

ANÁLISIS FLUIDODINÁMICO COMPUTACIONAL DE INYECCIÓN DE MEDICAMENTO EN CIRCUITOS DE VENTILACIÓN MECÁNICA

FLUID DYNAMIC COMPUTATIONAL ANALYSIS OF INJECTION OF MEDICINE IN MECHANICAL VENTILATION CIRCUITS

Matias A. Herrera^a, Ana E. Scarabino^a y Federico Bacchi^a

^a*Grupo de Fluidodinámica Computacional, Universidad Nacional de La Plata, La Plata, Buenos Aires, Argentina, gfc@ing.unlp.edu.ar, <http://www.gfc.ing.unlp.edu.ar>*

Palabras clave: Inyección, Sprays, Aerocámaras, Ventilación, CFD.

Resumen. El presente trabajo consiste en un estudio fluidodinámico computacional de la inyección de medicamentos en circuitos de ventilación mecánica, buscando la optimización y el aumento de eficiencia del dispositivo utilizado como medio para realizar la inyección, denominado aerocámara. Se analizaron dos modelos de aerocámaras propuestos y se compararon los resultados con los de una aerocámara de referencia actualmente utilizada en circuitos de ventilación. El estudio se realizó mediante el software CFX-ANSYS de CFD para lo cual se resolvió un problema multifásico con dispersión de partículas en una configuración turbulenta, tridimensional y no estacionaria, ya que debió simularse a lo largo del tiempo la evolución del campo fluidodinámico durante el ciclo de inspiración, así como las trayectorias de las microgotas de medicación durante dicho ciclo.

Keywords: Injection, Sprays, Spacers Chambers, Ventilation, CFD.

Abstract. The present work presents a computational fluid dynamic study of a medication spray injection into a mechanical ventilation circuit, with the goal of the optimization and efficiency increase of the device called aerospacer or “space chamber”. Two new aerospacer models are analyzed and results are compared with those of a standard model actually used for mechanical ventilation. The study is carried out with the commercial software CFX-ANSYS. The problem is solved as multiphase flow of particles (medication microdrops) interacting with the inspired air in a turbulent three-dimensional configuration. The time evolution of the fluid dynamic field was computed and analyzed, as well as the particle trajectories during an inspiration cycle.

1 INTRODUCCIÓN

La ventilación mecánica es un componente crítico en unidades de cuidados intensivos ya que es el encargado de generar los ciclos de inspiración y espiración en personas con fallas en el sistema respiratorio. A este problema se le suma la importancia de suministrar drogas durante la ventilación mecánica, tales como broncodilatadores, antivirales, anti-inflamatorios, entre otros (Hess and Kacmarek, 2014).

Estos medicamentos suelen ser inyectados al circuito de ventilación mediante nebulizadores y aerocámaras cuya función es básicamente generar un espacio donde las partículas sean inyectadas mediante un pulverizador de manera de perder velocidad evitando adherirse a las paredes.

En el presente trabajo se realizó el estudio fluidodinámico de la inyección de medicamento primero mediante una aerocámara comúnmente utilizada en cuidados intensivos, denominada Collapsible Holding Chamber (CHC) y en función de este análisis se propusieron dos diseños de aerocámaras y se compararon los resultados obtenidos con los de la aerocámara CHC, utilizando para todos los casos la misma geometría del circuito de ventilación. A lo largo del trabajo se comenta brevemente el marco teórico necesario para abordar el tema, los modelos numéricos utilizados, la malla de discretización del dominio, las configuraciones del software de simulación utilizadas y finalmente se presentan y comparan los resultados obtenidos para las diferentes aerocámaras.

2 MARCO TEÓRICO DE LA MECÁNICA DE VENTILACIÓN

2.1 Circuito de ventilación y modos de operación

A modo introductorio un circuito de ventilación mecánica está compuesto básicamente por el dispositivo de ventilación o ventilador mecánico, un humidificador cuya función es calentar y humidificar el flujo de aire que ingresa por la rama inspiratoria, y la aerocámara (spacer), dispositivo por el cual se inyecta medicamento al circuito. El circuito consta además de una rama inspiratoria y una rama espiratoria. El ventilador mecánico es el encargado de generar una presión positiva en la vía inspiratoria, en la cual se encuentra la aerocámara, ingresando así el flujo de inspiración y posteriormente el flujo de espiración es liberado por la vía secundaria del circuito. Dentro de los tipos de circuitos de ventilación, podemos encontrar circuitos invasivos, ya sea utilizando tubo endotraqueal o traqueotomía, y circuitos no invasivos utilizando máscaras. También existen otros métodos de inyección tal como la nebulización, ampliamente utilizada en la actualidad. En el presente trabajo el circuito analizado será invasivo mediante tubo endotraqueal y la inyección de medicamento se realizara a través de las aerocámaras (Dhand and Guntur, 2008).

En cuanto al modo de operación del circuito constituye una parte esencial del problema ya que determina la forma en que opera el ventilador mecánico y por ende determina las condiciones de borde para el problema.

Básicamente existen diferentes modos en los que puede operar en el ventilador mecánico entre los que se pueden mencionar: control de volumen y control de presión (Hess and Kacmarek, 2014).

- Control de volumen: mantiene constante un cierto flujo inspiratorio ajustado previamente variando de forma no controlable las condiciones de presión pulmonar.
- Control de presión: la presión en las vías aéreas es ajustada y permanece constante independientemente de cambios en la resistencia de los tejidos pulmonares y diafragma. El flujo inspiratorio a su vez varía de forma no controlable.

Para el presente trabajo se optó por estudiar el circuito de ventilación con un esquema de control de volumen, el cual es un tipo de ventilación clínicamente común.

2.2 Aerocámaras y método de inyección

Existen diversos tipos de aerocámaras actualmente utilizadas en circuitos de ventilación siendo una de las más típicas la CHC cuyo nombre comercial es Monaghan AeroVent, la cual se puede observar a continuación en la [Figura 1.a](#). Dicha aerocámara ha sido utilizada como aerocámara de referencia en el presente trabajo.

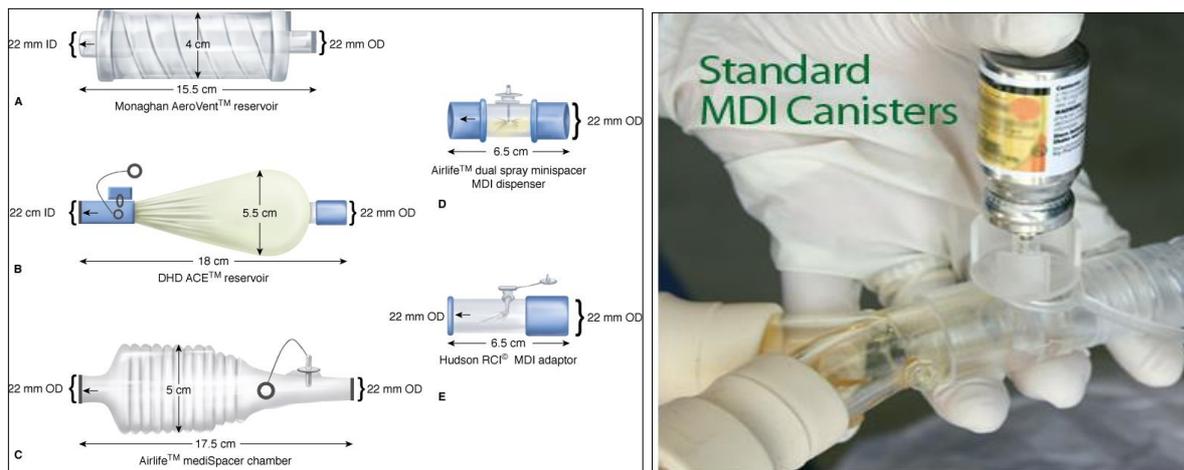


Figura 1: a) Tipos de aerocámaras. b) Método de inyección mediante pMDI.

Por su parte en cuanto a la inyección ésta se realiza mediante un inhalador de dosis medida (pMDI) el cual es un recipiente cilíndrico como se puede observar en la [Figura 1.b](#), el cual contiene el medicamento y está presurizado a aproximadamente 4 atmósferas mediante un gas propelente, el cual se evapora inmediatamente al ser liberado a la atmósfera. El medicamento es liberado gracias a una válvula dosificadora la cual libera una dosis controlada de aproximadamente 100 microgramos ([Newman, 2005](#)).

3 ANTECEDENTES Y ESTUDIOS PREVIOS

Existen numerosos estudios realizados relacionados a la temática. Se mencionarán algunos que han sido de particular ayuda en la realización del presente trabajo. En los trabajos de [Oliveira, 2012](#) y [Sprigge, 2014](#) se estudia detenidamente mediante CFD la inyección de medicamento mediante pMDIs en aerocámaras. [Oliveira, 2012](#) estudió las características geométricas de los espaciadores y como afectan la deposición de medicamento y [Sprigge, 2014](#) por su parte analizó como varía la deposición en aerocámaras para diferentes relaciones de flujo. El particular interés por estos estudios radica en la abundante información acerca de la configuración del software de CFD utilizadas para la obtención de resultados validados para la inyección. Otro trabajo de interés fue el de [Kleinstreuer, 2007](#). El mismo estudió mediante CFD las ventajas de la aerocámara en la inyección de medicamento mediante el pMDI modelando tanto el pMDI, como la aerocámara y las vías respiratorias. En el trabajo de [Yousefi, 2017](#) por su parte se analiza mediante CFD una vía aérea idealizada conectada al pMDI y cómo afectan las variables tales como velocidad de inyección, ángulo del cono del spray y distribución del tamaño de partículas, entre otras. Por último se pueden observar resultados experimentales en el trabajo de [Dugernier, 2016](#). En el mismo se compara experimentalmente la deposición de partículas en dos circuitos de ventilación con tubos endotraqueal mediante control de presión y

control de volumen. Las partículas fueron inyectadas con radioisótopos que emiten radiación gamma la cual es procesada en imágenes mediante la técnica denominada gammagrafía. Como resultado se obtuvieron deposiciones del $10,5 \pm 3$ y 15.1 ± 5 % en los pulmones, para el modo de control de presión y control de volumen respectivamente. Se observaron además deposiciones de 27.4 ± 6.6 y 20.7 ± 6 % en el tubo endotraqueal durante el modo de presión y volumen respectivamente.

Adicionalmente, en el Grupo Fluidodinámica Computacional, de la Facultad de Ingeniería de la Universidad Nacional de La Plata se han llevado a cabo estudios sobre la inyección y aspiración de medicamentos en aerocámaras con “puffs” para la inhalación directa de los mismos. (Ravettino et al, 2017).

4 MARCO TEÓRICO DE LA DINÁMICA DE FLUIDOS

El comportamiento de los fluidos se encuentra gobernado por las ya conocidas ecuaciones de Navier Stokes. Para un flujo newtoniano e incompresible (viscosidad y densidad constante) su comportamiento se encuentra determinado a partir de las siguientes ecuaciones de conservación de masa (ec. (1)) y cantidad de movimiento (ec. (2)), ver Batchelor, 2002:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = 0, \quad (1)$$

$$\rho \frac{D\vec{V}}{Dt} = -\vec{\nabla}P + \rho \vec{g} + \mu \nabla^2 \vec{V}. \quad (2)$$

Siendo:

- ρ : densidad
- μ : viscosidad dinámica
- $\vec{V} = \langle u(x,y,z), v(x,y,z), w(x,y,z) \rangle$ (Campo vectorial de velocidades)
- $P = P(x,y,z)$ (Campo escalar de presiones)

Estas ecuaciones modelan tanto flujos turbulentos como laminares. Sin embargo los flujos turbulentos están caracterizados por un rango amplio de escalas de longitud y tiempo, lo cual para su resolución se requeriría una discretización espacial y temporal extremadamente pequeña. Para hacer viable la resolución, se recurre a las ecuaciones promediadas de Navier Stokes (Reynolds Average Navier Stokes, ec.(4)), ver Durbin and Petterson, 2011:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_j)}{\partial x_j} = 0 \quad (3)$$

$$\frac{\partial \rho U_i}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_i U_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\tau_{ij} - \rho \overline{u_i u_j}) + SM \quad (4)$$

El problema fundamental de las ecuaciones RANS es lo que se conoce como “Problema de Clausura”. Al promediar las ecuaciones, surgen nuevas incógnitas, las conocidas “Tensiones de Reynolds o Tensiones Aparentes” (τ_{ij}), un tensor de tensiones de tercer grado. Un abordaje a este problema fue planteado por Boussinesq en 1877 y se basa en asumir que existe una relación entre una viscosidad de remolino o turbulenta “ μ_t ” (Eddy viscosity) y el gradiente de velocidades media (ver ec.(5)) de la misma forma que el tensor de tensiones se relaciona con el tensor de deformaciones para un flujo newtoniano laminar. Matemáticamente:

$$-\rho \overline{u_i u_j} = \mu_t \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} (\rho k + \mu_t \frac{\partial U_k}{\partial x_k}) \quad (5)$$

El problema consiste entonces en encontrar el valor de la viscosidad de remolino. Esto da lugar a los modelos de turbulencia basados en la viscosidad de remolino (eddy viscosity models)

los cuales plantean ecuaciones de transporte para variables que se relacionan con la viscosidad de remolino.

Para el presente trabajo son de interés los modelos k- ε y k- ω . Para el modelo de turbulencia k- ε *standard* se plantean las siguientes ecuaciones de transporte (ec. (6) y ec. (7)):

$$\frac{\partial(\rho K)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_j K)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu t}{\sigma k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + P_k - \rho \varepsilon + P_{kb} \quad (6)$$

$$\frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_j \varepsilon)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu t}{\sigma k} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + \frac{\varepsilon}{K} (C_{\varepsilon 1} P_k - C_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon + C_{\varepsilon 1} P_{\varepsilon b}) \quad (7)$$

Siendo $C_{\varepsilon 1}$, $C_{\varepsilon 2}$, σk y $\sigma \varepsilon$ constantes del modelo, P_{kb} y $P_{\varepsilon b}$ términos relacionados a fuerzas de flotabilidad y P_k término asociado a la generación de turbulencia debido a fuerzas viscosas. Además:

$$k = \frac{1}{2} \sum u_i^2 \quad (8)$$

$$\varepsilon = \frac{\mu}{\rho} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (9)$$

Donde la ecuación (8) es la energía cinética turbulenta y la ecuación (9) es la relación de disipación de la turbulencia.

Las variables k y ε determinan la viscosidad de remolino mediante la ecuación (10):

$$\mu t = C_{\mu} \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (10)$$

Existen variantes para el modelo k- ε tales como el *RNG* y el *REALIZABLE*. Estos modelos esencialmente agregan al modelo *standard*, términos que tienen en cuenta efectos de compresibilidad, correcciones para flujos con rotación, y términos limitadores de producción de turbulencia. Estos modelos dan buenos resultados para flujos con altos números de Reynolds y esencialmente no calculan la subcapa viscosa sino que la aproximan mediante funciones de pared, por lo que no dan buenas predicciones en flujos con altos gradientes adversos de presión y desprendimientos de capa límite.

Los modelos k- ω por su parte resuelven la subcapa viscosa por lo que requieren una discretización de la misma resultando computacionalmente costosos. El modelo original propuesto por Wilcox, 1986 consiste en las siguientes ecuaciones de transporte (11) y

(12):

$$\frac{\partial(\rho K)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_j K)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu t}{\sigma k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + P_k - \beta' \rho k \omega + P_{kb} \quad (11)$$

$$\frac{\partial(\rho \omega)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_j \omega)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu t}{\sigma \omega} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] + \alpha \frac{\omega}{K} P_k - \beta \rho \omega^2 + P_{\omega b} \quad (12)$$

Donde:

$$\omega = \varepsilon / k \quad (13)$$

Siendo la ecuación (13) la relación de disipación específica de la turbulencia.

La viscosidad de remolino se relaciona con las variables k y ω mediante la ecuación (14):

$$\mu t = C_{\mu} \rho \frac{k}{\omega} \quad (14)$$

El problema fundamental de estos modelos es que los resultados son altamente dependientes del valor que toma ω en la corriente libre. Para solventar este problema y aprovechar la ventaja de cada modelo por separado k- ε y k- ω Menter propuso un modelo que es una combinación de

los dos modelos. Los mismos se relacionan mediante una función de mezcla $F1$ dependiente de la distancia a la pared, tal que dentro de la capa límite se aplica el modelo $k-\omega$ y fuera de la misma el modelo $k-\varepsilon$. Dicho modelo se denomina Baseline (BSL) $k-\omega$ model y las ecuaciones de transporte son las ecuaciones (15) y (16), ver [Menter, 1994](#):

$$\frac{\partial(\rho K)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_j K)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + P_k - \beta' \rho k w + P_{kb} \quad (15)$$

$$\frac{\partial(\rho w)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_j w)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_w} \right) \frac{\partial w}{\partial x_j} \right] + (1-F1) 2\rho \frac{1}{\sigma_w} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial w}{\partial x_j} + \alpha 3 \frac{w}{K} P_k - \beta 3 \rho w^2 + P_{wb} \quad (16)$$

Este modelo falla básicamente en la predicción del comienzo y cantidad de separación de capa límite debido a que no contempla el transporte de las tensiones turbulentas y sobre predice la viscosidad de remolino. Por ende Menter propuso una función limitadora de la viscosidad de remolino, ecuación (17):

$$\mu_t = \frac{a1 * k * \rho}{\max(a1 w, SF2)} \quad (17)$$

El modelo BSL junto con la función limitadora de viscosidad de remolino da lugar al modelo $k-\omega$ shear stress transport (SST) y es el que ha sido utilizado en el desarrollo del presente trabajo.

4.1 Modelo de Inyección de Partículas

Existen dos enfoques para el tratamiento: euleriano y lagrangiano, ver [Durst et al, 1984](#). El enfoque utilizado en el presente trabajo es el lagrangiano, el cual plantea individualmente ecuaciones diferenciales en el tiempo para la posición, velocidad, y temperatura para cada partícula y las resuelve mediante algún método numérico de integración a medida que atraviesan el dominio. Para la resolución de las trayectorias, básicamente se plantea la segunda ley de Newton sobre cada partícula, ecuación (18):

$$m_p \frac{dU_p}{dt} = \sum F \quad (18)$$

Siendo:

- U_p : velocidad de la partícula
- M_p : masa de la partícula
- F : Fuerzas aplicadas sobre cada partícula

La posición de la partícula se obtiene a partir de la resolución de la ecuación cinemática (19):

$$\frac{dx_p}{dt} = U_p \quad (19)$$

Para el presente trabajo solo ha sido tenida en cuenta la fuerza de resistencia, mediante el modelo matemático de Schiller Naumann, ecuación (20), ver [Schiller and Naumann, 1935](#):

$$D = \frac{1}{2} C_d * \rho * A * |U_f - U_p| * (U_f - U_p) \quad (20)$$

Donde el coeficiente de resistencia C_d , está dado por la ecuación (21):

$$C_d = \frac{24}{Re} (1 + 0.15 Re^{0.687}) \quad (21)$$

- ρ : Densidad
- A : Área proyectada de cada partícula
- U_f : Velocidad del fluido en las inmediaciones de la partícula
- U_p : velocidad de la partícula

5 METODOLOGIA

El enfoque a grandes rasgos para la resolución del presente trabajo consta de las siguientes etapas:

- Generación de modelos en 3D
- Creación y tratamiento de la malla computacional
- Configuración de la simulación
- Procesamiento
- Análisis y comparación de resultados

6 GENERACIÓN DE MODELOS EN 3D

A continuación se observan las distintas geometrías estudiadas. En la [Figura 3](#) se observa la aerocámara 1 la cual es un rediseño intentando mejorar directamente las características de la CHC ([Figura 2](#)). La aerocámara 2 observada en la [Figura 4](#) es un diseño totalmente nuevo intentando aprovechar la disposición geométrica en el circuito. El circuito de ventilación se relevó a partir de un circuito del que se contaba físicamente para el desarrollo del trabajo. Para la creación de dichos modelos se utilizó el software de CAD Solidworks.

6.1 Aerocámara CHC

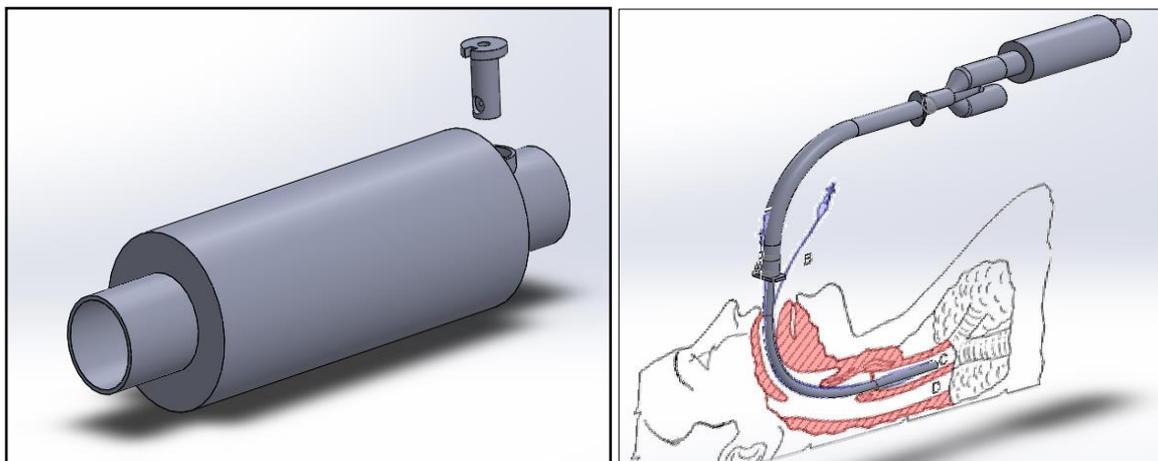


Figura 2: Aerocámara CHC y circuito de ventilación.

6.2 Aerocámara 1

Este nuevo diseño de aerocámara mantiene las dimensiones básicas de longitud y diámetro de la aerocámara CHC, y agrega tres canales en forma de helicoides separados equidistantemente de manera tal de generar una rotación (swirl) en el flujo de inspiración buscando reducir la cantidad de partículas que impactan las paredes de la misma.

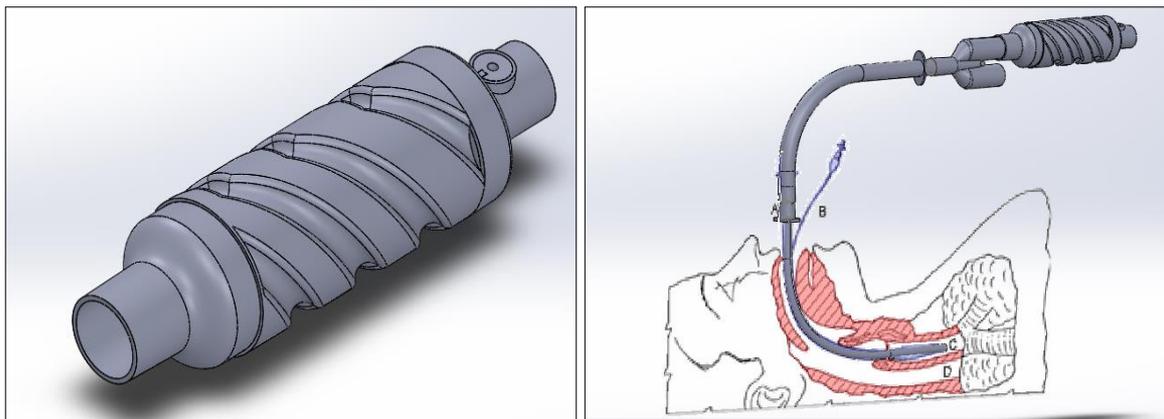


Figura 3: Aerocámara 1 y circuito de ventilación.

6.3 Aerocámara 2

Este diseño de doble cámara busca acortar la distancia de recorrido de las partículas inyectadas hasta las vías respiratorias, y al estar colocado aguas abajo de la ramificación de los tramos inspiratorios y espiratorios, evita que las partículas deban pasar por dicha ramificación del circuito, lo cual representa un gran obstáculo. La cámara superior y más grande tiene la función de generar el espacio donde son inyectadas las partículas. La cámara inferior y más pequeña tiene la función de generar una vía de escape para el flujo de espiración.

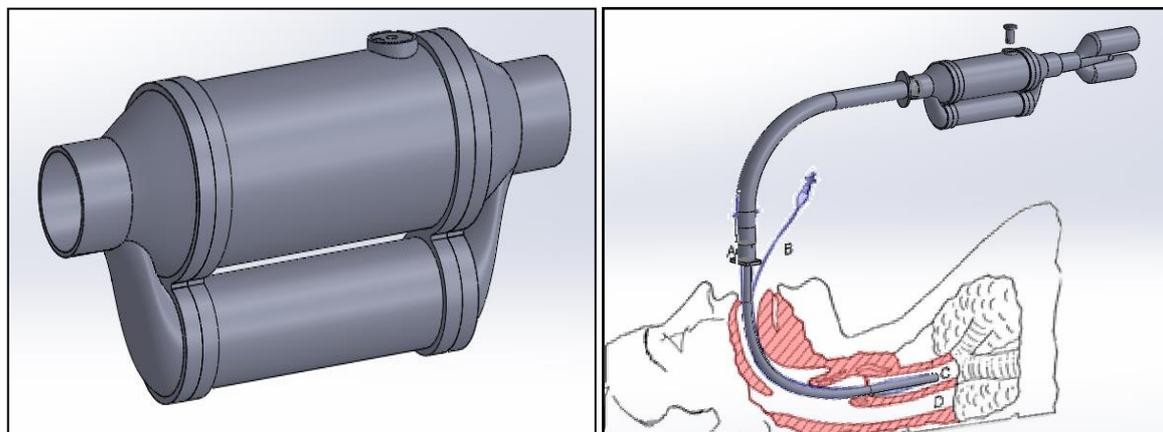


Figura 4: Aerocámara 2 y circuito de ventilación.

7 CREACIÓN Y TRATAMIENTO DE LA MALLA COMPUTACIONAL

El diseño final de la malla no es trivial y es el resultado de varias modificaciones realizadas sobre la malla generada inicialmente.

Debido al modelo de turbulencia utilizado fue necesario generar una discretización de la capa límite de manera de obtener un valor del parámetro y^+ menor a dos para el primer elemento adyacente a la pared, ver [ANSYS Documentation, 2017](#) y [Ferziger y Peric, 2002](#). El parámetro y^+ es un parámetro característico que divide las tres regiones básicas de la capa límite, subcapa viscosa ($y^+ < 5$), región de transición ($5 < y^+ < 60$) y región turbulenta ($60 < y^+$) y relaciona la tensión de corte en la pared con la altura física del primer elemento de la capa límite. El cálculo es entonces iterativo hasta obtener una malla con valor del parámetro y^+ menor a dos.

Por cuestiones de simplicidad del trabajo, solo se exponen a continuación las características de la malla correspondiente a la aerocámara CHC. La misma se puede observar a continuación en la [Figura 5](#) y [Figura 6](#).

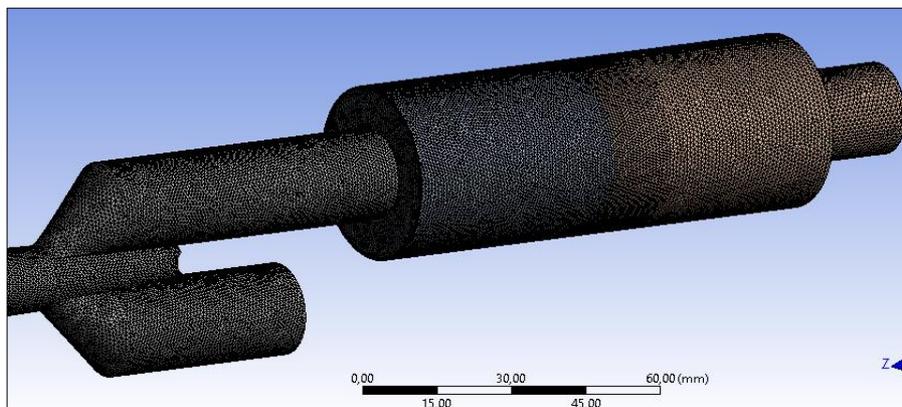


Figura 5: Mallado de aerocámara CHC. Vista en perspectiva

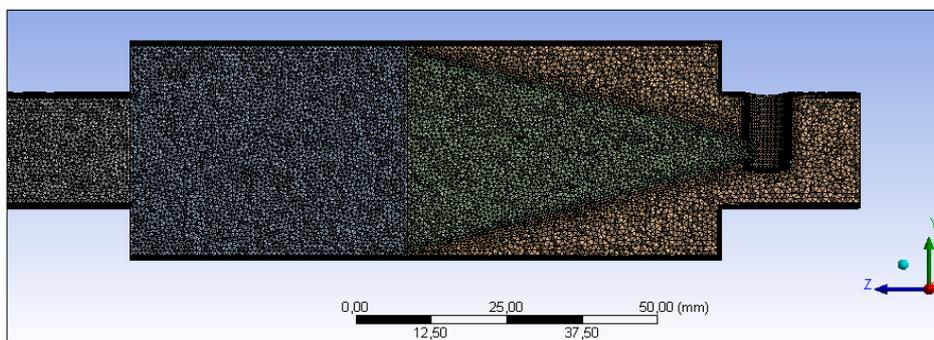


Figura 6: Mallado de aerocámara CHC. Vista en corte

A continuación se presentan las características de “skewness” y ortogonalidad del mallado. Por un lado el “skewness”, cuantifica que tan cercanos son los elementos de la malla a la geometría ideal de un triángulo equilátero o un prisma rectangular, y la ortogonalidad relaciona que tan cercanos son los ángulos a los ideales de 90 grados para prismas rectangulares y 60 para triángulos equiláteros. Los valores ideales para cada parámetro son de 1 y 0, para la ortogonalidad y el “skewness”, respectivamente, ver [Ferziger y Peric, 2002](#). La característica de ortogonalidad se puede observar en la [Figura 7](#), como una función del número de elementos.

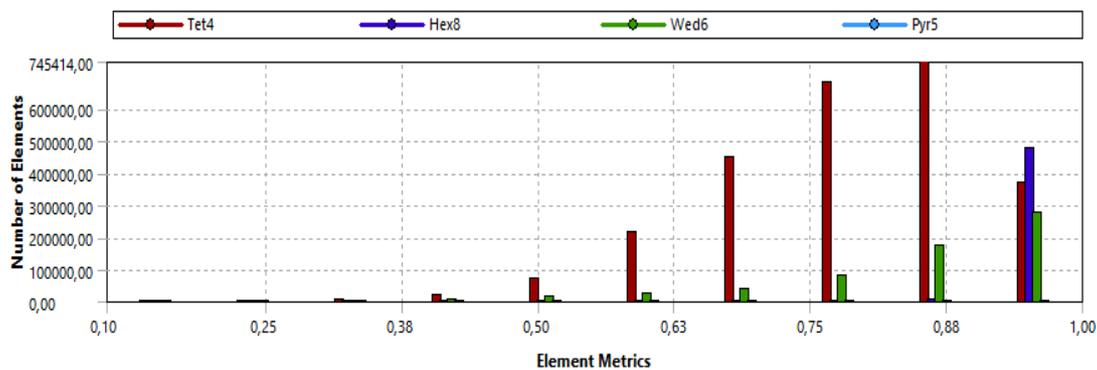


Figura 7: Caracterización de la malla. Ortogonalidad

A continuación en la [Tabla 1](#) se pueden observar valores de los parámetros de “skewness” y ortogonalidad para la malla anteriormente mostrada. Dichos valores son de interés a verificar en el momento de generación de la malla.

Valor / Parámetro	Skewness	Orthogonality
Mínimo	4.6e-5	0.1
Máximo	0.89	0.99
Promedio	0.18	0.82
Desvío	0.12	0.13

Tabla 1: Caracterización de la malla. Ortogonalidad y skewness

7.1 Análisis de independencia de los resultados con el mallado

Para cada aerocámara, se realizaron tres mallas con diferentes cantidades de elementos, y se simuló para cada malla un problema estacionario tomando como condiciones de borde un flujo másico constante en la entrada del dominio y una presión constante en la salida. Luego para cada malla se analizaron los valores (medios) de presión y velocidad en diferentes secciones a lo largo del circuito. Los resultados correspondientes a la aerocámara CHC se observan a continuación en la [Figura 8](#):

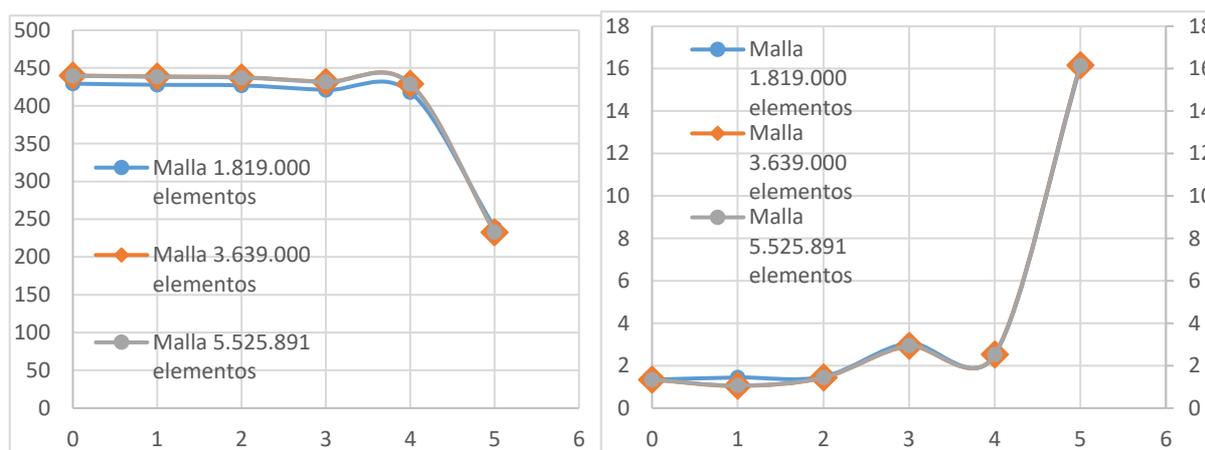


Figura 8: Presión y velocidad media en función de la sección de análisis.

Como resultado de este análisis se adopta para el posterior análisis no estacionario con inyección de partículas la malla correspondiente a 3.639.000 elementos.

8 CONFIGURACIÓN DE LA SIMULACIÓN

Para el presente trabajo se ha utilizado el software CFX-ANSYS 18.1.

A continuación se detallan las configuraciones generales.

8.1.- Configuraciones generales

En la [Tabla 2](#) se observan las características generales de la configuración de la simulación para todos los circuitos analizados.

Modelo	Transitorio Tiempo inicial = 0,5 segundos Tiempo Final = 2 segundos Paso de tiempo = 0,001 segundo
Fluido de inspiración	Aire a 25 °C Presión de referencia 1 atmósfera Fluido Continuo
Partículas inyectadas	Salbutamol <i>Particle Transport Fluid</i>
Modelo de Turbulencia	k- ω (SST) <i>Wall function: Automatic</i>
Acoplamiento Fluido-Partícula	<i>Fully coupled</i> <i>Drag Force: Schiller Naumann</i>

Tabla 2: Configuraciones generales. Simulación. [4,5]

8.2.- Condiciones de borde

Se tendrán como condiciones de borde del problema un flujo de aire variable en el tiempo (Figura 9) impuesto por el modo de operación del ventilador mecánico, y una presión variable en la salida del circuito (Figura 10) impuesta por la resistencia a expandirse de los tejidos pulmonar y el diafragma (Hess and Kacmarek, 2014).

- Flujo de entrada:

En la Tabla 3 se observan las características generales de la condición de borde para el flujo de entrada.

<i>Boundary type</i>	<i>Mass flow inlet</i>
<i>Flow direction</i>	<i>Normal to boundary condition</i>
<i>Flow Regime</i>	<i>Subsonic</i>
<i>Turbulence</i>	<i>Low intensity (1%)</i>

Tabla 3: Condiciones de borde. Flujo de entrada

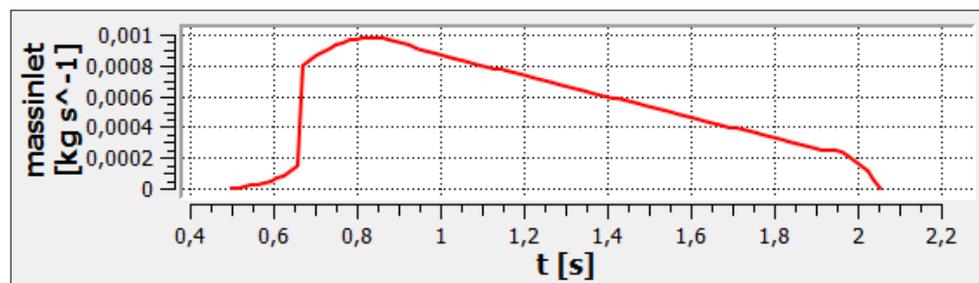


Figura 9: Flujo másico en la entrada [kg/segundo]. (Hess and Kacmarek, 2014)

- Flujo de salida:

En la Tabla 4 se observan las características generales de la condición de borde para la presión de salida.

<i>Boundary type</i>	<i>Opening Pressure</i>
<i>Flow direction</i>	<i>Normal to boundary condition</i>
<i>Flow Regime</i>	<i>Subsonic</i>
<i>Turbulence</i>	<i>Zero Gradient</i>

Tabla 4: Condiciones de borde. Flujo de salida

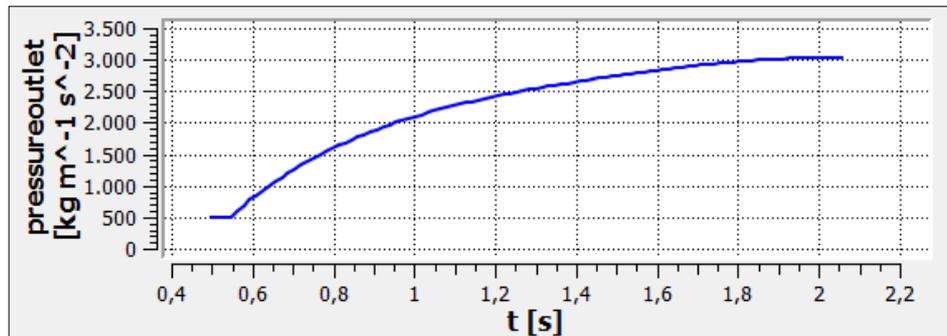


Figura 10: Presión estática a la salida [Pascal]. (Hess and Kacmarek, 2014)

- Inyección de Partículas:

En la [Tabla 5](#) se observan las características generales de la configuración para la inyección de partículas. Además, en la simulación se definió que toda partícula que alcanza la pared queda adherida a la misma.

Método de inyección	Cono
Radio del círculo de inyección	0,00025 metros
Velocidad de inyección	100 m/s
Ángulo del cono	10 grados
Distribucion de diámetro de partículas	Rosin Rammler
<i>Rosin Rammler size</i>	16.54 micrones
<i>Rosin Rammler Power</i>	1.86
Cantidad de partículas inyectadas	19800

Tabla 5: Inyección de partículas. [4,5]

En la [Figura 11](#) se observa la condición impuesta para el flujo másico de partículas inyectadas. La misma consiste en una dosis de 100 microgramos, como se mencionó anteriormente, inyectadas a lo largo de 0,1 segundos, (Oliveira, 2012).

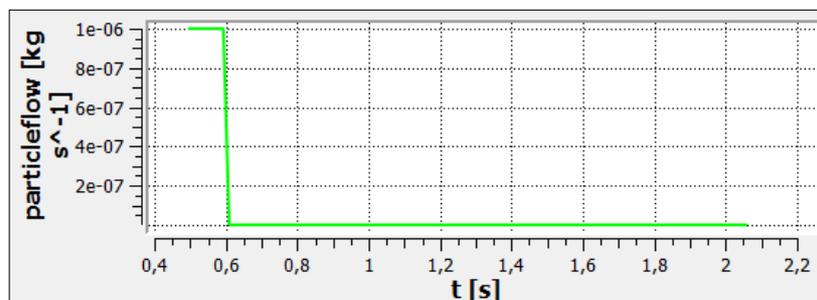


Figura 11: Flujo másico de inyección de partículas [kg/segundo]

9 RESULTADOS

A continuación se exponen algunos resultados obtenidos en el presente trabajo. Se presenta para cada circuito de ventilación, con su correspondiente aerocámara, un mapa de colores sobre la superficie del circuito de ventilación, el cual indica el espesor de la capa (“film”) de partículas adheridas a las paredes. La escala del mapa va desde el color azul indicando cero espesor de capa de partículas hasta el rojo indicando un espesor máximo de 0,0099 micrones (μm). Debe resaltarse que el pequeño espesor de la capa de partículas adheridas a las paredes, está asociado a la muy baja cantidad de inyección de medicamento por dosis, el cual como se mencionó anteriormente es de 100 microgramos.

9.1 Circuito de ventilación con aerocámara convencional CHC

En la [Figura 12](#) se observa cómo ha de esperarse, que la mayor cantidad de partículas se adhieren en aquellas regiones del circuito donde se dan cambios bruscos de sección, tal como a la salida de la aerocámara, y en los cambios de dirección del flujo, tal como se puede observar en el tubo endotraqueal y el tubo externo del circuito, hecho que está asociado a la inercia propia de las partículas.

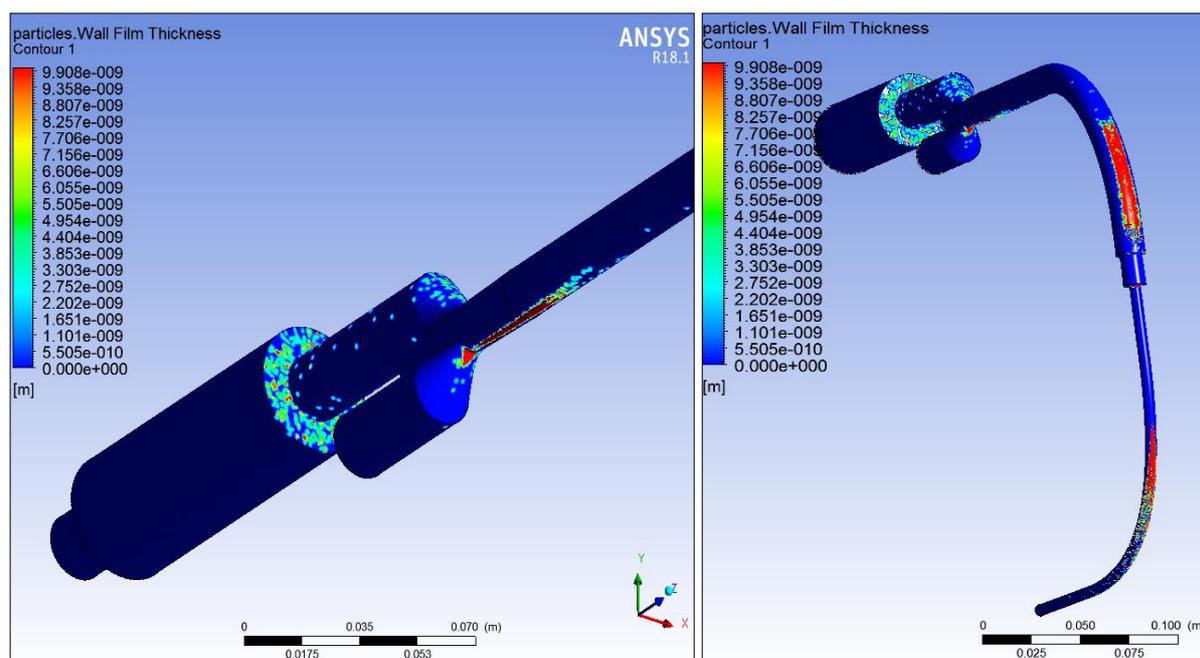


Figura 12: Espesor de la capa de partículas adheridas a las paredes. Aerocámara CHC

9.2 Circuito de ventilación con aerocámara 1

En la [Figura 13](#) se puede observar cualitativamente, una reducción en la cantidad de partículas adheridas en las paredes de la aerocámara, hecho que se visualizará en un análisis cuantitativo al final del trabajo. Se observan además características similares al circuito anterior, en cuanto a la adherencia de las partículas a las paredes.

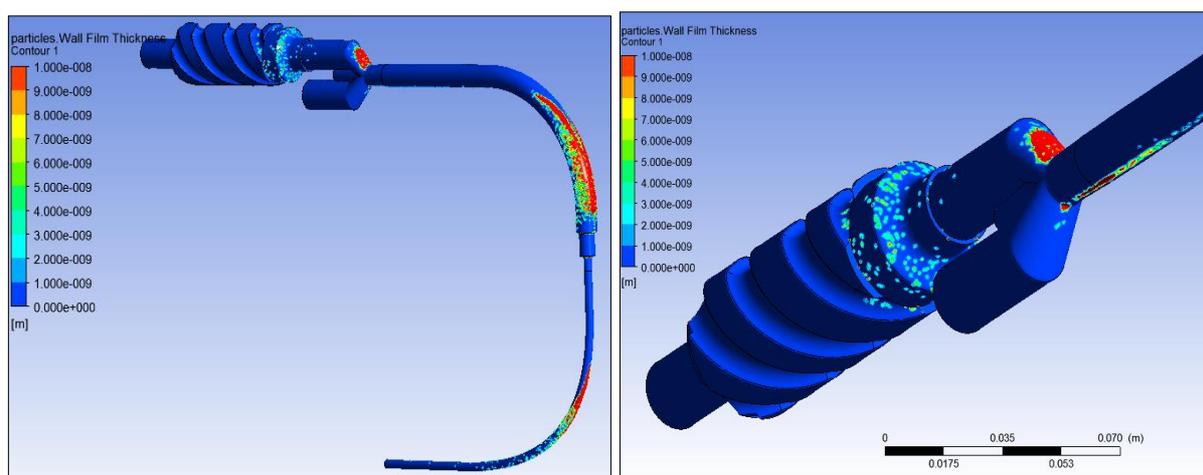


Figura 13: Espesor de la capa de partículas adheridas a las paredes. Aerocámara 1

9.3 Circuito de ventilación con aerocámara 2

En la Figura 14 se observa el espesor de la capa de partículas adheridas en el circuito de la aerocámara 2. Se puede observar cualitativamente un aumento en la cantidad de partículas adheridas en las paredes a la salida de la aerocámara y principalmente un aumento notable en la cantidad de partículas adheridas en el tubo externo, hecho que se visualizará cuantitativamente y se comentará al final del trabajo.

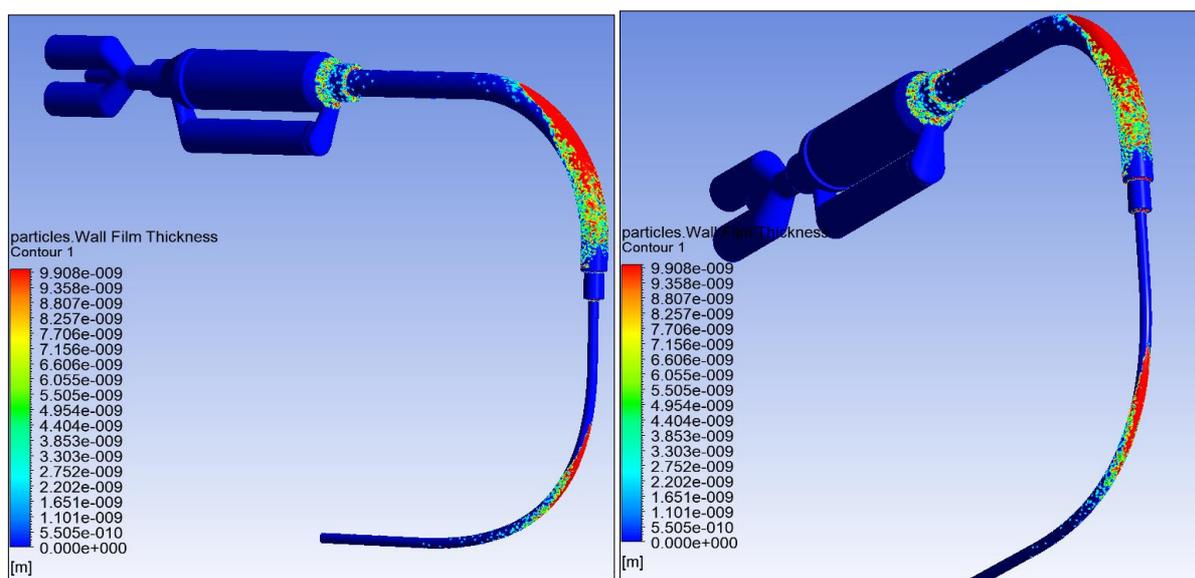


Figura 14.- Espesor de la capa de partículas adheridas a las paredes. Aerocámara 2

10 ANÁLISIS Y COMPARACIÓN DE RESULTADOS

A continuación en la Tabla 6 se presentan, los porcentajes de partículas adheridas en cada zona del circuito diferenciando entre aerocámara, tubo externo, tubo endotraqueal y resto del circuito. Por resto del circuito debe entenderse a aquellos accesorios tales como la bifurcación que divide las ramas inspiratorias y espiratorias, situada aguas debajo de la aerocámara CHC y aerocámara 1.

La cantidad de partículas adheridas en cada zona está dada en porcentajes respecto a la dosis de medicamento inyectada en el circuito, la cual como se mencionó es de 100 microgramos.

Circuito Zona del circuito	Circuito de ventilación con aerocámara convencional (CHC)	Circuito de ventilación con aerocámara 1	Circuito de ventilación con aerocámara 2
Partículas adheridas a las paredes de la aerocámara	2,3 %	1,75 %	5,46 %
Partículas adheridas a las paredes del tubo externo	40,4 %	36,77 %	55,24 %
Partículas adheridas a las paredes del tubo endotraqueal	21,85 %	33,96 %	36,38 %
Partículas adheridas en el resto del circuito	29,22 %	23,09 %	0 %
Partículas adheridas en todo el circuito (incluyendo aerocámara)	93,77 %	95,57 %	97,08 %
Partículas que llegan a los bronquios	6,23 %	4,43 %	2,92 %

Tabla 6: Comparación de resultados

11 CONCLUSIONES

A modo de comentarios se puede observar una disminución en la cantidad de partículas adheridas en las paredes de la aerocámara 1 respecto a la aerocámara CHC. Esto se debe en parte a su geometría que induce una rotación en el flujo evitando que las partículas se dispersen y acerquen a las paredes. La aerocámara 2 por su parte refleja un incremento en la cantidad de partículas adheridas (5,46 %). Esto se debe a que el diámetro de la cámara superior donde son inyectadas las partículas es inferior al diámetro de la aerocámara CHC, lo que reduce el volumen donde se realiza la inyección. Por otra parte es de destacar el notable incremento de partículas adheridas en las paredes del tubo externo de la aerocámara 2 (55,24 %) hecho que puede estar relacionado al acercamiento de la aerocámara al tubo endotraqueal.

Finalmente cabe mencionar la similitud en los porcentajes de partículas que quedan adheridas en todo el circuito completo, para los tres casos, a pesar de que se ha cambiado la geometría de la aerocámara y se ha variado su ubicación en el circuito. Esto puede llevar a pensar que el circuito actúa como un filtro dejando atravesar siempre diámetros de partículas

menores a cierto valor y filtrando aquellas partículas de diámetros superiores. Sin embargo este hecho no está demostrado y queda como objeto de análisis para estudios posteriores.

REFERENCIAS

- ANSYS Documentation. AIM. *Evaluating Mesh Quality*. 2017.
- ANSYS Documentation. CFX. *Theory Guide. Eddy viscosity turbulence models*. 2017
- Batchelor, G. K., *An introduction to FLUID DYNAMICS*. University of Kingdom, Cambridge, United Kingdom. 2002.
- Dhand, R., and Guntur, V. P. How best to deliver aerosol medications to mechanically ventilated patients. *Clinics in Chest Medicine*. 29:277-296. 2008.
- Dugernier, J., Reychler, G., Wittebole, X., Aerosol delivery with two ventilation modes during mechanical ventilation, a randomized study. *Ann. Intensive Care*. 6:73. 2016.
- Durbin, P. A., and Petterson, R., *Statistical Theory and Modeling for Turbulent Flow*. Iowa State University, USA. Wiley. 2011.
- Durst, F., Milojevic, D., and Scheonung, B. *Eulerian and Lagrangian predictions of particulate two-phase flows: a numerical study*. *Applied Mathematical Modelling*, 1984.
- Ferziger, J. and Peric, M. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Stanford University, Dept. of Mechanical Engineering, Stanford, CA 94305, USA.
- Hess, D. R., and Kacmarek, R. M. *Essentials of Mechanical Ventilation*. Chapter 5. Mc Graw Hill. Third edition. 2014.
- Kleinstreuer, C., Shi, H. and Zhe, Z. Computational analyses of a pressurized metered dose inhaler and a new drug aerosol targeting methodology. *J. Aerosol Med.* 20:294-309. 2007.
- Menter, F.R. "Two equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications", *AIAA-Journal.*, 32(8), pp. 1598 – 1605, 1994.
- Newman, S. P., *Principles of Metered Dose Inhaler Design*. Respiratory Care. Daedalus Enterprises 2005.
- Oliveira, R. F., Teixeira, S., Teixeira, J. C., *pMDI Sprays: Theory, Experiment and Numerical Simulation*. Chapter XI. INTECH. 2012.
- Ravettino, A., Scarabino, A., Bacchi, F. "Estudio de modificaciones de diseño de cámaras para la inhalación de medicamentos". *XXIII Congreso de Métodos Numéricos y sus Aplicaciones, ENIEF 2017*, La Plata, 07-10 de noviembre de 2017, Resúmen).
- Schiller, L. and Naumann, Z. *A drag coefficient correlation*. Deutsch. Ing. 1935.
- Sprigge, E., *Non uniform deposition of pMDI aerosol in a large volume spacer*. Master of Applied Science in Mechanical Engineering. Department of Mechanical Engineering. Carleton University. Ottawa, Ontario. 2014.
- Wilcox, D.C. Multiscale model for turbulent flows. *AIAA 24th Aerospace Sciences Meeting. American Institute of Aeronautics and Astronautics*. 1986.
- Yousefi, M., Inthavong, K., and Tu, J. Effect of pressurized metered dose inhaler spray characteristics and particle size distribution on drug delivery efficiency. *Journal of aerosol medicine and pulmonary drug delivery*. Vol. XXX. 1-14. 2017.