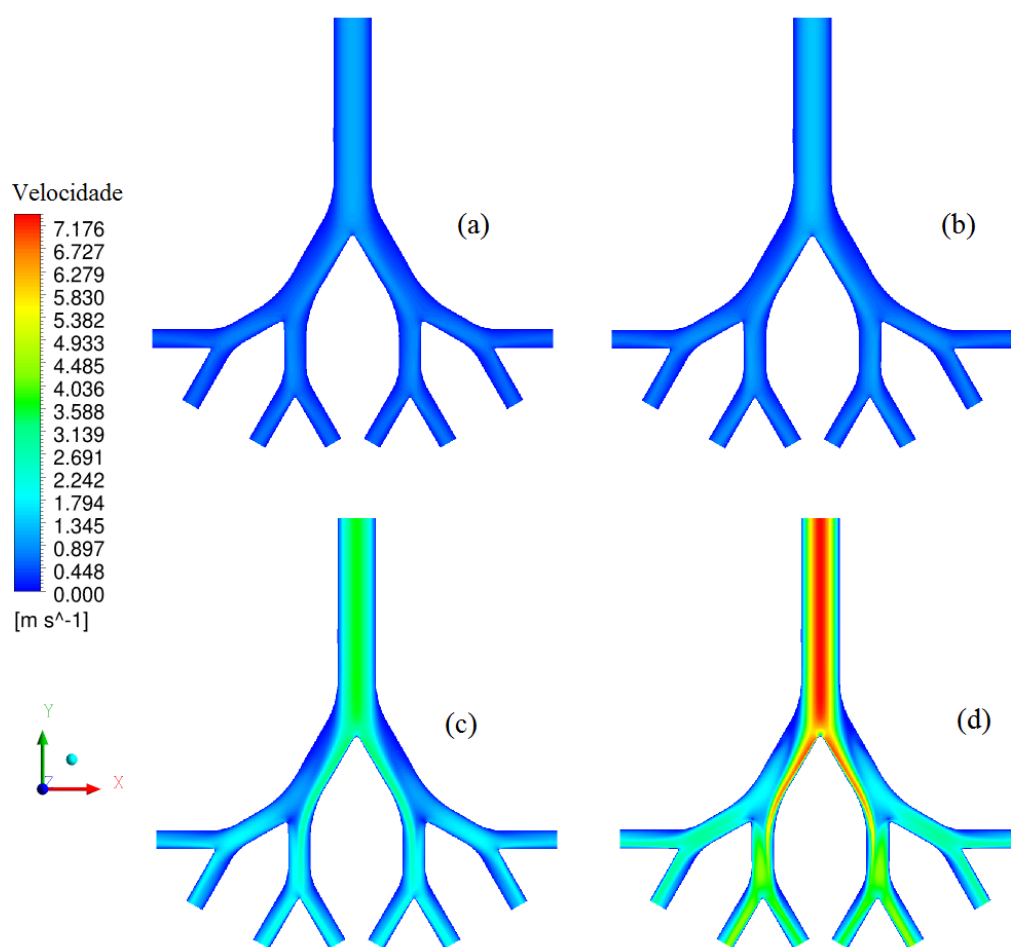
Os termos convectivos das equações de transporte foram interpolados pelo esquema *High Resolution*. Em relação ao acoplamento pressão-velocidade, o ANSYS CFX<sup>®</sup> 14.5 emprega um método acoplado, no qual a equação da continuidade é resolvida juntamente com as demais, em um único sistema. Para a resolução do sistema de equações lineares, a técnica Multigrid Algébrico, descrita no item 3.6.3, é utilizada por este *software*. Todos os cálculos foram realizados considerando dupla precisão. Cada simulação levou aproximadamente 12 minutos até atingir o critério de convergência de  $10^{-5}$  para a média quadrática (RMS, do inglês *root mean square*) do valor normalizado do resíduo. As simulações foram resolvidas em quatro partições com processadores Intel<sup>®</sup> Core 2Quad Q9550.

### 5.1.2 Resultados

Inicialmente, os perfis de velocidade foram obtidos pela resolução das equações da continuidade e da quantidade de movimento para cada uma das condições respiratórias. A Figura 5.2 ilustra os campos de velocidade para cada condição respiratória. É possível observar que o perfil em um plano XY, no centro do modelo, é igual para todas as situações, se diferenciando apenas na magnitude da velocidade. O perfil parabólico na entrada da terceira geração faz com que o fluxo de ar seja mais intenso nas gerações interiores, como consequência da velocidade máxima no centro da G3. Já nas sextas gerações, observa-se que o perfil parabólico começa a se formar novamente, com uma leve assimetria resultante da divisão do escoamento quando ocorre a primeira bifurcação.



**Figura 5.2 - Campos de velocidade para condições de (a) sono, (b) repouso e atividades (c) moderada e (d) intensa.**

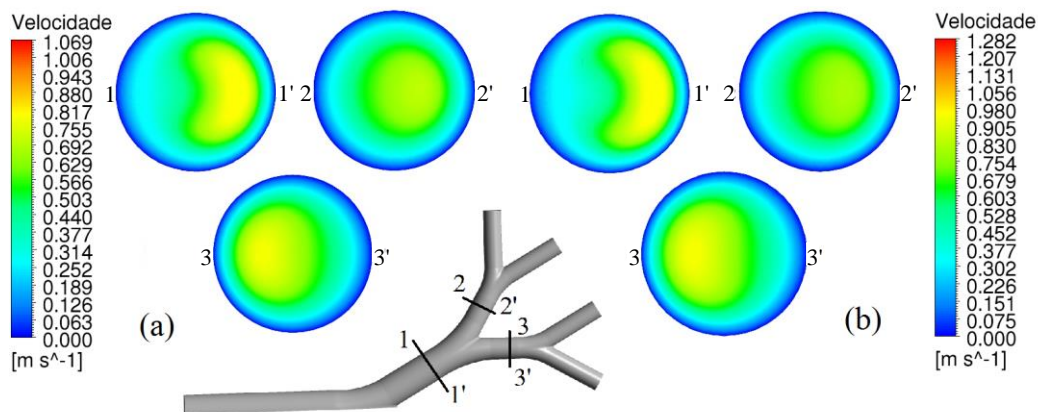


**Fonte: Acervo pessoal.**

Após atingir a primeira bifurcação, uma deflexão dá origem ao escoamento secundário nas gerações subsequentes. Zhang, Kleinstreuer e Kim (2002) observaram comportamento semelhante e atribuíram a formação de movimentos secundários a um gradiente de pressão centrifugamente induzido. As Figuras 5.3 e 5.4 mostram cortes nas seções transversais nas gerações 4 e 5, para as quatro condições respiratórias. Nos cortes das G4, pode-se observar o início da formação de um vórtice que faz com que o fluido se movimente da parede externa (1) para a interna (1'). Para os cortes das quintas gerações, para as quatro condições respiratórias, pode-se observar que o escoamento é mais intenso para as G5 internas (cortes 3-3') quando comparado com as G5 externas (corte 2-2'). Isto ocorre em função do perfil de velocidade parabólico utilizado na primeira entrada do domínio computacional, que faz com que o fluxo de ar seja mais intenso no centro do modelo (corte 3-3'). Segundo Cuming (1952), quando um fluido

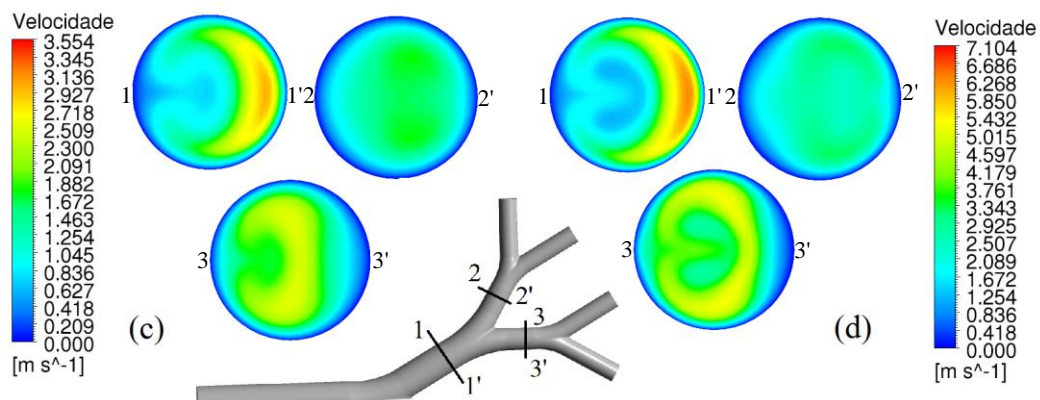
escoa ao longo de um duto com curvas, um gradiente de pressão surge devido à força centrífuga ocasionada pela curvatura, de forma que a pressão é maior nas paredes externas do duto e menor nas paredes internas. O início da formação do vórtice que impulsiona o fluido das paredes para o centro pode ser observado nos cortes 1-1' e 3-3' das Figuras 5.3 e 5.4, principalmente nas condições respiratórias que envolvem maior vazão de ar. Este vórtice se forma porque a porção de fluido da região central tem maior velocidade do que a porção próxima às paredes, devido aos efeitos viscosos, e o fluido com maior velocidade é submetido a uma força centrífuga maior do que a porção de fluido com menor velocidade. Dessa forma, a porção central de fluido é impulsionada em direção à parede que, por sua vez, é redirecionada em direção ao centro, formando um movimento de recirculação e dando origem ao escoamento secundário.

**Figura 5.3 - Escoamento secundário para condições de (a) sono e (b) repouso.**



Fonte: Acervo pessoal.

**Figura 5.4 - Escoamento secundário para condições de atividade (c) moderada e (d) intensa.**



Fonte: Acervo pessoal.

O movimento secundário é observado com maior intensidade nos casos em que a vazão de ar é maior, uma vez que a velocidade no centro da via respiratória é maior e, assim, o gradiente de pressão será maior. Além disso, uma maior vazão está relacionada a uma maior massa de fluido e, conseqüentemente, a uma maior inércia, fazendo com que a tendência que o fluido tem de seguir as curvaturas das gerações diminua. A Tabela 5.2 apresenta as vazões mássicas de ar nas gerações 4, para cada condição respiratória, e confirma o fato de que uma maior intensidade da atividade física do indivíduo está relacionada com uma maior massa de fluido. O número adimensional de Froude (Fr) é definido como a razão entre as forças inercial e gravitacional do fluido e pode ser calculado como segue:

$$Fr = \frac{U}{\sqrt{gd}} \quad (5.8)$$

Os resultados do cálculo deste número adimensional apresentados nas Tabelas A.1 a A.4, do Apêndice A, revelam que quanto mais intensa a condição respiratória, maior o número de Froude, confirmando, também, a relação de que a inércia do fluido aumenta com a vazão de entrada, ou seja, com a intensidade da atividade física do indivíduo.

Esta relação também pode explicar porque para as condições de sono e repouso os perfis de velocidade das duas gerações G5 são semelhantes: uma vez que a massa e as velocidades são baixas, a inércia do fluido é menor, e a bifurcação do fluido ocorre de forma semelhante. Para o caso de atividades moderada e intensa, nas quais a massa de fluido e as velocidades são maiores, a inércia é maior e faz com que a tendência do fluido de seguir as curvaturas da via diminua, dando origem a uma divisão mais desigual do fluido nas duas gerações G5. Ou seja, uma pequena parte do fluido escoava para a G5 mais externa, enquanto a grande parte segue para a G5 mais interna e dá origem a um escoamento secundário intenso. A Tabela 5.2 também mostra as vazões mássicas de ar nas duas quintas gerações, além de indicar, na parte inferior, a porcentagem de fluido que segue para a G5 mais interna e a porcentagem que segue para a G5 mais externa. Observa-se que o aumento da intensidade da condição respiratória, gera uma maior diferença entre as vazões de fluido das duas quintas gerações.

Tabela 5.2 - Vazões mássicas de ar nas gerações 4 e 5.

		<b>Dormindo</b>	<b>Repouso</b>	<b>Atividade Moderada</b>	<b>Atividade Intensa</b>
<b>G4 (1-1')</b>	Vazão mássica ( $10^5 \text{ kg min}^{-1}$ )	8,78	10,54	29,27	58,54
<b>G5 (2-2')</b>		4,15	4,90	12,55	23,58
<b>G5 (3-3')</b>		4,63	5,64	16,72	34,97
<b>G5 (2-2')</b>	Porcentagem (%)	47,28	46,48	42,88	40,28
<b>G5 (3-3')</b>		52,72	53,52	57,12	59,72

Fonte: Acervo pessoal.

Com relação ao movimento das partículas, o escoamento secundário pode influenciá-lo de duas formas. Para partículas menores que tendem a seguir as linhas de corrente do fluido, os vórtices podem significar zonas de recirculação, nas quais estas podem ficar confinadas. Por outro lado, quando as partículas são maiores, e possuem maior inércia, a tendência de seguir as linhas de corrente do fluido é menor, fazendo com que as partículas saiam do centro do vórtice e, eventualmente, por ação da força centrífuga, colidam com as superfícies das vias respiratórias. Esta última situação é observada nos casos em que a velocidade é alta e os vórtices são suficientemente fortes, a ponto de expulsar as partículas do movimento vorticial.

A Figura 5.5 ilustra as eficiências de deposição em cada condição respiratória e para cada diâmetro de partícula, calculadas pela Equação (3.2). Pode-se observar que a deposição total para cada diâmetro aumenta de acordo com a intensidade da situação física do indivíduo. Da mesma forma, considerando o mesmo diâmetro de partícula, o aumento da vazão de ar na entrada também reflete em uma maior deposição.

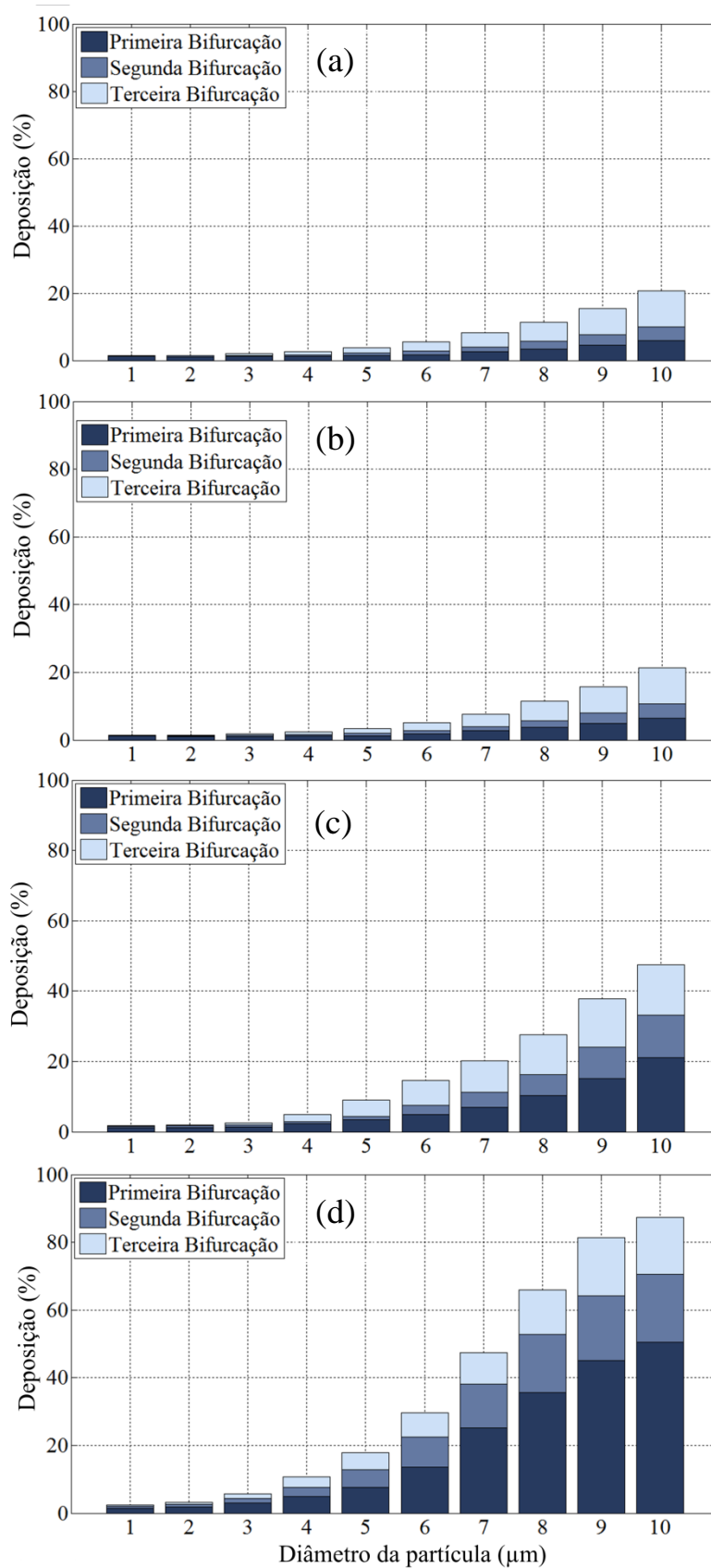
O primeiro termo do lado direito da igualdade da Equação (5.4) representa a força de arraste que a fase fluida exerce sobre a fase dispersa, que varia com o quadrado do diâmetro da partícula. Assim, fixando uma velocidade, um aumento no tamanho da partícula implica em uma maior força de arraste sobre a mesma. Dessa forma, a deposição pelo mecanismo de impactação inercial é maior para as partículas maiores, pois quanto maior o tamanho, maior a massa e a inércia da partícula, uma vez que a massa específica é a mesma em todas as situações e permaneceu constante durante toda a simulação. As partículas que possuem grande inércia não conseguem seguir as linhas de corrente do fluido quando este escoar por curvaturas e, eventualmente, se chocam com as superfícies internas das vias. Segundo Hofmann (2011), este mecanismo é mais

atuante nas gerações superiores do sistema respiratório humano, que é o caso deste trabalho, pois nestas regiões a velocidade é maior, o que também faz com que a inércia das partículas seja maior.

Para as condições respiratórias de sono e repouso, observa-se que a deposição de partículas menores que  $5\ \mu\text{m}$  na primeira bifurcação é maior quando comparada com os demais diâmetros. Por outro lado, as partículas maiores que  $5\ \mu\text{m}$  se depositam igualmente ou de forma mais intensa na terceira bifurcação, se comparado as outras bifurcações. Isso acontece porque nestas situações, nas quais a velocidade é baixa e o tempo de residência é alto, o mecanismo de sedimentação gravitacional é mais atuante, como indicado por Hofmann (2011) e mostrado por Piglione, Fontana e Vanni (2012). Aliado a este fato, nas últimas gerações G6, o ângulo entre o vetor aceleração da gravidade e a superfície das vias respiratórias é maior, fazendo com que as partículas maiores que  $5\ \mu\text{m}$  se depositem de forma mais intensa, enquanto aquelas menores que este tamanho tendem a seguir as linhas de corrente do fluido com mais facilidade, por possuírem menor inércia. Para as condições respiratórias de atividades moderada e intensa, as velocidades são mais altas e o mecanismo de sedimentação é menos atuante do que o de impactação inercial. Assim, nestes casos em que a inércia é predominante, a maior parte das partículas se deposita na primeira bifurcação, pois as partículas do centro da terceira geração possuem velocidade maior e, por inércia, se chocam diretamente com a primeira bifurcação.

Analisando a influência da velocidade no processo de deposição de sólidos nas vias respiratórias, pode-se observar que uma maior vazão de entrada de ar leva a uma maior quantidade de partículas depositadas. Isto ocorre pela mesma razão citada anteriormente: uma maior velocidade está relacionada a uma maior inércia das partículas, o que faz com que elas se choquem com as superfícies internas das vias respiratórias quando se movem ao longo de curvaturas. Portanto, pode-se observar que um aumento do número adimensional de Stokes, dado pela Equação (3.9), que leva em consideração propriedades da partícula e da velocidade em cada via respiratória, e um aumento do número de Reynolds, dado pela Equação (3.4), que é função da velocidade do fluido, implicam em uma maior deposição, como mostrando anteriormente pelas Figuras 4.7 e 4.8. Os valores detalhados dos números de Reynolds e de Stokes para cada diâmetro de partícula, cada geração e cada condição respiratória são apresentados no Apêndice A.

Figura 5.5 - Eficiências de deposição para situações de (a) sono, (b) repouso e atividades (c) moderada e (d) intensa.



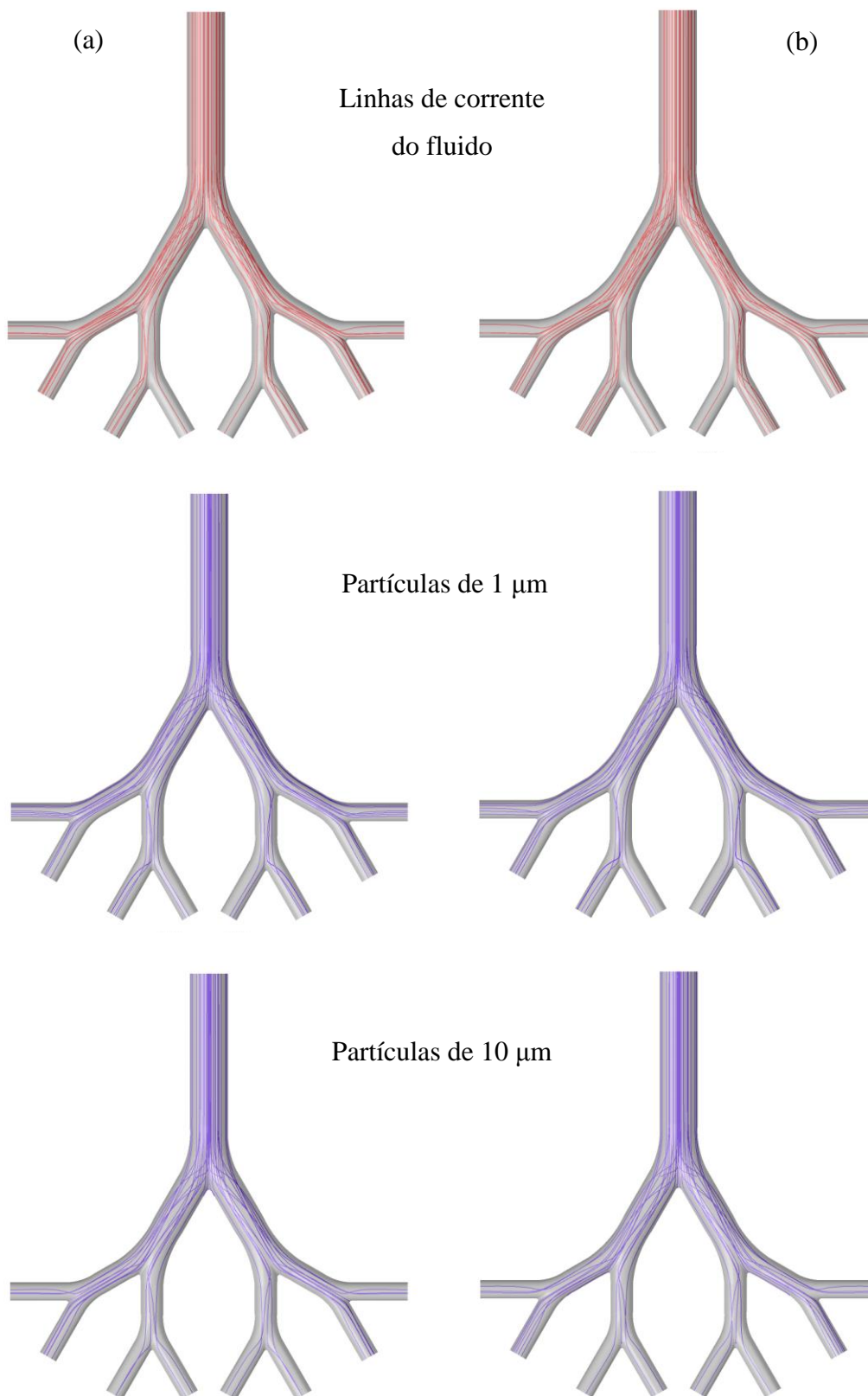
Fonte: Acervo pessoal.

As Figuras 5.6 e 5.7 confirmam a influência que o número de Stokes e o número de Reynolds têm sobre as partículas. Nestas figuras são ilustradas algumas linhas de corrente do fluido e a trajetória de algumas partículas para as quatro condições respiratórias consideradas.

A Figura 5.6 mostra que as linhas de corrente do fluido e das partículas de 1 e 10  $\mu\text{m}$  são semelhantes, uma vez que o número de Reynolds é baixo se comparado com as outras condições respiratórias, de forma que a inércia das partículas é menor. Apesar da semelhança entre as linhas de corrente do fluido e a trajetória de ambos os tamanhos de partícula, esta diferença é mais acentuada para as partículas de 10  $\mu\text{m}$  quando comparada com aquelas de 1  $\mu\text{m}$ , uma vez que as maiores possuem maior inércia do que as menores. Isto pode ser explicado baseado no número de Stokes, que é tão menor quanto o diâmetro das partículas e, como constatado anteriormente, quanto menor o valor deste número adimensional, menor é a deposição de material sólido nas vias aéreas. Além disso, um menor número de partículas é observado nas sextas gerações para as partículas de 10  $\mu\text{m}$ . Por outro lado, mais partículas de 1  $\mu\text{m}$  atingem as sextas gerações e saem do domínio computacional, evidenciando uma maior deposição para tamanhos maiores de partículas.

A Figura 5.7 mostra as linhas de corrente para o fluido e a trajetória das partículas para os casos de atividade moderada e intensa, respectivamente. Da mesma forma que para as situações anteriores, a trajetória das partículas de 1  $\mu\text{m}$  tem grande semelhança com as linhas de corrente do fluido, pois possuem menos inércia do que aquelas partículas maiores e tendem a seguir o escoamento do gás. Um raciocínio análogo em relação ao número de Stokes pode ser realizado para este caso: quanto maior o tamanho da partícula, maior este número adimensional e também maior a deposição. Para as partículas maiores, uma diferença mais acentuada entre a trajetória das mesmas e as linhas de corrente do fluido é observada, pois o número Reynolds nestas situações é maior quando comparado com as condições de sono e repouso.

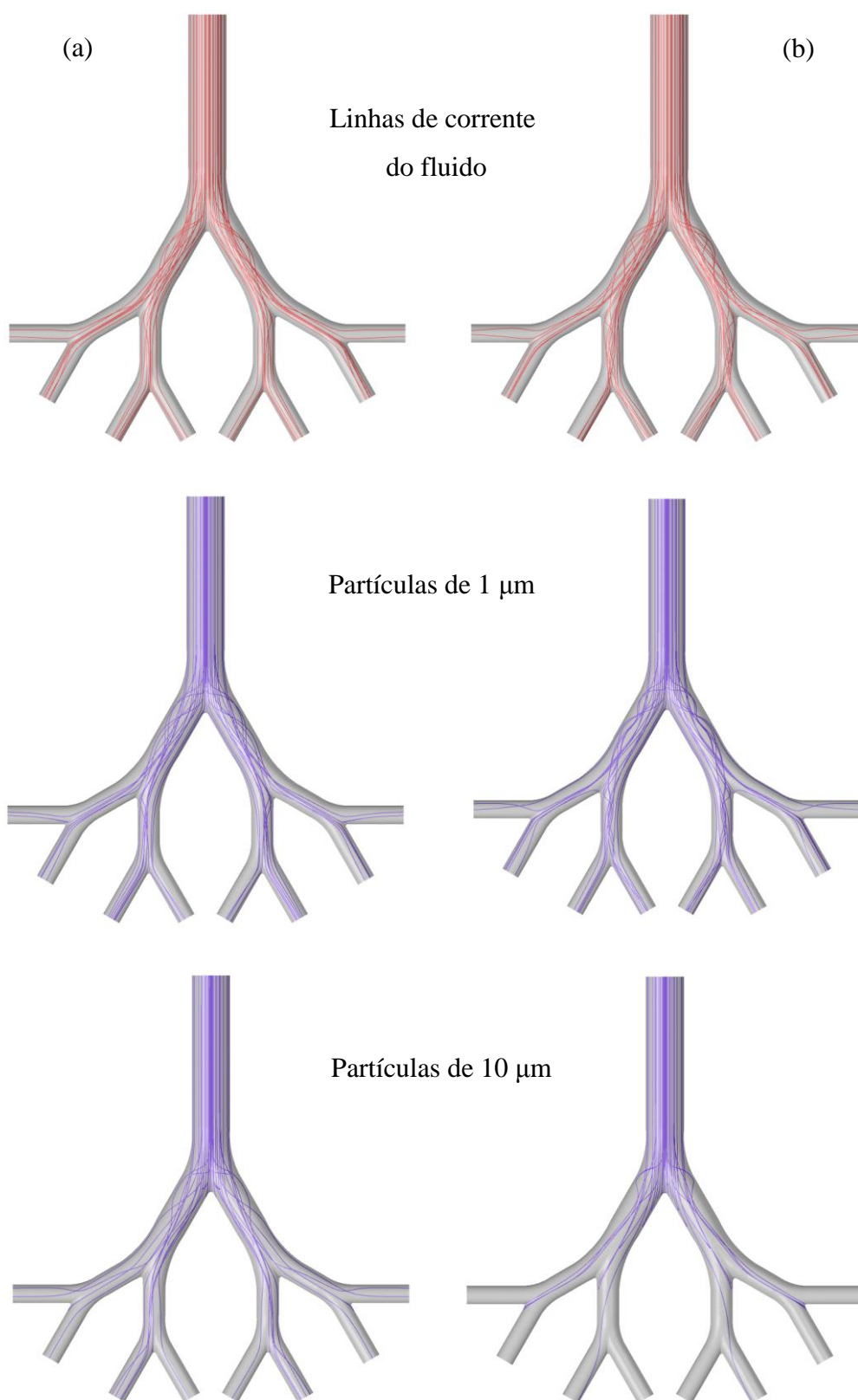
**Figura 5.6 - Linhas de corrente do fluido e trajetória das partículas para condições de (a) sono e (b) repouso.**



**Fonte: Acervo pessoal.**



**Figura 5.7 - Linhas de corrente do fluido e trajetória das partículas para condições de atividades (a) moderada e (b) intensa.**



**Fonte: Acervo pessoal.**

## 5.2 Comparação da Deposição de Partículas na Inspiração, Suspensão da Respiração e Expiração

Esta seção contém a configuração da simulação, a modelagem matemática e os resultados referentes ao conjunto de simulações no qual a deposição de partículas nas situações de inspiração, expiração e suspensão da respiração foi comparada. Este item tem importante aplicação na área de aerossóis farmacêuticos.

### 5.2.1 Modelagem Matemática e Configuração da Simulação

Uma segunda sequência de simulações foi realizada a fim de comparar a deposição de partículas nas situações de expiração e suspensão da respiração. Após a inalação de medicamentos inaláveis, é recomendável que se suspenda a respiração durante alguns segundos, a fim de garantir a deposição dos aerossóis farmacêuticos. Assim, este capítulo tem como principal objetivo utilizar as técnicas e ferramentas de CFD para comprovar o aumento da deposição na situação de suspensão da respiração frente à situação de subsequente expiração. Para isto, o pacote ANSYS Fluent® 14.5, que também utiliza o método os volumes finitos na discretização das equações diferenciais, foi utilizado.

Da mesma forma que descrito no item anterior, as Equações (5.1) e (5.2), da continuidade e de quantidade de movimento, respectivamente, foram resolvidas para escoamento laminar, incompressível, isotérmico e em regime transiente. O acoplamento de uma via também foi utilizado neste caso, uma vez que o escoamento é diluído em relação à fase dispersa, que ocupa aproximadamente  $1,10 \times 10^{-2} \%$  do volume em relação ao fluido. A trajetória das partículas foi calculada a partir da Equação (5.4), usando o Modelo de Fase Dispersa (ou DPM, do inglês *Discrete Phase Model*), disponível no *software*, que considera uma abordagem Euleriana-Lagrangeana para as fases contínua e dispersa, respectivamente. Foram consideradas as forças de arraste e gravitacional para o cálculo da trajetória das partículas. O coeficiente de arraste para partículas esféricas foi calculado pela equação que segue, proposta por Morsi e Alexander (1972):

$$C_D = a_1 + \frac{a_2}{Re_p} + \frac{a_3}{Re_p^2} \quad (5.9)$$

em que os coeficientes  $a_1$ ,  $a_2$  e  $a_3$  variam com o número de Reynolds da partícula de acordo com a Tabela 5.3:

**Tabela 5.3 - Valores das constantes para o cálculo de  $C_D$ .**

<b>Faixa de <math>Re_p</math></b>	<b><math>a_1</math></b>	<b><math>a_2</math></b>	<b><math>a_3</math></b>
$Re_p < 0,1$	0	24	0
$0,1 < Re_p < 1$	3,69	22,73	0,0903
$1 < Re_p < 10$	1,222	29,1667	-3,8889
$10 < Re_p < 100$	0,6167	46,5	-116,67
$100 < Re_p < 1000$	0,3644	98,33	-2778
$1000 < Re_p < 5000$	0,357	148,62	$-4,75 \times 10^4$
$5000 < Re_p < 10000$	0,46	-490,546	$57,87 \times 10^4$
$10000 < Re_p < 50000$	0,5191	-1662,5	$5,4167 \times 10^6$

**Fonte: Morsi e Alexander (1972).**

Um perfil parabólico de velocidade para o fluido da forma da Equação (5.7) foi utilizado na entrada da terceira geração. Para isto, uma função externa ou UDF (do inglês, *User Defined-Function*) foi criada em linguagem C para considerar este perfil de velocidade na entrada. Uma vazão de  $25 \text{ L min}^{-1}$  de ar na traqueia foi considerado para este caso, pois geralmente a inalação do medicamento é feita de forma mais intensa, mesmo que o indivíduo esteja fisicamente em repouso. Para a saída, foi utilizada uma condição de pressão nula. Semelhante às simulações do item anterior, as condições aplicadas às superfícies internas das vias foram as de parede estacionária e de não-deslizamento do fluido. As partículas que se chocam com a parede também foram consideradas depositadas, devido às características destas superfícies.

Inicialmente, foi simulado 1 segundo de inspiração, no qual foram injetadas 53 partículas de  $1.000 \text{ kg m}^{-3}$  a cada passo no tempo, de modo que, ao fim da simulação, foram liberadas no domínio computacional um total de 2.120.000 partículas. Imai et al. (2012) avaliaram a deposição de partículas de 1, 5 e  $10 \mu\text{m}$  durante a suspensão da respiração e concluíram que a quantidade de partículas de  $5 \mu\text{m}$  depositadas foi maior do que para os outros diâmetros. Amaral (2010) realizou um estudo sobre a distribuição do tamanho de gotas de um inalador comercial e concluiu que o diâmetro médio das partículas geradas por este tipo de dispositivo foi de  $5,36 \mu\text{m}$ . Por estes dois motivos, foi

considerado um diâmetro de 5  $\mu\text{m}$  para a comparação da deposição durante a suspensão da respiração e a expiração. O passo no tempo (ou *time-step*) foi escolhido baseado no número de Courant ( $Co$ ), que relaciona os termos de velocidade ( $U$ ), tamanho do volume de controle ( $\Delta x$ ) e passo no tempo ( $\Delta t$ ), como segue:

$$Co = U \frac{\Delta t}{\Delta x} \quad (5.10)$$

Segundo Ferziger e Perić (2002) e Fortuna (2012), o ideal é que este número adimensional seja menor que a unidade e, por isso, o passo no tempo utilizado nestas simulações foi de  $2,5 \times 10^{-5}$  s. A condição para o avanço no tempo foi que a média quadrática (RMS) do valor normalizado do resíduo fosse menor que  $10^{-5}$ .

Depois de 1 segundo, a velocidade de entrada foi zerada e a injeção de partículas foi cessada para representar a etapa de suspensão da respiração. A trajetória das partículas que já se encontravam dentro do domínio computacional continuou a ser calculada durante mais 2 segundos, a fim de obter a deposição nesta condição respiratória. Para a simulação da condição de expiração, as quatro sextas gerações foram consideradas entradas de ar, também com o perfil parabólico indicado pela Equação (5.7), e a terceira geração foi considerada saída, com pressão uniforme. O cálculo da trajetória das partículas que já se encontravam dentro do domínio computacional ao fim da inspiração foi realizado durante 2 segundos. Nestas duas situações, o passo no tempo e a condição para o avanço no tempo foi o mesmo que aquele utilizado para a inspiração.

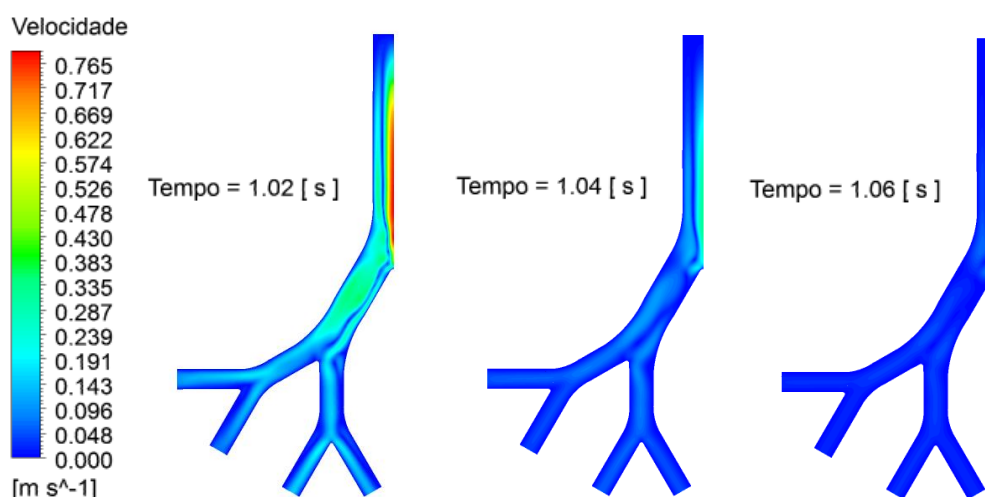
Os termos transientes foram interpolados pelo esquema implícito de Euler de primeira ordem e os termos convectivos, pelo esquema *upwind* de segunda ordem. O *software* ANSYS Fluent<sup>®</sup> permite escolher o método acoplado ou segregado de solução e, nas simulações, foi utilizado o esquema segregado SIMPLE, que calcula a pressão através de estimativas e correções na pressão, obtidas através de correções nas velocidades da equação da continuidade. Da mesma forma que o ANSYS CFX<sup>®</sup>, o método de resolução do sistema de equações é o Multigrid Algébrico. Todos os cálculos foram realizados considerando dupla precisão. As três simulações foram realizadas em 12 partições com processadores AMD Opteron<sup>™</sup> 6234. Foram gastos aproximadamente 10 horas para completar 1 segundo de inspiração, 39 horas para a etapa de suspensão da respiração e 16 horas para a etapa de expiração.

## 5.2.2 Resultados

Alguns medicamentos, como Berotec® e Aerodini®, recomendam que após o período de inspiração, a respiração deve ser suspensa durante aproximadamente 5 a 10 segundos, a fim de fazer com que os aerossóis farmacêuticos se depositem na árvore respiratória. Nesta seção, são apresentados os resultados da deposição nas situações de suspensão da respiração e expiração após inalação, a título de comparação.

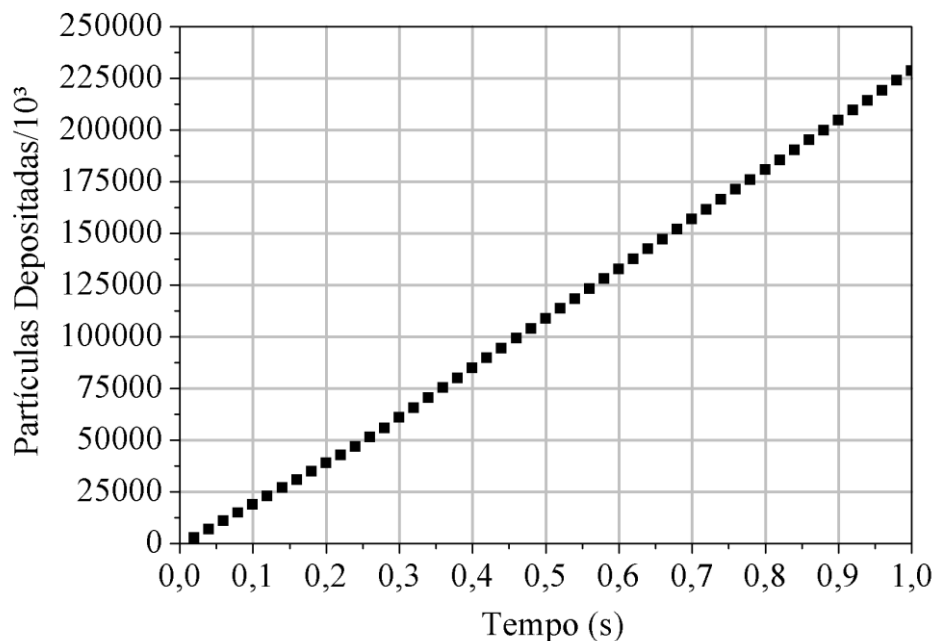
Os campos de velocidade para o período de inspiração são os mesmos que aqueles apresentados no item 5.1.2, para um fluxo de  $25 \text{ L min}^{-1}$  de ar na traqueia. Na Figura 5.8 o perfil de velocidade do fluido após 0,02, 0,04 e 0,06 segundos do fim da inspiração é ilustrado e mostra que a velocidade em todo o domínio é rapidamente reduzida depois que a velocidade é zerada na entrada da terceira geração.

**Figura 5.8 - Campos de velocidade no início da suspensão da respiração.**



Fonte: Acervo pessoal.

Como neste trabalho foram representadas apenas as gerações 3 a 6 do sistema respiratório, foi realizada uma simulação correspondente a um segundo de inspiração. Este tempo foi escolhido porque a deposição de partículas segue um perfil linear durante o período de inalação, como mostra a Figura 5.9, descartando a necessidade de prosseguir a simulação por um tempo maior.

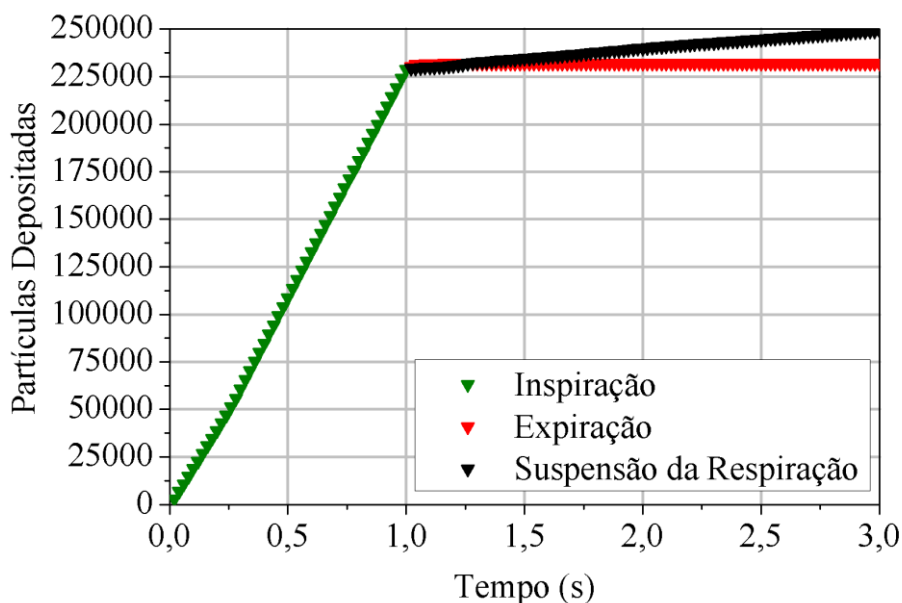
**Figura 5.9 - Deposição de partículas para período de inspiração.**

Fonte: Acervo pessoal.

O perfil linear obtido para esta situação ocorre em razão das posições iniciais das partículas serem as mesmas em cada passo no tempo, e por não ser incluído nenhum modelo de turbulência ou movimento Browniano, que possuem caráter aleatório, fazendo com que a deposição ocorra de forma semelhante em cada intervalo de tempo. Nesta sequência de simulações numéricas, a deposição foi analisada em todo o domínio, ao contrário do item anterior, no qual foi apresentada a deposição em cada bifurcação separadamente. Segundo as recomendações encontradas nas bulas de medicamentos inaláveis, deve-se suspender a respiração durante 5 a 10 segundos. Porém, da mesma forma que para o período de inspiração, um perfil aproximadamente linear também é obtido para as situações de expiração e suspensão da respiração (Figura 5.10). Portanto, dois segundos foram suficientes para comparar a deposição em cada uma destas duas condições. Imai et al. (2012) também observaram que a deposição aumenta linearmente com o tempo durante o período de suspensão da respiração. Analisando a Figura 5.10, pode-se observar que nas condições de suspensão de respiração e de expiração a deposição é menor do que para a inspiração, o que era esperado uma vez que a injeção de partículas foi cessada ao fim deste período. Comparando as situações de suspensão da respiração e expiração, observa-se que, apesar da pequena diferença, a deposição de

partículas de 5  $\mu\text{m}$  foi maior para o primeiro caso, como era esperado, de acordo com as recomendações médicas dos fabricantes de medicamentos aerossóis inaláveis.

**Figura 5.10 - Comparação para situações de expiração e suspensão da respiração.**



Fonte: Acervo pessoal.

Apesar de a deposição durante a inspiração aumentar mais rapidamente com o tempo, não seria interessante que o paciente continuasse a inalar os aerossóis farmacêuticos, uma vez que isto implicaria em um maior consumo do medicamento. Assim, a suspensão da respiração é uma alternativa para aumentar a deposição das partículas já inaladas e, conseqüentemente, a eficácia do medicamento. Observa-se que rapidamente o número de partículas depositadas torna-se constante no período de expiração e, por outro lado, durante a suspensão da respiração este número continua a crescer linearmente, mesmo depois dos 2 segundos representados neste trabalho. Assim, seguindo as recomendações médicas de suspender a respiração por 5 a 10 segundos, a eficácia do medicamento seria ainda maior, uma vez que o número de partículas depositadas aumenta com o decorrer do tempo.

Os mecanismos de impactação inercial e de sedimentação gravitacional agem sobre as partículas durante a inalação do medicamento e, no momento em que a respiração é suspensa, a velocidade do fluido é imediatamente reduzida, fazendo com que a velocidade terminal seja rapidamente atingida e o mecanismo de sedimentação

gravitacional seja dominante sobre o arraste do ar sobre as partículas. O número adimensional de Stokes, descrito anteriormente pela Equação (3.9), também pode ser considerado como a razão entre o tempo de resposta da partícula a uma alteração na velocidade do fluido ( $\tau_v$ ) e um tempo característico do fluido, e pode ser expresso por:

$$St = \frac{\tau_v U}{d} \quad (5.11)$$

De acordo com as características do escoamento e das configurações geométricas, o número de Stokes é baixo nos casos da condição respiratória de atividade moderada, com valores entre  $1,47 \times 10^{-2}$  e  $4,48 \times 10^{-2}$ , como pode ser observado na Tabela A.3 do Apêndice A, para a etapa de inspiração. Durante a suspensão da respiração, espera-se que este valor seja ainda menor, uma vez que a velocidade do ar é ainda menor nesses casos, quando comparada com a etapa de inspiração. Segundo Crowe et al. (2012), para valores deste número adimensional menores que 1, como é o caso da suspensão da respiração, o tempo de resposta de uma partícula quando ocorre uma mudança na velocidade do fluido é baixo e as velocidades das fases dispersa e fluida tendem a se igualarem rapidamente. Logo, quando a velocidade de fluido na entrada da terceira geração é zerada ao fim da inspiração, as partículas também tendem a diminuir rapidamente sua velocidade. Esta análise confirma que no período de suspensão da respiração o mecanismo de impactação inercial é pouco influente e a sedimentação gravitacional tem grande importância neste caso em que a velocidade é baixa.

Na expiração, a velocidade da fase contínua não é dada como nula, apenas seu sentido é alterado. Portanto, ao contrário da suspensão da respiração, o arraste continua sendo importante e faz com que, eventualmente, as partículas tenham velocidades mais altas, sigam as linhas de corrente do fluido e deixem a saída do domínio computacional (no caso particular da expiração, representada pela terceira geração).

Dessa forma, as técnicas de CFD podem representar a deposição de partículas de medicamentos e são capazes de comprovar o principal motivo das recomendações médicas com relação à suspensão da respiração após o período de inspiração de aerossóis farmacêuticos.



### 5.3 Análise da Ação dos Mecanismos Físicos

Nos itens 5.1 e 5.2, o movimento Browniano não foi incluído na modelagem da fase dispersa. Nesta etapa, para a avaliação da ação dos mecanismos físicos de impactação inercial, sedimentação gravitacional e difusão Browniana sobre a fase dispersa, foram realizadas simulações, em três diferentes situações, considerando:

- a força de arraste (situação 1);
- as forças de arraste e gravitacional (situação 2);
- as forças de arraste e difusional (situação 3).

Para isto, o *software* ANSYS Fluent® 14.5 foi utilizado para resolver as Equações (5.1) e (5.2) para escoamento laminar, incompressível, isotérmico e em regime estacionário. Assim como no item 5.1.1, o acoplamento de uma via foi escolhida para representar a interação entre as fases contínua e dispersa, uma vez que a fração volumétrica de sólidos em relação à de fluido é de aproximadamente  $1,25 \times 10^{-2} \%$ , para os casos das partículas com maior diâmetro, e a abordagem Lagrangeana (*Discrete Phase Model*, DPM) foi utilizada para representar as partículas. A Equação (5.4) foi resolvida para o cálculo da trajetória das partículas, sendo que, para os casos nos quais o movimento Browniano foi considerado, o termo a seguir foi adicionado ao lado direito da igualdade (ANSYS-FLUENT THEORY GUIDE, 2012):

$$F_B = \zeta_i \sqrt{\frac{\pi}{\Delta t} \frac{216\nu k_B T}{\pi^2 \rho_f d_p^5 \left(\frac{\rho_p}{\rho_f}\right)^2 C_c}} \quad (5.12)$$

em que  $\zeta_i$  são números randômicos independentes segundo uma distribuição Gaussiana de média zero e variância unitária e  $\nu$  é a viscosidade cinemática do gás. Neste caso, foi considerado fator de escorregamento igual a um, uma vez que, como apresentado no item 5.1.1, este fator não interfere significativamente no processo de deposição do material sólido, nos diâmetros utilizados neste trabalho.

Foram realizadas 15 injeções de 20.021 partículas esféricas sólidas, com massa específica igual a  $2.000 \text{ kg m}^{-3}$ , uniformemente distribuídas na entrada do domínio computacional, totalizando 300.315 partículas. A ação de cada um dos mecanismos físicos foi avaliada nas condições respiratórias de sono e atividade intensa e para

diâmetros de partícula iguais a 1, 5 e 10  $\mu\text{m}$ . Os métodos para solução foram os mesmos utilizados no conjunto de simulações do item 5.2: esquema *upwind* de segunda ordem para os termos convectivos, esquema segregado SIMPLE para o acoplamento pressão-velocidade, e método Multigrid Algébrico para a resolução do sistema de equações. Todos os cálculos foram realizados considerando dupla precisão. As simulações foram realizadas em quatro partições com processadores Intel® Core 2Quad Q9550 e foram gastos aproximadamente 23 minutos para cada diâmetro, em cada situação, até atingir um valor para a média quadrática menor que  $10^{-5}$  como critério de convergência.

### 5.3.1 Resultados

As Tabelas 5.4 e 5.5 mostram a deposição em cada um destes dois casos, para cada diâmetro e considerando cada mecanismo físico de deposição. As duas colunas à direita, de cada tabela, representam a diferença na deposição de material sólido comparando a situação 1 com as situações 2 e 3.

**Tabela 5.4 - Comparação da deposição para diferentes mecanismos físicos, para condição respiratória de sono.**

Diâmetro da partícula ( $\mu\text{m}$ )	Deposição (%) para cada situação			Diferença (%) entre situações	
	Arraste (1)	Arraste e gravitacional (2)	Arraste e difusional (3)	1 e 2	1 e 3
1	2,013	1,928	1,783	4,218	11,431
5	2,118	4,171	2,136	96,934	0,865
10	7,607	20,718	7,596	172,357	0,144

Fonte: Acervo pessoal.

**Tabela 5.5 - Comparação da deposição para diferentes mecanismos físicos, para condição respiratória de atividade intensa.**

Diâmetro da partícula ( $\mu\text{m}$ )	Deposição (%) para cada situação			Diferença (%) entre situações	
	Arraste (1)	Arraste e gravitacional (2)	Arraste e difusional (3)	1 e 2	1 e 3
1	4,275	4,280	4,201	0,117	1,745
5	21,657	21,622	21,700	0,161	0,200
10	86,774	87,358	86,744	0,673	0,035

Fonte: Acervo pessoal.

Ambas as tabelas mostram que a deposição pelo mecanismo de sedimentação gravitacional aumenta com o tamanho da partícula, ou seja, a diferença entre a porcentagem de sólidos depositadas nas situações 1 e 2 é maior para as partículas de 10  $\mu\text{m}$ , para ambas as condições respiratórias. Observa-se também que, para a condição respiratória de sono, a diferença entre estas duas situações é muito maior que para a condição de atividade intensa. Isso ocorre porque, como explicado item 4.2, o mecanismo de sedimentação gravitacional é mais atuante nos casos em que a velocidade é menor, pois nestes casos o tempo de residência é maior, possibilitando que as partículas atinjam a velocidade terminal e, então, se choquem com as superfícies internas das vias respiratórias por ação da aceleração da gravidade. Já no caso da condição respiratória de atividade intensa, como mostra a Tabela 5.5, a diferença entre as situações 1 e 2 é menor que 1% para todos os tamanhos de partícula. Neste caso, a velocidade média do fluido é aproximadamente seis vezes maior, dificultando que as partículas atinjam sua velocidade terminal e fazendo com que estas se choquem com as superfícies principalmente pelo mecanismo de interceptação inercial.

De acordo com Crowe et al. (2012) e Spurny (1998), o mecanismo de difusão é mais atuante para partículas menores, da ordem submicrométrica. As diferenças entre as situações 1 e 3, das Tabelas 5.4 e 5.5, confirmam este fato, uma vez que uma maior diferença foi encontrada para as partículas com diâmetro igual a 1  $\mu\text{m}$ . Além disso, este mecanismo também exerce mais influência nos casos em que a velocidade é menor, condição esta que está relacionada a um maior tempo de residência, possibilitando mais choques entre as moléculas do fluido e as partículas suspensas. Por isso, a diferença entre as situações que consideram apenas a força de arraste e aquela que considera esta força, mais o movimento Browniano, foi maior para a condição respiratória de sono, quando comparada com a situação de atividade intensa.

# Capítulo 6

## Considerações Finais

Na etapa de análise da influência da condição respiratória (sono, repouso, atividade moderada e atividade intensa) e do diâmetro da fase dispersa, foi observado que um aumento da velocidade de entrada do ar e do tamanho da partícula implica em uma maior deposição de partículas nas superfícies internas das vias aéreas. Além disso, observou-se também uma maior deposição de partículas menores que  $5\ \mu\text{m}$  na primeira bifurcação do modelo, enquanto que aquelas maiores que  $5\ \mu\text{m}$  se depositam igualmente ou mais intensamente na terceira bifurcação, para as condições respiratórias de sono e repouso. Para as situações de atividades moderada e intensa, para todos os diâmetros de partículas, a deposição é maior na primeira bifurcação, pois nestes casos a inércia é dominante sobre a sedimentação gravitacional, devido às altas velocidades.

No conjunto de simulações para verificação da necessidade de suspender a respiração após a inalação de medicamentos, foi observado que a deposição de aerossóis farmacêuticos aumenta mais rapidamente para a situação de suspensão da respiração, quando comparado com o período de expiração, comprovando as recomendações médicas encontradas nas bulas dos medicamentos inaláveis.

A avaliação dos mecanismos físicos que agem sobre a partícula revelou que a sedimentação gravitacional tem grande influência para partículas com diâmetro maior ( $10\ \mu\text{m}$ ) e para velocidades mais baixas. No caso da difusão Browniana, a deposição é mais afetada quando se considera partículas menores ( $1\ \mu\text{m}$ ) e, assim como a sedimentação gravitacional, em situações envolvendo menores velocidades.

Assim, as técnicas de CFD e a modelagem matemática apresentada se mostraram úteis na análise da deposição de partículas micrométricas nas gerações 3 a 6, em diferentes condições respiratórias, e para verificação da eficácia da suspensão da respiração quando se inala aerossóis farmacêuticos, além de conseguir reproduzir a diferença entre os diferentes mecanismos físicos de deposição.

## Sugestões para Trabalhos Futuros

Diferentemente da inspiração de medicamentos inaláveis, que geralmente possuem propriedades físicas definidas, como diâmetro e massa específica, o ar atmosférico contém partículas de tamanho e massa específica variados. Neste trabalho foram realizadas injeções de aerossóis monodispersos. Sugere-se, então, considerar aerossóis polidispersos na entrada do domínio computacional, a fim de representar com mais fidelidade a situação real de inalação de partículas presentes no ar.

Além disso, a velocidade de entrada foi considerada constante no tempo. Outra sugestão seria utilizar uma expressão para a variação da velocidade com o tempo, o que também seria uma situação mais realista. Para a fase dispersa, uma avaliação da posição das partículas na área da entrada poderia ser realizada, a fim de se verificar a influência da distribuição desses pontos de injeção.

Para as vias aéreas pulmonares, foram consideradas paredes rígidas neste trabalho. Sugere-se, então, uma análise mais complexa considerando estratégias com malhas numéricas adaptativas móveis, para representar o movimento das paredes dos vasos respiratórios durante a respiração.

## Referências

AERODINI: Sulfato de Salbutamol. Andreia Cavalcante Silva. Anápolis: Teuto Brasileiro S/A. Bula de remédio.

AGNIHOTRI, V.; GHORBANIASL, G.; VERBANCK, S.; LACOR, C. On the Multiple LES Frozen Field Approach for the Prediction of Particle Deposition in the Human Upper Respiratory Tract. **Journal of Aerosol Science**, v. 68, p. 58-72, fev. 2014.

AMARAL, C. D. **Estudo da Geração de Nanopartículas a Partir da Atomização de Soluções de Cloreto de Sódio**. 2010. 102 p. (Dissertação de Mestrado) – Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal de São Carlos – São Carlos – SP. 2010.

ASGHARIAN, B.; HOFMANN, W.; BERGMANN, R. Particle Deposition in a Multiple-Path Model of the Human Lung, **Aerosol Science and Technology**, v. 34, n. 4, p. 332-339, 2001.

ANSYS Inc. **Ansys-CFX Modeling Guide**. Canonsburg, 2012. 640 p.

ANSYS Inc. **Ansys-CFX Solver Theory Guide**. Canonsburg, 2012. 372 p.

ANSYS Inc. **Ansys-Fluent Theory Guide**. Canonsburg, 2012. 788 p.

BALÁSHÁZY, I.; HOFMANN, W.; FARKAS, Á. Numerical Modelling of Deposition of Inhaled Particles in Central Human Airways. **Annals of Occupational Hygiene**, v. 46, n. 1, p. 353-357, 2002.

BEARD, K. V. Terminal Velocity and Shape of Cloud and Precipitation Drops Aloft. **Journal of Atmospheric Sciences**, v. 33, n. 5, p. 851-864, mai. 1976.

BENNETT, W. D. Targeting Respiratory Drug Delivery With Aerosols Boluses. **Journal of Aerosol Medicine**, v. 4, n. 2, p. 69-78, jan. 1991.

BERNSTEIN, J. A. et al. Health Effects of Air Pollution. **Journal of Allergy and Clinical Immunology**, v. 114, n. 5, p. 1116-1123, ago. 2004.

BEROTEC: Bromidrato de Fenoterol. Laura M. Spinosa Ramos. Itapecerica da Serra: Boehringer Ingelheim do Brasil Química e Farmacêutica Ltda. Bula de remédio.

BLAZEK, J. **Computational Fluid Dynamics: Principles and Applications**, 1<sup>a</sup> ed. Amsterdam: Elsevier, 2001. 440 p.

BRASIL. Conselho Nacional do Meio Ambiente (CONAMA). **Resolução 003 de 28/06/90**: Padrões de Qualidade do Ar. 1990, 3 p.

BRICKUS, L. S. R.; AQUINO NETO, F. R. A Qualidade do Ar de Interiores e a Química. **Química Nova**, v. 22, n. 1, p. 65-74, fev. 1999.

BRUCE, N.; PADILLA-PEREZ, R.; ALBALAK, R. Indoor Air Pollution in Developing Countries: A Major Environmental and Public Health Challenge. **Bulletin of the World Health Organization**, v. 78, n. 9, p. 1078-1092, 2000.

CARVALHO, T. C.; PETERS, J. I.; WILLIAMS III, R. O. Influence of Particle Size on Regional Lung Deposition – What Evidence is There?. **International Journal of Pharmaceutics**, v. 406, n. 1-2, p. 1-10, 2011.

CHEN, X. et al. CFD-DEM Simulation of Particle Transport and Deposition in Pulmonary Airway. **Powder Technology**, v. 228, p. 309-318, set. 2012a.

CHEN, X. et al. Study on Gas/Solid Flow in an Obstructed Pulmonary Airway With Transient Flow Based on CFD-DPM Approach. **Powder Technology**, v. 217, p. 252-260, fev. 2012b.

CHENG, K-H. et al. *In vivo* Measurements of Nasal Airway Dimensions and Ultrafine Aerosol Deposition in the Human Nasal and Oral Airways. **Journal of Aerosol Science**, v. 27, n. 5, p. 785-801, jul. 1996.

CLAY, M. M.; CLARKE, S. W. Effects of Nebulised Aerosol Size on Lung Deposition in Patients With Mild Asthma. **Thorax**, v. 42, n. 3, p. 190-194, mar. 1987.

COATES, M. S. et al. Effect of Design on the Performance of a Dry Powder Inhaler Using Computational Fluid Dynamics. Part 2: Air Inlet Size. **Journal of Pharmaceutical Sciences**, v. 95, n. 6, p. 1362-1392, jun. 2005.

COATES, M. S. et al. Effect of Design on the Performance of a Dry Powder Inhaler Using Computational Fluid Dynamics. Part 1: Grid Structure and Mouthpiece Length. **Journal of Pharmaceutical Sciences**, v. 93, n. 11, p. 2863-2876, nov. 2004.

CONCENTRATION HEAT AND MOMENTUM LTD (CHAM). **Welcome to CHAM and PHOENICS**. Disponível em: <[www.cham.co.uk](http://www.cham.co.uk)>. Acesso em: Novembro, 2012.

CONCHA, F. Settling Velocities of Particulate Systems. **Kona Powder and Particle Journal**, n. 27, p. 18-37, 2009.

COURY, J. R. **Electrostatic Effects in Granular Bed Filtration of Gases**. 1983. 234 p. Ph.D. Thesis, Cambridge University, UK, 1983.

CROWE, C. T.; SCHWARZKOPF, J. D.; SOMMERFELD, M.; TSUJI, Y. **Multiphase Flows With Droplets and Particles**, 2<sup>a</sup> ed. New York: CRC Press, 2012. 494 p.

CULLEN, P. J. **Food Mixing: Principles and Applications**, 1<sup>a</sup> ed. Dublin: Wiley-Blackwell, 2009. 320 p.

CUMING, H. G. The Secondary Flow in Curved Pipes. **Reports and Memoranda**, n. 2880, fev. 1952.



DAVIES, C. N. Definitive Equations of the Fluid Resistance of Spheres. **The Proceedings of the Physical Society**, v. 57, n. 4, p. 259-270, jul. 1945.

FERRON, G. A. et al. Airflow Simulation in Two-Dimensional Bifurcations. **Journal of Aerosol Science**, v. 22, n. 1, p. 809-812, 1991.

FERZIGER, J. H.; PERIĆ, M. **Computational Methods of Fluid Dynamics**, 3<sup>a</sup> ed. Berlin: Springer Verlag, 2002. 423 p.

FINLAY, W. H.; MARTIN, A. R. Recent Advances in Predictive Understanding of Respiratory Tract Deposition. **Journal of Aerosol Medicine and Pulmonary Drug Delivery**, v. 21, n. 2, p. 189-205, jun. 2008.

FORTUNA, A. O. **Técnicas Computacionais para Dinâmicas dos Fluidos: Conceitos Básicos e Aplicações**, 2<sup>a</sup> ed. São Paulo: Edusp, 2012. 426 p.

GEORGE, S. C.; HLASTALA, M. P. Airway Gas Exchange and Exhaled Biomarkers. **Comprehensive Physiology**, v. 1, n. 4, p. 1837-1859, out. 2011.

GHAHRAMANI, E.; ABOUALI, O.; EMDAD, H.; AHMADI, G. Numerical Analysis of Stochastic Dispersion of Micro-particles in Turbulent Flows in a Realistic Model of Human Nasal/Upper Airway. **Journal of Aerosol Science**, v. 67, p. 188-206, jan. 2014.

GRADONÍ, L.; ORLICKI, D. Deposition of Inhaled Aerosol Particles in a Generation of the Tracheobronchial Tree. **Journal of Aerosol Science**, v. 21, n. 1, p. 3-19, 1990.

HANBY, R. F.; SILVESTER, D. J.; CHEW, J. W. A Comparison of Coupled and Segregated Iterative Solution Techniques for Incompressible Swirling Flow. **International Journal of Numerical Methods in Fluids**, v. 22, n. 5, p. 353-373, mar. 1996.

HEISTRACHER, T.; HOFMANN, W. Physiologically Realistic Models of Bronchial Airway Bifurcations. **Journal of Aerosol Science**, v. 26, n. 3, p. 497-509, abr. 1995.

HEYDER, J. et al. Deposition of Particles in the Human Respiratory Tract in the Size Range 0.005-015  $\mu\text{m}$ . **Journal of Aerosol Science**, v. 17, n. 5, p. 811-825, out. 1986.

HINDS, W. C. **Aerosol Technology**: Properties, Behavior and Measurement of Airborne Particles, 2<sup>a</sup> ed. New York: John Wiley & Sons, 1999. 483 p.

HOFMANN, W. Modelling Inhaled Particle Deposition in the Human Lung – A Review. **Journal of Aerosol Science**, v. 42, n. 10, p. 693-724, out. 2011.

HORSFIELD, K.; THURLBECK, A. Computer Simulation of the Geometry of the Human Bronchial Tree. **Bulletin of Mathematical Biology**, v. 46, n. 3, p. 389-398, 1984.

ICRP. Human Respiratory Tract Model for Radiological Protection. ICRP Publication 66. **Annals of International Commission of Radiological Protection** 24. n. 1-3, 1994.

IMAI, Y. et al. Deposition of Micrometer Particles in Pulmonary Airways During Inhalation and Breathing Holding. **Journal of Biomechanics**, v. 45, n. 10, p. 1810-1815, jun. 2012.

KESAVANATHAN, J.; SWIFT, D. L. Human Nasal Passage Particle Deposition: The Effect of Particle Size, Flow Rate, and Anatomical Factors. **Aerosol Science and Technology**, v. 28, n. 5, p. 457-463, mai. 1998.

KIM, C. S.; FISHER, D. M. Deposition Characteristics of Aerosol Particles in Sequentially Bifurcating Airway Models. **Aerosol Science and Technology**, v. 31, n. 2-3, p. 198-220, ago. 1999.

KIM, C. S.; FISHER, D. M.; LUTZ, D. J.; GERRITY, T. R. Particle Deposition in Bifurcating Airway Models With Varying Geometry. **Journal of Aerosol Science**, v. 25, n. 3, p. 567-581, dez. 1993.

KLEVEN, M. et al. Using Computational Fluid Dynamics (CFD) to Improve the Bi-Directional Nasal Drug Delivery Concept. **Food and Bioproducts Processing**, v. 83, n. 2, p. 107-117, jun. 2005.

KOBLINGER, L.; HOFMANN, W. Analysis of Human Lung Morphometric Data for Stochastic Aerosol Deposition Calculations. **Physics in Medicine and Biology**, v. 30, n. 6, p. 541-556, jun. 1985.

LICHT, W. **Air Pollution Control Engineering: Basic Calculations for Particulate Collection**, 2<sup>a</sup> ed. New York: Marcel Dekker, 1988. 477 p.

LIN, C. L. et al. Computational Fluid Dynamics Multiscale Simulation of Gas Flow in Subject-Specific Models of the Human Lung. **IEEE Engineering in Medicine and Biology Magazine**, v. 28, n. 3, p. 25-33, mai-jun. 2009.

LONGEST, P. W.; VINCHURKAR, S. Effects of Mesh Style and Grid Convergence on Particle Deposition in Bifurcating Airway With Comparisons to Experimental Data. **Mechanical Engineering & Physics**, v. 29, n. 3, 350-366, abr. 2007.

LONGEST, P. W.; VINCHURKAR, S. Inertial Deposition of Aerosols in Bifurcating Models During Steady Expiratory Flow. **Journal of Aerosol Science**, v. 40, n. 4, p. 370-378, abr. 2009.

LONGEST, P.W.; HINDLE, M. Evaluation of the Respimat Soft Mist Inhaler Using a Concurrent CFD and In Vitro Approach. **Journal of Aerosol Medicine and Pulmonary Drug Delivery**, v. 22, n. 2, p. 99-112, jun. 2009.

LONGEST, P. W.; HOLBROOK, L. T. *In silico* Models of Aerosol Delivery to the Respiratory Tract – Development and Applications. **Advanced Drug Delivery Reviews**, v. 64, n. 4, p. 296-311, mar. 2012.

MALISKA, C. R. **Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional**, 2<sup>a</sup> ed. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos, 2004. 453 p.

MARTONEN, T. B.; YANG, Y.; XUE, Z. Q. Effects of Carinal Ridge Shapes on Lung Airstreams. **Aerosol Science and Technology**, v. 21, n. 2, p. 119-136, jan. 1994.

MITCHELL, D. M. et al. Effect of Particle Size of Bronchodilator Aerosols on Lung Distribution and Pulmonary Function in Patients With Chronic Asthma. **Thorax**, v. 42, n. 6, p. 457-461, jun. 1987.

MOGHADAS, H. et al. Numerical Investigation of Septal Deviation Effect on Deposition of Nano/Microparticles in Human Nasal Passage. **Respiratory Physiology & Neurobiology**, v. 177, n. 1, p. 9-18, jun. 2011.

MÖLLER, W. et al. Left-to-Right Asymmetry of Aerosol Deposition After Shallow Bolus Inhalation Depends on Lung Ventilation. **Journal of Aerosol Medicine and Pulmonary Drug Delivery**, v. 22, n. 4, p. 333-339, dez. 2009.

MORSI, S. A.; ALEXANDER, A. J. An Investigation of Particles Trajectories in Two-phase Flow Systems. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 55, n. 2, p. 193-208, 1972.

NOWAK, N.; KAKADE, P. P.; ANNAPRAGADA, A. V. Computational Fluid Dynamics Simulation of Airflow and Aerosol Deposition in Human Lungs. **Annals of Biomedical Engineering**, v. 31, n. 4, p. 374-390, abr. 2003.

ORGANIZAÇÃO MUNDIAL DA SAÚDE. **Fact Sheet n° 310: The Top 10 Causes of Death, 2013**. Disponível em: <[www.who.int/mediacentre/factsheets/fs310](http://www.who.int/mediacentre/factsheets/fs310)>. Acesso em Julho de 2013.

ORGANIZAÇÃO MUNDIAL DA SAÚDE. **Occupational Health. Hazard Prevention and Control in the Work Environment: Airborne Dust**. 1999. 96 p.

ORGANIZAÇÃO MUNDIAL DA SAÚDE. **Fact Sheet n° 313: Air Quality and Health, 2011**. Disponível em: <[www.who.int/mediacentre/factsheets/fs313](http://www.who.int/mediacentre/factsheets/fs313)>. Acesso em: Novembro 2012.

PALADINO, E. E. **Estudo do Escoamento Multifásico em Medidores de Vazão do Tipo Pressão Diferencial**. 2005. 263 p. (Tese de Doutorado) – Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis – SC, 2005.

PERRY, H. R.; GREEN, D. W. **Perry's Chemical Engineers' Handbook**, 7ª ed. Estados Unidos da América: McGraw-Hill, 1999.

PIGLIONE, M. C.; FONTANA, D. VANNI, M. Simulation of Particle Deposition in Human Central Airways. **European Journal of Mechanics B/Fluids**, v. 31, p. 91-101, jan.-fev. 2012.

POPE, C. A., III; DOCKERY, D. W. Health Effects of Fine Particulate Air Pollution: Lines That Connect. **Journal of the Air & Waste Management Association**, v. 56, n. 6, p. 709-742, jun. 2006.

RAABE, O. G. et al. **Tracheobronchial Geometry: Human, Dog, Rat, Hamster**. Lovelace Foundation Report LF-53. New Mexico: Lovelace Foundation. 1976.

RADHAKRISHNAN, H.; KASSINOS, S. CFD Modeling of Turbulent Flow and Particle Deposition in Human Lungs. 31<sup>st</sup> Annual International Conference of the IEEE EMBs. **Engineering in Medicine and Biology Society**. Minnesota, USA, p. 2867-2870, set. 2009.

SÃO PAULO. Companhia Ambiental do Estado de São Paulo. **Qualidade do ar: Poluentes**. Disponível em: <[www.cetesb.sp.gov.br](http://www.cetesb.sp.gov.br)>. Acesso em Julho de 2013.

SABER, E. M.; HEYDARI, G. Flow Patterns and Deposition Fraction of Particles in the Range of 0,1-10  $\mu\text{m}$  at Trachea and the First Thirds Generations Under Different Breathing Conditions. **Computers in Biology and Medicine**, v. 42, n. 5, p. 631-638, mai. 2012.

SCHROETER, J. D. et al. Hygroscopic Growth and Deposition of Inhaled Secondary Cigarette Smoke in Human Nasal Pathways. **Aerosol Science and Technology**, v. 34, n. 1, p. 137-143, jan. 2001.

SEINFELD, J. H.; PANDIS, S. N. **Atmospheric Chemistry and Physics: From Air Pollution to Climate Change**, 2<sup>a</sup> ed. New Jersey: John Wiley & Sons, 2006, 1203 p.

SON, Y-J.; LONGEST, P. W.; TIAN, G.; HINDLE, M. Evaluation and Modification of Commercial Dry Powder Inhalers for the Aerosolization of a Submicrometer Excipient Enhanced Growth (EEG) Formulation. **European Journal of Pharmaceutical Sciences**, v. 49, n. 3, p. 390-399, jun. 2013.

SPURNY, K. R. **Advances in Aerosol Filtration**, 1<sup>a</sup> ed. Florida: CRC Press LLC, 1998, 533 p.

STAHLHOFEN, W.; RUDOLF, G.; JAMES, A. C. Intercomparison of Experimental Regional Aerosol Deposition Data. **Journal of Aerosol Medicine**, v. 2, n. 3, p. 285-208, 1989.

STURM, R.; HOFMANN, W. Stochastic Simulation of Alveolar Particle Deposition in Lungs Affected by Different Types of Emphysema. **Journal of Aerosol Medicine**, v. 14, n. 4, p. 357-372, 2004.

TAKANO, H. et al. Inhaled Particle Deposition in Unsteady-State Respiratory Flow at a Numerically Constructed Model of the Human Larynx. **Journal of Aerosol Medicine**, v. 19, n. 3, p. 314-328, out. 2006.

TANABE, E. H. **Desempenho de Meios Filtrantes na Filtração de Gases a Altas Pressões**. 2011. 150 p. (Tese de Doutorado) – Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos – SP, 2011.

TENA, A. F.; CLARÀ, P. C. Deposition of Inhaled Particles in the Lungs. **Archivos de Bronconeumologia**, v. 48, n. 7, p. 240-246, jul. 2012.

TU, J.; YEOH, G. H.; LIU, C. **Computational Fluid Dynamics: A Practical Approach**, 1<sup>a</sup> ed. Oxford: Butterworth-Heinemann, 2008, 459 p.

VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. **An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method**, 2<sup>a</sup> ed. New York: Prentice Hall, 2007. 503 p.

XI, J.; LONGEST, P. W. Transport and Deposition of Micro-Aerosols in Realistic and Simplified Models of the Oral Airway. **Annals of Biomedical Engineering**, v. 35, n. 4, p. 560-581, abr. 2007.

XI, J.; LONGEST, P. W.; MARTONEN, T. B. Effects of the Laryngeal Jet on Nano- and Microparticle Transport and Deposition in an Approximate Model of the Upper Tracheobronchial Airways. **Journal of Applied Physiology**, v. 104, n. 6, p. 1761-1777, jun. 2008.

XIE, Y. et al. Magnetic Deposition of Aerosols Composed of Aggregated Superparamagnetic Nanoparticles. **Pharmaceutical Research**, v. 27, n. 5, p. 855-865, mai. 2010.

WANG, C. Y. Bifurcating Distributive System Using Monte Carlo Method. **Mathematical and Computer Modelling**, v. 16, n. 3, p. 91-98, mar. 1992.

YEH, H. C.; SCHUM, G. M. Models of Human Lung Airways and Their Application to Inhaled Particle Deposition. **Bulletin of Mathematical Biology**, v. 42, n. 3, p. 461-480, 1980.

YIN, Y. et al. Simulation of Pulmonary Air Flow with a Subject-Specific Boundary Condition. **Journal of Biomechanics**, v. 43, n. 11, p. 2159-2163, ago. 2010.

ZHANG, L.; ASGHARIAN, B.; ANJILVEL, S. Inertial Deposition of Particles in the Human Upper Airway Bifurcations. **Aerosol Science and Technology**, v. 26, n. 2, p. 97-110, 1997.

ZHANG, Z.; KLEINSTREUER, C. Airflow Structures and Nano-Particle Deposition in a Human Upper Airway Model. **Journal of Computational Physics**, v. 198, n. 1, p. 178-210, jul. 2004.

ZHANG, Z.; KLEINSTREUER, C.; KIM, C. S. Gas-Solid Two-Phase Flow in a Triple Bifurcation Lung Airway Model. **International Journal of Multiphase Flow**, v. 28, n. 6, p. 1021-1046, jun. 2002.

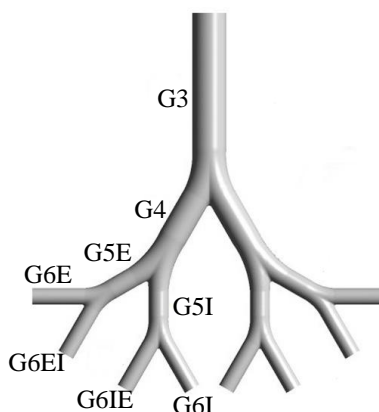
ZHU, J. H. et al. Y. Evaluation and Comparison of Nasal Airway Flow Patterns Among Three Subjects from Caucasian, Chinese and Indian Ethnic Groups Using Computational Fluid Dynamics Simulation. **Respiratory Physiology & Neurobiology**, v. 175, n. 1, p. 62-69, jan. 2011.



## APÊNDICE A

Valores do número de Reynolds do escoamento de ar, do número de Stokes da partícula e do número de Froude, para as quatro condições respiratórias, cada diâmetro de partícula e cada geração.

**Figura A.1 - Identificação das gerações.**



**Tabela A.1 - Números adimensionais de Reynolds, Stokes e Froude para condição de sono  
(continua).**

Geração (Figura A.1)	Diâmetro da geração (cm)	Velocidade média do fluido (m/s)	Diâmetro da partícula ( $\mu\text{m}$ )	Número de Reynolds da geração	Número de Stokes	Número de Froude
G3	0,6	0,55	1	195,05	5,36E-04	2,27
			2		2,14E-03	
			3		4,82E-03	
			4		8,58E-03	
			5		1,34E-02	
			6		1,93E-02	
			7		2,63E-02	
			8		3,43E-02	
			9		4,34E-02	
			10		5,36E-02	
G4	0,5	0,41	1	121,17	4,80E-04	1,85
			2		1,92E-03	
			3		4,32E-03	
			4		7,67E-03	
			5		1,20E-02	
			6		1,73E-02	
			7		2,35E-02	
			8		3,07E-02	
			9		3,88E-02	
			10		4,80E-02	

**Tabela A.1 - Números adimensionais de Reynolds, Stokes e Froude para condição de sono (continua).**

<b>Geração (Figura A.1)</b>	<b>Diâmetro da geração (cm)</b>	<b>Velocidade média do fluido (m/s)</b>	<b>Diâmetro da partícula (µm)</b>	<b>Número de Reynolds da geração</b>	<b>Número de Stokes</b>	<b>Número de Froude</b>
G5I	0,35	0,43	1	88,95	7,18E-04	2,32
			2		2,87E-03	
			3		6,47E-03	
			4		1,15E-02	
			5		1,80E-02	
			6		2,59E-02	
			7		3,52E-02	
			8		4,60E-02	
			9		5,82E-02	
			10		7,18E-02	
G5E	0,35	0,39	1	80,68	6,52E-04	2,10
			2		2,61E-03	
			3		5,86E-03	
			4		1,04E-02	
			5		1,63E-02	
			6		2,35E-02	
			7		3,19E-02	
			8		4,17E-02	
			9		5,28E-02	
			10		6,52E-02	
G6I	0,29	0,3	1	51,42	6,05E-04	1,78
			2		2,42E-03	
			3		5,44E-03	
			4		9,68E-03	
			5		1,51E-02	
			6		2,18E-02	
			7		2,96E-02	
			8		3,87E-02	
			9		4,90E-02	
			10		6,05E-02	
G6IE	0,29	0,33	1	56,56	6,65E-04	1,96
			2		2,66E-03	
			3		5,99E-03	
			4		1,06E-02	
			5		1,66E-02	
			6		2,40E-02	
			7		3,26E-02	
			8		4,26E-02	
			9		5,39E-02	
			10		6,65E-02	

**Tabela A.1 - Números adimensionais de Reynolds, Stokes e Froude para condição de sono (conclusão).**

<b>Geração (Figura A.1)</b>	<b>Diâmetro da geração (cm)</b>	<b>Velocidade média do fluido (m/s)</b>	<b>Diâmetro da partícula (<math>\mu\text{m}</math>)</b>	<b>Número de Reynolds da geração</b>	<b>Número de Stokes</b>	<b>Número de Froude</b>
G6EI	0,29	0,29	1	49,71	5,85E-04	1,72
			2		2,34E-03	
			3		5,26E-03	
			4		9,36E-03	
			5		1,46E-02	
			6		2,11E-02	
			7		2,87E-02	
			8		3,74E-02	
			9		4,74E-02	
			10		5,85E-02	
G6E	0,29	0,27	1	46,28	5,44E-04	1,60
			2		2,18E-03	
			3		4,90E-03	
			4		8,71E-03	
			5		1,36E-02	
			6		1,96E-02	
			7		2,67E-02	
			8		3,48E-02	
			9		4,41E-02	
			10		5,44E-02	

**Tabela A.2 - Números adimensionais de Reynolds, Stokes e Froude para condição de repouso (continua).**

<b>Geração (Figura A.1)</b>	<b>Diâmetro da geração (cm)</b>	<b>Velocidade média do fluido (m/s)</b>	<b>Diâmetro da partícula (<math>\mu\text{m}</math>)</b>	<b>Número de Reynolds da geração</b>	<b>Número de Stokes</b>	<b>Número de Froude</b>
G3	0,6	0,66	1	234,06	6,43E-04	2,72
			2		2,57E-03	
			3		5,79E-03	
			4		1,03E-02	
			5		1,61E-02	
			6		2,32E-02	
			7		3,15E-02	
			8		4,12E-02	
			9		5,21E-02	
			10		6,43E-02	

**Tabela A.2 - Números adimensionais de Reynolds, Stokes e Froude para condição de repouso (continua).**

<b>Geração (Figura A.1)</b>	<b>Diâmetro da geração (cm)</b>	<b>Velocidade média do fluido (m/s)</b>	<b>Diâmetro da partícula (µm)</b>	<b>Número de Reynolds da geração</b>	<b>Número de Stokes</b>	<b>Número de Froude</b>
G4	0,5	0,5	1	147,76	5,85E-04	2,26
			2		2,34E-03	
			3		5,26E-03	
			4		9,36E-03	
			5		1,46E-02	
			6		2,11E-02	
			7		2,87E-02	
			8		3,74E-02	
			9		4,74E-02	
			10		5,85E-02	
G5I	0,35	0,53	1	109,64	8,86E-04	2,86
			2		3,54E-03	
			3		7,97E-03	
			4		1,42E-02	
			5		2,21E-02	
			6		3,19E-02	
			7		4,34E-02	
			8		5,67E-02	
			9		7,17E-02	
			10		8,86E-02	
G5E	0,35	0,46	1	95,16	7,69E-04	2,48
			2		3,07E-03	
			3		6,92E-03	
			4		1,23E-02	
			5		1,92E-02	
			6		2,77E-02	
			7		3,77E-02	
			8		4,92E-02	
			9		6,23E-02	
			10		7,69E-02	
G6I	0,29	0,36	1	61,71	7,26E-04	2,13
			2		2,90E-03	
			3		6,53E-03	
			4		1,16E-02	
			5		1,81E-02	
			6		2,61E-02	
			7		3,56E-02	
			8		4,65E-02	
			9		5,88E-02	
			10		7,26E-02	

**Tabela A.2 - Números adimensionais de Reynolds, Stokes e Froude para condição de repouso (conclusão).**

<b>Geração (Figura A.1)</b>	<b>Diâmetro da geração (cm)</b>	<b>Velocidade média do fluido (m/s)</b>	<b>Diâmetro da partícula (<math>\mu\text{m}</math>)</b>	<b>Número de Reynolds da geração</b>	<b>Número de Stokes</b>	<b>Número de Froude</b>
G6IE	0,29	0,41	1	70,28	8,27E-02	2,43
			2		8,27E-04	
			3		3,31E-03	
			4		7,44E-03	
			5		1,32E-02	
			6		2,07E-02	
			7		2,98E-02	
			8		4,05E-02	
			9		5,29E-02	
			10		6,70E-02	
G6EI	0,29	0,34	1	58,28	8,27E-04	2,02
			2		3,31E-03	
			3		7,44E-03	
			4		1,32E-02	
			5		2,07E-02	
			6		2,98E-02	
			7		4,05E-02	
			8		5,29E-02	
			9		6,70E-02	
			10		8,27E-02	
G6E	0,29	0,32	1	54,85	6,86E-04	1,90
			2		2,74E-03	
			3		6,17E-03	
			4		1,10E-02	
			5		1,71E-02	
			6		2,47E-02	
			7		3,36E-02	
			8		4,39E-02	
			9		5,55E-02	
			10		6,86E-02	

**Tabela A.3 - Números adimensionais de Reynolds, Stokes e Froude para condição de atividade moderada (continua).**

<b>Geração (Figura A.1)</b>	<b>Diâmetro da geração (cm)</b>	<b>Velocidade média do fluido (m/s)</b>	<b>Diâmetro Partícula (<math>\mu\text{m}</math>)</b>	<b>Número de Reynolds da geração</b>	<b>Número de Stokes</b>	<b>Número de Froude</b>
G3	0,6	1,84	1	652,52	1,79E-03	7,58
			2		7,17E-03	
			3		1,61E-02	
			4		2,87E-02	
			5		4,48E-02	
			6		6,46E-02	
			7		8,79E-02	
			8		1,15E-01	
			9		1,45E-01	
			10		1,79E-01	
G4	0,5	1,4	1	413,74	1,64E-03	6,32
			2		6,55E-03	
			3		1,47E-02	
			4		2,62E-02	
			5		4,09E-02	
			6		5,89E-02	
			7		8,02E-02	
			8		1,05E-01	
			9		1,33E-01	
			10		1,64E-01	
G5I	0,35	1,56	1	322,71	2,61E-03	8,42
			2		1,04E-02	
			3		2,35E-02	
			4		4,17E-02	
			5		6,52E-02	
			6		9,38E-02	
			7		1,28E-01	
			8		1,67E-01	
			9		2,11E-01	
			10		2,61E-01	
			10		1,95E-01	

**Tabela A.3 - Números adimensionais de Reynolds, Stokes e Froude para condição de atividade moderada (continua).**

<b>Geração (Figura A.1)</b>	<b>Diâmetro da geração (cm)</b>	<b>Velocidade média do fluido (m/s)</b>	<b>Diâmetro da partícula (µm)</b>	<b>Número de Reynolds da geração</b>	<b>Número de Stokes</b>	<b>Número de Froude</b>
G5E	0,35	1,17	1	242,04	1,95E-03	6,31
			2		7,82E-03	
			3		1,76E-02	
			4		3,13E-02	
			5		4,89E-02	
			6		7,04E-02	
			7		9,58E-02	
			8		1,25E-01	
			9		1,58E-01	
			10		1,95E-01	
G6I	0,29	1,1	1	188,55	2,22E-03	6,52
			2		8,87E-03	
			3		2,00E-02	
			4		3,55E-02	
			5		5,55E-02	
			6		7,99E-02	
			7		1,09E-01	
			8		1,42E-01	
			9		1,80E-01	
			10		2,22E-01	
G6IE	0,29	1,18	1	202,26	2,38E-03	7,00
			2		9,52E-03	
			3		2,14E-02	
			4		3,81E-02	
			5		5,95E-02	
			6		8,57E-02	
			7		1,17E-01	
			8		1,52E-01	
			9		1,93E-01	
			10		2,38E-01	
G6EI	0,29	0,89	1	152,55	1,79E-03	5,28
			2		7,18E-03	
			3		1,62E-02	
			4		2,87E-02	
			5		4,49E-02	
			6		6,46E-02	
			7		8,79E-02	
			8		1,15E-01	
			9		8,79E-02	
			10		1,15E-01	

**Tabela A.3 - Números adimensionais de Reynolds, Stokes e Froude para condição de atividade moderada (conclusão).**

<b>Geração (Figura A.1)</b>	<b>Diâmetro da geração (cm)</b>	<b>Velocidade média do fluido (m/s)</b>	<b>Diâmetro da partícula (µm)</b>	<b>Número de Reynolds da geração</b>	<b>Número de Stokes</b>	<b>Número de Froude</b>
G6E	0,29	0,81	1	138,84	1,63E-03	4,80
			2		6,53E-03	
			3		1,47E-02	
			4		2,61E-02	
			5		4,08E-02	
			6		5,88E-02	
			7		8,00E-02	
			8		1,05E-01	
			9		1,32E-01	
			10		1,63E-01	

**Tabela A.4 - Números adimensionais de Reynolds, Stokes e Froude para condição de atividade intensa (continua).**

<b>Geração (Figura A.1)</b>	<b>Diâmetro da geração (cm)</b>	<b>Velocidade média do fluido (m/s)</b>	<b>Diâmetro da partícula (µm)</b>	<b>Número de Reynolds da geração</b>	<b>Número de Stokes</b>	<b>Número de Froude</b>
G3	0,6	3,69	1	1308,59	3,60E-03	15,21
			2		1,44E-02	
			3		3,24E-02	
			4		5,75E-02	
			5		8,99E-02	
			6		1,29E-01	
			7		1,76E-01	
			8		2,30E-01	
			9		2,91E-01	
			10		3,60E-01	
G4	0,5	2,82	1	833,38	3,30E-03	12,73
			2		1,32E-02	
			3		2,97E-02	
			4		5,28E-02	
			5		8,25E-02	
			6		1,19E-01	
			7		1,62E-01	
			8		2,11E-01	
			9		2,67E-01	
			10		3,30E-01	



**Tabela A.4 - Números adimensionais de Reynolds, Stokes e Froude para condição de atividade intensa (continua).**

<b>Geração (Figura A.1)</b>	<b>Diâmetro da geração (cm)</b>	<b>Velocidade média do fluido (m/s)</b>	<b>Diâmetro da partícula (µm)</b>	<b>Número de Reynolds da geração</b>	<b>Número de Stokes</b>	<b>Número de Froude</b>
G5I	0,35	3,3	1	682,67	5,51E-03	17,81
			2		2,21E-02	
			3		4,96E-02	
			4		8,82E-02	
			5		1,38E-01	
			6		1,98E-01	
			7		2,70E-01	
			8		3,53E-01	
			9		4,47E-01	
			10		5,51E-01	
G5E	0,35	2,19	1	453,04	3,66E-03	11,82
			2		1,46E-02	
			3		3,29E-02	
			4		5,85E-02	
			5		9,15E-02	
			6		1,32E-01	
			7		1,79E-01	
			8		2,34E-01	
			9		2,96E-01	
			10		3,66E-01	
G6I	0,29	2,22	1	380,52	4,48E-03	13,16
			2		1,79E-02	
			3		4,03E-02	
			4		7,16E-02	
			5		1,12E-01	
			6		1,61E-01	
			7		2,19E-01	
			8		2,87E-01	
			9		3,63E-01	
			10		4,48E-01	
G6IE	0,29	2,54	1	435,37	5,12E-03	15,06
			2		2,05E-02	
			3		4,61E-02	
			4		8,20E-02	
			5		1,28E-01	
			6		1,84E-01	
			7		2,51E-01	
			8		3,28E-01	
			9		4,15E-01	
			10		5,12E-01	

**Tabela A.4 - Números adimensionais de Reynolds, Stokes e Froude para condição de atividade intensa (conclusão).**

<b>Geração (Figura A.1)</b>	<b>Diâmetro da geração (cm)</b>	<b>Velocidade média do fluido (m/s)</b>	<b>Diâmetro da partícula (<math>\mu\text{m}</math>)</b>	<b>Número de Reynolds da geração</b>	<b>Número de Stokes</b>	<b>Número de Froude</b>
G6EI	0,29	1,68	1	287,96	3,39E-03	9,96
			2		1,36E-02	
			3		3,05E-02	
			4		5,42E-02	
			5		8,47E-02	
			6		1,22E-01	
			7		1,66E-01	
			8		2,17E-01	
			9		2,74E-01	
			10		3,39E-01	
G6E	0,29	1,51	1	258,82	3,04E-03	8,95
			2		1,22E-02	
			3		2,74E-02	
			4		4,87E-02	
			5		7,61E-02	
			6		1,10E-01	
			7		1,49E-01	
			8		1,95E-01	
			9		2,47E-01	
			10		1,95E-01	

## APÊNDICE B

Subrotina acoplada ao *software* ANSYS CFX® 14.5 para análise da influência do fator de escorregamento sobre a deposição de partículas.

```

#include "cfx5ext.h"
dllexport(pt_mom_source)
  SUBROUTINE PT_MOM_SOURCE(NLOC,NRET,NARG,RET,ARG,CRESLT,
    &
      CZ,DZ,IZ,LZ,RZ)
CC
CC User routine: Schiller-Naumann Drag Force
CC
CC -----
CC   Input
CC -----
CC
CC NRET - number of components in result
CC NARG - number of arguments in call
CC ARG() - (NARG) argument values
CC
CC -----
CC   Modified
CC -----
CC
CC Stacks possibly.
CC
CC -----
CC   Output
CC -----
CC
CC RET() - (NRET) return values
CC
CC -----
CC   Details
CC -----
CC
CC=====
C
C -----
C   Preprocessor includes
C -----
C
C
C -----
C   Global Parameters
C -----
C
C
C -----
C   Argument list
C -----
C
C   INTEGER NLOC,NARG,NRET
C
C   REAL ARG(NLOC,NARG), RET(NLOC,NRET)
C

```

```

CHARACTER CRESLT*(*)
C
INTEGER IZ(*)
CHARACTER CZ(*)*(1)
DOUBLE PRECISION DZ(*)
LOGICAL LZ(*)
REAL RZ(*)
C
C-----
C   External routines
C-----
C
C
C-----
C   Local Parameters
C-----
C
C
C-----
C   Local Variables
C-----
C
C
C-----
C   Stack pointers
C-----
C
C=====
C
C-----
C   Executable Statements
C-----
C
C=====
C
C   Argument variables stack:
C   -----
C
C   Particle diameter : DIAM_PT = ARG(1,1)
C   Reynolds number  : RE_PT   = ARG(1,2)
C   Slip velocity    : SLPVEL_PT = ARG(1,3)
C   Particle velocity : VEL_PT   = ARG(1,4:6)
C   Fluid density    : DENSITY_FL = ARG(1,7)
C   Fluid velocity   : VEL_FL    = ARG(1,8:10)
C   Pressure        : PRESS     = ARG(1,11)
C   Viscosity       : VISC      = ARG(1,12)
C
C   Return variables stack:
C   -----
C
C   Source term      : SOURCE   = RET(1,1:3)
C   Source coefficient : COEF_PT  = RET(1,4)
C   Source coefficient : COEF_FL  = RET(1,5)
C
C=====
C
C-----
C   Calculate the momentum source and source term coefficient
C-----

```

```

C
  CALL USER_MOMENTUM_SOURCE (RET(1,1),RET(1,4),RET(1,5),
&     ARG(1,1),ARG(1,2),ARG(1,3),ARG(1,4),
&     ARG(1,7),ARG(1,8),ARG(1,11),ARG(1,12))
C
  END

  SUBROUTINE USER_MOMENTUM_SOURCE (SOURCE,COEF_PT,COEF_FL,
&     DIAM_PT,RE_PT,SLPVEL_PT,VEL_PT,
&     DENSITY_FL,VEL_FL,PRESS,VISC)
C
C=====
C  Calculate the momentum source and source term coefficient
C=====
C
C-----
C  Preprocessor includes
C-----
C
#include "cfd_sysdep.h"
#include "cfd_constants.h"
C
C-----
C  Argument list
C-----
C
  REAL    SOURCE(3), COEF_PT, COEF_FL,
&        DIAM_PT, VEL_PT(3), RE_PT, SLPVEL_PT,
&        DENSITY_FL, VEL_FL(3), PRESS, VISC
C
C-----
C  Local variables
C-----
C
  REAL    AREA, CD, FACT, TEMP, LAMBDA, KN
C
C-----
C  Executable statements
C-----
C
C---- Convert P in Pa to bar
  PRESS = PRESS/1e5

C---- Calculate Mean Free Path
  LAMBDA = 2.15e-4*VISC*TEMP**0.5/PRESS

C---- Calculate Knudsen Number
  KN = LAMBDA/DIAM_PT

C---- Calculate Cunningham Correction Factor
  CUN = 1 + KN*(2.514 + 0.800*EXP(-0.550/KN))

C---- Calculate the Particle Reference Area
C
  AREA = PI*DIAM_PT**2*QUARTER
C
C---- Calculate the Schiller-Naumann Drag Coefficient
C

```

```
IF (RE_PT.LT.800.) THEN  
  CD = 24./RE_PT*(1+0.15*RE_PT**0.687)  
ELSE  
  CD = 0.45  
ENDIF
```

```
CD = CD/CUN
```

```
C---- Calculate the Momentum Source Term and Linear Coefficients
```

```
C  
  FACT = HALF*DENSITY_FL*AREA*CD*SLPVEL_PT  
C  
  SOURCE = FACT*(VEL_FL-VEL_PT)  
C  
  COEF_PT = -FACT  
  COEF_FL = FACT  
C  
END
```