

ETUDE NUMERIQUE DE L'INFLUENCE DU RAPPORT D'ASPECT SUR LE PRELEVEMENT DE PARTICULES ELLIPSOÏDALES PAR UNE CASSETTE FERMEE 37 MM

A. Chatain^{*1,2}, E. Belut¹, B. Arcen², R. Guichard¹, A. Tanière²

¹INRS, Vandœuvre-lès-Nancy, 54500, France

²Université de Lorraine, CNRS, LEMTA, F-54000 Nancy, France

*Courriel de l'orateur : aurelien.chatain@inrs.fr

TITLE

Numerical study of the influence of aspect ratio on the collection of ellipsoidal particles by a closed-face 37 mm cassette

RESUME

À l'aide de l'approche Euler-Lagrange et en calculant les trajectoires limites, nous étudions l'efficacité avec laquelle une cassette fermée de 37 mm à orifice de 4 mm capte des particules ellipsoïdales par rapport à des particules sphériques, en air calme. Les particules sont soumises à la pesanteur et aux forces et couples aérodynamiques, qui agissent sur leur translation et leur rotation au cours du prélèvement. La variabilité du biais de prélèvement avec le rapport d'aspect et l'orientation des ellipsoïdes dans l'ambiance interroge sur l'usage d'une simplification telle qu'un diamètre aérodynamique moyen pour caractériser universellement le transport de particules anisotropes dans les écoulements d'air, et notamment dans les préleveurs et les voies respiratoires.

ABSTRACT

Using the Euler-Lagrange approach and calculating the grazing trajectories, we study the efficiency with which a closed face 37 mm cassette with 4 mm opening captures ellipsoidal particles compared to spherical particles in calm air. The particles are subject to gravity and aerodynamic forces and torques, which act on their translation and rotation during sampling. The variability of the sampling bias with the aspect ratio and orientation of the ellipsoids in the environment raises questions about the use of a simplification such as an average aerodynamic diameter to universally characterize the transport of anisotropic particles in airflows, particularly in samplers and respiratory tracts.

MOTS-CLÉS : prélèvement, particules anisotropes, ellipsoïdes, simulations / **KEYWORDS:** air sampling, anisotropic particles, ellipsoidal particles, simulations

1. INTRODUCTION

Le diamètre aérodynamique des aérosols est conventionnellement utilisé comme déterminant de leur dépôt dans les voies respiratoires et des performances d'échantillonnage des appareils de mesure des concentrations en aérosol dans l'air. Ce diamètre équivalent correspond à celui d'une particule sphérique de masse volumique $\rho_0 = 1000 \text{ kg/m}^3$ qui sédimente à la même vitesse. Si cette définition ne pose pas problème pour des particules sphériques, elle est plus épingleuse pour des particules géométriquement anisotropes, et ce d'autant plus que leur degré d'anisotropie est élevé. Les fibres en sont un bon exemple. La vitesse de sédimentation V_s est fortement dépendante de l'orientation des particules, conduisant à une distribution de V_s , et donc de d_{ae} , plutôt qu'à une valeur unique. Collazo *et al* (2002) obtiennent expérimentalement une telle distribution en faisant traverser un impacteur multi-étage à des fibres de PET identiques (aux incertitudes de fabrication près). Le diamètre aérodynamique moyen $\langle d_{ae} \rangle$ est alors le plus souvent utilisé, basé sur des orientations équiprobables de la particule.

La question de la représentativité du diamètre aérodynamique moyen comme caractéristique inertielle moyenne des fibres se pose alors. Gallily et Eisner (1979) mettent déjà à mal cette simplification sphérique en réfutant l'existence d'un $\langle d_{ae} \rangle$ intrinsèque à la particule mais en le présentant comme une propriété de cette dernière et de l'écoulement. Dans le registre de la prévention, Cheng et Su (2013) en font l'expérience sur une réplique de voies respiratoires humaines où ils constatent que des fibres de dioxyde de titane pénètrent dans les poumons plus profondément que leurs équivalents sphériques de même diamètre aérodynamique lorsque celui-ci est calculé sur base d'orientations équiprobables. Ce constat motive une caractérisation approfondie des dispositifs de prélèvement qui tiendrait compte de l'anisotropie des particules.

En adoptant un formalisme Euler-Lagrange et en modélisant les actions exercées sur une particule ellipsoïdale en régime de Stokes, on calcule les trajectoires limites des particules entrant dans une cassette fermée 37 mm à orifice de 4 mm (CF37), dispositif de mesure le plus employé en prélèvement d'aérosols. Nous

considérons le cas où la cassette prélève dans un air calme. Les trajectoires limites correspondent aux trajectoires des particules qui délimitent le volume d'air ambiant d'où proviennent les particules captées par la cassette. Elles sont calculées pour des particules couvrant une gamme d'inerties, de rapports d'aspect mais aussi d'orientations initiales. Une condition de dépôt est imposée lorsque le centre des particules touche les parois externes (impaction). L'efficacité de prélèvement (préférentiellement dénommée biais prélèvement en raison de valeurs parfois supérieures à l'unité) est calculée grâce aux trajectoires limites puis moyennée sur les orientations initiales abordant la question de l'utilisation d'un $\langle d_{ae} \rangle$ pour caractériser le transport au sein de ces écoulements.

2. METHODE

2.1. Modélisation et hypothèses

Pour calculer les trajectoires de particules ellipsoïdales, le principe fondamental de la dynamique est appliqué. On considère des ellipsoïdes de révolution caractérisées par un demi petit axe b , un rapport d'aspect β et une masse volumique ρ_p . Les actions qui s'exercent sur ces particules sont les forces et couples aérodynamiques ainsi que la gravité. La dynamique translationnelle et rotationnelle des particules obéit au système d'équation (1) :

$$\begin{cases} \frac{d\vec{X}_p}{dt} = \vec{V}_p \\ m_p \frac{d\vec{V}_p}{dt} = m_p \vec{g} + \vec{F}_{aéro} \\ \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \\ \epsilon_3 \\ \eta \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \eta & -\epsilon_3 & \epsilon_2 \\ \epsilon_3 & \eta & -\epsilon_1 \\ -\epsilon_2 & \epsilon_1 & \eta \\ -\epsilon_1 & -\epsilon_2 & -\epsilon_3 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \omega_{p,\hat{x}} \\ \omega_{p,\hat{y}} \\ \omega_{p,\hat{z}} \end{pmatrix} \\ \bar{\hat{I}} \frac{d\vec{\omega}_p}{dt} + \vec{\omega}_p \times (\bar{\hat{I}} \vec{\omega}_p) = \vec{\hat{c}}_{aéro} \end{cases} \quad (1)$$

Avec : \vec{X}_p la position de la particule, \vec{V}_p sa vitesse de translation, $q = (\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3, \eta)$ le quaternion de norme unitaire associé à la particule pour résoudre sa cinématique de rotation, $\vec{\omega}_p$ sa vitesse angulaire exprimée dans son référentiel, m_p sa masse et $\bar{\hat{I}}$ son tenseur d'inertie, également exprimé dans son référentiel.

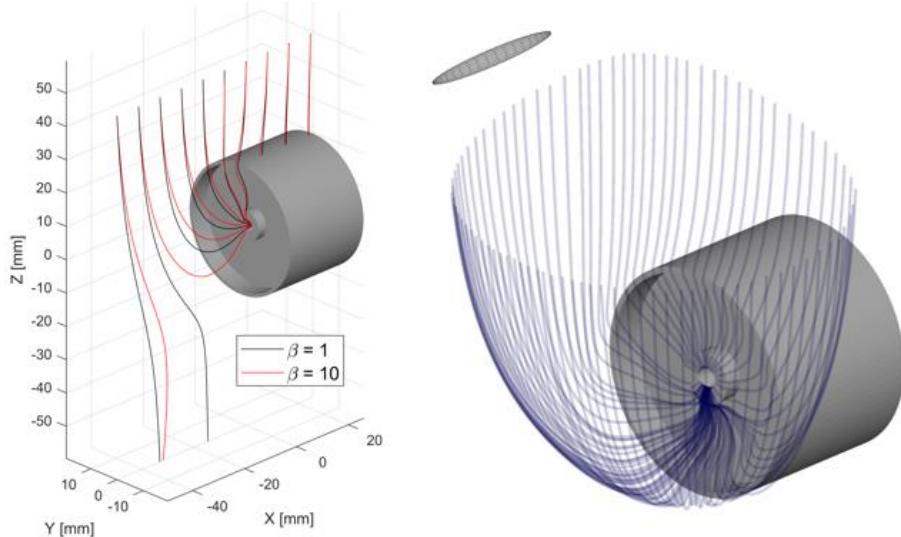


Figure 1 : Visualisation de trajectoires pour des particules de même inertie $\langle d_{ae} \rangle = 20 \mu\text{m}$ mais de rapport d'aspect différent (gauche). Trajectoires limites pour des particules de même inertie orientées initialement comme l'ellipsoïde agrandie ($\beta = 10$) (droite).

En supposant les particules suffisamment petites (d'une dimension inférieure aux plus petites structures qui existent au sein de l'écoulement), l'approche particule-point est adoptée et les actions aérodynamiques sont modélisées. L'écoulement autour des particules est considéré comme rampant (régime de Stokes). Dans ces conditions, des expressions analytiques existent pour la force et le couple aérodynamiques : Happel et Brenner (1983) donnent $\vec{F}_{aéro} = \mu \pi b \bar{K} (\vec{U}_f - \vec{V}_p)$; et Jeffery (1922) $\vec{\hat{c}}_{aéro}$. Ces formules font intervenir la vitesse du fluide \vec{U}_f et son gradient $\bar{\nabla} \vec{U}_f$ au centre de la particule, nécessitant une interpolation du champ fluide.

Dans le contexte des aérosols, la taille des particules et leur fraction volumique typiquement inférieure au millionième permet de supposer un couplage unidirectionnel où les particules n'influent pas la phase porteuse (dit couplage « one-way » en anglais). Le champ fluide est ainsi calculé au préalable en résolvant les équations de Navier-Stokes par la méthode des volumes finis sur Ansys Fluent. La cassette présente un orifice de diamètre $D_s = 4 \text{ mm}$ et aspire à un débit $Q_{v_{in}} = 2 \text{ L/min}$. On en déduit la vitesse d'aspiration $U_s \approx 2.65 \text{ m.s}^{-1}$ et un Reynolds en entrée $Re \approx 700$ qui fait du dispositif le siège d'un écoulement laminaire axisymétrique. Une pression ambiante uniforme est appliquée aux frontières extérieures du domaine (pas de vent incident) et une vitesse d'aspiration est imposée au sein du dispositif de prélèvement. L'indépendance en maillage est vérifiée puis les résultats sont exportés sur une grille cartésienne afin d'alimenter le suivi lagrangien décrit par le système (1). L'interpolation de \vec{U}_f et $\bar{\nabla}\vec{U}_f$ se fait à l'aide d'un polynôme de Lagrange d'ordre 2. Le système d'EDO (1) est enfin résolu à l'aide d'un solveur implicite.

2.2. Méthode de calcul du biais de prélèvement

Le biais de prélèvement η est défini comme le rapport entre la concentration déduite du prélèvement C_{mes} et la concentration réelle C_∞ (concentration uniforme à l'infini, c.à.d. loin du préleveur). En pratique, le préleveur collecte au cours d'une période de mesure $t_{collecte}$ une masse m_p en aspirant l'air environnant avec un débit $Q_{v_{in}}$. On déduit $\eta = \frac{C_{mes}}{C_\infty} = \frac{m_p}{Q_{v_{in}} \cdot t_{collecte} \cdot C_\infty} = \frac{\dot{m}_p}{C_\infty \cdot Q_{v_{in}}}$. En l'absence supposée de turbulence dans l'environnement ambiant et de mouvement Brownien, les trajectoires des particules collectées par le préleveur forment un tube (de section non-circulaire) délimité par les trajectoires limites, visibles en Figure 1, séparant les trajectoires des particules collectées de celles qui ne le sont pas. Par ailleurs, à l'infini non perturbé en amont du préleveur, la concentration particulaire est uniforme et égale à C_∞ . La conservation de la masse des particules dans le tube des trajectoires limites permet ainsi de simplifier le calcul du débit massique \dot{m}_p en intégrant simplement la vitesse des particules dans la section du tube des trajectoires limites à l'infini, suivant $\dot{m}_p = C_\infty \int_{S_{in_2}} \vec{V}_\alpha \cdot d\vec{S}$, avec : S_{in_2} la section du tube formé par les trajectoires et \vec{V}_α la vitesse de la phase particulaire α . L'expression de η s'en retrouve simplifiée : $\eta = \frac{1}{Q_{v_{in}}} \int_{S_{in_2}} \vec{V}_\alpha \cdot d\vec{S}$. A l'infini, les particules sont par ailleurs supposées être en régime de sédimentation (état d'équilibre) et \vec{V}_α est donc connu : $\vec{V}_\alpha = \vec{U}_f + \vec{V}_s$; avec \vec{V}_s la vitesse de sédimentation des particules en air calme. Au final, pour calculer η il suffit donc de déterminer S_{in_2} suffisamment en amont du préleveur, à l'aide des trajectoires limites.

Dans cet objectif, on simule d'abord les trajectoires de particules émanant d'un dôme de rayon $r_{dôme}$ entourant le préleveur avec des positions initiales distribuées angulairement uniformément sur ce dôme. Les résultats obtenus pour ces trajectoires (capture ou non) alimentent une recherche itérative des trajectoires limites qui forment le contour de S_{in_2} (équivalent bidimensionnel de la dichotomie). Une fois S_{in_2} trouvée à une précision souhaitée, l'intégration du débit volumique de la phase particule se fait en discréétisant S_{in_2} en des éléments d'une taille cohérente avec la recherche adaptative puis en additionnant les débits associés à chaque facette i_{capt} contenue dans S_{in_2} . On obtient l'approximation du biais : $\tilde{\eta} = \frac{1}{Q_{v_{in}}} \sum_{i \in i_{capt}} \vec{V}_{\alpha_i} \cdot d\vec{S}_i$

Enfin, $r_{dôme}$ est choisi suffisamment grand pour que les hypothèses d'uniformité des concentrations et de régime de sédimentation pure des particules y soient vérifiées. Les résultats présentés ici sont obtenus avec $r_{dôme} \approx 25 r_s$, r_s étant le rayon de l'orifice de la cassette.

2.3. Variables d'études et conditions aux limites

La caractérisation des performances de captage des préleveurs en fonction de l'inertie et de l'anisotropie des particules ellipsoïdales s'effectue en balayant une gamme de $\langle d_{ae} \rangle = [5; 60] \mu\text{m}$, en adoptant la relation de Stöber *et al* (1972) : $\langle d_{ae} \rangle = d_v \sqrt{\frac{\rho_p}{\rho_0 K_r}}$ (avec d_v le diamètre de la particule sphérique de même volume et K_r le facteur de forme dynamique donné par Happel et Brenner (1983) pour une orientation aléatoire uniformément distribuée). Cette gamme de $\langle d_{ae} \rangle$ étudiée s'étend volontairement au-delà des préconisations usuelles d'usage de la CF37 à des fins exploratoires. La gamme de rapport d'aspect β s'étend quant à elle de 1 à 20.

L'anisotropie des particules induit une forte influence de leur orientation initiale sur le tube formé par les trajectoires limites. Il existe pour chaque combinaison $\langle d_{ae}, \beta \rangle$ autant de tubes que d'orientations initiales et donc de biais associés.

3. RESULTATS

La Figure 2 illustre la dispersion du biais de prélèvement en fonction de $\langle d_{ae} \rangle$ et de β lorsque les orientations des particules à l'infini sont équiprobables. Deux discrétisations de $\langle d_{ae} \rangle$ sont représentées sur cette figure : de 5 à 30 μm par pas de 5 μm sur la plage d'utilisation habituelle d'une CF37 (gauche), et de 10 à 60 μm par pas de 10 μm pour visualiser les résultats sur une gamme étendue de diamètres (droite). On constate que la dispersion du biais de prélèvement est d'autant plus importante que les particules sont anisotropes et de $\langle d_{ae} \rangle$ élevé. Cette caractéristique peut être reliée à la différence entre les temps de réponse aérodynamiques maximums et minimums (pour des ellipsoïdes dont le grand axe est respectivement aligné et normal à la vitesse relative fluide-particule \vec{U}_r), différence qui croît de façon linéaire avec $\langle d_{ae} \rangle$ et non linéaire avec β . On peut alors supposer que l'étalement du biais résulte de celui de la distribution du temps de réponse aérodynamique.

Même si les extrêmes des biais calculés dépassent les 120% pour certaines orientations, les biais médians restent inférieurs à l'unité, comme pour des sphères (cas $\beta = 1$). Ce constat laisse penser qu'il serait possible de définir un diamètre équivalent pour qualifier la sphère qui aurait le même biais de prélèvement qu'un ellipsoïde donné, mais ce diamètre ne peut manifestement pas correspondre au $\langle d_{ae} \rangle$ moyen sur des orientations équiprobables tel qu'utilisé en Figure 2.

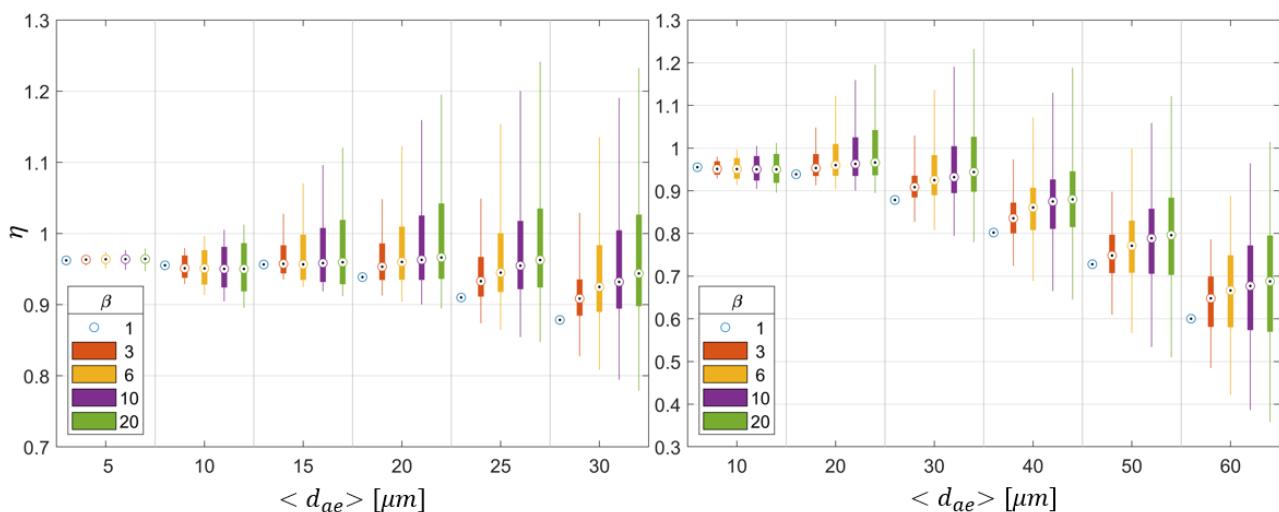


Figure 2 : Dispersion du biais de prélèvement dû à l'orientation initiale des particules en fonction du $\langle d_{ae} \rangle$ et du rapport d'aspect. Les médianes, quartiles et extrêmes sont représentés pour chaque boîte.

4. CONCLUSION ET DISCUSSION

Les simulations réalisées mettent en évidence la différence de comportement entre des particules ellipsoïdales et des particules sphériques lors d'un prélèvement en air calme par une cassette fermée 37 mm à orifice de 4 mm au débit de 2 L/min. La variabilité du biais de prélèvement avec le rapport d'aspect et l'orientation des ellipsoïdes dans l'ambiance interroge sur l'usage d'une simplification telle qu'un diamètre aérodynamique moyen $\langle d_{ae} \rangle$ pour caractériser universellement le transport de particules anisotropes dans les écoulements d'air, et notamment dans les préleveurs et les voies respiratoires. On notera qu'en dépit de la diminution de la variabilité du biais avec l'inertie moyenne, des variations notables (10%) apparaissent dès $\langle d_{ae} \rangle = 10 \mu\text{m}$ et atteignent 30% pour un diamètre aérodynamique moyen $\langle d_{ae} \rangle = 20 \mu\text{m}$ et un rapport d'aspect $\beta = 20$.

Cheng, Y. S., & Su, W.-C. (2013). Thoracic Fraction of Inhaled Fiber Aerosol. *Journal of Occupational and Environmental Hygiene*, 10(4), 194-202.

Collazo, H., Crow ,W. Andrew, Gardner ,Lonnie, Phillips ,Brenda L., Marple ,Virgil A., & and Olson, B. (2002). Inertial Impactors to Measure Aerodynamic Diameters of Man-Made Organic Fibers. *Aerosol Science and Technology*, 36(2), 166-177.

Gallily, I., & Eisner, A. D. (1979). On the orderly nature of the motion of nonspherical aerosol particles. I. Deposition from a laminar flow. *Journal of Colloid and Interface Science*, 68(2), 320-337.

Happel, J., & Brenner, H. (1983). *Low Reynolds number hydrodynamics : With special applications to particulate media* (1st ed. 1983.). Springer Netherlands.

Jeffery, G. B. (1922). The motion of ellipsoidal particles immersed in a viscous fluid. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, 102(715), 161-179.

Stöber, W., Flachsbart, H., & Boose, C. (1972). Distribution analyses of the aerodynamic size and the mass of aerosol particles by means of the spiral centrifuge in comparison to other aerosol precipitators. *Journal of Colloid and Interface Science*, 39(1), 109-120.