

Simulação Numérica em Elementos Finitos de Escoamento Bifásico em Sistemas Biológicos

Área de Concentração: Termociências e Engenharia Térmica

M.Sc. Leandro Marques dos Santos

Orientador: D.Sc. Gustavo Rabello dos Anjos

Rio de Janeiro
2020

1 Resumo

A simulação numérica é uma ferramenta importante para solucionar problemas encontrados em diversos processos físicos, como na extração de petróleo, enchimento de reservatórios, arrefecimento de componentes eletrônicos e caracterização da hidrodinâmica em sistemas biológicos, relacionados a problemas decorrentes de doença arterial coronariana (DAC). Este último é de grande importância devido o enorme fardo econômico na sociedade. Este plano de trabalho tem como objetivo desenvolver uma estrutura computacional para simular o escoamento em uma artéria coronária em coordenadas cartesianas. O Método dos Elementos Finitos (MEF) será aplicado para resolver as equações de governo do escoamento sanguíneo na artéria coronária com aterosclerose e stent farmacológico implantado. O sangue será modelado como um fluido multifásico, incompressível e newtoniano. A equação de Navier-Stokes e a equação de transporte de espécie química serão apresentadas de acordo com a descrição Lagrangeana-Euleriana Arbitrária (ALE). O método semi-Lagrangeano será usado a fim de reduzir as oscilações espúrias que podem ser observadas quando o termo convectivo é predominante.

2 Introdução

De acordo com a Organização Mundial da Saúde (OMS) [1], mais pessoas morrem anualmente devido às doenças cardiovasculares (DCV) do que qualquer outra causa no mundo a cada ano. Estima-se que 17,7 milhões de pessoas morreram por DCV em 2015, representando 31% de todas as mortes no mundo. Aproximadamente 40% das mortes por DCV ocorreram devido às doenças na artéria coronária (DAC). A principal causa da DAC é a aterosclerose que consiste no acúmulo de placas de gordura no interior da parede da artéria ocasionando uma diminuição do diâmetro do lúmen. A aterosclerose pode ser prevenida com uma mudança de hábitos nocivos tais como: o uso de tabaco, o uso de álcool, falta de atividade física e dietas não saudáveis [2]. Para uma abordagem corretiva, porém, dois tratamentos podem ser realizados: o bypass coronário (também conhecido como ponte de safena) e a angioplastia coronária transluminal percutânea (PTCA). O PTCA é um procedimento minimamente invasivo onde um tubo aramado, chamado stents, é colocado [3]. Os principais objetivos deste plano de trabalho são o desenvolvimento de um código em Elementos Finitos utilizando a descrição Lagrangeana-Euleriana Arbitrária (ALE) [4] para a equação de Navier-Stokes com o transporte de espécie química e conhecer a dinâmica do escoamento sanguíneo numa artéria coronária com aterosclerose e com stents farmacológico implantado.

As equações que governam a dinâmica do escoamento sanguíneo numa artéria coronária serão desenvolvidas segundo a hipótese do meio contínuo. Dessa forma, os princípios de conservação de massa, de quantidade de movimento linear e de espécie química poderão ser utilizados. O sangue será considerado como um fluido incompressível, newtoniano e multifásico, como também o coeficiente difusivo será aproximado como constante. A equação de Navier-Stokes será apresentada segundo as variáveis primitivas (velocidade-pressão) com a equação de transporte de espécie química sem geração interna [5].

O desenvolvimento computacional será feito em linguagem C++/Python [6] [7] utilizando o paradigma de orientação a objetos com objetivo de reaproveitar o código em outras pesquisas e as equações de governo serão discretizadas em cima de uma malha tetraédrica não estruturada através do Método dos Elementos Finitos. As equações serão discretizadas no tempo utilizando a expansão da série de Taylor e o Método semi-Lagrangeano [8] será utilizado com o intuito de reduzir as oscilações espúrias que são características das equações do tipo convecção-difusão e a formulação de Galerkin [9] será utilizada para discretizarmos as equações no espaço.

Este projeto visa ser desenvolvido no Laboratório de Transmissão e Tecnologia do Calor (LTTC) do Programa de Engenharia Mecânica da Coppe (PEM/COPPE). Tal laboratório dispõe de uma ampla infraestrutura, além de recursos computacionais de última geração, voltada a projetos de pesquisa, desenvolvimento e inovação em termociências, em diversas linhas, inclusive em simulações com o uso de métodos numéricos [10].

3 Objetivos

Para a realização do projeto proposto, planeja-se desenvolver simulações através da construção de um algoritmo de Elementos Finitos para modelos com geometrias complexas da artéria coronária com aterosclerose e com stent farmacológico implantado. Com a implementação desse código, é necessária sua validação através de comparações com possíveis resultados analíticos para se garantir que o modelo é uma boa representação do fenômeno estudado. O trabalho realizado e seus resultados também serão apresentados com publicação em canais de comunicação de grande visibilidade e alto fator de impacto. Com isso, objetiva-se a descrição detalhada de escoamentos em uma artéria coronária.

Os indicadores de desempenho que serão utilizados no projeto estão baseados em publicações produzidas na Coppe-UFRJ e submetidos a avaliações da comunidade científica. Como objetivos específicos, espera-se realizar:

1. Desenvolvimento de um código em Elementos Finitos utilizando a descrição Lagrangeana-Euleriana Arbitrária (ALE) para a equação Navier-Stokes com o transporte de espécie química;
2. Conhecer a dinâmica do escoamento sanguíneo numa artéria coronária com aterosclerose e com stents farmacológico implantado;
3. Publicação dos resultados em canais de comunicação nacionais e internacionais de excelência e alto impacto;
4. Defesa de tese de Doutorado.

4 Metodologia

A elaboração do método matemático que descreve corretamente o fenômeno físico é de extrema importância para o sucesso do projeto. As equações que governam a dinâmica do escoamento sanguíneo numa artéria coronária serão desenvolvidas segundo a hipótese do meio contínuo. Dessa forma, os princípios de conservação de massa, de quantidade de movimento linear e de espécie química poderão ser utilizados. O sangue será considerado como um fluido incompressível, newtoniano e multifásico, como também o coeficiente difusivo será aproximado como constante. A equação de Navier-Stokes será apresentada segundo as variáveis primitivas (velocidade-pressão) com a equação de transporte de espécie química sem geração interna usando uma abordagem Lagrangeana-Euleriana Arbitrária (ALE) [4].

O desenvolvimento computacional será feito em linguagem C++/Python [6] [7] utilizando o paradigma de orientação a objetos com objetivo de reaproveitar o código em outras pesquisas e as equações de governo serão discretizadas em cima de uma malha tetraédrica não estruturada gerada através do software livre GMSH [11]. Devido a restrição Babuska-Brezzi [12] [13], serão utilizados elementos distintos para os campos de velocidade e de pressão. As equações serão discretizadas no tempo utilizando a expansão da série de Taylor e o Método semi-Lagrangeano

[8] será usado com o intuito de reduzir as oscilações espúrias que são características das equações do tipo convecção-difusão. A formulação de Galerkin [9] será utilizada para discretizarmos as equações no espaço.

Para solução do sistema de equações lineares oriundo da utilização do método de elementos finitos, deseja-se utilizar as técnicas mais modernas disponíveis em biblioteca pública de cálculo numérico. O emprego destas técnicas permitirá a utilização de diversos tipos de preconditionadores e métodos iterativos para uma eficiente solução do problema linear. A visualização da solução numérica encontrada através da solução do sistema linear será realizada através do software livre PARAVIEW [14], possibilitando alto nível de detalhamento da soluções numérica, através de cortes geométricos, interpolações e vetorização de campos.

5 Cronograma e Disciplinas

Este projeto visa ser desenvolvido no Laboratório de Transmissão e Tecnologia do Calor (LTTC) do Programa de Engenharia Mecânica da Coppe (PEM/COPPE). Tal laboratório dispõe de uma ampla infraestrutura, além de recursos computacionais de última geração, voltada a projetos de pesquisa, desenvolvimento e inovação em termociências, em diversas linhas, inclusive em simulações com o uso de métodos numéricos [10].

Para este projeto as seguintes metas serão propostas, conforme apresentado no cronograma a seguir:

1. No primeiro ano, concluir 100% da carga horária do curso com CRA superior a 2.0 e ser aprovador nas Fases I e II do Exame de Qualificação;
2. No segundo ano, concluir a Revisão Bibliográfica e iniciar a implementação do Código Numérico;
3. No terceiro ano, concluir a implementação e validação do código numérico;
4. No quarto ano, finalizar as simulações do problema proposto, publicar os resultados em canais de alto impacto e apresentar a Tese de Doutorado.

	2020		2021				2022				2023				2024		
ATIVIDADES	3P	4P	1P	2P	3P	4P	1P	2P	3P	4P	1P	2P	3P	4P	1P	2P	3P
DISCIPLINAS																	
EXAME DE QUALIFICAÇÃO																	
REVISÃO BIBLIOGRÁFICA																	
IMPLEMENTAÇÃO DO CÓDIGO NUMÉRICO																	
VALIDAÇÃO DO CÓDIGO NUMÉRICO																	
SIMULAÇÕES DO PROBLEMA PROPOSTO																	
PUBLICAÇÕES																	
APRESENTAÇÃO FINAL																	

As disciplinas a serem realizadas são:

1. COM774 - Métodos Matemáticos;
2. COM719 - Mecânica do Contínuo;
3. COM710 - Fundamentos da Mecânica dos Fluidos;
4. COM825 - Escoamento Bifásico;
5. COM795 - Análise Numérica;
6. COM737 - Geração Numérica de Malhas;

Referências

- [1] W. World Health Organization (WHO), “The top 10 causes of death,” www.who.int/news-room/fact-sheets/detail/the-top-10-causes-of-death, 2018. [Online; accessed 06-04-20 08:27pm].
- [2] B. Spring, J. Ockene, S. Gidding, D. Mozaffarian, S. Moore, M. Rosal, M. Brown, D. Vafiadis, D. Cohen, L. Burke, and D. Lloyd-Jones, “Better population health through behavior change in adults: a call to action,” *Circulation*, 2013.
- [3] U. Sigwart, J. Puel, V. Mirkovitch, F. Joffre, and L. Kappenberger, “Intravascular stents to prevent occlusion and restenosis after transluminal angioplasty,” *The New England Journal of Medicine*, 1987.
- [4] J. Donea, A. Huerta, J. Ponthot, and A. Rodríguez-Ferran, “Arbitrary lagrangian–eulerian methods,” *In Encyclopedia of Computational Mechanics*, 2004.
- [5] G. Batchelor, “An introduction to fluid dynamics,” *Cambridge University Press*, 1967.
- [6] I. C++, “Programming language c++,” <https://isocpp.org/std/the-standard>, 2014. [Online; accessed 06/30/20 3:45pm].
- [7] S. F. Python, “Python language reference, version 2.7,” <http://www.python.org/>, 1990. [Online; accessed 12/12/2017 12:18].
- [8] O. Pironneau, “On the transport-diffusion algorithm and its applications to the navier-stokes equations,” *Numer. Math.* 38, 309–332, 1982.
- [9] O. C. Zienkiewicz and Y. K. Cheung, “Finite elements in the solution of fiel problems,” *The Engineer*, 1965.
- [10] L. Laboratório de Transmissão e Tecnologia do Calor (LTTC) <https://www.coppe.ufrj.br/pt-br/pesquisa/laboratorios/laboratorio-de-transmissao-e-tecnologia-do-calor-lttc>, 2020. [Online; accessed 06-29-20 11:50pm].
- [11] C. Geuzaine and J. Remacle, “Gmsh: a three-dimensional finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities,” *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2009.
- [12] I. Babuska, “Error bounds for finite element method,” *Numerische Mathematik*, 1971.
- [13] F. Brezzi, “On the existence, uniqueness and approximation of saddle-point problems arising from lagrange multipliers,” *Revue française d’automatique, informatique, recherche opérationnelle. Analyse numérique.*, 1974.
- [14] A. Henderson, “Paraview guide, a parallel visualization application,” *Kitware Inc.*, 2007.