超细颗粒物在非对称下呼吸道中沉积效应的数值模拟

庄依杰¹, 马子健¹, 龙霄翱², 杨彦^{1,3*}, 余应新¹

1. 广东工业大学环境科学与工程学院, 环境健康与污染控制研究院, 粤港澳污染物暴露与健康联合实验室, 广东省环境催化与健康风险控制重点实验室, 广州 510006;

2. 广东医科大学附属第一医院神经外科, 湛江 524023;

3. 化学与精细化工广东省实验室, 汕头 515041

* 联系人, E-mail: yangyan1209@gdut.edu.cn

2021-06-18 收稿, 2021-08-16 修回, 2021-08-18 接受, 2021-08-19 网络版发表

国家自然科学基金(52006039, 41907299, 41977303)、国家重点研发计划(2018YFC1801102)和化学与精细化工广东省实验室科研启动项目(2032008)资助

摘要 超细颗粒物质量轻、体积小, 易在空气中传播及人体呼吸系统中沉积, 引起慢性疾病甚至癌症。超细颗粒物在下呼吸道沉积的相关研究较少。本研究基于Yeh模型建立第1~10级三维人体非对称支气管模型, 并利用EI-Basth模型描述颗粒沉积规律, 采用计算流体力学方法模拟研究不同支气管的形状和直径以及超细颗粒物的不同物性, 对其沉积效应的影响及其与细颗粒物的差别。研究表明, 形状变化缓和以及较大的径向流体速度差是超细颗粒物发生沉积的有利条件, 曳力对超细颗粒物的作用是超细颗粒物在下呼吸道沉积的根本原因。肺部的右上叶与左下叶相比于其他部分, 对超细颗粒物有一定的富集作用, 在进行环境健康风险评估时应着重考虑这两个部位。不同直径超细颗粒物和细颗粒物在第1~10级支气管的沉积效应有明显区别, 但它们在此部分的沉积率都低于20%。本文为研究大气环境质量对人体肺部健康状态的影响提供理论指导和科学依据。

关键词 超细颗粒物, 非对称性下呼吸道, 计算流体力学, 沉积效应, 环境健康

超细颗粒物是指直径小于100 nm的颗粒物, 而直径在100 nm~2.5 μm 的颗粒物则为细颗粒物。人类每年的生产活动释放出大量颗粒物到大气中^[1~4], 其成分复杂, 部分颗粒物与空气中的细菌、病毒融合形成有生物活性的颗粒物, 危害极大。大气颗粒物质量轻、体积小, 易在空气中传播, 并通过呼吸进入人体呼吸系统发生沉积, 造成慢性疾病甚至癌症^[3,5,6]。因此, 研究超细颗粒物在人体呼吸系统沉积效应具有重要的科学意义。目前利用人体进行颗粒物暴露实验存在花费高、时间长和涉及伦理等问题, 为了方便进行颗粒物暴露相关数据的实验检测, 本文使用计算流体动力学(computational fluid dynamics, CFD)方法模拟超细颗粒物在

非对称下呼吸道的沉积过程, 研究超细颗粒物在非对称下呼吸道中的沉积效应。

CFD中的雷诺平均法(Reynolds average Navier-Stokes, RANS)与离散相(discrete phase model, DPM)在模拟颗粒物沉积研究中已被大量运用^[7~11]。颗粒沉积主要集中在口咽区(即上呼吸道)^[7,8], 对于细颗粒物, 其粒径与沉积率存在U型关系。对于下呼吸道的数值研究, 可分为肺腺区和支气管区。目前研究主要集中在颗粒物在肺腺区的运动轨迹和沉积效应^[9~11]。对于支气管区的数值模拟研究, 需建立支气管模型。经典Weibel A对称肺模型^[12]是进行三维支气管模型建模的主要依据。然而人体支气管是非对称性结构, 会造成肺部各部位

引用格式: 庄依杰, 马子健, 龙霄翱, 等. 超细颗粒物在非对称下呼吸道中沉积效应的数值模拟. 科学通报, 2021, 66: 4054–4064

Zhuang Y J, Ma Z J, Long X A, et al. Numerical simulation on deposition effects of ultrafine particles in the asymmetrical lower respiratory tract (in Chinese). Chin Sci Bull, 2021, 66: 4054–4064, doi: 10.1360/TB-2021-0582

的颗粒物沉积情况不同。因此,有必要研究颗粒物在非对称性下呼吸道的沉积情况。Yeh模型^[13]是一个具有左上叶、左下叶、右上叶、右中叶、右下叶的全肺数学模型。相比于经典Weibel A模型,其将全肺分为5个部分,提高了三维全肺模型的真实性和非对称性,使颗粒物沉积情况更贴近实际。然而,由于各级支气管形状各异、空间分布复杂和数量庞大,难以进行网格划分。RANS对于复杂几何体边界层模拟运算效果一般。大涡模拟法^[14](large eddy simulation, LES)虽然可精确描述边界层的流体运动,但是计算量较大。随着计算机技术的发展,现在的高性能计算机完全具备对非对称性下呼吸道流场的模拟计算能力。这为本文研究超细颗粒物在非对称性下呼吸道的沉积提供了良好的客观条件。

大气颗粒物直径范围在0.001~100 μm ^[15],包括超细颗粒物和细颗粒物。目前已有大量关于细颗粒物在人体呼吸系统沉积效应的研究^[16~19],而超细颗粒物在人体呼吸系统中沉积效应的相关研究则相对较少。这些研究大部分仅涉及4~5级的二维或三维呼吸道模型。部分研究只针对第2和3级对称性下呼吸道模型进行模拟计算^[20,21],且研究多局限于支气管分叉角和直径的变化,没有考虑支气管分叉径向的旋转变化。10级以上的三维呼吸道模型的模拟研究尚缺乏。随着呼吸道的级数增加,支气管数量会以指数形式剧烈增加,导致模拟计算难度大大增加,所以大部分关于高级数支气管模型的研究都对模型进行了简化,如通过剪枝的方法,仅模拟一条或者几条第1~10级以上的支气管。Islam等人^[22,23]分别进行了细颗粒物与超细颗粒物在第1~17级的非对称下呼吸道的沉积效应研究,但其对三维呼吸道模拟进行了一定的修剪,仅有部分气管是第1~17级的,不能完全代表第1~17级整个呼吸道的流场以及颗粒物的沉积情况。此外,超细颗粒物与细颗粒物相比,在人体呼吸系统中的运动轨迹和沉积方式具有统计学意义上的差异^[24],它们的沉积效应并不完全相同,超细颗粒物对流动空间的几何变化较敏感^[25],且以往大部分研究假设模拟过程中颗粒物与管壁发生接触即代表发生沉积,忽视了颗粒物与管壁的真实物理化学性质对颗粒物沉积效应的影响^[22,23,26]。

本研究基于Yeh模型^[13]在没有使用剪枝等模型简化方法前提下,使用多级非对称下呼吸道生理结构数据(包括不同肺叶和不同级别的支气管直径、长度以及支气管分叉角)对每一个支气管进行建模。同时考虑径向旋转,建立第1~10级的三维非对称支气管模型,利

用EI-Basth模型^[27]描述超细颗粒物沉积规律。采用ANSYS Fluent软件模拟研究不同呼吸道的形状和直径,以及超细颗粒物的不同物性对超细颗粒物沉积规律的影响,深入研究超细颗粒物在第1~10级非对称下呼吸道的沉积规律和特征。本研究结果可为进一步探索大气环境质量对人体肺部健康状态的影响提供理论指导和科学依据。

1 理论模型与研究方法

1.1 人体下呼吸道理想结构模型

本研究基于Yeh模型^[13]采用SOLIDWORKS软件建立第1~10级的非对称下呼吸道模型(图1(a)),模型参数如表1所示。该模型没有考虑各肺叶真实三维模型所占据的空间,这里对其存在互相矛盾的数据进行修正。三维模型如图1(b)~(f)所示,与真实全肺相似度较高。

本研究中颗粒物两相流计算基于LES与DPM方法。假设空气流体是等温、非稳态且不可压缩的,对大于惯性子区的湍流运动,连续性方程、动量守恒方程和能量守恒方程如下^[28]:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \bar{u}_i) = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \bar{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \bar{u}_i \bar{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j}(\sigma_{ij}) - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} - \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j}, \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho \bar{h}_s}{\partial t} + \frac{\partial \rho \bar{u}_i \bar{h}_s}{\partial x_i} - \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} - \bar{u}_j \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) \\ = - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\rho (\bar{u}_i \bar{h}_s - \bar{u}_i \bar{h}_s) \right], \end{aligned} \quad (3)$$

式中, $\rho(\text{kg}/\text{m}^3)$ 为空气密度,取1.225 kg/m^3 ; $t(\text{s})$ 为某时刻; $x_{ij}(\text{m})$ 为三维空间坐标; $u_{ij}(\text{m}/\text{s})$ 为速度; $\sigma_{ij}(\text{Pa})$ 为分子黏度的应力张量; $p(\text{Pa})$ 为压力; $\tau_{ij}(\text{Pa})$ 为亚格子尺度应力; $T(\text{K})$ 为温度; $h_s(\text{kJ}/\text{kg})$ 为显焓; $\lambda(\text{W}/(\text{m} \cdot \text{K}))$ 为热导率。对于小于惯性子区的湍流运动,采用Smagorinsky-Lilly(SL)模型^[29]进行亚格子尺度计算。

颗粒物在流体中运动时,除了受重力与曳力之外,还会受Magnus力、Saffman力、Basset力、附加质量力与布朗力的影响。根据颗粒物粒径的不同,各种类型的力对颗粒物运动的影响也不同。Saffman力是由于颗粒两侧流速不同而产生的力; Basset力是由于颗粒物在流体中作变速运动而产生的阻力; Magnus力是由于颗粒物自身的旋转而产生的升力; 附加质量力是颗粒物表面流体运动因惯性而产生的力。这4种力对于粒径小于5 μm 的颗粒物影响极小,可忽略不计。对于微米级的颗

图 1 三维非对称下呼吸道模型. (a) 第1~10级. I: 进气口; II: 支气管管壁; III: 出气口. (b) 正视图; (c) 左视图; (d) 右视图; (e) 上视图; (f) 下视图. LL, 左下叶; LU, 左上叶; RL, 右下叶; RM, 右中叶; RU, 右上叶

Figure 1 Three-dimensional asymmetric model of the lower respiratory tract. (a) Level 1–10. I: Air inlet; II: The wall of the bronchi; III: Air outlet. (b) Front view; (c) left view; (d) right view; (e) upper view; (f) lower view. LL, lower left lobe; LU, upper left lobe; RL, right lower lobe; RM, right middle lobe; RU, right upper lobe

表 1 各部分肺叶的第1~10级支气管数量、长度、直径以及分枝角度^{a)}

Table 1 The number, length, diameter and branch angle of the level 1–10 bronchi in each part of the lobes

<i>n</i>	<i>N</i>					<i>L</i> (cm)					<i>d</i> (cm)					$\theta(^{\circ})$				
	右 上 叶	右 中 叶	右 下 叶	左 上 叶	左 下 叶	右 上 叶	右 中 叶	右 下 叶	左 上 叶	左 下 叶	右 上 叶	右 中 叶	右 下 叶	左 上 叶	左 下 叶	右 上 叶	右 中 叶	右 下 叶	左 上 叶	左 下 叶
1	1	1	1	1	1	10.000	10.000	10.000	10.000	10.000	2.010	2.010	2.010	2.010	2.010	0	0	0	0	0
2	1	1	1	1	1	3.090	3.090	3.090	5.630	5.630	1.750	1.750	1.750	1.380	1.380	25	25	25	40	40
3	1	1	1	1	1	1.220	3.020	3.020	1.450	1.420	1.020	1.330	1.330	1.030	1.150	60	15	15	35	25
4	2	1	1	2	2	0.800	2.270	0.880	1.080	1.330	0.760	0.720	1.010	0.835	0.905	28	25	5	30	48
5	4	2	2	4	4	1.270	1.340	1.090	1.020	1.130	0.650	0.620	0.800	0.640	0.680	30	18	23	21	25
6	8	4	4	8	8	1.250	1.630	1.330	1.090	0.891	0.579	0.528	0.650	0.535	0.559	17	28	31	15	31
7	16	8	8	16	16	0.827	1.040	1.220	1.020	1.020	0.454	0.376	0.583	0.426	0.454	22	18	29	25	22
8	32	16	16	32	32	0.988	1.040	0.796	0.751	0.836	0.355	0.317	0.471	0.341	0.365	31	31	33	28	27
9	64	32	32	64	64	0.798	0.691	0.803	0.832	0.778	0.278	0.268	0.367	0.307	0.316	37	38	31	28	27
10	128	64	64	128	128	0.557	0.527	0.880	0.555	0.771	0.216	0.199	0.347	0.234	0.298	38	45	34	25	28

a) *n*为支气管级数; *N*为某叶某级的气管数量; *L*为某叶某级的长度; *d*为某叶某级的气管直径; θ 为某叶某级的气管分枝角度

颗粒物, 需要考虑重力与曳力的影响. 对于粒径小于1 μm 的亚微米级与纳米级颗粒物, 需要考虑布朗力的影响. 本文考虑重力、曳力和布朗力对超细颗粒物的影响, 其运动控制方程可由牛顿第二定律按照下式表达:

$$m_p \frac{du_p}{dt} = F_G + F_D + F_B, \quad (4)$$

式中, $m_p(\text{kg})$ 为颗粒物的质量; $u_p(\text{m/s})$ 为超细颗粒物的速度; $t(\text{s})$ 为时间; $F_G(\text{N})$ 为超细颗粒物所受到的重力; $F_D(\text{N})$ 为超细颗粒物所受到的曳力; $F_B(\text{N})$ 为超细颗粒物所受到的布朗力.

对于颗粒物沉积效应, 采用EI-Batsh模型^[27]来描述颗粒捕获:

$$V_{cr} = \left(\frac{2E}{D_p} \right)^{\frac{10}{7}}, \quad (5)$$

式中, $V_{cr}(\text{m/s})$ 为颗粒物临界捕获速度; $D_p(\text{m})$ 为颗粒物的空气动力学直径; $E = 0.51 \left\{ [5\pi^2(k_1 + k_2)]/4\rho_p^{3/2} \right\}^{2/5}$; $\rho_p(\text{kg/m}^3)$ 为颗粒物质量密度, 取 2000 kg/m^3 ; $k_1 = (1 - v_s^2)/\pi E_s$; $k_2 = (1 - v_p^2)/\pi E_p$; E_s 和 $E_p(\text{Pa})$ 分别为管壁表面和颗粒物的杨氏模量; v_s 和 v_p (无量纲)分别为管壁表面和颗粒物的泊松比. 对于管壁, 其杨氏模量 E_s 与泊松比 v_s 建议值^[30]分别为5 MPa和0.45.

对于颗粒物的沉积率 α 和深入率 β , 可以用下式表达:

$$\alpha = \frac{N_t}{N_a} \times 100\%, \quad (6)$$

$$\beta = \frac{N_e}{N_a} \times 100\%, \quad (7)$$

式中, N_t 为沉积颗粒物数量, N_e 为往更高级支气管扩散的颗粒物数量(对于第1级的支气管, 则为逃逸颗粒物数量), N_a 为总释放颗粒物数量.

1.2 模型边界条件

本研究中将模型分为3个部分, 如图1(a)所示. 进气口为气流和颗粒物入口, 均垂直于进气口进入模型. 进气速度近似于符合正弦曲线^[31]. 本研究进气模型采用下式^[32]:

$$v = v_{\max} \sin\left(\frac{2\pi}{T}t\right), \quad (8)$$

式中, $v(\text{m/s})$ 为 t 秒的进气口速度; $v_{\max}(\text{m/s})$ 为最大进气速度, $v_{\max} = (V_M/T)(D_n/2)^{-2}$; $T(\text{s})$ 为呼吸周期; $V_M(\text{mL})$ 为潮气量; $D_n(\text{cm})$ 为第 n 级支气管直径. 这里, 设 V_M 为150 mL, T 为4 s, D_n 取第1级支气管直径, 见表1.

1.3 数值模拟方法

对于气相模拟, 启用Press-based模式、LES、SL亚格子应力模型, 基于式(8)建立进气速度profile user define function(UDF), 出气口均为0 kPa(表压). 对于颗粒相模拟, DPM设置为与流场耦合、非稳态颗粒追踪. 颗粒物服从基于式(5)的侵蚀模型UDF、Stokes-Cunningham、布朗运动、重力和能量模型. 研究表明, Fluent中的DPM模型对布朗力模拟存在误差的原因在于, Fluent在进行布朗力计算时, 对粒子时间积分步长取值不当,

误差可能有一个数量级以上^[33]. Chen和Zhao^[34]提出了一种布朗力的修正模型, 在不考虑粒子时间积分步长的情况下进行布朗力的计算, 既减少了计算步骤, 也提高了精确度. 然而, 粒子时间积分步长可以通过改变用户指定的长度比例因子(user specified length scale factor, L_s)或者步长因子(step length factor, SLF)来进行修正^[28]. 研究表明, 该种误差与网格质量、 L_s 、SLF以及流场分布都有关系^[35]. 结合网格具体情况, 通过修改 L_s 以及SLF可减少该种误差. 对比实验数据, 可认为修改后较好地表达了超细颗粒物在管道内的沉积情况. 研究表明, 使用Fluent的DPM模型中布朗力方程研究超细颗粒物在呼吸道的沉积情况, 并与实验数据进行对比, 模型模拟效果较好^[26]. 因此, 对于步长因子设置, 本文采用Inthavong等人^[35]的推荐值5.

数值模拟方式启用离散随机步、随机边界生存时间. 选取泊松比和杨氏模量分别为0.27和4.8 MPa, 以直径为10、30、50、70、90、100、180、260、340、420、500、580和600 nm的球形颗粒物作为研究对象, 其在一开始于进气口面均匀释放, 释放总质量分别为 7.79×10^{-17} 、 2.10×10^{-15} 、 9.73×10^{-15} 、 2.67×10^{-14} 、 5.68×10^{-14} 、 7.79×10^{-14} 、 4.54×10^{-13} 、 1.37×10^{-12} 、 3.06×10^{-12} 、 5.77×10^{-12} 、 9.73×10^{-12} 、 1.52×10^{-11} 和 $1.68 \times 10^{-11} \text{ kg}$. 颗粒物通过进气口则为逃逸, 通过出气口则为深入. 壁面为无滑移壁面, 颗粒物与其相碰时, 通过式(5)判定是否被捕获. 颗粒物碰撞过程视为理想碰撞. 采用SIMPLE算法^[28], 空间离散化均采用二阶以上精度, 收敛条件设置能量项为 10^{-6} , 其他项均设置为 10^{-5} . 初始化方式采用混合初始化, 时间步数为4000, 时间步长为0.001 s, 每步最大迭代数为150, 每时间步记录各直径颗粒物的沉积率和深入率.

1.4 网格独立性与模型验证

本研究使用ANSYS Meshing软件进行非结构网格划分, 比较不同网格数下模型的各出气口最大速度, 结果如表2所示. 可以看出, 不同网格数结果差别不大, 网格划分效果均很好, 因此下文的计算均采用第一种网格.

在模型验证上, 将本研究的超细颗粒物(10~100 nm)数值模拟结果(图2(1))与国际辐射防护委员会(International Commission of Radiological Protection, ICRP)^[36]所提供的超细颗粒物在支气管区域的沉积率曲线(图2(2))、Hinds^[37]提供的多径颗粒沉积模型(mul-

表 2 不同网格数下模型各出气口的最大速度**Table 2** Maximum velocities of each air outlet in the model with different mesh numbers

出气口部位	最大速度(m/s)		
	11588481个 网格数	24848678个 网格数	31183427个 网格数
左下叶	0.0811	0.0807	0.0821
左上叶	0.0966	0.0971	0.0982
右上叶	0.1129	0.1132	0.1148
右中叶	0.0846	0.0841	0.0839
右下叶	0.2095	0.2068	0.2053

图 2 不同研究中超细颗粒物的沉积率分布图。(1) 本研究结果；(2) 来自ICRP的支气管区域超细颗粒物沉积结果^[36]；(3) 第1~15级的超细颗粒物沉积率^[37]；(4) 第1~9级的超细颗粒物沉积率^[37]；(5) 第1~15级的超细颗粒物沉积率^[38]；(6) 第1~15级的超细颗粒物沉积率^[38]；(7) 来自Ghalati等人^[39]的呼吸道区域超细颗粒物沉积结果

Figure 2 Distribution of deposition rate of ultrafine particles in different studies. (1) Results of the present study; (2) results of ultrafine particles deposition in the bronchial region from ICRP^[36]; (3) ultrafine particle deposition rate of level 1 to 15^[37]; (4) ultrafine particle deposition rate of level 1 to 9^[37]; (5) ultrafine particle deposition rate of level 1 to 15^[38]; (6) ultrafine particle deposition rate of level 1 to 15^[38]; (7) results of ultrafine particles deposition in the respiratory tract region from Ghalati et al.^[39]

tiple-path particle dosimetry model, MPPD)模拟的第1~9级和第1~15级的颗粒物沉积率曲线(图2(3)与(4))、Su等人^[38]提供的第1~9级和第1~15级的颗粒物沉积率曲线(图2(5)与(6))，以及Ghalati等人^[39]提供的呼吸道区域颗粒物沉积曲线(图2(7))进行对比。可以看出，本文的数值模拟结果趋势与图中其他研究结果趋势相当，模型模拟效果较好。

2 结果与讨论

2.1 流场分布与超细颗粒物分布

从气固两相流场图3(a), (b)可见，流体流动速度随

图 3 三维模拟计算结果图。(a) 流场速度分布(第1~10级, 1 s时刻); (b) 超细颗粒物速度分布(第1~10级, 1 s时刻); (c) 超细颗粒物与流场速度分布(第1~3级, 1 s时刻); (d) 超细颗粒物分布情况(10~100 nm, 1.2 s时刻); (e) 亚微米级颗粒物分布情况(180~600 nm, 1.2 s时刻)。A-A, 第1级剖视图; B-B, 右第2级剖视图; C-C, 左第2级剖视图; D-D, 左上第3级剖视图; E-E, 左下第3级剖视图; F-F, 右上第3级剖视图; G-G, 右下第3级剖视图

Figure 3 The results of three-dimensional simulation calculations. (a) Flow field velocity distribution (level 1–10, moment 1 s); (b) ultrafine particle velocity distribution (level 1–10, moment 1 s); (c) velocity distributions of ultrafine particles and flow field (level 1–3, moment 1 s); (d) distribution of ultrafine particles (10–100 nm, moment 1.2 s); (e) distribution of sub-micron particles (180–600 nm, moment 1.2 s). A-A, section view of level 1; B-B, section view of level 2 right bronchi; C-C, section view of level 2 left bronchi; D-D, section view of level 3 upper left bronchi; E-E, section view of level 3 lower left bronchi; F-F, section view of level 3 upper right bronchi; G-G, section view of level 3 lower right bronchi

级数增大而减少，肺叶各部位流速减少的程度不同，同时进入右叶的超细颗粒物数目占其总注射数目的比例(39.0%)略大于进入左叶的(27.1%)，另有33.9%的超细颗粒物在第1级支气管已经发生沉积(图3(b))。特别地，进入管壁形状变化剧烈区域(即右上叶和左下叶)的超细颗粒物数目分别占其总注射数目的18.2%和17.6%，进入两者的超细颗粒物数目占其进入左右肺叶总数目的54.2%(图1(b)和3(b))。此时气体流过右上叶和左上叶时所受到的阻碍比其他部位多(图1(b)~(f))，表明超细

颗粒物趋向集中流向管壁形状变化剧烈处。Ma等人^[25]研究超细颗粒物在咽喉处的沉积效应时也发现了类似结果,由CT扫描形成的上呼吸道模型中的细微形状变化会对流场和颗粒分布造成影响。

由上述可知,各支气管之间的不同形状角度和几何位置会造成不同的流场分布,从而影响颗粒的分布。具体见图3(c),第1级支气管某横截面A-A的最大速度为0.650 m/s,第2级右和左支气管某横截面B-B和C-C的最大速度分别为0.530和0.520 m/s,第3级左上和左下支气管某横截面D-D和E-E的最大速度分别为0.398和0.524 m/s,第3级右上和右下支气管某横截面F-F和G-G的最大速度分别为0.455和0.520 m/s。在同一级数下,右上叶的速度比右下叶的慢,左上叶的比左下叶的慢。在同一横截面内,存在明显速度梯度(如B-B处),速度最大处(0.530 m/s)的中心偏向支气管分岔角处,而远离分岔角端速度普遍较小(最小值为0.130 m/s),最大速度差为0.520 m/s。随着级数的增大,在不同横截面内的速度梯度会逐渐变小,速度最大处的中心偏移也会越来越明显,如B-B和F-F处。这时,流体与超细颗粒物的相对速度越大,其受到的曳力作用就越大。在同一横截面内,其在曳力的作用下朝速度较低(相对速度较小)的方向移动,如当超细颗粒物流经B-B处时,会流向速度较慢的地方。对于超细颗粒物,速度梯度越小,曳力对超细颗粒物的影响就越小,故分布越均匀(C-C和D-D处)。这与细颗粒物的运动规律并不相同。段莉和陈沅江^[40]研究细颗粒物在支气管沉积效应时发现,细颗粒物沉积主要发生在支气管分枝角处,越靠近分枝内壁面,区域细颗粒物的体积分数越大。这是因为超细颗粒物和细颗粒物在流动中受到的主导力不同,超细颗粒物直径较小,质量较轻,受到曳力作用大于重力作用,会流向流体速度较慢的地方,而细颗粒物则反之。

图3(d)与(e)对比了1.2 s时超细颗粒物与亚微米级颗粒物的分布情况。可以看出,在第2级支气管处,右支气管的超细颗粒物数量明显比同一位置的亚微米级颗粒物数量多,左支气管的超细颗粒物数量比亚微米级颗粒物数量略少。这可能与第2级分岔角处以及左右支气管形状不一而形成的湍流运动有关,表明在同样的流场情况下,超细颗粒物的运动轨迹与亚微米级颗粒物的运动轨迹并不完全相同。图3(d)中右上叶的超细颗粒物数量比图3(e)中右上叶的亚微米级颗粒物少。另外,在图4(b)中右上叶第3级支气管处有沉积率明显偏高的区域,原因可能是超细颗粒物在此处发生了沉积,

导致后续流场中的超细颗粒物数量变少。

超细颗粒物与细颗粒物在流场中的运动规律不一样,前者由于粒径较小,流经管壁附近的区域时,气流与粗糙的管壁直接摩擦而产生的细微扰动会使其产生复杂的湍流运动。从图4(a), (b)可以看出,第1级支气管管壁上出现了这种随机性极强的沉积分布。这与Islam等人^[23]得到的超细颗粒物在第1~17级非对称呼吸道沉积效应的结果类似。这是由于流体与粗糙管壁之间的摩擦而产生的湍流运动,导致超细颗粒物随机碰撞到第1级支气管的管壁上。超细颗粒物与细颗粒物的沉积位置不同。段莉和陈沅江^[40]发现,细颗粒物在支气管分岔角处的沉积率最高,这与本研究的结果(图4)不同。在本研究中,超细颗粒物在前3级支气管的沉积数目占总沉积数目的91.5%,沉积位置主要在第1~3级支气管的

图4 超细颗粒沉积分布。(a) 正视图; (b) 后视图; (c) 左视图; (d) 右视图; (e) 上视图; (f) 下视图

Figure 4 Distributions of ultrafine particle deposition. (a) Front view; (b) rear view; (c) left view; (d) right view; (e) upper view; (f) lower view

内壁, 而第3~10级支气管中的沉积数目仅占总沉积数目的8.6%. 这是由于第1~3级支气管都存在较长平缓的管道, 且管道中径向存在较大的速度差, 超细颗粒物受到的曳力作用较强, 容易在曳力的作用下撞击壁面发生沉积. 在第4级之后, 支气管的长度和直径迅速减少, 形状变化相比于前3级剧烈, 其流速(小于0.130 m/s)比第1~3级支气管的流速小, 径向速度差较小, 这时超细颗粒物受到的曳力作用小, 不容易撞击管壁. Ma等人^[25]也发现超细颗粒物在低级支气管中的沉积率明显比高级支气管中的沉积率高. 因此, 形状变化缓和以及较大的径向流体速度差是超细颗粒物发生沉积的有利条件, 曳力对超细颗粒物的作用是超细颗粒物在下呼吸道沉积的根本原因.

2.2 不同肺叶部位超细颗粒物深入情况

通过叠加I、II、III、IV和VI线的最终深入率, 得到各肺叶部位的超细颗粒物深入率总和为42.8%(图5), 表明有一半左右的超细颗粒物深入到肺部深处(即肺腺泡区). 肺腺泡区是人体呼吸系统吸收空气物质的主要场所, 若超细颗粒物深入到肺部深处会带来更大的健康风险. 通过分别叠加I和IV线以及II、III和VI线, 得到左右肺总深入率分别为21.6%和21.2%, 另有5.7%最终从肺部呼出, 表明左右肺叶的超细颗粒物深入情况差别不大. 对于超细颗粒物在各部位的深入情况, 左下叶(15.4%)多于左上叶(6.2%), 右上叶(13.8%)多于右中叶(0.5%)和右下叶(6.9%), 即大量超细颗粒物流向右上叶与左下叶深处. Ma等人^[25]进行超细颗粒物在咽喉处的沉积效应研究时发现右肺有类似情况, 但大量超细颗粒物也会流向左上叶. 然而, 本研究中大量超细颗粒物流向左下叶而不是左上叶, 这与模型左下叶形状较复杂有关, 表明超细颗粒物的分布与下呼吸道模型形状相关性很强, 不同的下呼吸道模型可导致各部分肺叶不同的富集效应.

值得注意的是, 大量的超细颗粒物流向肺的右上叶深处(13.8%), 表明超细颗粒物在各肺叶的沉积分布不均匀, 右上叶对超细颗粒物有一定富集作用. 同时, 大量肺肿瘤病理学研究表明, 右肺与左肺相比, 右肺肿瘤多发于左肺, 上叶比中叶和下叶易发病, 右上叶为主要发病部位^[41~44]. 这表明人体呼吸系统的发病部位并不是随机的, 而是有一种集中在右上叶发病的趋势, 而超细颗粒物恰恰趋向于朝右上叶集中, 所以在进行对人体呼吸系统的环境健康风险评估时, 应首先考虑

图5 不同肺叶部位超细颗粒物深入率. Inlet, 进气口; LL, 左下叶; LU, 左上叶; RL, 右下叶; RM, 右中叶; RU, 右上叶. I, 左下叶流场分布; II, 右上叶流场分布; III, 右下叶流场分布; IV, 左上叶流场分布; V, 进气口流场分布; VI, 右中叶流场分布

Figure 5 In-depth rates of ultrafine particles in different lobes. Inlet, air inlet; LL, lower left lobe; LU, upper left lobe; RL, right lower lobe; RM, right middle lobe; RU, right upper lobe. I, flow field distribution of the lower left lobe; II, flow field distribution of the upper right lobe; III, flow field distribution of the right lower lobe; IV, flow field distribution of the upper left lobe; V, flow field distribution of the inlet; VI, flow field distribution of the right middle lobe

人体呼吸系统易发病的部位, 着重以肺的右上叶作为评估对象. 超细颗粒物会在右上叶和左下叶富集, 在进行环境健康风险评估时, 应着重对这两个部位进行评估.

2.3 不同直径颗粒物沉积效应

首先, 通过对比10 nm超细颗粒物与600 nm细颗粒物的沉积率(α)可知, 超细颗粒物与细颗粒物的沉积率差别最大为19.5%(图6(a)), 表明两者在第1~10级的沉积效应有明显区别. 然后, 结合颗粒物的沉积率与深入率(β)随时间的变化趋势, 可以将一个呼吸周期内颗粒物运动情况分为5个阶段, 如图6(b)所示. 第1阶段, 颗粒物主要在惯性作用和扩散作用下沉积; 第2阶段, 有70%~90%的颗粒物发生沉积和深入肺部; 第3阶段, 由吸气转变为呼气, 颗粒物在支气管中保持不变; 第4阶段, 颗粒物又开始从下呼吸道进气口(图1(a)I)排出, 此时 $\alpha+\beta$ 值上升, 表示颗粒物在下呼吸道进气口的呼出量; 第5阶段, 呼气速度减弱, 部分颗粒物未从下呼吸道排出, 直接进入下个呼吸周期.

由图6(c)可见, 在超细颗粒物区间(10~100 nm), 超细颗粒物直径越大沉积率越小, 超细颗粒物的沉积率从25%下降到5%左右; 在细颗粒物区间(100~600 nm), 细颗粒物的沉积率一直保持在2.5%左右. 因此, 颗粒物

图6 不同直径颗粒物沉积率与深入率。(a) 沉积率; (b) 沉积率和深入率; (c) 颗粒物沉积率与深入率随直径变化。I, 第1阶段; II, 第2阶段; III, 第3阶段; IV, 第4阶段; V, 第5阶段

Figure 6 The deposition rates and in-depth rates of particles with different diameters. (a) Deposition rate; (b) deposition rate and in-depth rate; (c) variation of deposition rate and in-depth rate of particles with diameter. I, first stage; II, second stage; III, third stage; IV, forth stage; V, fifth stage

直径越大, 沉积率越小, 当直径大小处于细颗粒物范围时, 沉积率趋于平稳。Ganimedov和Muchnaya^[45]在研究

直径为1~10000 nm的颗粒物在咽喉部的沉积效应时也发现了相似结果。研究发现, 直径在1~100 nm区间的超细颗粒物沉积率与直径在100~10000 nm区间的细颗粒物有较大差别。这表明颗粒物直径越小, 沉积率越高, 开始沉积时刻越早, 且超细颗粒物比细颗粒物更易受到流场的影响而撞击管壁发生沉积。然而, 对于第1~10级下呼吸道, 随着直径的变化, 各直径颗粒物的 $\alpha+\beta$ 值并没有明显规律。综上, 各直径超细颗粒物和细颗粒物在第1~10级支气管的沉积效应有明显区别, 超细颗粒物的沉积率比细颗粒物的沉积率高, 但两者在此部分的沉积率都低于20%, 表明大部分颗粒物深入到了第10级以后的支气管。

3 结论

本文建立了人体第1~10级非对称支气管三维模型, 模拟研究了支气管的不同形状和直径, 以及颗粒物的不同物性对超细颗粒物沉积效应的影响及与细颗粒物的差别。结果表明, 形状变化缓和以及径向流体速度差大是超细颗粒物发生沉积的有利条件, 电力对超细颗粒物的作用是超细颗粒物在下呼吸道沉积的根本原因; 超细颗粒物易在右上叶和左下叶富集, 在进行环境健康风险评估时, 应着重对这两个部位进行评估; 不同直径超细颗粒物和细颗粒物在第1~10级支气管的沉积效应有明显区别, 但它们在此部分的沉积率都低于20%。在接下来的研究中, 将使用CT扫描的人体真实下呼吸道模型进行更加精准的数值模拟研究。本研究可为探究超细颗粒物的运动轨迹与沉积效应的影响因素和为颗粒物暴露与健康风险评估相关领域的交叉应用提供理论支持与科学依据。

参考文献

- Fröhlich-Nowoisky J, Kampf C J, Weber B, et al. Bioaerosols in the earth system: Climate, health, and ecosystem interactions. *Atmos Res*, 2016, 182: 346–376
- Burrows S M, Elbert W, Lawrence M G, et al. Bacteria in the global atmosphere—Part 1: Review and synthesis of literature data for different ecosystems. *Atmos Chem Phys*, 2009, 9: 9263–9280
- Burrows S M, Butler T, Jöckel P, et al. Bacteria in the global atmosphere—Part 2: Modeling of emissions and transport between different ecosystems. *Atmos Chem Phys*, 2009, 9: 9281–9297
- Chen J, Li C, Ristovski Z, et al. A review of biomass burning: emissions and impacts on air quality, health and climate in China. *Sci Total Environ*, 2017, 579: 1000–1034
- Tang K, Huang Z, Huang J, et al. Characterization of atmospheric bioaerosols along the transport pathway of Asian dust during the dust-bioaerosol 2016 campaign. *Atmos Chem Phys*, 2018, 18: 7131–7148
- Rodo X, Ballester J, Cayan D, et al. Association of Kawasaki disease with tropospheric wind patterns. *Sci Rep*, 2011, 1: 152
- Inthavong K, Zhang K, Tu J. Numerical modelling of nanoparticle deposition in the nasal cavity and the tracheobronchial airway. *Comput Methods*

- Biomech Biomed Eng, 2011, 14: 633–643
- 8 Hindle M, Longest P W. Evaluation of enhanced condensational growth (ECG) for controlled respiratory drug delivery in a mouth-throat and upper tracheobronchial model. *Pharm Res*, 2010, 27: 1800–1811
- 9 Semmler-Behnke M, Kreyling W G, Schulz H, et al. Nanoparticle delivery in infant lungs. *Proc Natl Acad Sci USA*, 2012, 109: 5092–5097
- 10 Tsuda A, Laine-Pearson F E, Hydon P E. Why chaotic mixing of particles is inevitable in the deep lung. *J Theor Biol*, 2011, 286: 57–66
- 11 Kumar H, Tawhai M H, Hoffman E A, et al. The effects of geometry on airflow in the acinar region of the human lung. *J Biomech*, 2009, 42: 1635–1642
- 12 Weibel E R. *Morphometry of the Human Lung*. Berlin, Heidelberg: Springer, 1963
- 13 Yeh H, Schum G. Models of human lung airways and their application to inhaled particle deposition. *Bull Math Biol*, 1980, 42: 461–480
- 14 Deardorff J W. The use of subgrid transport equations in a three-dimensional model of atmospheric turbulence. *J Fluids Eng*, 1973, 95: 429–438
- 15 Pöschl U, Shiraiwa M. Multiphase chemistry at the atmosphere-biosphere interface influencing climate and public health in the anthropocene. *Chem Rev*, 2015, 115: 4440–4475
- 16 Tian G, Hindle M, Lee S, et al. Validating CFD predictions of pharmaceutical aerosol deposition with *in vivo* data. *Pharm Res*, 2015, 32: 3170–3187
- 17 Huang J, Zhang L, Yu S. Modeling micro-particle deposition in human upper respiratory tract under steady inhalation. *Particuology*, 2011, 9: 39–43
- 18 Xi J, Longest P W. Numerical predictions of submicrometer aerosol deposition in the nasal cavity using a novel drift flux approach. *Int J Heat Mass Transf*, 2008, 51: 5562–5577
- 19 Cheng Y S, Zhou Y, Chen B T. Particle deposition in a cast of human oral airways. *Aerosol Sci Technol*, 1999, 31: 286–300
- 20 Zhang Z, Kleinstreuer C. Computational analysis of airflow and nanoparticle deposition in a combined nasal-oral-tracheobronchial airway model. *J Aerosol Sci*, 2011, 42: 174–194
- 21 Shi H, Kleinstreuer C, Zhang Z, et al. Nanoparticle transport and deposition in bifurcating tubes with different inlet conditions. *Phys Fluids*, 2004, 16: 2199–2213
- 22 Islam M S, Saha S C, Sauret E, et al. Pulmonary aerosol transport and deposition analysis in upper 17 generations of the human respiratory tract. *J Aerosol Sci*, 2017, 108: 29–43
- 23 Islam M S, Saha S C, Sauret E, et al. Ultrafine particle transport and deposition in a large scale 17-generation lung model. *J Biomech*, 2017, 64: 16–25
- 24 Sturm R. A computer model for the simulation of nanoparticle deposition in the alveolar structures of the human lungs. *Ann Transl Med*, 2015, 3: 281–291
- 25 Ma J, Su W C, Chen Y, et al. A combined computational and experimental study on nanoparticle transport and partitioning in the human trachea and upper bronchial airways. *Aerosol Air Qual Res*, 2020, 20: 2404–2418
- 26 Dong J L, Li J, Tian L, et al. Transport and deposition of ultrafine particles in the upper tracheobronchial tree: A comparative study between approximate and realistic respiratory tract models. *Comput Method Biomech*, 2021, <https://doi.org/10.1080/10255842.2020.1869220>
- 27 El-Batsh H, Haselbacher H. Numerical investigation of the effect of ash particle deposition on the flow field through turbine cascades. In: *Turbo Expo 2002: Power for Land, Sea, and Air*. Amsterdam: American Society of Mechanical Engineers, 2002, 5: 1035–1043
- 28 ANSYS Inc. *ANSYS Fluent Theory Guide*, 2020
- 29 Smagorinsky J. General circulation experiments with the primitive equations I the basic experiment. *Month*, 1963, 91: 99–164
- 30 Shen W, Niu Y, Mattrey R F, et al. Development and validation of subject-specific finite element models for blunt trauma study. *J Biomech Eng*, 2008, 130: 021022
- 31 Fung Y C. A model of the lung structure and its validation. *J Appl Physiol*, 1988, 64: 2132–2141
- 32 Li P H, Xu X X, Li R, et al. Numerical simulation on the deposition characteristics of inhaled particles in human pulmonary acinus region under the influence of multi-factors (in Chinese). *J Biomed Eng*, 2020, 37: 793–801 [李鹏辉, 徐新喜, 李蓉, 等. 多因素影响下的人体肺腺泡区吸入颗粒物沉积规律数值模拟研究. *生物医学工程学杂志*, 2020, 37: 793–801]
- 33 Nazridoust K, Asgharian B. Unsteady-state airflow and particle deposition in a three-generation human lung geometry. *Inhal Toxicol*, 2008, 20: 595–610
- 34 Chen C, Zhao B. A modified Brownian force for ultrafine particle penetration through building crack modeling. *Atmos Environ*, 2017, 170: 143–148
- 35 Inthavong K, Tian L, Tu J. Lagrangian particle modelling of spherical nanoparticle dispersion and deposition in confined flows. *J Aerosol Sci*, 2016, 96: 56–68
- 36 International Commission on Radiological Protection (ICRP). Human Respiratory Tract Model for Radiological Protection. *Ann ICRP*, 1994, 24: 1–3
- 37 Hinds W C. *Aerosol Technology-Properties, Behavior, and Measurement of Airborne Particles*. New Jersey: John Wiley and Sons Ltd, 1999

- 38 Su W C, Chen Y, Bezerra M, et al. Respiratory deposition of ultrafine welding fume particles. *J Occup Environ Hyg*, 2019, 16: 694–706
- 39 Ghalati P F, Keshavarzian E, Abouali O, et al. Numerical analysis of micro- and nano-particle deposition in a realistic human upper airway. *Comput Biol Med*, 2012, 42: 39–49
- 40 Duan L, Chen Y J. Simulated research of smelting dust deposition in human respiratory system (in Chinese). *J Saf Environ*, 2011, 5: 198–202 [段莉, 陈沅江. 冶炼粉尘在人体呼吸系统的沉积仿真模拟研究. *安全与环境学报*, 2011, 5: 198–202]
- 41 Li R Q. Clinical epidemiology and pathological characteristics of patients with lung tumor (in Chinese). *Pract Clin J Integr Trad Chin West Med*, 2017, 17: 94–95 [李瑞芹. 肺肿瘤患者的临床流行病学及病理特征分析. *实用中西医结合临床*, 2017, 17: 94–95]
- 42 Xu C W, Wang H Y, Wu Y F, et al. 2771 cases of clinicopathological analysis of pulmonary neoplasm (in Chinese). *J Int Pathol Clin Med*, 2016, 36: 173–184 [许春伟, 王海艳, 吴永芳, 等. 2771例肺肿瘤临床病理特征分析. *临床与病理杂志*, 2016, 36: 173–184]
- 43 Li X X, Wang M J, Gao J, et al. Retrospective analysis of clinical pathology characteristic in patients with lung neoplasms (in Chinese). *Chin J Cancer Prev Treat*, 2012, 19: 130–133 [李学祥, 王懋杰, 高佳, 等. 肺肿瘤患者临床病理特征回顾性分析. *中华肿瘤防治杂志*, 2012, 19: 130–133]
- 44 Yang Z, Wang Z, Duan Y, et al. Clinicopathological characteristics and prognosis of resected cases of carcinoid tumors of the lung. *Thorac Cancer*, 2016, 7: 633–638
- 45 Ganimedov V L, Muchnaya M I. Numerical simulation of particle deposition in the human nasal cavity. *Thermophys Aeromech*, 2020, 27: 303–312

Summary for “超细颗粒物在非对称下呼吸道中沉积效应的数值模拟”

Numerical simulation on deposition effects of ultrafine particles in the asymmetrical lower respiratory tract

Yijie Zhuang¹, Zijian Ma¹, Xiaobao Long², Yan Yang^{1,3*} & Yingxin Yu¹

¹ Guangdong Key Laboratory of Environmental Catalysis and Health Risk Control, Guangdong-Hong Kong-Macao Joint Laboratory for Contaminants Exposure and Health, Institute of Environmental Health and Pollution Control, School of Environmental Science and Engineering, Guangdong University of Technology, Guangzhou 510006, China;

² Neurosurgery Department, Affiliated Hospital of Guangdong Medical University, Zhanjiang 524023, China;

³ Chemistry and Chemical Engineering Guangdong Laboratory, Shantou 515041, China

* Corresponding author, E-mail: yangyan1209@gdut.edu.cn

A large number of particles are released into the atmosphere by human production activities every year. Some of them are combined with bacteria and viruses in the air to form bioactive particles, which are extremely harmful to human health. With light weights and small sizes, atmospheric particles easily spread in the air and enter the human respiratory system through breath, resulting in chronic diseases and even cancer. It is known that the diameters of atmospheric particles, including fine and ultrafine particles, range from 0.001 to 100 μm . At present, many studies have been conducted on the deposition effects of fine particles in the human respiratory system, however, few studies have investigated the deposition effects of ultrafine particles. Furthermore, most of these published studies only concern 4–5 levels of the two-dimensional or three-dimensional respiratory tract model, and consider the changes in the bronchus divides angles and the diameters but not the rotation of the bronchus bifurcations. Moreover, most studies on higher level bronchial model have simplified the model by the pruning method, for example, only one or several bronchi from level 1 to level 10 or above are simulated. As such, the research on the deposition effects of ultrafine particles in more than 10 levels of the three-dimensional respiratory tract is still lacking. In the present study, based on Yeh's model, without using pruning and other simplified methods, we modeled each bronchus using multi-stage asymmetric physiological structural data (including the diameters, lengths, and bifurcating angles of different levels of bronchi in different lobes) with the consideration of the bifurcation radial rotation. The three-dimensional asymmetric bronchial model at level 1–10 was established using SOLIDWORKS software and the EI-Basth's model was employed to describe the deposition pattern of ultrafine particles. With the help of ANSYS Fluent software, the computational fluid dynamics (CFD) method was used to simulate the influence of the shapes and diameters of different respiratory tracts as well as the different physical properties of ultrafine particles on the deposition rule of ultrafine particles, and the differences between ultrafine and fine particles. The deposition regularity and characteristics of ultrafine particles in the asymmetric lower respiratory tract at level 1–10 were then studied. The results showed that the favorable conditions for the deposition of ultrafine particles were the moderate shape change and the large radial velocity difference. The effects of the drag force on ultrafine particles were the main cause of the deposition of ultrafine particles in the lower respiratory tract. Compared with other parts of the lung, the right upper lobe and the left lower lobe had certain enrichment effects on ultrafine particles, which should be taken into account in the environmental health risk assessment. The deposition effects of ultrafine particles and fine particles with different diameters were obviously different in the level 1–10 bronchi, but their deposition rates were lower than 20% in these parts. This study can provide theoretical guidance and scientific basis for investigations on the effects of atmospheric environmental quality on human lung health.

ultrafine particles, asymmetrical lower respiratory tract, computational fluid dynamics, deposition effects, environmental health

doi: [10.1360/TB-2021-0582](https://doi.org/10.1360/TB-2021-0582)