

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO

Gabriel dos Santos Oliveira

**DIFUSÃO DE MEDICAMENTOS A PARTIR DE STENTS  
FARMACOLÓGICOS EM ARTÉRIAS CORONÁRIAS**

RIO DE JANEIRO

2023

Gabriel dos Santos Oliveira

**DIFUSÃO DE MEDICAMENTOS A PARTIR DE STENTS  
FARMACOLÓGICOS EM ARTÉRIAS CORONÁRIAS**

Projeto de Graduação apresentado ao Curso de Engenharia Mecânica da Escola Politécnica, Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Engenheiro Mecânico.

Orientador: Gustavo Rabello dos Anjos

RIO DE JANEIRO


2023

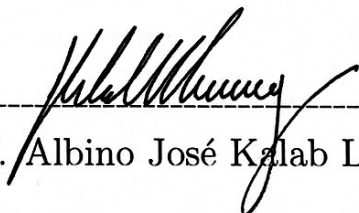
DIFUSÃO DE MEDICAMENTOS A PARTIR DE STENTS  
FARMACOLÓGICOS EM ARTÉRIAS CORONÁRIAS


Gabriel dos Santos Oliveira

PROJETO DE GRADUAÇÃO SUBMETIDO AO CORPO DOCENTE DO CURSO  
DE ENGENHARIA MECÂNICA DA ESCOLA POLITÉCNICA DA UNIVERSIDADE  
FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS  
PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE ENGENHEIRO MECÂNICO.

Examinado por:

  
-----  
Prof. Gustavo Rabello dos Anjos, Ph.D

  
-----  
Prof. Albino José Kalab Leiroz, Ph.D

  
-----  
Prof. Gabriel Lisbôa Verissimo, D.Sc

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL

JANEIRO DE 2023

Oliveira, Gabriel dos Santos

Difusão de Medicamentos a Partir de Stents Farmacológicos em Artérias Coronárias/ Gabriel dos Santos Oliveira. – Rio de Janeiro: UFRJ/ Escola Politécnica, 2023.

XV, 94 p.: 106 il.: 29,7 cm.

Orientador: Gustavo Rabello dos Anjos

Projeto de Graduação – UFRJ/ Escola Politécnica/ Curso de Engenharia Mecânica, 2023.

Referências Bibliográficas: p. 72-74

1. Introdução 2. Revisão Bibliográfica 3. Equações de Governo 4. Método de Elementos Finitos (MEF) 5. Malha 6. Validação dos Dados 7. Resultados 8. Resultados com Dados Reais 9. Conclusão.

I. Anjos, Gustavo Rabello dos. II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola Politécnica, Curso de Engenharia Mecânica. III. Título

Dedico este trabalho primeiramente a Deus, que jamais me abandonou e sempre me deu forças para que eu trilhasse meu caminho até aqui. Também a intercessão de Nossa Senhora que jamais há de abandonar um de seus filhos e tanto roga a Deus por mim.

Dedico também aos meus pais Antonio e Denilce, e a minha irmã Ana Carolina, sem os quais eu jamais teria conseguido chegar onde cheguei, seja devido ao apoio financeiro e estrutural ou ao simples suporte emocional e afetivo.

Por fim dedico também à minha esposa Thamirys que foi a maior incentivadora para que eu chegasse aqui, bem como meu enteado, Bernardo, pois ambos me incentivando e apoiando jamais deixaram que eu desistisse ou desanimasse.

## AGRADECIMENTOS

Agradeço em primeiro lugar ao professor Gustavo Rabello dos Anjos pela sua grande disponibilidade e dedicação na orientação deste trabalho.

Agradeço também, na pessoa do meu grande amigo Vitor Tavares Fontenele, a todos os meus amigos e colegas que tanto me apoiaram e me auxiliaram na compreensão das mais variadas matérias ao longo do curso, assim como agradeço de maneira especial a todos os professores que contribuíram de alguma forma para o meu acúmulo de conhecimento, sem os quais hoje eu não estaria aqui.

Agradeço também a minha família como que sempre apoiou e respeitou as minhas decisões, me incentivando e motivando a continuar a árdua batalha que é conquistar um diploma de ensino superior.

Gostaria de agradecer aos inúmeros amigos que sempre me incentivaram e estiveram ao meu lado (mesmo que não fisicamente) dentre os quais posso citar Deyvid Alves Mineiro, Francesco Comunalle Lima, Róger dos Santos Queiroz, Felipe Guedes dos Santos e William Apolinário de Paula.

Por, fim deixo minha gratidão à turma 64 do Curso de Formação de Oficiais do Corpo de Bombeiros Militar do Estado do Rio de Janeiro por sempre ter me apoiado e dado o suporte necessário para concluir o meu ensino superior.

Resumo do Projeto de Graduação apresentado à Escola Politécnica/UFRJ como parte dos requisitos necessário para a obtenção do grau de Engenheiro Mecânico.

Difusão de Medicamentos a Partir de Stents Farmacológicos em Artérias Coronárias

Gabriel dos Santos Oliveira

Janeiro/2023

Orientador: Gustavo Rabello dos Anjos

Curso: Engenharia Mecânica

Em pacientes com níveis elevados de colesterol do tipo LDL (Low Density Lipoprotein) há a tendência de formação de placas de ateroma no interior das artérias, obstruindo assim o fluxo sanguíneo. Em situações mais graves esse fluxo pode até mesmo ser interrompido levando o paciente a óbito. Este trabalho tem como objetivo a análise do escoamento do fluxo sanguíneo e a difusão de medicamentos em artérias coronarianas que possuem stents farmacológicos que foram colocados após procedimento de angioplastia. Os stents são hastes de metal introduzidas no interior das artérias, que visam proporcionar uma maior abertura no canal arterial, de forma a garantir a passagem de sangue no trecho. Neste trabalho foi utilizado o Método dos Elementos Finitos para a discretização do problema que foi simulado computacionalmente. O ponto principal do estudo é verificar como é dada a difusão de fármaco liberado nos stents em um problema com dados reais de fluxo sanguíneo, massa específica do sangue e difusividade do fármaco. Para tanto foram analisados dois fármacos distintos (Sirolimus e Paclitaxel) e cinco diferentes geometrias de stents.

*Palavras-chave:* Stent Farmacológico; Método de Elementos Finitos; Esquema Taylor-Galerkin; Formulação Corrente-Vorticidade; Número de Schmidt.

Abstract of Undergraduate Project presented to POLI/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Engineer.

Medicine Diffusion from Drug-eluting Stents in Coronary Arteries

Gabriel dos Santos Oliveira

January/2023

Advisor: Gustavo Rabello dos Anjos

Course: Mechanical Engineering

In patients with high levels of LDL cholesterol (Low Density Lipoprotein) there is a tendency to form atheromatous plaques inside the arteries, obstructing blood flow. In serious situations, this flow can even be interrupted, leading the patient to death. This work aims to analyze the configuration of blood flow and the diffusion of drugs in coronary arteries that have drug-eluting stents that were placed after the angioplasty procedure. Stents are metal rods inserted into the arteries, which aim to provide an opening in the arteries, in order to guarantee the passage of blood in a certain stretch. In this work, the Finite Element Method was used to discretize the problem that was computationally simulated. The main goal of the study is to verify how diffusion of drug released in stents occurs in a problem with real data on blood flow, blood density and drug diffusivity. For this purpose, two different drugs (Sirolimus and Paclitaxel) and five different stent geometries were analyzed.

*Keywords:* Drug-Eluting Stents; Finite Element Method; Taylor-Galerkin Scheme; Stream-Vorticity Formulation; Schmidt Number.

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Revisão Bibliográfica</b>	<b>4</b>
2.1	Método dos Elementos Finitos (MEF) . . . . .	4
2.2	A Utilização de Stents . . . . .	7
<b>3</b>	<b>Equações de Governo</b>	<b>9</b>
3.1	Conservação de Massa . . . . .	9
3.2	Conservação da Quantidade de Movimento . . . . .	10
3.3	Formulação Corrente - Vorticidade . . . . .	12
3.4	Conservação da Espécie Química . . . . .	14
3.5	Adimensionalização . . . . .	16
<b>4</b>	<b>Método de Elementos Finitos (MEF)</b>	<b>18</b>
4.1	O Método . . . . .	18
4.2	As Matrizes dos Casos Estudados . . . . .	24
4.3	Termo Convectivo . . . . .	25
<b>5</b>	<b>Malha</b>	<b>29</b>
5.1	Geração da Malha . . . . .	29
5.2	As Malhas Utilizadas . . . . .	30
<b>6</b>	<b>Validação e Verificação dos Dados</b>	<b>33</b>
6.1	Escoamento de Poiseuille . . . . .	33
6.2	Escoamento de Lid-Driven . . . . .	35
6.3	Escoamento Degrau . . . . .	37
<b>7</b>	<b>Resultados</b>	<b>40</b>
7.1	Considerações Gerais . . . . .	40
7.2	Stent Atual . . . . .	45
7.3	Stent Atual Fletido . . . . .	47
7.4	Stent Circular . . . . .	52
7.5	Stent Circular Fletido . . . . .	55

7.6	Stent com Geometria Aleatória . . . . .	57
<b>8</b>	<b>Resultados com Dados Reais</b>	<b>61</b>
8.1	Stent Atual . . . . .	62
8.2	Stent Atual Fletido . . . . .	63
8.3	Stent Circular . . . . .	65
8.4	Stent Circular Fletido . . . . .	66
8.5	Geometria Aleatória . . . . .	67
<b>9</b>	<b>Conclusão</b>	<b>69</b>
<b>A</b>	<b>Resultados Complementares</b>	<b>75</b>
A.1	Soluções referentes ao capítulo "Resultados	75
A.1.1	Resultados complementares da geometria stent atual aos 6s . . . . .	75
A.1.2	Resultados complementares da geometria stent atual fletido aos 6s .	78
A.1.3	Resultados complementares da geometria stent circular aos 6s . . .	81
A.1.4	Resultados complementares da geometria stent circular fletido aos 6s	84
A.1.5	Resultados complementares da geometria aleatória aos 6s . . . . .	87
A.2	Soluções referentes ao capítulo "Resultados com Dados Reais	90
A.2.1	Resultados complementares da geometria stent atual aos 500s . . .	90
A.2.2	Resultados complementares da geometria stent atual fletido aos 500s	91
A.2.3	Resultados complementares da geometria stent circular aos 500s . .	92
A.2.4	Resultados complementares da geometria stent circular fletido aos 500s . . . . .	93
A.2.5	Resultados complementares da geometria aleatória aos 500s . . . .	94

## Lista de Figuras

1	Exemplo de Utilização do MEF . . . . .	4
2	Comparação de Taylor-Galerkin com demais métodos. Legenda na imagem.	6
3	Diferença entre stent com balão e o stent farmacológico atual . . . . .	8
4	Tensões sobre um elemento de fluido na direção $x$ . . . . .	11
5	Função de forma linear no caso unidimensional . . . . .	20
6	Função de forma quadrática no caso unidimensional . . . . .	21
7	Sistema linear resultante da discretização do MEF explicitando como é dado o mecanismo de montagem <i>Assembling</i> das matrizes globais . . . . .	23
8	Elemento triangular linear . . . . .	24
9	Vorticidade (aqui representada por $\phi$ ) no domínio espaço-tempo . . . . .	26
10	Exemplo de malha triangular com os elementos e vértices numerados . . . . .	29
11	Stent Atual. . . . .	30
12	Stent Atual Fletido. . . . .	30
13	Stent Circular. . . . .	31
14	Stent Circular Fletido . . . . .	31
15	Stent com Geometria Aleatória . . . . .	31
16	Escoamento de Poiseuille . . . . .	33
17	Condições de Contorno . . . . .	34
18	Resultado obtido para Poiseuille . . . . .	35
19	Esquema do escoamento de Lid-Driven Cavity Flow com as devidas condições de contorno. . . . .	36
20	Perfil de velocidades $u$ em $x=0.5$ . . . . .	36
21	Perfil de velocidades $v$ em $y=0.5$ . . . . .	37
22	Condições de Contorno do Escoamento Degrau . . . . .	38
23	$u(y)$ em $x=6$ . . . . .	39
24	Condições de Contorno do Problema . . . . .	40
25	Frames sequenciais de diferentes instantes de tempo de $u$ . Gráficos de $u$ x $y$ .	43
26	Difusão com $Sc=0.1$ . . . . .	46
27	Difusão com $Sc=1.0$ . . . . .	47
28	Difusão com $Sc=10.0$ . . . . .	48
29	Difusão com $Sc=0.1$ . . . . .	49

30	Difusão com $Sc=1.0$ . . . . .	50
31	Difusão com $Sc=10.0$ . . . . .	51
32	Difusão com $Sc=0.1$ . . . . .	52
33	Difusão com $Sc=1.0$ . . . . .	53
34	Difusão com $Sc=10.0$ . . . . .	54
35	Difusão com $Sc=0.1$ . . . . .	55
36	Difusão com $Sc=1.0$ . . . . .	56
37	Difusão com $Sc=10.0$ . . . . .	57
38	Difusão com $Sc=0.1$ . . . . .	58
39	Difusão com $Sc=1.0$ . . . . .	59
40	Difusão com $Sc=10.0$ . . . . .	60
41	Condições de Contorno do Problema . . . . .	62
42	Difusão com $Sc$ na ordem de $10^7$ . . . . .	63
43	Difusão com $Sc$ na ordem de $10^7$ . . . . .	64
44	Difusão com $Sc$ na ordem de $10^7$ . . . . .	65
45	Difusão com $Sc$ na ordem de $10^7$ . . . . .	67
46	Difusão com $Sc$ na ordem de $10^7$ . . . . .	68
47	Função Corrente. $Sc=0.1$ . . . . .	75
48	$V_x$ . $Sc=0.1$ . . . . .	75
49	$V_y$ . $Sc=0.1$ . . . . .	75
50	Função Corrente. $Sc=1.0$ . . . . .	76
51	$V_x$ . $Sc=1.0$ . . . . .	76
52	$V_y$ . $Sc=1.0$ . . . . .	76
53	Função Corrente. $Sc=10.0$ . . . . .	77
54	$V_x$ . $Sc=10.0$ . . . . .	77
55	$V_y$ . $Sc=10.0$ . . . . .	77
56	Função Corrente. $Sc=0.1$ . . . . .	78
57	$V_x$ . $Sc=0.1$ . . . . .	78
58	$V_y$ . $Sc=0.1$ . . . . .	78
59	Função Corrente. $Sc=1.0$ . . . . .	79
60	$V_x$ . $Sc=1.0$ . . . . .	79
61	$V_y$ . $Sc=1.0$ . . . . .	79

62	Função Corrente. $Sc=10.0$ . . . . .	80
63	$V_x$ . $Sc=10.0$ . . . . .	80
64	$V_y$ . $Sc=10.0$ . . . . .	80
65	Função Corrente. $Sc=0.1$ . . . . .	81
66	$V_x$ . $Sc=0.1$ . . . . .	81
67	$V_y$ . $Sc=0.1$ . . . . .	81
68	Função Corrente. $Sc=1.0$ . . . . .	82
69	$V_x$ . $Sc=1.0$ . . . . .	82
70	$V_y$ . $Sc=1.0$ . . . . .	82
71	Função Corrente. $Sc=10.0$ . . . . .	83
72	$V_x$ . $Sc=10.0$ . . . . .	83
73	$V_y$ . $Sc=10.0$ . . . . .	83
74	Função Corrente. $Sc=0.1$ . . . . .	84
75	$V_x$ . $Sc=0.1$ . . . . .	84
76	$V_y$ . $Sc=0.1$ . . . . .	84
77	Função Corrente. $Sc=1.0$ . . . . .	85
78	$V_x$ . $Sc=1.0$ . . . . .	85
79	$V_y$ . $Sc=1.0$ . . . . .	85
80	Função Corrente. $Sc=10.0$ . . . . .	86
81	$V_x$ . $Sc=10.0$ . . . . .	86
82	$V_y$ . $Sc=10.0$ . . . . .	86
83	Função Corrente. $Sc=0.1$ . . . . .	87
84	$V_x$ . $Sc=0.1$ . . . . .	87
85	$V_y$ . $Sc=0.1$ . . . . .	87
86	Função Corrente. $Sc=1.0$ . . . . .	88
87	$V_x$ . $Sc=1.0$ . . . . .	88
88	$V_y$ . $Sc=1.0$ . . . . .	88
89	Função Corrente. $Sc=10.0$ . . . . .	89
90	$V_x$ . $Sc=10.0$ . . . . .	89
91	$V_y$ . $Sc=10.0$ . . . . .	89
92	Função Corrente. . . . .	90
93	$V_x$ . . . . .	90

94	$V_y$ . . . . .	90
95	Função Corrente. . . . .	91
96	$V_x$ . . . . .	91
97	$V_y$ . . . . .	91
98	Função Corrente. . . . .	92
99	$V_x$ . . . . .	92
100	$V_y$ . . . . .	92
101	Função Corrente. . . . .	93
102	$V_x$ . . . . .	93
103	$V_y$ . . . . .	93
104	Função Corrente. . . . .	94
105	$V_x$ . . . . .	94
106	$V_y$ . . . . .	94

## Lista de Tabelas

1	Variáveis da equação de conservação de massa. . . . .	9
2	Variáveis da equação da quantidade de movimento. . . . .	12
3	Variáveis da formulação corrente-vorticidade . . . . .	14
4	Variáveis da equação de conservação da espécie química. . . . .	15

# 1 Introdução

O presente trabalho tem como objetivo a análise do escoamento sanguíneo em artérias coronárias que foram submetidas ao procedimento de angioplastia com colocação de stents farmacológicos. Esse procedimento cirúrgico é um dos mais comuns de serem realizados pela medicina contemporânea, por ser considerado de simples execução. Doenças cardiovasculares são a principal causa de morte no século XXI de acordo com a OMS, o que corrobora com a relevância da realização de estudos como este no âmbito acadêmico.

Este trabalho contribui ainda com aquele desenvolvido por *Gomes*(1) que explorou o escoamento e a difusão da espécie química em artérias coronárias com diferentes graus de restrição geométrica. A abordagem do presente estudo visa, no entanto, a investigação da influência da constante conhecida como número de Schmidt na análise de CFD (Computational Fluid Dynamics) do escoamento sanguíneo em artérias coronárias com stent farmacológico.

Nesse estudo os dados serão obtidos a partir da utilização do Método de Elementos Finitos (MEF) na discretização dimensional para a modelagem do problema corrente-vorticidade e difusão da espécie química. Em conjunto com tal método, o método das diferenças finitas também será utilizado, mas apenas para a discretização temporal do problema. Essa combinação de ambos os métodos é comum e já foi utilizado por diversos outros pesquisadores do mesmo tema como *Donea* (2), *Bozsak* (3), *Thomas* (4), entre outros.

Não é objetivo fazer uma análise numérica precisa, mas sim um estudo qualitativo para avaliar a resposta do método diante de diferentes valores para um mesmo problema. Também não está no escopo deste trabalho uma análise de como os resultados aqui obtidos influenciariam na técnica medicinal que atualmente é empregada nos procedimentos de angioplastia.

Neste trabalho foram feitas comparações entre diferentes valores de número de Schmidt, para poder melhor compreender a importância da constante na formulação do problema. Foram utilizados ainda valores próximos dos reais para as constantes de Reynolds e Schmidt. A utilização de geometrias correlatas também auxilia muito na comparação de

diferentes casos, pois podem ser entendidas como antes e depois de uma situação real: o stent pode ser entendido como uma haste reta que posteriormente cede e sofre flexão devido às placas de ateroma, ou do contrário, ele pode ser inserido fletido e forçar a revascularização da artéria.

No segundo capítulo será apresentado um breve histórico sobre a criação do método de elementos finitos (MEF) e como ele vem sendo desenvolvido através da metade final do século XX e do século XXI. Também será abordada a importância e a história da colocação e implementação dos stents farmacológicos na revascularização sanguínea de pacientes com problemas de colesterol alto.

Já no capítulo de número três serão apresentadas as equações utilizadas neste estudo, bem como a origem e o desenvolvimento delas. Também serão construídas suas formas adimensionais, que efetivamente estarão inseridas na formulação do problema.

No número quatro o MEF será construído e demonstrado com exemplos simples. Parte importante na formulação do objetivo principal desse estudo, a formulação do efeito convectivo utilizando o método Galerkin Característico (ou Petrov-Galerkin), também é demonstrada neste capítulo.

O capítulo cinco aborda a criação da malha utilizada no MEF, e sintetiza a importância de sua montagem na resolução do problema. Explica ainda as malhas que serão utilizadas para obter os resultados aqui desejados.

O capítulo de número seis é de extrema importância, pois é ele que valida todos os resultados encontrados. Através da resolução já consolidada de problemas simples é possível comprovar que a programação está correta e que os resultados futuros possuem confiabilidade comprovada.

O sétimo capítulo trás um comparativo entre diferentes números de Schmidt e diferentes geometrias de stents. Dessa forma é possível analisar a influência de diferentes variáveis em um mesmo problema.

No oitavo capítulo, o problema desenvolvido no capítulo sete é retomado, porém com dados reais de massa específica do sangue, difusividade dos fármacos e e viscosidade do sangue. É feita então uma análise de como valores elevados de número de Schmidt podem interferir no problema e gerar resultados relevantes em algumas geometrias utilizadas. Bem como é evidenciada a importância da formulação do método Galerkin Característico para a maior precisão dos dados obtidos computacionalmente.

## 2 Revisão Bibliográfica

### 2.1 Método dos Elementos Finitos (MEF)

Com o passar dos anos o ser humano desenvolveu os mais diversos tipos de modelos matemáticos para descrever fenômenos físicos. Existem equações de movimento, quantidade de movimento, de conservação de energia, de transferência de calor, da distribuição de tensões em um corpo entre diversas outras. Conforme foram evoluindo os estudos e pesquisas, a modelagem dos problemas foi adquirindo cada vez maior complexidade, exigindo também um maior grau de recursos matemáticos. Assim, hoje a maioria das modelagens matemáticas é feita utilizando-se equações integrais ou diferenciais. Entretanto, a maioria dessas equações não possui resultados analíticos, a não ser em casos com geometria extremamente simples como retangulares ou circulares.

Todavia, os problemas em engenharia se tornaram cada vez mais detalhados e complicados, de forma que os poucos resultados analíticos existentes em casos com geometria simples não correspondem a situações cotidianas. No intuito de resolver esses problemas até então sem soluções, começaram a surgir métodos numéricos dos mais variados, que ao invés de calcularem uma resposta exata, buscam encontrar aproximações cada vez mais precisas para os problemas. Dessa forma, mesmo que os valores reais sejam desconhecidos, as aproximações encontradas podem ser tão boas que se tornam mais do que o suficiente para a aplicação desejada.

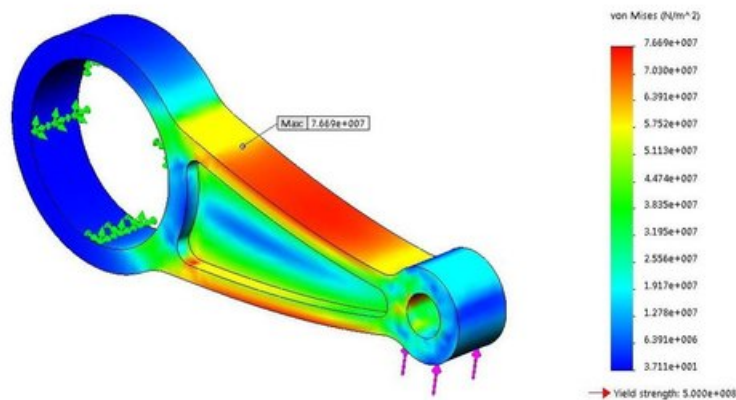


Figura 1: Exemplo de Utilização do MEF (5)

Uma vez que buscava-se e necessitava-se a criação de ferramentas mais poderosas para o cálculo de problemas reais, foi desenvolvido o MEF nos anos 50, conforme cita *Fish* (6). Nesse período, houve grandes investimentos na chamada "corrida aeroespacial" que o mundo vivenciava no contexto de Guerra Fria, o que proporcionou excelente oportunidade para o desenvolvimento e aprimoramento de novas técnicas empregadas nas mais diversas tecnologias.

Em 1956 *Turner* (7) publicou o primeiro artigo com as ideias principais do método, entretanto ainda não havia aparecido o termo "elementos finitos". Já em 1960, *Clough* (8), que já havia participado do trabalho com *Turner*, utilizou pela primeira vez o termo "elementos finitos". No início dos anos 60, vários matemáticos mostraram que os resultados obtidos pelo método convergiam para os valores reais conforme era aumentado o número de elementos dentro do domínio. Então em 1965 a NASA fundou um grande projeto no valor de \$3.000.000 para desenvolver melhor o método, o que culminou na criação das mais variadas possibilidades de geometrias e funções de forma que ainda não haviam sido estudadas. Posteriormente, matemáticos descobriram um artigo de *Courant* (9) no qual ele utilizou elementos triangulares com princípios variacionais para resolver problemas de vibração. Assim, alguns estudiosos reivindicam a *Courant* a autoria do método.

Segundo *Anjos* (10), ao longo dos anos o MEF, foi subutilizado para a resolução de problemas de transferência de calor e de mecânica dos fluidos devido a existência do termo convectivo em suas respectivas equações. Esse termo gera oscilações espúrias nos resultados encontrados e o problema acaba não convergindo para a solução correta nos casos em que o número de Reynolds, por exemplo, é muito elevado. Ainda conforme *Anjos*, o forte acoplamento entre pressão e velocidade nas equações de mecânica dos fluidos, gera alta não-linearidade no problema, produzindo operadores não simétricos e que possuem difícil solução.

Em 1976, foi desenvolvida a formulação de *Petrov-Galerkin* por *Christie* (11). O trabalho foi inovador por apresentar uma análise dos elementos triangulares (que já eram utilizados) utilizando-se funções peso quadráticas ao invés de lineares. Essa mudança na abordagem do problema culminou na convergência das soluções que antes oscilavam. Já em 1977 *Heinrich* (12) complementou os estudos de *Christie* aplicando um esquema

*upwind* tanto em casos 1D quanto 2D.

No ano de 1982, *Brooks e Hughes* (13) desenvolveram um novo conceito de elementos finitos com o método Petrov-Galerkin. Esse método consiste em variar as funções peso de forma a desequilibrá-la para o elemento anterior, para assim eliminar as oscilações nos resultados. A efetividade do método foi comprovada para valores de Reynolds de até 100.

Já em 1984, *Donea* (2) propôs o esquema nomeado de *Taylor-Galerkin* para resolver o problema da não-convergência nos cálculos de equações que apresentavam o termo convectivo. A inovação trazida por *Donea* foi que ao invés de se variar a função peso, ele passa a utilizar termos de mais alta ordem na série de Taylor para reduzir as oscilações espúrias. Sendo assim, é possível que se utilize matrizes globais simétricas que otimizarão o gasto computacional para a resolução de problemas, conforme cita *Amaral* (14).

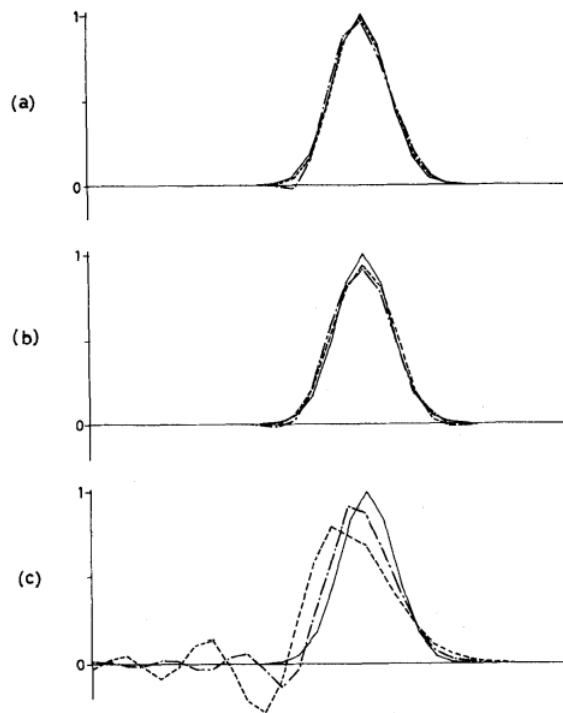


Figure 3. Solutions of  $u_t = au_x$  by (a) CNTG scheme (31), (b) Crank-Nicolson-Petrov-Galerkin,<sup>5</sup> (c) Crank-Nicolson-Galerkin (—, exact; ---,  $C=0.45$ ; -.-,  $C=0.90$ )

Figura 2: Comparação de Taylor-Galerkin com demais métodos. Legenda na imagem.  
(2)

*Amaral* em 2020 teve como enfoque o estudo dos campos de concentração nas mais variadas geometrias de stent farmacológico. O intuito era verificar as geometrias mais e menos eficientes na difusão química. Em 2021 *Gomes* (1) teve como foco os campos de velocidades e concentração para diferentes níveis de restrições geométricas. Foram avaliados 15 cenários diferentes com uma ou duas restrições para se atingir os objetivos propostos.

## 2.2 A Utilização de Stents

A colocação de stents farmacológicos é um dos procedimentos cirúrgicos mais comuns na medicina atual em todo o mundo. Eles fazem parte do procedimento de angioplastia que é realizado para a revascularização de vasos com fluxo parcialmente ou totalmente interrompido. Essa revascularização é necessária devido a formação de placas de ateroma nas paredes dos vasos. Essas placas são agressões à parede do vaso sanguíneo devido a fatores de risco como o aumento nos níveis de colesterol LDL (Low Density Lipoprotein), a hipertensão, o diabetes e o tabagismo. O estudo na área é de extrema importância pois, segundo a OMS, doenças cardíacas continuam sendo a principal causa de morte no planeta.

Segundo *Tomberli et. al* (15), em 1963 *Dotter* e seu trainee *Judkins* acidentalmente recanalizaram uma artéria ilíaca fechada durante um procedimento de aortografia com uso de um cateter. Já em 1977 *Gruentzig* realizou o primeiro procedimento de inserção percutânea de um stent do tipo balão em um paciente consciente. Esse feito revolucionou o tratamento da Doença Arterial Coronariana (DAC). No ano de 1986 foi implantado o primeiro stent auto-expansível por *Puel* e *Sigwart*. Em 1999, *Sousa* revolucionou o tratamento da DAC implantando o primeiro stent com eluidor de medicamentos no mundo, o chamado stent farmacológico, que é o alvo principal de estudo desse trabalho. Nesse primeiro momento os únicos medicamentos utilizados eram o Sirolimus e o Paclitaxel.

Conforme *Moses et. al* (17), a utilização de stents eluidores reduziu em larga escala a possibilidade de reestenose nos pacientes. Para chegar a essa conclusão foi realizado um estudo clínico com mais de 1000 pacientes em 53 centros de saúde nos Estados Unidos.

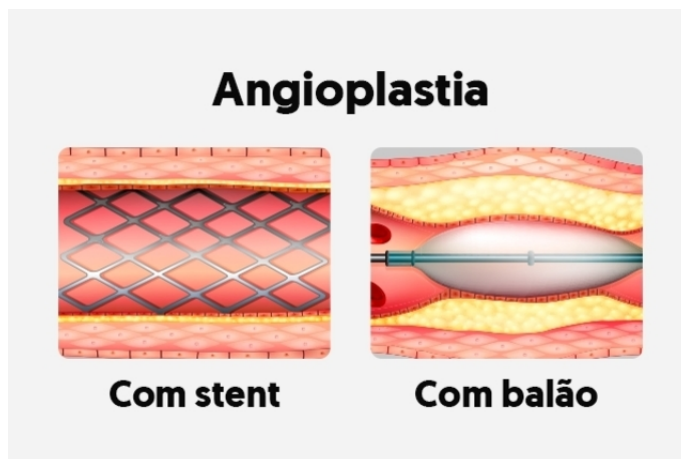


Figura 3: Diferença entre stent com balão e o stent farmacológico atual (16)

A evolução tecnológica na fabricação e utilização dos stents tem sido constante desde a sua primeira aparição em 1963. Com o advento de novas técnicas hoje já existem stents farmacológicos com polímeros duráveis, com polímeros biorreabsorvíveis e até mesmo com materiais não-poliméricos, conforme cita *Silva et. al* (18). O autor cita também a utilização de diversos outros tipos de fármacos nos stents como o Zotarolimus, o Everolimus e o Biolimus.

A despeito da simulação computacional, com a utilização do MEF, da difusão de fármacos nas artérias com stents, podem ser citados inúmeros trabalhos dentre os quais *Bozsak et. al* (3) e *Lucena et. al* (19). O primeiro simulou casos de controvérsia entre os estudiosos envolvendo a utilização do fármaco (Paclitaxel ou Sirolimus) e como as diferenças de geometria entre os DES (drug-eluting stents) e os DCB (drug-coated balloons) implicariam nisso. Já o trabalho de *Lucena et. al* mostrou a influência da saúde do paciente na utilização do stent, pois demonstrou a grande interferência que as propriedades da parede da artéria têm no sucesso da implementação. Para isso as paredes da artéria foram simuladas como sendo um meio poroso, anisotrópico e axissimétrico.

### 3 Equações de Governo

#### 3.1 Conservação de Massa

Conforme cita *Fox* (20), para se chegar a equação de conservação de massa, deve-se primeiro compreender o Teorema de Transporte de Reynolds que é dado pela equação

$$\left(\frac{dN}{dt}\right)_{sistema} = \frac{\partial}{\partial t} \int_{VC} \eta \rho dV + \int_{SC} \eta \rho \mathbf{v} \cdot d\mathbf{A} \quad (1)$$

Sendo  $N$  e  $\eta$ , respectivamente, uma propriedade extensiva do sistema e um valor dependente de  $N$ . No caso particular da conservação de massa teremos que  $N=M$  e  $\eta=1$ . A equação (1) então se torna:

$$\left(\frac{dM}{dt}\right)_{sistema} = \frac{\partial}{\partial t} \int_{VC} \rho dV + \int_{SC} \rho \mathbf{v} \cdot d\mathbf{A} \quad (2)$$

As variáveis estão indicada pela Tabela 1. A equação é função do tempo e do espaço.

massa	M
massa específica	$\rho$
velocidade	$\mathbf{v}$

Tabela 1: Variáveis da equação de conservação de massa.

É possível separar a equação (2) em três partes e assim analisá-la termo a termo. O termo à esquerda é a taxa de variação da propriedade extensiva (nesse caso, a massa). O primeiro termo após o sinal de igual representa a taxa de variação da quantidade de massa dentro do volume de controle. Por fim, o último termo da equação representa a taxa na qual a massa está saindo da superfície de controle.

Como a massa do sistema permanece constante (não há geração de massa) tem-se que:

$$\left(\frac{dN}{dt}\right)_{sistema} = 0 \quad (3)$$

Com uma manipulação algébrica advinda do Teorema de Gauss, a equação (2) finalmente pode ser escrita como:

$$\int_V \left[ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) \right] dV = 0 \quad (4)$$

Como  $dV \neq 0$  (o volume de controle não pode ser zero), a equação (4) se torna:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (5)$$

A equação (5) é conhecida como *Equação da Continuidade*. Ela é função da massa específica do fluido  $\rho$ , e do campo de velocidade  $\mathbf{V}$  (que no caso a ser estudado é bidimensional). O gradiente pode ser definido como:

$$\nabla = \left[ \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y} \right] \quad (6)$$

Desenvolvendo a equação (5) tem-se que:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \rho + \rho \nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (7)$$

Será adotado na modelagem o sangue como um fluido incompressível, dessa forma  $\rho$  não é função nem do tempo nem do espaço. Pode-se ainda desenvolver o gradiente, para que então se chegue à forma final da equação da continuidade para um fluido incompressível (a equação que será utilizada nos cálculos do presente trabalho).

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (8)$$

### 3.2 Conservação da Quantidade de Movimento

Com o objetivo de se obter uma equação que descreva corretamente o movimento de um fluido, podemos aplicar a Segunda Lei de Newton no sistema em estudo. Temos que a Segunda Lei de Newton para um sistema é:

$$\mathbf{F} = \left. \frac{d\mathbf{P}}{dt} \right)_{\text{sistema}} \quad (9)$$

e a quantidade de movimento linear  $\mathbf{P}$  do sistema pode ser reescrita como:

$$\mathbf{P}_{sistema} = \int_{massa(sistema)} \mathbf{v} dm. \quad (10)$$

A estratégia passa a ser então aplicar essas duas equações básicas em um elemento infinitesimal do fluido. Faz-se um balanço de forças no fluido conforme a Figura 4 e então aplica-se a Segunda Lei de Newton para se obter uma equação que represente a dinâmica dessa partícula fluida.

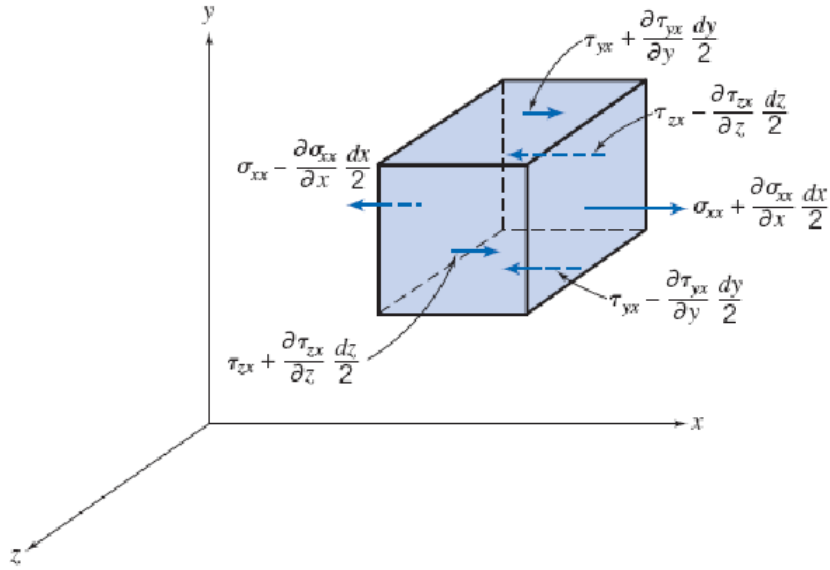


Figura 4: Tensões sobre um elemento de fluido na direção x (20)

O mesmo que foi feito na Figura (4) pode ser extrapolado para as dimensões y e z. Após considerar-se a influência do campo gravitacional, e utilizando-se expressões complexas para as tensões (tanto cisalhantes quanto axiais) tridimensionais, chega-se finalmente nas equações diferenciais do movimento de um fluido. Sob as condições de viscosidade constante e fluido incompressível, essas equações tornam-se as famosas equações de *Navier-Stokes*:

$$\rho \left( \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} \right) = \rho g_x - \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) \quad (11)$$

$$\rho \left( \frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} \right) = \rho g_y - \frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left( \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) \quad (12)$$

$$\rho \left( \frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} \right) = \rho g_z - \frac{\partial p}{\partial z} + \mu \left( \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) \quad (13)$$

Tendo em vista uma escrita mais compacta das equações de *Navier-Stokes* a fim de facilitar a aplicação dela nos cálculos que virão, é possível reescrevê-la na forma vetorial em função da viscosidade cinemática  $\nu = \mu/\rho$

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{g} \quad (14)$$

pressão	p
viscosidade cinemática	$\nu$
gravidade	g

Tabela 2: Variáveis da equação da quantidade de movimento.

### 3.3 Formulação Corrente - Vorticidade

A equação (14) descreve completamente o movimento de um fluido newtoniano, em escoamento incompressível e com viscosidade constante. Entretanto ela possui duas variáveis: velocidade e pressão. Com isso, ela necessita de mais uma equação para ser solucionada, que é a equação da conservação de massa (8).

Esse acoplamento entre velocidade e pressão implica numa dificuldade a mais na resolução do problema. A formulação Corrente-Vorticidade surge com o objetivo de realizar o desacoplamento desses dois problemas. Dessa forma, não é necessário resolver o campo de pressão para que se encontre o campo de velocidade. Com o intuito de facilitar resolução a resolução da equação (14) pode-se manipula-lá algebricamente com a aplicação de algumas identidades vetoriais.

Aplicando o rotacional em toda a equação:

$$\nabla \times \left( \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right) = \nabla \times \left( -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{g} \right) \quad (15)$$

Aplicando a identidade trigonométrica para abrir o produto escalar tem-se que:

$$\nabla \times \left( \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \frac{v^2}{2} - \mathbf{v} \times \nabla \times \mathbf{v} \right) = \nabla \times \left( -\frac{1}{\rho} \nabla \mathbf{p} + \nu \nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{g} \right) \quad (16)$$

Aplicando a distributiva nos parênteses em ambos os lados:

$$\frac{\partial(\nabla \times \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla \times \nabla \frac{v^2}{2} - \nabla \times (\mathbf{v} \times \nabla \times \mathbf{v}) = -\frac{1}{\rho} \nabla \times \nabla \mathbf{p} + \nu \nabla^2 (\nabla \times \mathbf{v}) + \nabla \times \mathbf{g} \quad (17)$$

Por definição, o rotacional do gradiente de um escalar é sempre igual a zero. Bem como o rotacional da gravidade também é igual a zero, pois aqui ela é considerada como constante. Assim, a equação (17) pode ser escrita como:

$$\frac{\partial(\nabla \times \mathbf{v})}{\partial t} - \nabla \times (\mathbf{v} \times \nabla \times \mathbf{v}) = \nu \nabla^2 (\nabla \times \mathbf{v}) \quad (18)$$

O vetor descrito pelo produto vetorial  $\nabla \times \mathbf{v}$  é definido como **rotacional**  $\omega$ . A vorticidade está relacionada com a rotação das partículas durante o movimento de um fluido. Todo escoamento viscoso possui vorticidade não nula. Aplicando essa definição na equação (18) e abrindo o produto vetorial remanescente em dois produtos escalares, tem-se que:

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \omega - \omega \cdot \nabla \mathbf{v} = \nu \nabla^2 \omega \quad (19)$$

Nesse estudo, a simulação computacional será realizada no modelo simplificado para duas dimensões (2D). Sendo assim, o terceiro termo do lado esquerdo valerá zero - produto escalar entre dois vetores ortogonais. Portanto, a equação (19) será reduzida para:

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \omega = \nu \nabla^2 \omega \quad (20)$$

A equação (20) é a equação de transporte da vorticidade para o caso de um fluido newtoniano, incompressível e em um escoamento bidimensional. É a equação que será trabalhada no presente estudo.

A velocidade pode então ser calculada a partir da definição do escalar função corrente  $\psi$ . As velocidades  $v_x$  e  $v_y$ , respectivamente nos eixos x e y, podem se obtidas então por:

$$v_x = \frac{\partial \psi}{\partial y} \quad (21)$$

$$v_y = -\frac{\partial \psi}{\partial x} \quad (22)$$

Pode-se então aplicar a definição da vorticidade para um escoamento bidimensional. Logo:

$$\omega = \nabla \times \mathbf{v} = \frac{\partial v_y}{\partial x} - \frac{\partial v_x}{\partial y} \quad (23)$$

Juntando as equações (21), (22) e (23) obtêm-se:

$$\omega = -\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial \psi}{\partial y} \quad (24)$$

$$\omega = -\nabla^2 \psi \quad (25)$$

A equação (25) é enfim a formulação corrente-vorticidade.

vorticidade	$\omega$
função corrente	$\psi$

Tabela 3: Variáveis da formulação corrente-vorticidade

### 3.4 Conservação da Espécie Química

Assim como nos dois casos anteriores de conservação, também é possível atingir a equação que modela a difusão de uma espécie química por meio de um balanço em um volume de controle. A equação (1) torna-se então:

$$\left. \frac{dR}{dt} \right)_{\text{sistema}} = \frac{\partial}{\partial t} \int_{VC} c dV + \int_{SC} (c\mathbf{v} + D\nabla c) \cdot d\mathbf{A} \quad (26)$$

Onde  $c$  é a concentração do soluto. No caso estudado, ela é função do tempo  $t$ , e das coordenadas  $x$  e  $y$ .

A equação(26) pode ser melhor escrita tornando-se:

$$\int_{VC} \dot{R}d\mathcal{V} = \frac{\partial}{\partial t} \int_{VC} cd\mathcal{V} + \int_{SC} (c\mathbf{v} + D\nabla c) \cdot d\mathbf{A} \quad (27)$$

Conforme explicado por *Bird et. al* (21), o termo à esquerda representa a taxa de produção de massa do sistema como um todo. Após o sinal de igual, o primeiro termo é a taxa de aumento de massa no volume de controle. A integral na superfície de controle - o último termo da equação - é composta por duas partes: a primeira representa a taxa líquida de adição de massa por convecção (que é função do campo de velocidade) já a segunda parte é a taxa líquida de adição de massa por difusão (que é função da difusibilidade D do soluto no solvente).

Após aplicação do Teorema de Gauss na integral da superfície de controle, e de certa manipulação algébrica, a equação (27) torna-se:

$$\int_{VC} \left[ \frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (c\mathbf{v}) - \nabla \cdot (D\nabla c) - \dot{R} \right] d\mathcal{V} = 0 \quad (28)$$

Como o volume de controle não pode ser igual a zero ( $dV \neq 0$ ), assim como nos casos anteriores, a integral pode desaparecer. Desenvolvendo os termos que estão em parênteses, considerando que a difusibilidade D é constante, e rearrumando a equação, chega-se a:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla c + c\nabla \cdot \mathbf{v} = D\nabla^2 c + \dot{R} \quad (29)$$

concentração	c
difusibilidade	D
taxa de geração de massa de soluto	$\dot{R}$

Tabela 4: Variáveis da equação de conservação da espécie química.

Conforme a conservação de massa (equação de continuidade), tem-se que  $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$ . No sistema estudado nesse trabalho, também não será considerada geração de massa, sendo assim  $\dot{R} = 0$ . Sendo assim, a equação (18) se reduz a:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla c = D\nabla^2 c \quad (30)$$

A equação (30) é a que será utilizada no escopo desse estudo. Conforme as particularidades do problema aqui apresentadas (fluido incompressível, coeficiente de difusão constante e sem geração de massa), a equação (30) pode ser chamada de *Equação de Transporte da Espécie Química*.

### 3.5 Adimensionalização

Para que se tenha maior facilidade na análise dos cálculos de mecânica dos fluidos, foi formulada a técnica de adimensionalização das equações. Essa técnica consiste em eliminar a dependência dos valores geométricos e do escoamento nas equações e passa-se a trabalhar apenas com valores adimensionais. Define-se então:

$$x^* = \frac{x}{L} \quad (31)$$

$$y^* = \frac{y}{L} \quad (32)$$

$$v_x^* = \frac{v_x}{U} \quad (33)$$

$$v_y^* = \frac{v_y}{U} \quad (34)$$

$$t^* = t \frac{U}{L} \quad (35)$$

$$\nabla^* = \nabla L \quad (36)$$

Onde:

L = comprimento de referência

U = velocidade de referência

Substituindo as equações (31), (32), (33), (34), (35) e (36) nas equações (20) e (30), pode-se enfim obter:

$$\frac{\partial \omega}{\partial t^*} + \mathbf{v}^* \cdot \nabla \omega = \frac{1}{Re} \nabla^2 \omega \quad (37)$$

$$\frac{\partial c}{\partial t^*} + \mathbf{v}^* \cdot \nabla c = \frac{1}{ReSc} \nabla^2 c \quad (38)$$

Que são as formas adimensionais, respectivamente, da função corrente-vorticidade e do transporte de espécie química.

Importante notar que nas equações (37) e (38) surgem importantes parâmetros adimensionais que são o Número de Reynolds ( $Re$ ) e o Número de Schmidt ( $Sc$ ). O número de Reynolds é definido por:

$$Re = \frac{U \cdot L}{\nu} \quad (39)$$

Conforme *Cunha* (22) e *Silva* (23) é utilizado para a caracterização de regimes de escoamento.

Já o número de Schmidt, assim como cita *Amaral* (24) pode ser entendido como a relação entre a espessura da camada limite hidrodinâmica e a difusão da espécie química. É definido por:

$$Sc = \frac{\nu}{D} \quad (40)$$

## 4 Método de Elementos Finitos (MEF)

### 4.1 O Método

Como já foi previamente explicado, o MEF consiste em dividir o domínio de estudo em uma quantidade finita de elementos (daí o nome do método), para que então se calcule individualmente nesses elementos os valores numéricos do campo a ser estudado. Para tanto, é necessária a utilização da forma fraca - ou variacional - da equação diferencial que está sendo estudada. Vamos supor a seguinte equação diferencial:

$$\alpha \frac{d^2 u}{dx^2} + u + 1 = 0 \quad em \quad \Omega \quad (41)$$

$$u = u_0 \quad em \quad \Gamma_0 \quad (42)$$

$$\frac{du}{dx} = 2 \quad em \quad \Gamma_L \quad (43)$$

A equação diferencial está definida para apenas uma dimensão: eixo x. É uma equação diferencial de segunda ordem. Possui condição de contorno do tipo Dirichlet em  $\Gamma_0$  e do tipo Neumann em  $\Gamma_L$ .

Conforme *Anjos*(10), para se transformar essa equação de sua forma forte para a sua forma fraca, multiplica-se ela por uma função peso  $\omega$ , e integra-se em todo o domínio  $\Omega$ .

$$\int_{\Omega} \omega \left[ \alpha \frac{d^2 u}{dx^2} + u + 1 \right] d\Omega = 0 \quad (44)$$

Na equação (42),  $\alpha$  é uma constante,  $u$  é a variável,  $\Omega$  é o domínio, e  $\omega$  a função peso. A função peso é tal que as formas forte e fraca da equação são equivalentes. Também é importante salientar que a função peso possui valor  $\omega = 0$  nos pontos onde a condição de contorno é do tipo Dirichlet, isto é, onde a condição de contorno possui valor definido.

Prosseguindo com a resolução do problema, a equação (42) deve ser integrada por partes, para que se reduza a ordem da equação. Tem-se que:

$$\omega\alpha\frac{du}{dx}\Big|_{\Gamma} - \int_{\Omega}\alpha\frac{d\omega}{dx}\frac{du}{dx}d\Omega + \int_{\Omega}\omega ud\Omega + \int_{\Omega}d\Omega = 0 \quad (45)$$

Observa-se que a partir desse momento a derivada de mais alta ordem existente é de primeira ordem. A derivada de segunda ordem que existia em relação a  $u$  foi desmembrada em duas derivadas de primeira ordem: uma em  $u$  e outra em  $\omega$ .

O primeiro termo, que não está mais dentro da integral, pode ser desmembrado entre seus respectivos valores de contorno na entrada e na saída do domínio. Fica assim:

$$\omega\alpha\frac{du}{dx}\Big|_{\Gamma_L} - \omega\alpha\frac{du}{dx}\Big|_{\Gamma_0} - \int_{\Omega}\alpha\frac{d\omega}{dx}\frac{du}{dx}d\Omega + \int_{\Omega}\omega ud\Omega + \int_{\Omega}d\Omega = 0 \quad (46)$$

Nos dois primeiros termos podem ser aplicadas as condições de contorno do problema. No ponto em que  $x=0$  a condição de contorno é do tipo Dirichlet e no ponto em que  $x=L$  a condição é do tipo Neumann. Logo, a equação (44) se torna:

$$2\alpha\omega - \int_{\Omega}\alpha\frac{d\omega}{dx}\frac{du}{dx}d\Omega + \int_{\Omega}\omega ud\Omega + \int_{\Omega}d\Omega = 0 \quad (47)$$

O segundo termo desapareceu, pois conforme já definido, a função peso  $\omega$  vale 0 onde a condição é do tipo Dirichlet.

Até aqui não foi realizada qualquer aproximação numérica. Todo o esforço até este ponto é resultante apenas de definições e manipulações algébricas. Sendo assim, não há também qualquer tipo de restrição quanto a um método específico. Agora, no entanto, se iniciará de fato o MEF. Para tanto, serão utilizadas aproximações para o cálculo das funções  $u(x)$  e  $\omega(x)$ :

$$u^e(x) = \sum_{n=1}^{np} u_n N_n^e(x) \quad (48)$$

$$\omega^e(x) = \sum_{n=1}^{np} \omega_n N_n^e(x) \quad (49)$$

Onde a malha possui  $ne$  elementos e  $np$  pontos.  $u^e(x)$  e  $\omega^e(x)$  representam respectivamente as funções  $u$  e  $\omega$  em um elemento  $e$  qualquer do domínio. Já  $u_n$  e  $\omega_n$  são as

constantes a serem determinadas. Já  $N_i$  e  $N_j$  são as funções de forma. Elas podem ter infinitas formulações. Particularmente, no Método de Galerkin, que é o abordado nesse trabalho, tem-se que:

$$N_i^e = N_j^e \quad (50)$$

Segundo *Fish* (6), o Método de Galerkin é o mais utilizado e o de mais fácil abordagem. Mas existem outros métodos conforme cita *Lewis* (25) como o método variacional, de mínimos quadrados, ou o método de sub-domínio, também citado por *Anjos* (10). Outros métodos podem ser encontrados ainda em (26) como o Método de Galerkin Descontínuo e os Métodos Mortar.

Mesmo dentro da utilização do Método de Galerkin em elementos finitos, as funções de forma ainda podem possuir inúmeros formatos. No caso unidimensional, como o tratado no exemplo dado, destacam-se o uso de funções lineares, quadráticas, ou mesmo cúbicas. Alguns exemplos podem ser verificados nas Figuras 5 e 6.

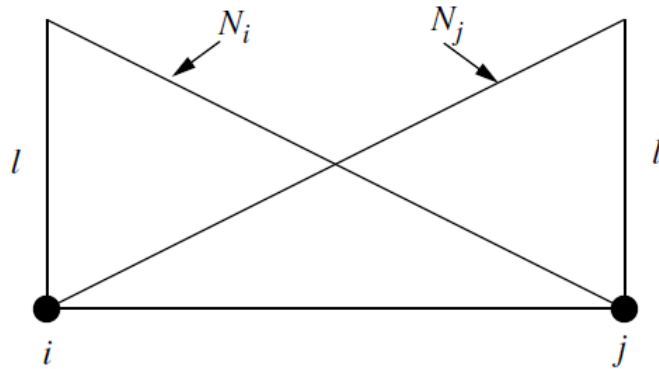


Figura 5: Função de forma linear no caso unidimensional (25).

Já em casos mais complexos como os bidimensionais ou os tridimensionais, são comumente tratados por funções de forma lineares devido a facilidade para se lidar com essas. No entanto, isso não representa impedimento algum quanto a utilização de funções de forma de outros formatos (quadráticas, cúbicas, senoidais, exponenciais, etc).

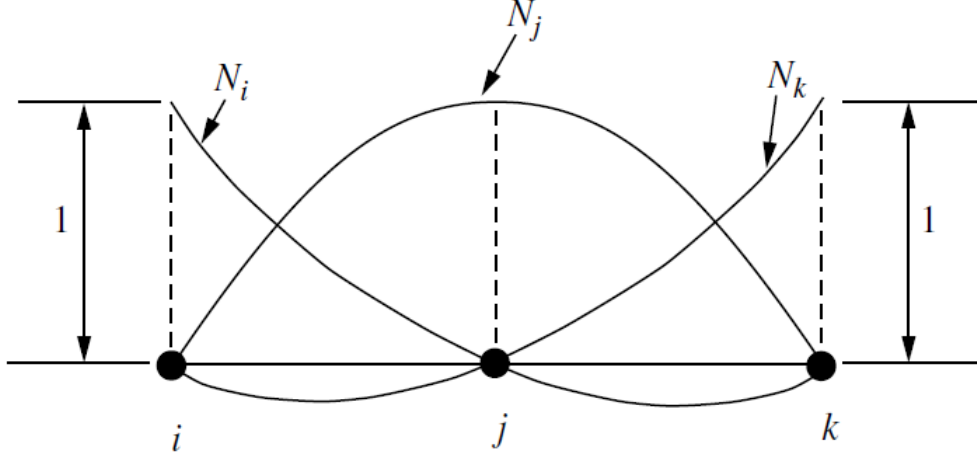


Figura 6: Função de forma quadrática no caso unidimensional (20)

A utilização de funções de forma lineares é mais recorrente devido ao baixo custo computacional de sua implementação na resolução de equações diferenciais diversas. Utilizar funções de forma com alta complexidade irá acarretar em um maior custo computacional de processadores e memória, o que certamente irá também provocar uma demora maior para a obtenção de resultados finais - principalmente em problemas mais complexos.

É possível substituir as equações (48) e (49) na equação (47). Logo obtêm-se a expressão:

$$2\alpha\omega_j N_j^e(L) - \int_{\Omega^e} \sum_{i,j \in e} \alpha \frac{du_i N_i^e}{dx} \frac{d\omega_j N_j^e}{dx} d\Omega + \int_{\Omega^e} \sum_{i,j \in e} u_i N_i^e \omega_j N_j^e d\Omega = - \int_{\Omega^e} \sum_{i,j \in e} \omega_j N_j^e d\Omega \quad (51)$$

Nota-se que o primeiro termo não possui o sinal de somatório, pois ele representa apenas um ponto:  $x=L$ . Esse termo é dependente dos valores da função de forma e função peso neste ponto (que possui condição de contorno do tipo Neumann).

O termo  $\omega_j$  aparece em todas as parcelas da equação (51), portanto pode ser eliminado da equação. Aplicando-se então o Método de Galerkin ( $N_i^e(x) = N_j^e(x)$ ) é possível chegar a:

$$2\alpha N_i^e(L) - \int_{\Omega^e} \sum_{i,j \in e} \alpha \frac{dN_i^e}{dx} \frac{dN_j^e}{dx} u_i d\Omega + \int_{\Omega^e} \sum_{i,j \in e} N_i^e N_j^e u_i d\Omega = - \int_{\Omega^e} \sum_{i,j \in e} N_i^e d\Omega \quad (52)$$

Essa equação pode ser definida como um sistema linear do tipo:

$$\mathbf{K}_{i,j} u_i + \mathbf{M}_{i,j} u_i = \mathbf{f}_j + c.c. \quad (53)$$

A incógnita a ser descoberta é  $u_i$ . As matrizes são construídas por uma montagem especial chamada de *Assembling*. A montagem é realizada a partir da superposição das matrizes dos elementos individuais do domínio. Pode ser descrita por:

$$\begin{aligned} \mathbf{K} &= \mathcal{A}_{e=1}^{nele} k^e \\ \mathbf{M} &= \mathcal{A}_{e=1}^{nele} m^e \\ \mathbf{f} &= \mathcal{A}_{e=1}^{nele} f^e \end{aligned} \quad (54)$$

Na equação (54),  $\mathcal{A}$  é a montagem *Assembling*.  $k^e$ ,  $m^e$  e  $f^e$  são dados respectivamente por:

$$k_{i,j} = \int_{\Omega^e} \alpha \frac{dN_i^e}{dx} \frac{dN_j^e}{dx} d\Omega \quad i, j = 2 \quad (55)$$

$$m_{i,j} = \int_{\Omega^e} N_i^e N_j^e d\Omega \quad i, j = 2 \quad (56)$$

$$f_i = \int_{\Omega^e} N_i^e f d\Omega \quad i = 2 \quad (57)$$

Para o caso unidimensional com funções de forma lineares, é possível definir  $N_i^e$  e  $N_j^e$  como:

$$N_i = 1 - \frac{x - x_i}{h} \quad (58)$$

$$N_j = \frac{x - x_j}{h} \quad (59)$$

Onde  $h$  representa o tamanho característico do elemento, isto é, o comprimento. É possível substituir as equações (58) e (59), e suas derivadas, nas equações (55), (56) e (57), para se chegar finalmente às matrizes  $k^e$ ,  $m^e$  e  $f^e$ :

$$k^e = \frac{\alpha}{h} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \quad (60)$$

$$m^e = \frac{h}{6} \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \quad (61)$$

$$f^e = \frac{h}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (62)$$

Após a montagem das matrizes individuais dos elementos, basta que se monte as matrizes globais pelo procedimento de *Assembling* (conforme ilustra a Figura 7) que será obtido um sistema linear no formato da equação (53).

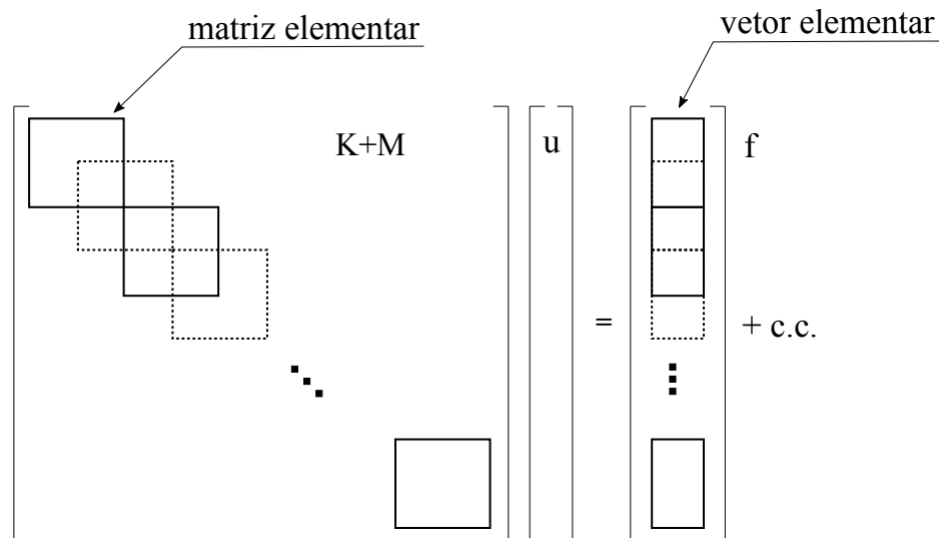


Figura 7: Sistema linear resultante da discretização do MEF explicitando como é dado o mecanismo de montagem *Assembling* das matrizes globais (10).

É possível, enfim, elaborar um algoritmo para a resolução de problemas usando o MEF:

1. Encontrar a forma fraca da equação a partir da utilização da função peso  $\omega$ .
2. Reduzir a ordem da equação fazendo a integração por partes.

3. Substituir  $u(x)$  e  $\omega(x)$  pelas aproximações  $u^e(x)$  e  $\omega^e(x)$ .
4. Rearranjar os somatórios, para que seja montada a equação em sua forma matricial.
5. Impor as condições de contorno (c.c.).
6. Resolver o sistema encontrado, onde as soluções serão os valores da incógnita nos respectivos nós.

## 4.2 As Matrizes dos Casos Estudados

As equações de interesse neste trabalho são efetivamente a (37) e a (38). Após a geração das malhas as quais o problema será calculado, é necessário escrever essas equações em suas formas matriciais.

Uma vez que, diferentemente do exemplo apresentado na seção 4.1, os elementos abordados no escopo desse estudo são triangulares (2D) e não lineares (1D), as matrizes utilizadas divergem em certa medida.

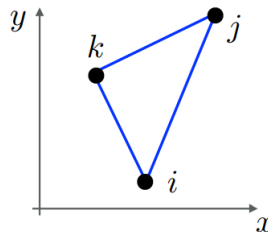


Figura 8: Elemento triangular linear (10)

O elemento triangular linear é o representado na Figura (8). A partir dele é possível definir a matriz de área  $A$ , a matriz de massa do elemento  $m^e$ , as matrizes do gradiente  $g_x^e$  e  $g_y^e$ , e as matrizes de rigidez  $k_x^e$ ,  $k_y^e$  e  $k_{xy}^e$ :

$$A = \frac{1}{2} \det \begin{bmatrix} 1 & x_i & y_i \\ 1 & x_j & y_j \\ 1 & x_k & y_k \end{bmatrix} \quad (63)$$

$$m^e = \frac{A}{12} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{bmatrix} \quad (64)$$

$$g_x^e = \frac{1}{6} \begin{bmatrix} b_i & b_j & b_k \\ b_i & b_j & b_k \\ b_i & b_j & b_k \end{bmatrix} \quad (65)$$

$$g_y^e = \frac{1}{6} \begin{bmatrix} c_i & c_j & c_k \\ c_i & c_j & c_k \\ c_i & c_j & c_k \end{bmatrix} \quad (66)$$

$$k_x^e = \frac{1}{4A} \begin{bmatrix} b_i^2 & b_i b_j & b_i b_k \\ b_j b_i & b_j^2 & b_j b_k \\ b_k b_i & b_k b_j & b_k^2 \end{bmatrix} \quad (67)$$

$$k_y^e = \frac{1}{4A} \begin{bmatrix} c_i^2 & c_i c_j & c_i c_k \\ c_j c_i & c_j^2 & c_j c_k \\ c_k c_i & c_k c_j & c_k^2 \end{bmatrix} \quad (68)$$

$$k_{xy}^e = \frac{1}{4A} \begin{bmatrix} b_i c_i & b_i c_j & b_i c_k \\ b_j c_i & b_j c_j & b_j c_k \\ b_k c_i & b_k c_j & b_k c_k \end{bmatrix} \quad (69)$$

Onde  $b_i$ ,  $b_j$ ,  $b_k$ ,  $c_i$ ,  $c_j$  e  $c_k$  podem ser definidos por:

$$\begin{aligned} b_i &= y_i - y_k & c_i &= x_k - x_j \\ b_j &= y_k - y_i & c_j &= x_i - x_k \\ b_k &= y_i - y_j & c_k &= x_j - x_i \end{aligned} \quad (70)$$

### 4.3 Termo Convectivo

Com a formulação corrente-vorticidade é possível desacoplar os campos de pressão e velocidade das equações de Navier-Stokes e com isso facilitar as resoluções. No entanto, o termo convectivo  $\mathbf{v} \cdot \nabla$  ainda está presente, o que pode causar oscilações espúrias (já mencionadas) nos resultados. Nestes casos, é conveniente que se evite o Método de Galerkin, ou então, que ele seja corrigido de alguma maneira. Algumas das técnicas possíveis de serem utilizadas são:

- Método Galerkin Característico (Taylor-Galerkin)

- Método SUPG (streamline upwind Petrov-Galerkin)
- Método Semi-lagrangiano
- Método de captura de choque (chock-capturing)
- Método CBS (Characteristic-based split)

No presente trabalho o método utilizado será o Galerkin Característico (Petrov-Galerkin). Após a discretização temporal da vorticidade  $\omega$ , esse termo pode ser representado no domínio espaço-tempo conforme pode ser observado na Figura 9.

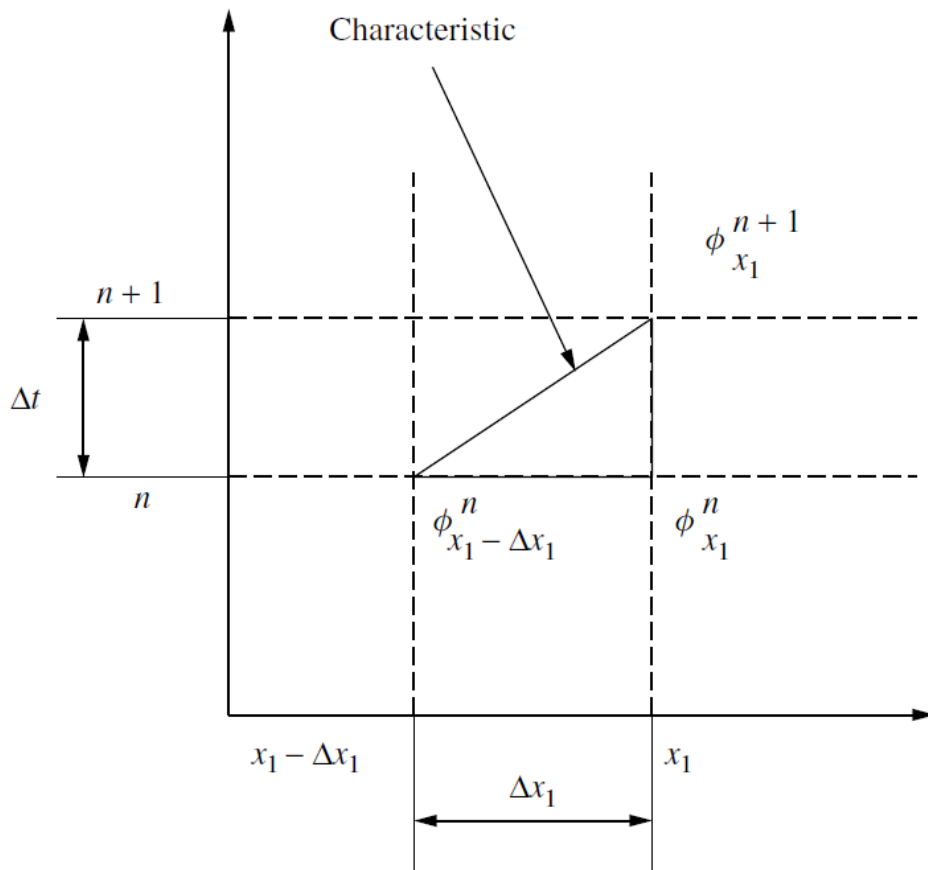


Figura 9: Vorticidade (aqui representada por  $\phi$ ) no domínio espaço-tempo (25).

Fazendo a expansão em Série de Taylor tem-se que:

$$\omega_{x-\Delta x}^n = \omega_x^n - \frac{\partial \omega}{\partial x} \frac{\Delta x}{1!} + \frac{\partial^2 \omega}{\partial x^2} \frac{\Delta x^2}{2!} - \dots \quad (71)$$

É importante notar que o  $\phi$  da Figura 9, foi representado como  $\omega$  na equação (71).

Da mesma forma, é possível fazer a expansão em série de Taylor do termo  $\frac{\partial}{\partial x} \left( \nu \frac{\partial \omega}{\partial x} \right)$  que será aplicado na equação (37):

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( \nu \frac{\partial \omega}{\partial x} \right)_{x-\Delta x}^n = \frac{\partial}{\partial x} \left( \nu \frac{\partial \omega}{\partial x} \right)_x^n - \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{\partial}{\partial x} \left( \nu \frac{\partial \omega}{\partial x} \right)_x^n \right] \frac{\Delta x}{1!} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[ \frac{\partial}{\partial x} \left( \nu \frac{\partial \omega}{\partial x} \right)_x^n \right] \frac{\Delta x^2}{2!} - \dots \quad (72)$$

Substituindo em (72) em (37):

$$\frac{\omega^{n+1} - \omega^n}{\Delta t} = -\mathbf{v} \cdot \mathbf{G} \omega^n + \nu \nabla^2 \omega^n + v_x \frac{\Delta t}{2!} \frac{\partial}{\partial x} \left[ v_x \frac{\partial \omega}{\partial x} + v_y \frac{\partial \omega}{\partial y} \right]^n + v_y \frac{\Delta t}{2!} \frac{\partial}{\partial y} \left[ v_x \frac{\partial \omega}{\partial x} + v_y \frac{\partial \omega}{\partial y} \right]^n \quad (73)$$

O mesmo procedimento pode ser repetido para a equação da difusão. Logo:

$$\frac{c^{n+1} - c^n}{\Delta t} = -\mathbf{v} \cdot \mathbf{G} c^n + \nu \nabla^2 c^n + v_x \frac{\Delta t}{2!} \frac{\partial}{\partial x} \left[ v_x \frac{\partial c}{\partial x} + v_y \frac{\partial c}{\partial y} \right]^n + v_y \frac{\Delta t}{2!} \frac{\partial}{\partial y} \left[ v_x \frac{\partial c}{\partial x} + v_y \frac{\partial c}{\partial y} \right]^n \quad (74)$$

A partir da forma como foram escritas as duas últimas equações, é possível aplicar uma matriz de estabilização chamada  $k_{est}$ . Essa matriz aumentará o efeito difusivo presente na equação, difundindo os erros de discretização do termo convectivo  $\mathbf{v} \cdot \mathbf{G}$  (10). Sendo assim, será possível trabalhar com altos valores de  $Re$  sem a ocorrência de erros devido à instabilidade e oscilações espúrias.

A matriz de estabilidade deve ser calculada a cada iteração, pois ela é tomada a partir da velocidade média (variável a cada instante) de cada elemento da malha. Assim como as matrizes anteriormente definidas, ela é dependente da geometria utilizada em cada elemento da malha. Para elementos triangulares (bidimensionais e lineares) a matriz  $K_{est}$  é definida como:

$$k_{est}^e = \overline{v_x} \frac{\Delta t}{2} [\overline{v_x} k_x^e + \overline{v_y} k_{xy}^e] + \overline{v_y} \frac{\Delta t}{2} [\overline{v_x} k_{xy}^e + \overline{v_y} k_y^e] \quad (75)$$

A equação (75) pode ainda ser reescrita como:

$$\begin{aligned}
k_{est}^e = & \frac{\bar{v}_x}{4A} \frac{\Delta t}{2} \begin{bmatrix} \bar{v}_x b_i^2 + \bar{v}_y b_i c_i & \bar{v}_x b_i b_j + \bar{v}_y b_i c_j & \bar{v}_x b_i b_k + \bar{v}_y b_i c_k \\ \bar{v}_x b_j b_i + \bar{v}_y b_j c_i & \bar{v}_x b_j^2 + \bar{v}_y b_j c_j & \bar{v}_x b_j b_k + \bar{v}_y b_j c_k \\ \bar{v}_x b_k b_i + \bar{v}_y b_k c_i & \bar{v}_x b_k b_j + \bar{v}_y b_k c_j & \bar{v}_x b_k^2 + \bar{v}_y b_k c_k \end{bmatrix} + \\
& \frac{\bar{v}_y}{4A} \frac{\Delta t}{2} \begin{bmatrix} \bar{v}_x c_i b_i + \bar{v}_y c_i^2 & \bar{v}_x c_i b_j + \bar{v}_y c_i c_j & \bar{v}_x c_i b_k + \bar{v}_y c_i c_k \\ \bar{v}_x c_j b_i + \bar{v}_y c_j c_i & \bar{v}_x c_j b_j + \bar{v}_y c_j^2 & \bar{v}_x c_j b_k + \bar{v}_y c_j c_k \\ \bar{v}_x c_k b_i + \bar{v}_y c_k c_i & \bar{v}_x c_k b_j + \bar{v}_y c_k c_j & \bar{v}_x c_k b_k + \bar{v}_y c_k^2 \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{76}$$

Sendo assim, é possível reescrever as equações da corrente vorticidade e do transporte de massa por difusão com a presença da matriz de estabilização que irá corrigir as oscilações anteriormente presentes. Em sua forma explícita, as equações tornam-se:

$$\frac{M}{\Delta t} \omega^{n+1} = \left( \frac{M}{\Delta t} - \mathbf{v} \cdot \mathbf{G} - \nu \mathbf{K} \right) \omega^n - \mathbf{K}_{est} \omega^n + cc \tag{77}$$

$$\frac{M}{\Delta t} c^{n+1} = \left( \frac{M}{\Delta t} - \mathbf{v} \cdot \mathbf{G} - \nu \mathbf{K} \right) c^n - \mathbf{K}_{est} c^n + cc \tag{78}$$

## 5 Malha

### 5.1 Geração da Malha

A geração da malha é uma das partes mais importantes no processo de aplicação do método de elementos finitos, pois é ela quem irá definir vários dos parâmetros que serão utilizados nos cálculos. Variáveis como o custo computacional, a qualidade da aproximação calculada e os valores e tamanhos das matrizes criadas são definidas pela malha que está sendo utilizada.

Para o problema que este estudo pretende abordar, foram utilizadas malhas triangulares lineares e não estruturadas. Cada caso conta com diferente número de elementos em suas malhas. Problemas mais simples, ou trechos mais simples da geometria, contam com elementos maiores, ou seja, uma geometria menos detalhada. Por sua vez, casos mais complexos, ou trechos mais elaborados, contam com elementos menores e em maior quantidade, para que a modelagem seja mais fidedigna.

Para um bom ajuste e identificação dos elementos, eles são numerados e cada um dos nós (isto é, os vértices de cada elemento) também. Um exemplo disso pode ser verificado na Figura(10). Esse processo servirá como base de todo o código programado, pois somente a partir da numeração de cada elemento e de cada vértice que é possível correlacionar a geometria do problema com cada uma das linhas no sistema linear que será resolvido.

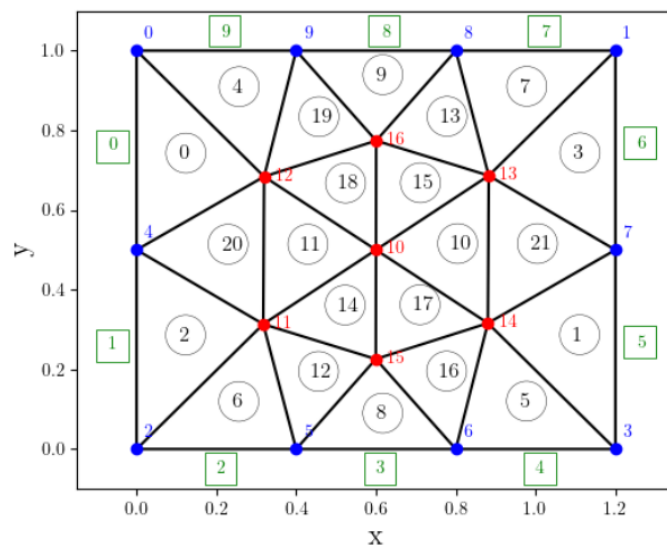


Figura 10: Exemplo de malha triangular com os elementos e vértices numerados (10).

Foram escolhidas quatro geometrias para serem estudadas, e cada uma delas foi construída com a utilização do software livre Gmsh 3.0.6. A partir desse software é possível montar a geometria global do problema e gerar a malha e seus elementos. O refinamento também é possível de ser ajustado por meio do parâmetro "*Element size factor*". Dessa forma, é possível aumentar o tamanho dos elementos (e diminuir a quantidade) aumentando esse parâmetro, tal como é possível diminuir o tamanho dos elementos (aumentando a quantidade deles) ao se diminuir o valor desse parâmetro.

## 5.2 As Malhas Utilizadas

As geometrias que serão abordadas são as seguintes:

- Stent Atual (Figura (11))
- Stent Atual Fletido (Figura (12))
- Stent Circular (Figura (13))
- Stent Circular Fletido (Figura (14))
- Stent com Geometria Aleatória (Figura (15))

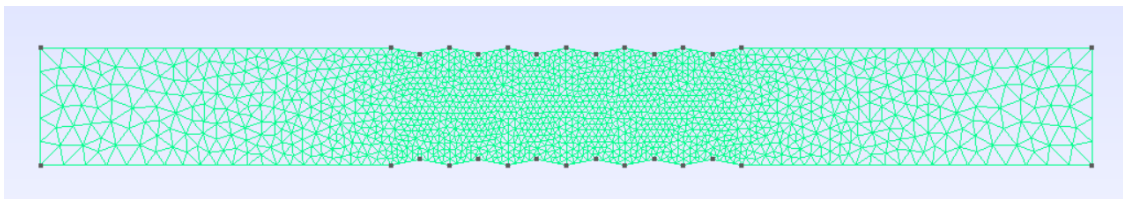


Figura 11: Stent Atual.

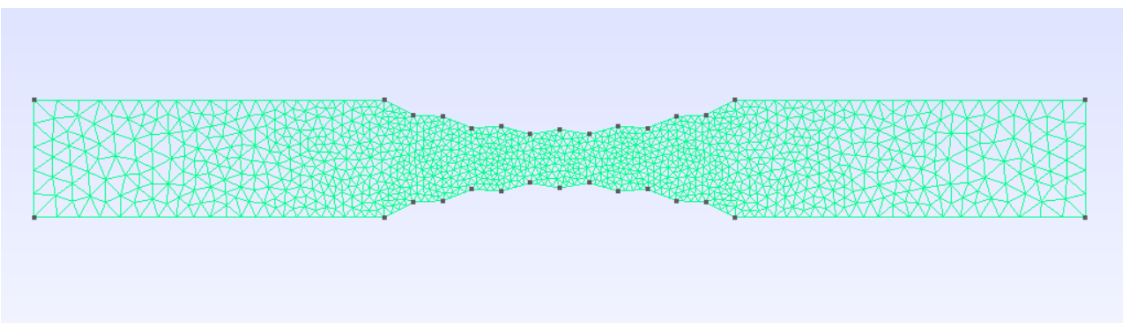


Figura 12: Stent Atual Fletido.

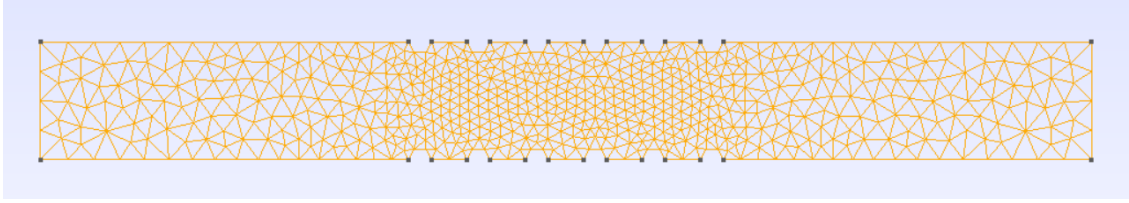


Figura 13: Stent Circular.

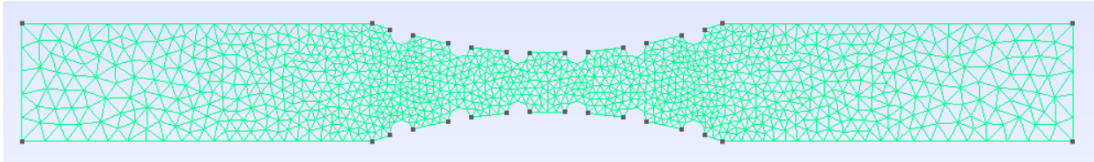


Figura 14: Stent Circular Fletido

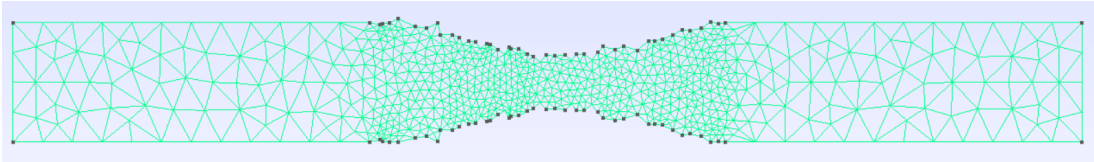


Figura 15: Stent com Geometria Aleatória

As geometrias em que não há flexão (Figuras (11) e (13)) são casos idealizados onde a parede do vaso foi completamente aberta de modo que a única evidência de que houve um procedimento de angioplastia são as ranhuras na parede do vaso: no stent utilizado atualmente, geometrias losangulares e no stent circular as geometrias de semi-círculos.

Por outro lado, as geometrias fletidas (Figuras (12) e (14)) visam abordar uma situação mais real, onde a parede do vaso foi apenas parcialmente aberta pelo stent, de forma que a seção transversal do vaso no trecho do stent possua metade do raio da seção transversal que possuía originalmente (antes da formação das placas de aterosclerose). Como a forma geométrica originada pela colocação do stent tende a um hiperboloide de uma folha, para a abordagem bidimensional foram consideradas parábolas na parede superior e inferior do vaso (sem desconsiderar a presença das ranhuras derivadas dos fios do stent). A geometria da Figura 15 é um caso particular, onde foram considerados segmentos de retas e semi-círculos para a construção da geometria bidimensional de forma completamente aleatória para poder simular uma distribuição desigual de uma placa de aterosclerose que pode vir a surgir no trecho com stent.

Na Figura 11 a malha utilizada possui 3036 elementos. Já na Figura 12, 2154 elementos compõem a malha. Por sua vez, a malha da Figura 13 é composta por 1324 elementos. Na Figura 14, foi utilizada uma malha com 1938 elementos. Por fim, a geometria aleatória, Figura 15, é composta também por 1324 elementos.

Não foram testadas geometrias com o stent em posições diferentes. O stent centralizado no trecho tubular gerado produz soluções suficientemente satisfatórias para os objetivos desse trabalho.

## 6 Validação e Verificação dos Dados

Para que sejam de fato validados os dados obtidos nesse estudo, é necessária uma etapa de validação de dados, nos quais será verificado o resultado obtido pelo código em escoamentos que possuem solução já consolidada pela literatura existente. Com este objetivo serão abordados os escoamento de *Poiseuille*, *Lid-Driven Cavity Flow* e o *Backward-facing Step*.

### 6.1 Escoamento de Poiseuille

O escoamento de Poiseuille (também encontrado na literatura como Hagen-Poiseuille) possui solução analítica a partir do momento em que o escoamento na tubulação encontra-se totalmente desenvolvido. É um escoamento permanente entre duas placas a uma distância fixa uma da outra (27), como pode ser bem observado na Figura 16.

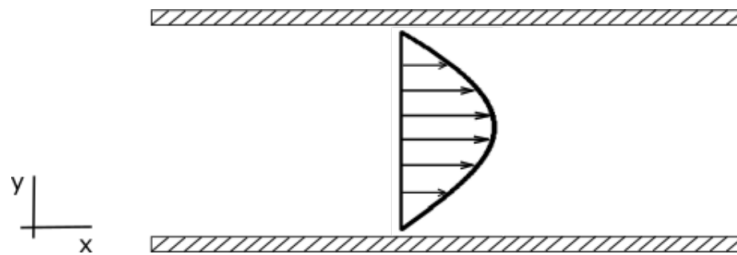


Figura 16: Escoamento de Poiseuille

O deslocamento do fluido nesse problema é causado devido ao gradiente de pressão  $\frac{\partial p}{\partial x}$  no eixo  $x$ .

As condições de contorno das velocidades são  $v_x = 1$  e  $v_y = 0$  no início do escoamento (extremidade da esquerda). Já nas partes superior e inferior (pontos de contato com as placas planas) é válida a condição de não-deslizamento, ou seja,  $v_x = 0$  e  $v_y = 0$ .

Também são necessárias condições de contorno para a função corrente. Como todo o escoamento passa entre as placas inferior e superior, por definição, a função corrente tem que variar de 0 a 1 nesse trecho, sendo  $\psi = 0$  na placa inferior e  $\psi = 1$  na placa superior. Já na entrada do escoamento - lado esquerdo -  $\psi$  assume os valores de  $y$ , uma vez que este varia de 0 a 1 linearmente. Por fim, a condição de contorno na extremidade da direita do

escoamento é do tipo condição de Neumann: fluxo constante. Uma vez que essa é uma extremidade aberta, é válido que

$$\nabla\psi \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (79)$$

que é a condição de contorno.

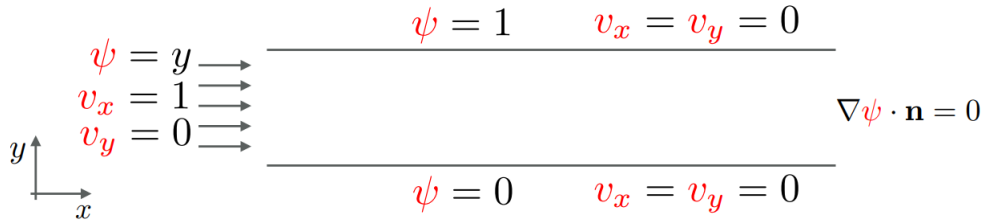


Figura 17: Condições de Contorno

Sendo  $L$  a distância entre as duas placas planas, e  $u_{max}$  a velocidade máxima do escoamento, onde  $u_{max}=1.5 \bar{u}$  (sendo  $\bar{u}$  a velocidade média), a velocidade em  $x$  do escoamento -  $v_x$  - é função de  $y$  e conforme se verifica em Brennen(28) pode ser dada por:

$$u = \frac{4u_{max}}{L^2}y(L - y) \quad (80)$$

Portanto, é possível criar uma malha e simular o problema utilizando o MEF e comparar os resultados obtidos com aqueles fornecidos analiticamente pela equação (80). Para isso, foi utilizado um número de Reynolds de 10 e uma malha com 8592 elementos. Após testar outras malhas mais e menos refinadas, concluiu-se que esse número de elementos era suficiente para o resultado que se esperava atingir.

A equação que rege o problema possui uma diferencial do tempo, entretanto o resultado analítico é dado considerando um tempo infinito, ou seja,  $t \rightarrow \infty$ . Portanto, as iterações foram programadas com um critério de parada, ou seja, se repetem até que os resultados numéricos deixem de variar de acordo com o erro estipulado.

Dessa forma, conforme verificado na Figura 18, os resultados convergem para aquele atingido analiticamente, e é possível comprovar que o código numérico utilizado é adequado para a resolução do problema.

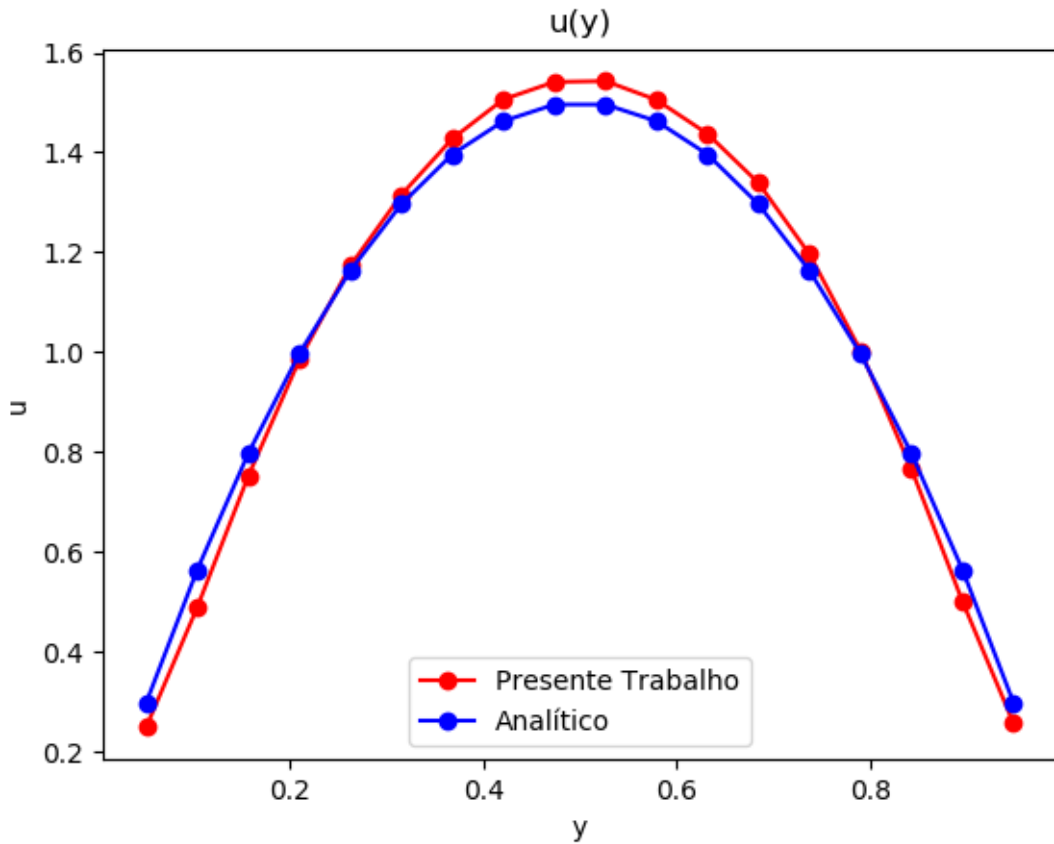


Figura 18: Resultado obtido para Poiseuille

## 6.2 Escoamento de Lid-Driven

Tal como foi realizado com o escoamento de Poiseuille no título anterior, o objetivo deste é simular o escoamento de *Lid-Driven Cavity Flow* utilizando o MEF. O problema em questão também já possui resolução consolidada, conforme demonstrado por Ghia (29).

Esse escoamento é definido como forçado pelo movimento de uma tampa na parte superior de uma cavidade quadrada. O problema possui como condição de contorno  $\psi = 0$  em todas as quatro laterais, e velocidades  $u$  e  $v$  iguais a zero em todas as extremidades exceto a velocidade em  $x$  ( $u$ ) na parte superior da cavidade. Essas condições de contorno podem ser melhor verificadas na Figura 19.

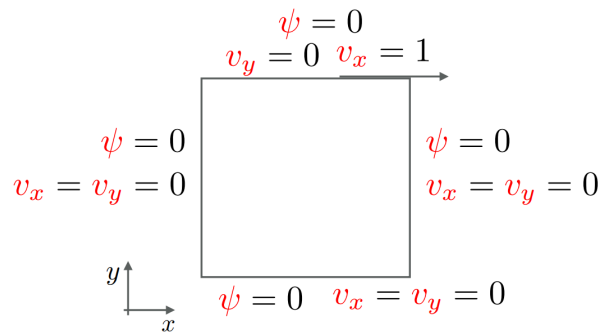


Figura 19: Esquema do escoamento de Lid-Driven Cavity Flow com as devidas condições de contorno.

Para esse escoamento, serão avaliadas as variáveis da velocidade em  $x$  ( $u$ ) e em  $y$  ( $v$ ). Conforme avaliado por Ghia, a velocidade  $u$  é avaliada na reta  $y = 0.5$  e a velocidade  $v$  é avaliada na reta  $x = 0.5$ . No cálculo realizado foi utilizado um Número de Reynolds de 100 e uma malha estruturada com 1152 elementos.

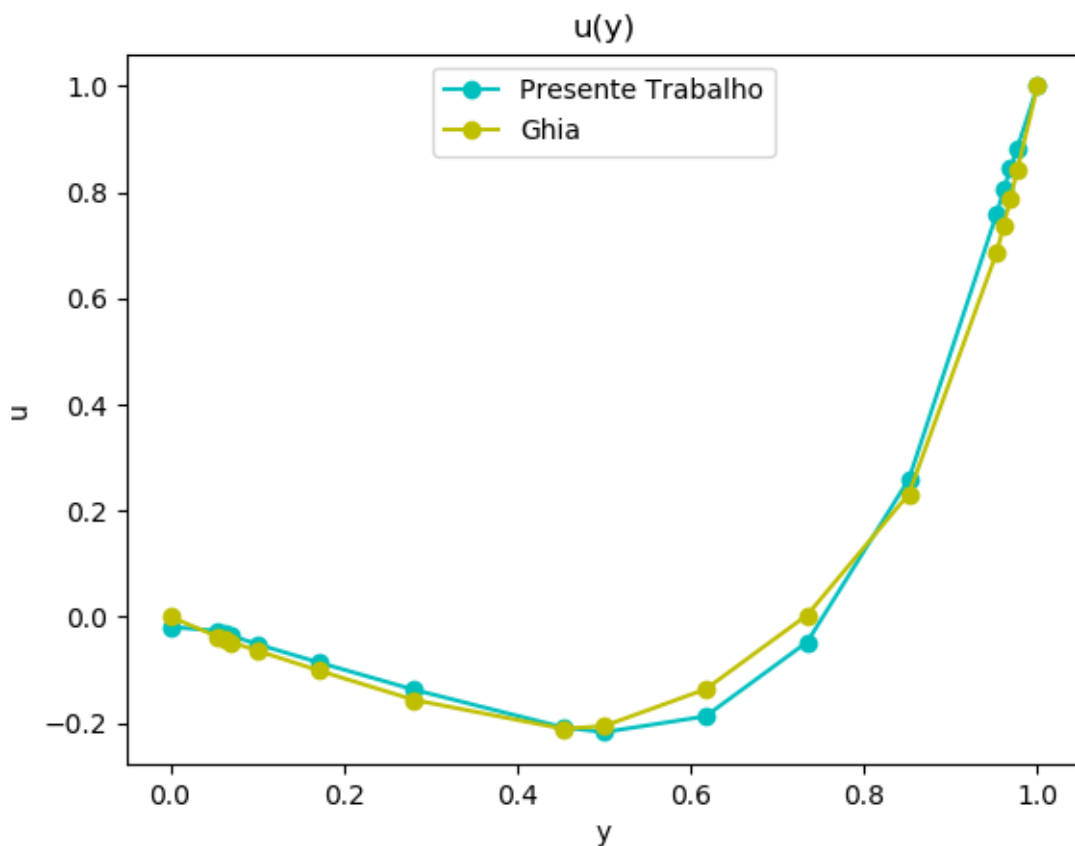


Figura 20: Perfil de velocidades  $u$  em  $x=0.5$ .

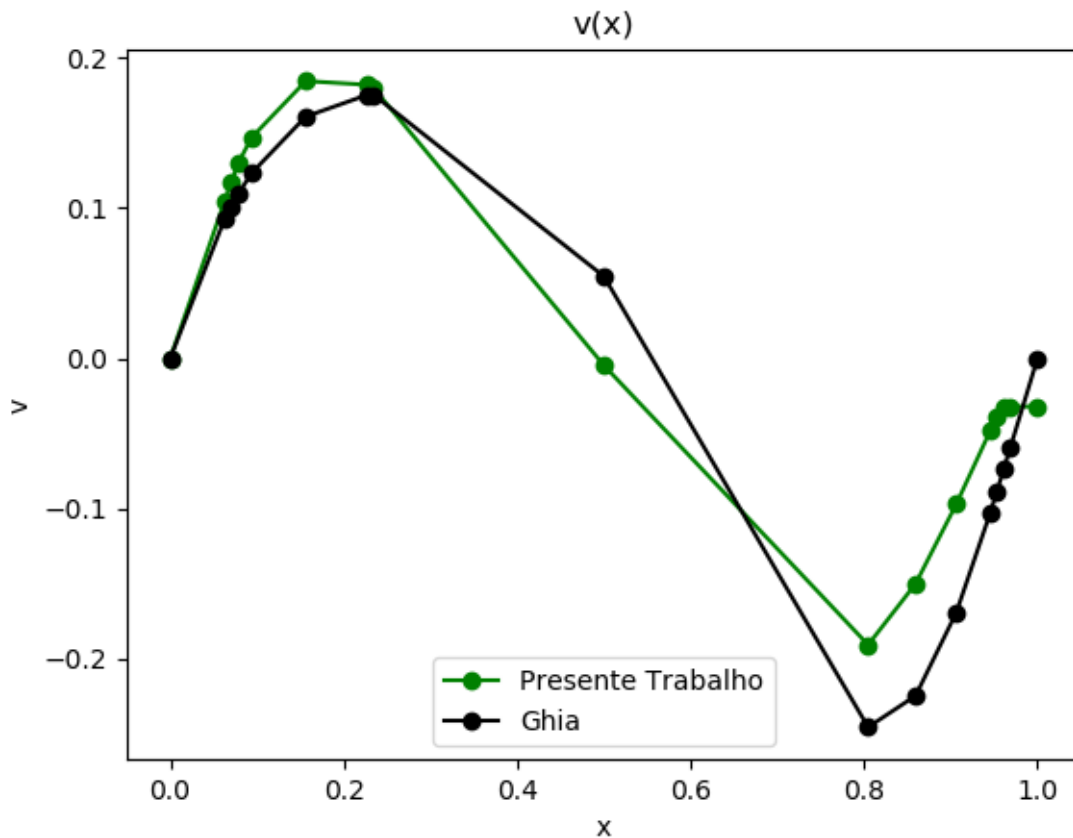


Figura 21: Perfil de velocidades  $v$  em  $y=0.5$ .

É possível se verificar que ambos os resultados convergiram para a solução prevista pela literatura, entretanto a aproximação calculada para a velocidade  $u(y)$  se assemelhou mais daquilo que era esperado do que a velocidade  $v(x)$ . Vários fatores podem explicar o afastamento do resultado esperado em alguns pontos, sendo o motivo mais provável o distanciamento dos pontos calculados pela literatura, o que proporcionou menor acurácia nas regiões intermediárias de  $v(x)$ , isto é, aquelas próximas a  $x = 0.5$ . Contudo, devido a boa aproximação encontrada nos demais pontos da curva, a metodologia utilizada no código pode ser considerada adequada para o cálculo de problemas mais complexos de elementos finitos.

### 6.3 Escoamento Degrau

Também conhecido na literatura como *backward-facing step*, o escoamento em degrau também possui resultados consolidados. É possível encontrar trabalhos que tratam o pro-

blema com as mais diversas geometrias de degrau e diâmetro do canal, tal como com diferentes números de Reynolds. Autores como *Erturk* (30) e *Thomas et. al* (4) apresentam bons resultados empíricos para esse problema.

Esse escoamento consiste na entrada de um escoamento num duto que abruptamente aumenta o seu diâmetro num ponto chamado de "degrau". As condições de contorno da velocidade são: na entrada são velocidade nula em  $y$  e constante com valor unitário em  $x$ , velocidade nula em todas as direções nas paredes e no degrau. Já a função corrente possui valor variando linearmente de 0 a 1 na entrada, 0 no degrau e na parede inferior, 1 na parede superior e também fluxo constante e igual a 0 na saída.

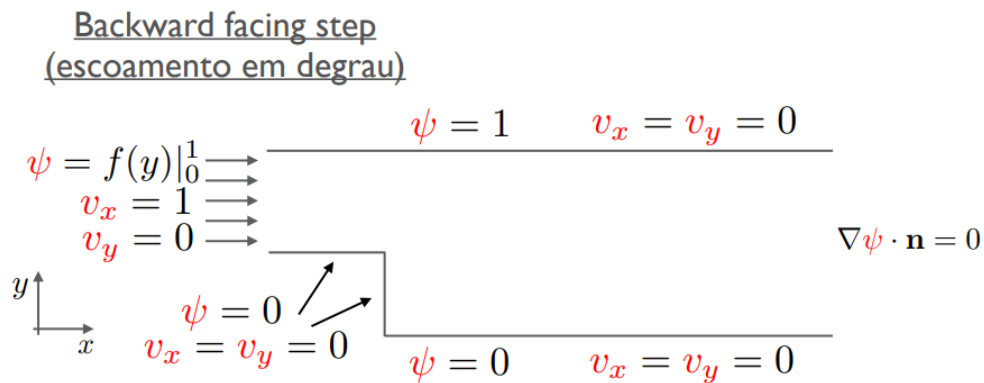


Figura 22: Condições de Contorno do Escoamento Degrau

Como proposta de resolução desse problema foi utilizados o método de elementos finitos com Número de Reynolds igual a 800 e uma malha com 3000 elementos.

Avaliando a velocidade em  $x$  no ponto  $x=6$  (sendo  $x=0$  o ponto do degrau) é possível comparar os resultados obtidos de  $u(y)$  com aqueles encontrados por *Erturk* conforme pode ser observado na Figura 23.

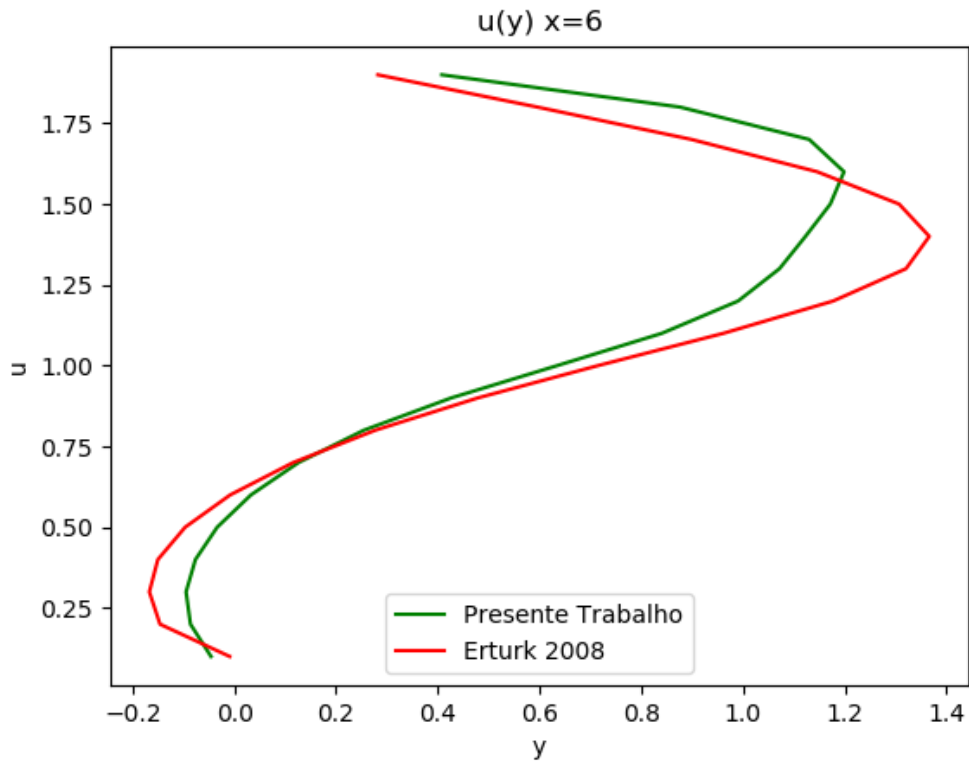


Figura 23:  $u(y)$  em  $x=6$

Conforme pode ser observado no gráfico em verde, a curva se aproximou satisfatoriamente daquela encontrada por *Erturk*. Para um resultado ainda mais preciso seria necessário a utilização de uma malha com mais pontos e menor  $\Delta t$ , todavia a máquina utilizada no presente trabalho não tem a capacidade de obter resultados melhores.

## 7 Resultados

### 7.1 Considerações Gerais

No intuito de atingir os resultados almejados, o MEF foi programado em Python com o auxílio de bibliotecas especiais como *Numpy*, *Meshio* e *Scipy*. Para a realização do pós-processamento dos dados obtidos, foi utilizado o software livre *Paraview*.

Para o escoamento do sangue dentro das paredes arteriais que possuem stent, a modelagem realizada foi semelhante aquela utilizada para o problema do escoamento de Poiseuille. Nas partes superior e inferior da artéria é válida a condição de não escoamento, logo  $v_x$  e  $v_y$  iguais a zero em ambas as paredes. Na saída, isto é, na extremidade da direita, a condição de contorno é de fluxo constante, ou seja:  $\nabla\psi \cdot \mathbf{n} = 0$ .

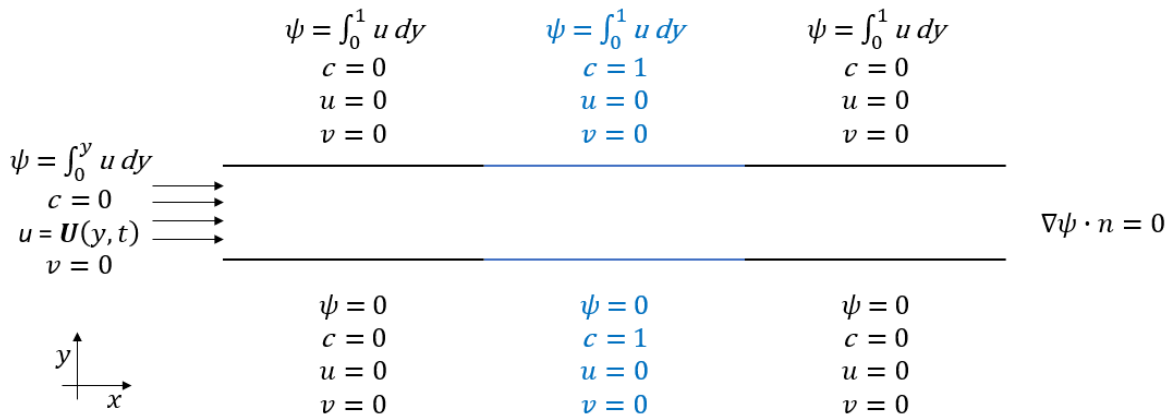


Figura 24: Condições de Contorno do Problema

Já na entrada, isto é, na extremidade da esquerda, o fluxo sanguíneo não foi considerado como possuindo uma velocidade constante, pois devido ao bombeamento realizado pelo coração nos movimentos sistólicos e diastólicos realizados periodicamente, o sangue percorre as paredes de um vaso com velocidade variável, ao invés de contínua. Para esta modelagem, foi utilizado o trabalho de *Silva e Jatobá* (31), que simula o fluxo de sangue em uma artéria carótida utilizando também a mecânica dos fluidos computacional (MFC). No trabalho supracitado, o escoamento da artéria é modelado como uma função periódica

envolvendo duas senoides sobrepostas multiplicadas pela parábola que determina o valor da velocidade em função da coordenada  $y$ , multiplicada ainda por uma constante para dar a proporcionalidade e valor adequados à velocidade. A equação adotada para a modelagem, foi então:

$$\mathbf{U}(y, t) = 17.4 \cdot 0.1088[1 + 1.0001\sin(\omega t) + 1.001|\sin(\omega t)|]\mathbf{P}_b(\mathbf{y}) \quad (81)$$

$$\mathbf{P}_b(\mathbf{y}) = \frac{(1.0 - y)(y - 0.0)}{(0.25)(1.0 - 0.0)^2} \quad (82)$$

$\omega$  é a frequência angular - valor que depende da frequência das batidas do coração.  $t$  é a variável tempo em segundos.  $P_b(y)$  é a equação de segundo grau (a menos uma constante) que representa a distribuição de velocidades axiais  $u$  - aqui sendo representadas pelo eixo  $x$  - em um determinado instante de tempo  $t$ .

As condições de contorno do problema podem ser mais claramente visualizadas na Figura 24. O trecho em azul é o espaço ocupado pela stent que será utilizado. A geometria se altera a cada exemplo, porém as condições iniciais são as mesmas em todos os casos. O valor de  $\psi$  nas condições de contorno superior e na entrada necessita ser encontrado. De acordo com a formulação corrente-vorticidade tem-se:

$$\psi = \psi_1 - \psi_0 = \int_{\Omega} (v_x dy - v_y dx) \quad (83)$$

Porém a velocidade em  $y$  é constante e igual a 0 no trecho analisado (contorno do problema). Logo a equação pode ser reduzida a:

$$\psi_1 - \psi_0 = \int_{\Omega} v_x dy \quad (84)$$

Substituindo (81) em (84) é possível finalmente encontrar o valor procurado.

$$\psi = \int_0^y 17.4 \cdot 0.1088[1 + 1.0001\sin(\omega t) + 1.001|\sin(\omega t)|]\mathbf{P}_b(\mathbf{y}) dy \quad (85)$$

O termo inicial não depende de  $y$ , logo a integral pode ser reescrita como:

$$\psi = 17.4 \cdot 0.1088[1 + 1.0001\sin(\omega t) + 1.001|\sin(\omega t)|] \int_0^y \mathbf{P}_b(\mathbf{y})dy \quad (86)$$

Para a integral em questão tem-se:

$$\int_0^y \mathbf{P}_b(\mathbf{y})dy = \int_0^y \frac{(1.0 - y)(y - 0.0)}{(0.25)(1.0 - 0.0)^2}dy = 4 \left( \frac{y^2}{2} - \frac{y^3}{3} \right) \quad (87)$$

Logo a condição de contorno na entrada do problema será:

$$\psi = 4 \cdot 17.4 \cdot 0.1088[1 + 1.0001\sin(\omega t) + 1.001|\sin(\omega t)|] \left( \frac{y^2}{2} - \frac{y^3}{3} \right) \quad (88)$$

Já para a parte superior do duto arterial o valor de  $y$  é constante e igual a 1. Logo, a condição de contorno se torna:

$$\psi = \int_0^1 v_x dy = 4 \cdot 17.4 \cdot 0.1088[1 + 1.0001\sin(\omega t) + 1.001|\sin(\omega t)|] \left( \frac{1}{2} - \frac{1}{3} \right) \quad (89)$$

A cada variação infinitesimal do tempo,  $dt$ , a amplitude da parábola representada pela equação  $P_b(y)$  é alterada, de forma que quando ela possui seu valor máximo a velocidade média da seção transversal  $\bar{u}$ , onde

$$\bar{u} = \frac{u_{max}}{1.5} \quad (90)$$

é o valor unitário adimensional, 1.0.

As Figuras 25 (a), (b), (c), (d) e (e) representam a velocidade do sangue  $u$  a cada instante de tempo na seção transversal da entrada do escoamento. Essa velocidade varia de forma que o número de Reynolds a ser utilizado esteja sempre na faixa de 400 a 1200, conforme cita *Silva e Jatobá* (31) como sendo valores típicos das artérias humanas. O número de Reynolds para fins de cálculo foi considerado como calculado a partir de uma velocidade constante: a velocidade máxima na entrada. A velocidade de referência foi considerada como 2.6cm/s. Já o diâmetro hidráulico é assumido como 4.0mm como observado em *Ku e Giddens* (32) e foi adotado com comprimento de referência.

Para a difusividade, a condição de contorno escolhida foi  $D=0$  em toda a parede arterial, exceto nas partes onde o stent se encontra localizado. Nesses pontos a difusividade foi

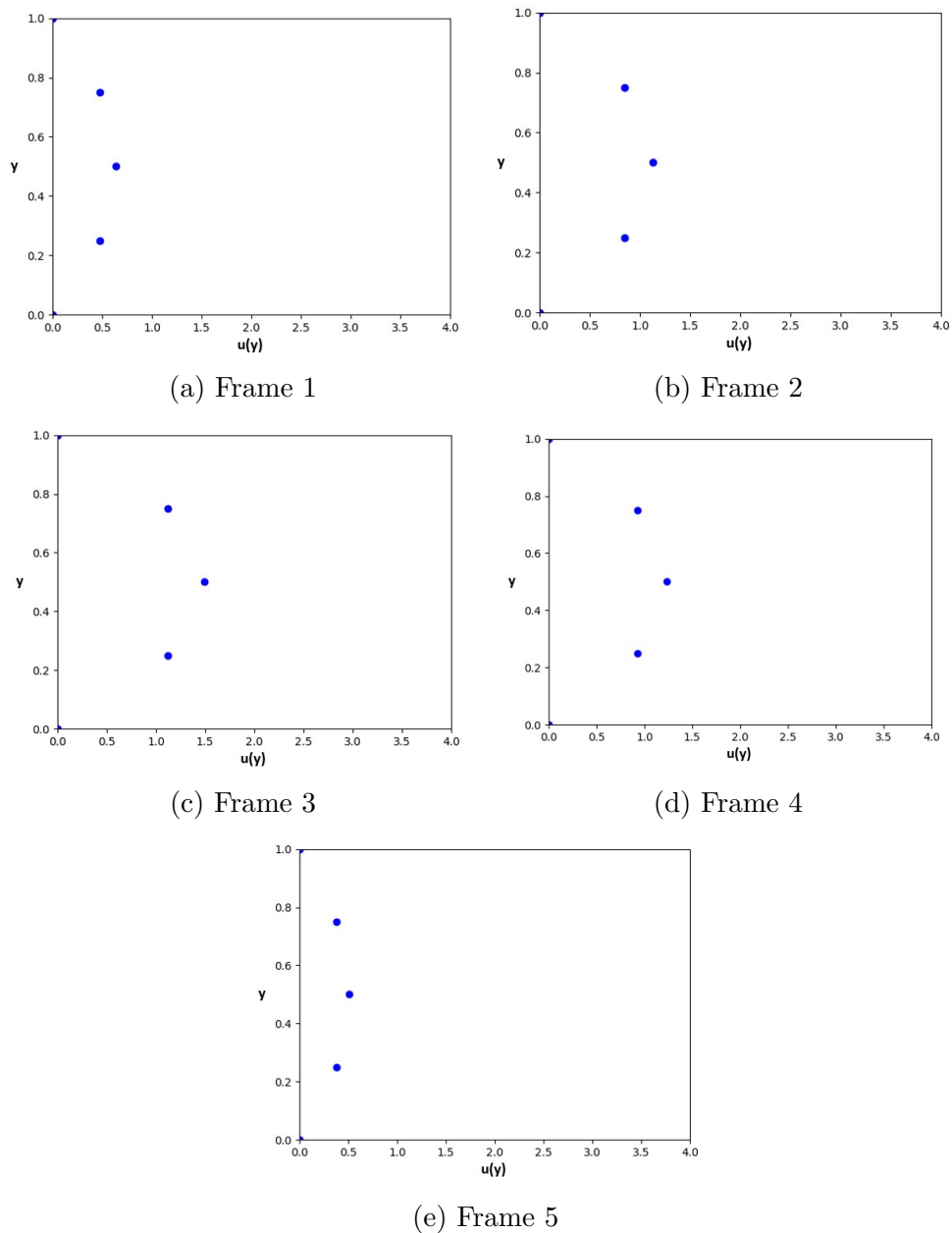


Figura 25: Frames sequenciais de diferentes instantes de tempo de  $u$ . Gráficos de  $u \times y$ .

considerada como o valor unitário (1.0), ou seja, pontos onde constantemente está sendo expelido o fármaco puro.

Neste trabalho, foi verificado a influência do número de Schmidt na difusão do fármaco a ser liberado na corrente sanguínea. Por definição, conforme descrito por *Bird* (21), o número de Schmidt é definido por:

$$Sc = \frac{\nu}{D} = \frac{\mu}{\rho D} \quad (91)$$

Para cada geometria simulada, foram testados diferentes valores do número de Schmidt: 0.1, 1.0 e 10.0. Como essa constante é inversamente proporcional a difusividade  $D$ , quanto menor o número de Schmidt, mais rápido o soluto - no caso o fármaco - irá se difundir no solvente em questão.

Nas simulações realizadas nesse trabalho o sangue foi considerado como sendo um fluido newtoniano. Essa simplificação já foi utilizada por diversos outros pesquisadores em vários artigos publicados como os já citados *Bozsak* (3), *Lucena* (19), *Amaral* (14) e *Gomes* (1).

Para que a programação progrida a cada transiente, foi necessário estipular condições de contorno da vorticidade nas extremidades do domínio. Para tanto, foi utilizado o campo arbitrário de velocidade inicial nula em todo o domínio, exceto nos contornos - que possuem as condições anteriormente citadas e demonstradas na Figura 24. Dessa forma, no contorno do canal (inicialmente apenas na entrada), o diferencial da vorticidade é não nulo e a vorticidade do contorno pode ser calculada. A cada iteração, a vorticidade em todo o contorno do domínio é novamente calculada, utilizando-se como base o campo de velocidades encontrado na iteração imediatamente anterior. Ou seja, as condições de contorno da vorticidade são de Dirichlet, mas no entanto variam a cada transiente.

O passo de tempo  $\Delta t$  adotado foi de 0.05s, pois dessa forma a variação temporal da condição de contorno de entrada da velocidade  $\mathbf{u}$  ficou bem evidenciada. Esse passo de tempo utilizado também permitiu que a simulação se estendesse até 6s. Tempo este que foi considerado adequado para as simulações devido ao gasto computacional da máquina que foi utilizada. Cada programação rodou em média por 50 minutos.

Um algoritmo explicativo da solução do problema foi elaborado por *Anjos* (10):

Procedimento para solução do problema:

- Criação da malha: vetores de coordenadas e matrizes de conectividade.
- Definição das condições de contorno.
- Montagem das matrizes globais.
- Inicialização do campo de velocidades

- Inicialização do campo de vorticidade

Loop for/while:

- Cálculo da condição de contorno de vorticidade:  $\mathbf{M}\omega = \mathbf{G}_x v_y - \mathbf{G}_y v_x$
- Solução da equação de transporte de vorticidade:  $\frac{M}{\Delta t} \omega^{n+1} = \left( \frac{M}{\Delta t} - \mathbf{v} \cdot \mathbf{G} - \nu \mathbf{K} \right) \omega^n - \mathbf{K}_{est} \omega^n + cc$
- Solução da equação corrente:  $\mathbf{K}\psi = \mathbf{M}\omega + cc$
- Cálculo do campo de velocidades:  $\mathbf{M}v_x = \mathbf{G}_y \psi$ ;  $\mathbf{M}v_y = -\mathbf{G}_x \psi$
- Imposição das condições de contorno de velocidades.
- Solução da equação de difusão da espécie química:  $\frac{M}{\Delta t} c^{n+1} = \left( \frac{M}{\Delta t} - \mathbf{v} \cdot \mathbf{G} - \nu \mathbf{K} \right) c^n - \mathbf{K}_{est} c^n + cc$

## 7.2 Stent Atual

A primeira geometria trabalhada foi a do stent atual (Figura 11).

Para um número de Schmidt igual a 0.1, a convecção é majoritária na difusão do químico. Observa-se que decorridos 3s do início da inserção do fármaco (Figura 26(c)), este ainda não atingiu um estágio que possa ser considerado estacionário. O mesmo pode se dizer dos frames seguintes, Figuras 26 (d) e (e). O fármaco se espalha na corrente sanguínea constantemente, e rapidamente atinge todo o duto arterial com alta concentração.

Uma vez que a difusibilidade de uma substância química é inversamente proporcional ao seu número de Schmidt, conforme esperado, o aumento da constante para 1.0 reduziu a difusão. Percebe-se que a mudança de 0s (Figura 27(a)) para 1.06s (Figura 27(b)) é pouca. Tal como para, 2.64s (Figura 27(c)), 4.14s (Figura 27(d)) e 6s (Figura 27(e)). O espalhamento do químico na corrente sanguínea é gradual e se dá aos poucos. A convecção é preponderante na organização da mistura, de forma que altas concentrações do químico só começam a ser efetivamente notadas conforme se afasta do ponto de lançamento do mesmo.

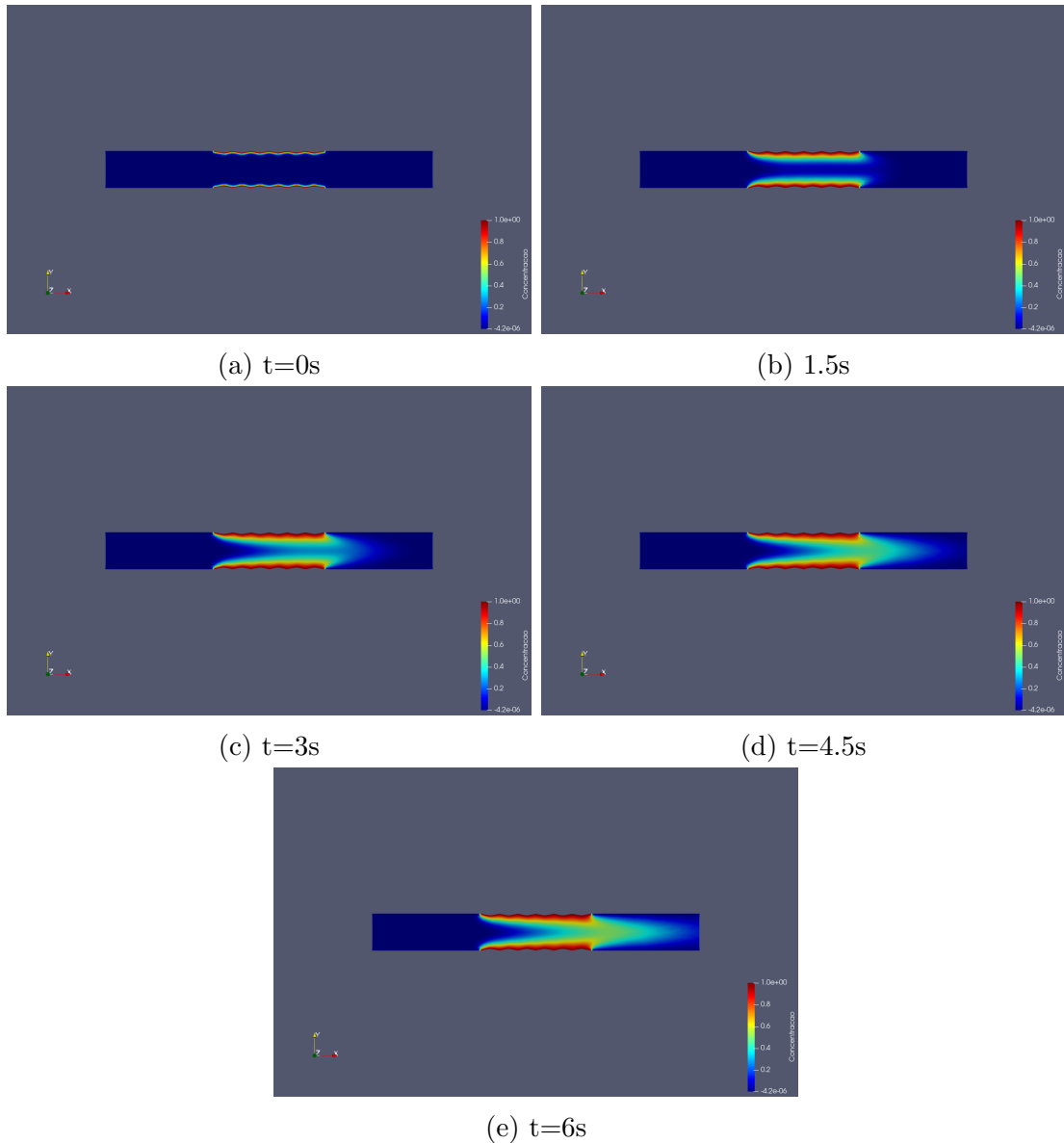


Figura 26: Difusão com  $Sc=0.1$

Por fim, para o caso de um número de Schmidt, 100 vezes maior que o primeiro simulado a difusão do composto químico é quase que imperceptível para o intervalo de tempo padronizado de 6 segundos em cada simulação, conforme Figura 28. Seria necessário uma tomada de tempo bem maior para que se fosse possível observar significativas mudanças no estado no sistema. Algumas ínfimas diferenças na concentração do soluto entre um frame e outro podem ser visualizadas. Observa-se claramente que a convecção obtém total preponderância em relação à difusão, pois a concentração do fármaco no leito do canal permanece praticamente inalterada, enquanto que nas margens é possível notar alguma mudança no trecho próximo ao final do stent.

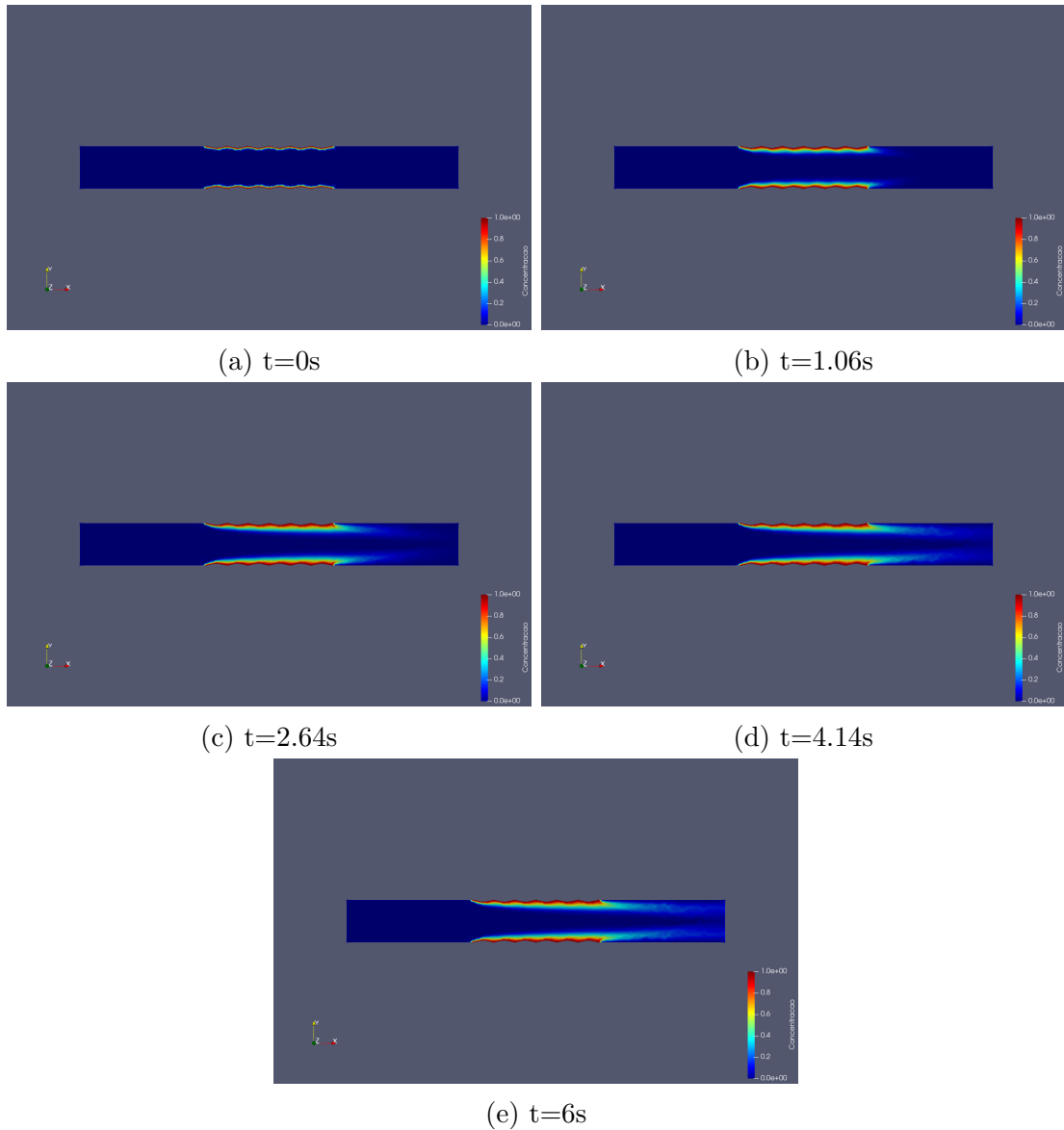


Figura 27: Difusão com  $Sc=1.0$

### 7.3 Stent Atual Fletido

Essa geometria foi gerada, visando-se uma maior proximidade com a situação real, onde o Stent Farmacológico sofre uma leve deformação ao ser inserido no paciente, devido a presença da placa de ateroma nas paredes arteriais. Sendo assim, suas paredes durante operação normal não se encontram paralelas entre si, mas sim curvadas (em maior ou menor grau, dependendo das condições do paciente).

Com um valor de 0.1 (Figura(29)) para Schmidt a convecção exerce fortíssima influência na difusão. Rapidamente o soluto já se encontra em altas concentrações mesmo em pontos distantes do stent. O trecho com seção transversal de menor diâmetro favorece a difusão

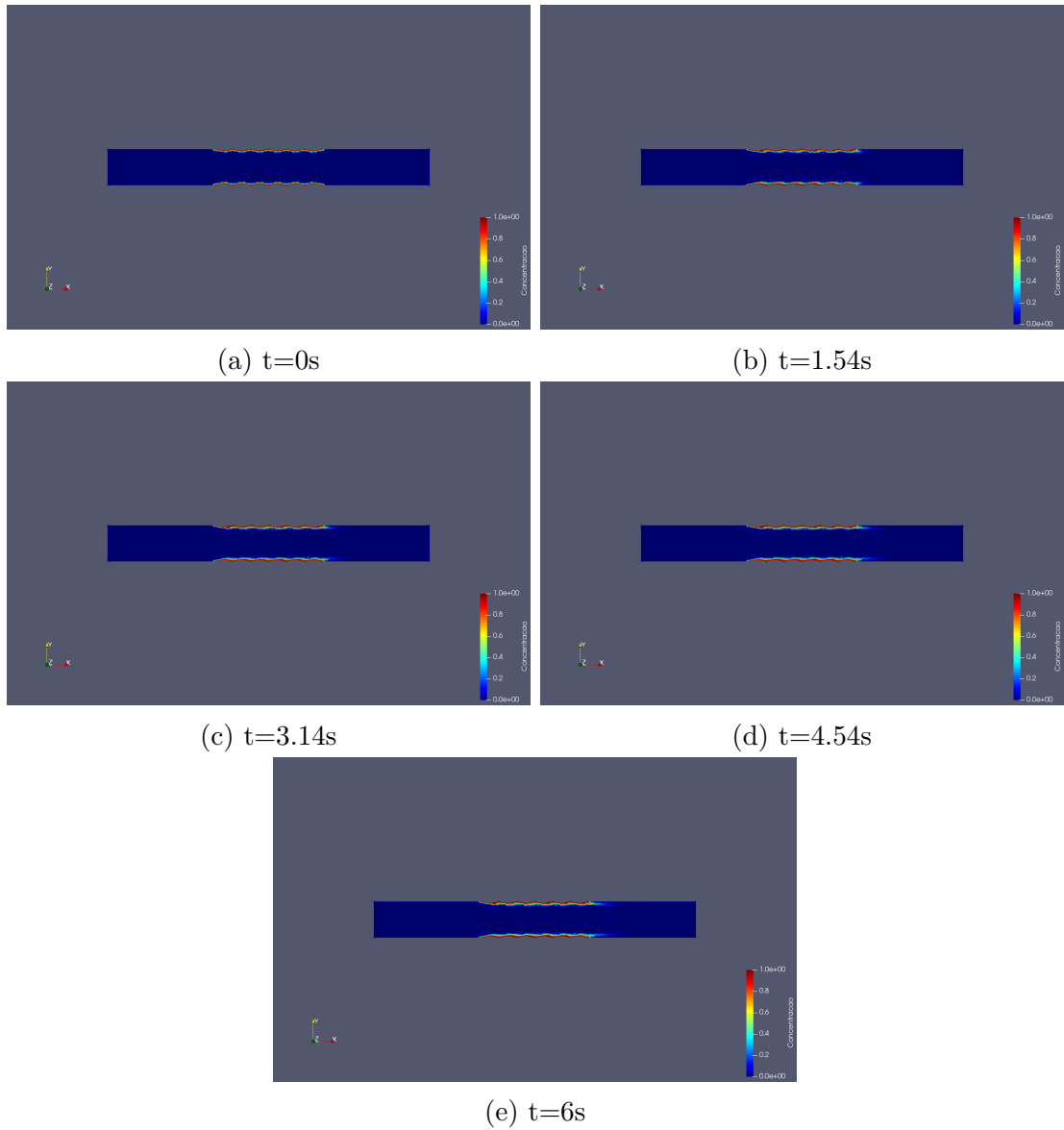
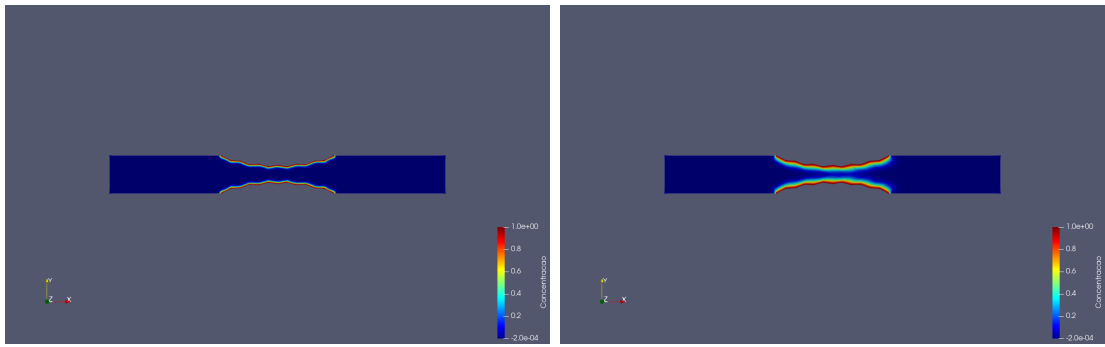


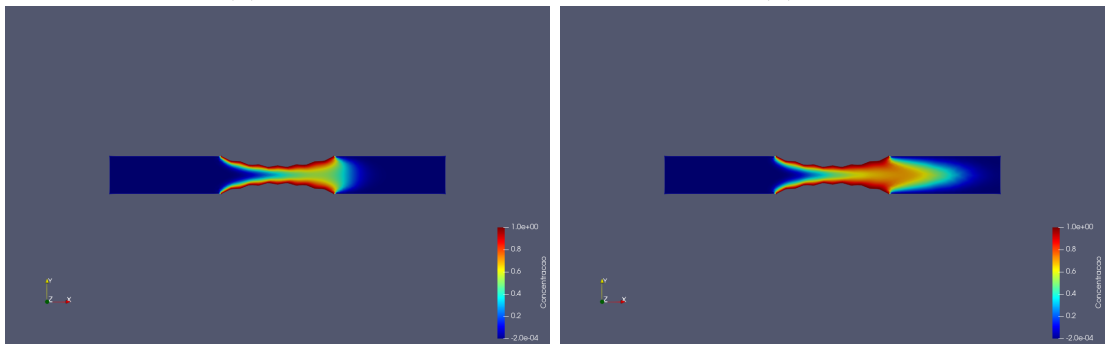
Figura 28: Difusão com  $Sc=10.0$

do produto. Assim, é possível verificar cores mais fortes ao longo do duto arterial na tomada de 6s (Figura 29(e)), do que no caso não-fletido, indicando maior concentração do fármaco nesse caso que no outro.



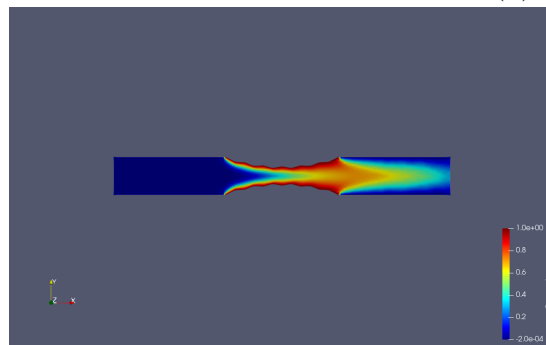
(a)  $t=0s$

(b)  $t=0.38s$



(c)  $t=1.54s$

(d)  $t=3.7s$



(e)  $t=6s$

Figura 29: Difusão com  $Sc=0.1$

Com 1.0 para o valor do número de Schmidt a difusão ocorre de forma principalmente convectiva. 6s após o início do lançamento do fármaco na corrente sanguínea (Figura 30(e)) a concentração do produto nas artérias é bem menor do que quando utilizado o valor de 0.1 na constante. Entretanto, o fato do duto sanguíneo estar fletido, aumenta a facilidade de dissolução do fármaco de forma que é possível notar diferença em relação ao caso do stent reto.

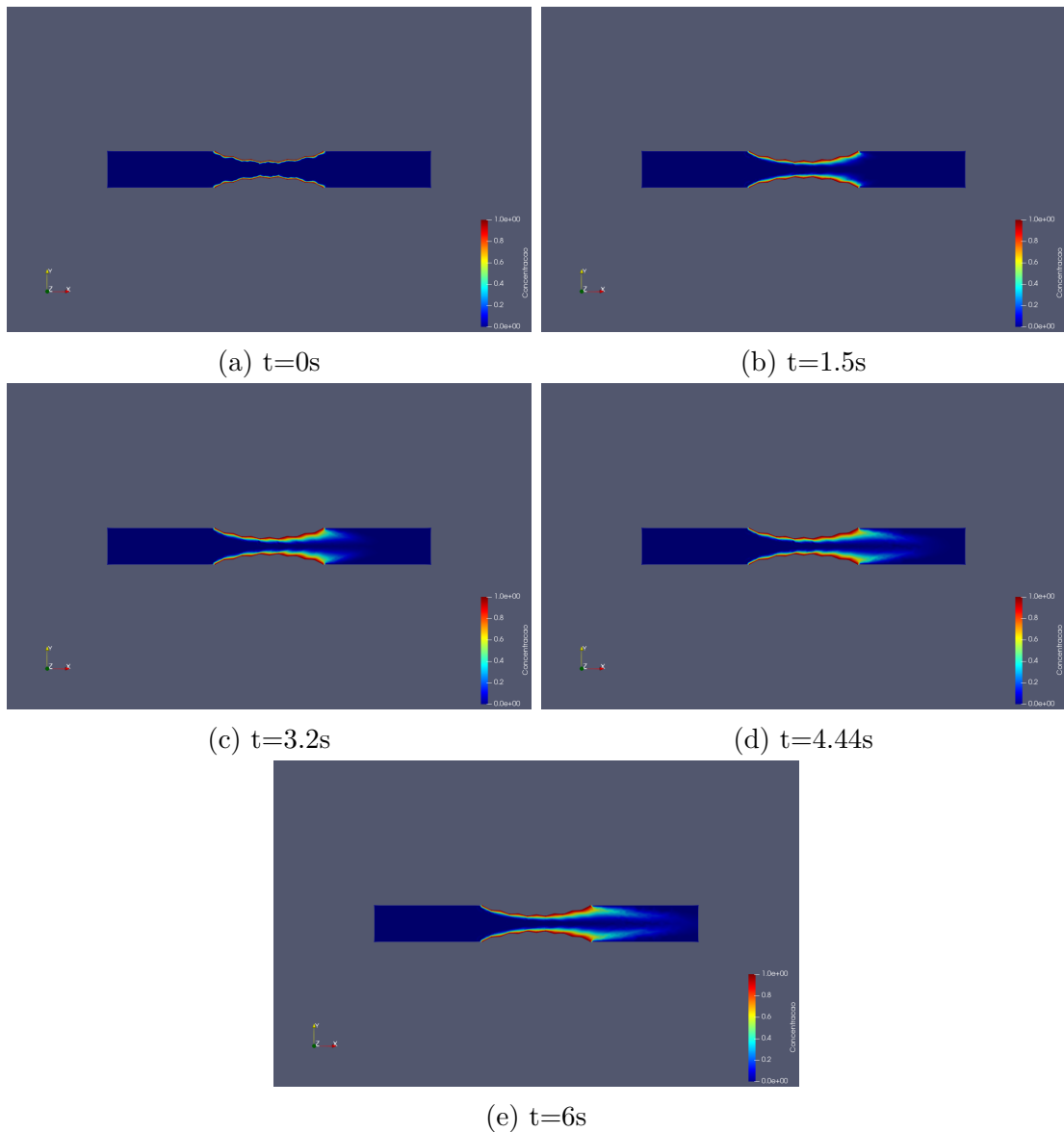


Figura 30: Difusão com  $Sc=1.0$

Como pode ser visto na Figura 31, um elevado número de Schmidt (10.0 nas imagens) afeta diretamente a velocidade da difusão. O soluto possui uma difusibilidade muito baixa, logo a difusão ocorre de forma bem mais lenta e é preponderantemente convectiva, ou seja, o deslocamento do sangue exerce maior influência do que a natureza química das substâncias.

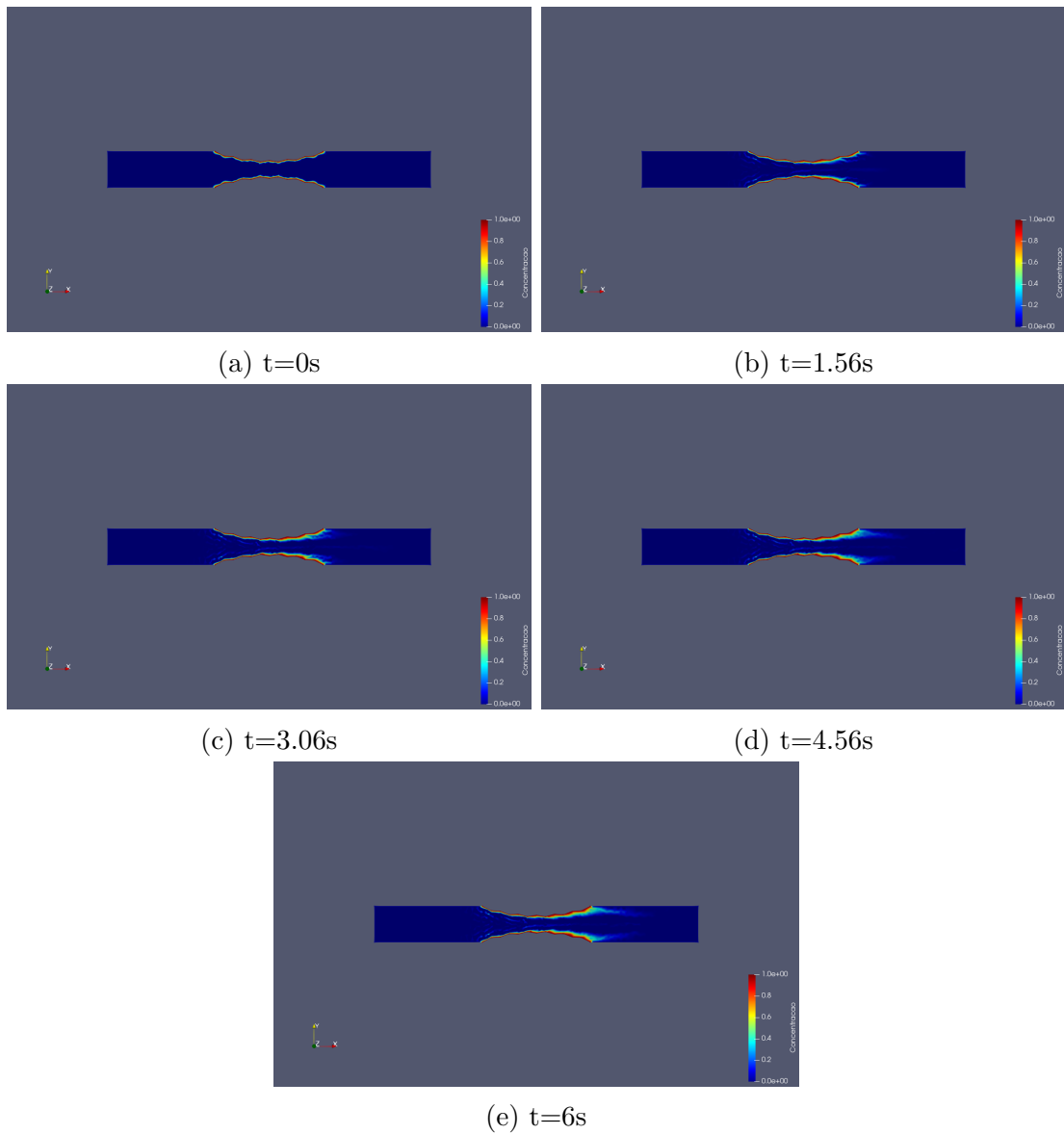


Figura 31: Difusão com  $Sc=10.0$

## 7.4 Stent Circular

Essa geometria visa uma melhor compreensão do escoamento sanguíneo no interior de um stent com formato de espira metálica. Para simplificação do estudo, a geometria criada é uma planificação do problema proposto, onde semicírculos representam os diâmetros do arame que foi enrolado.

Com um número de Schmidt igual a 0.1 (Figura 32), o espalhamento do fármaco já se dá preponderantemente na direção do escoamento sanguíneo. A difusão é bem rápida e ficam evidentes as transformações ocorridas no sistema a cada intervalo de 1.5s. Não há divergência relevante em relação ao caso correspondente na geometria do stent atual.

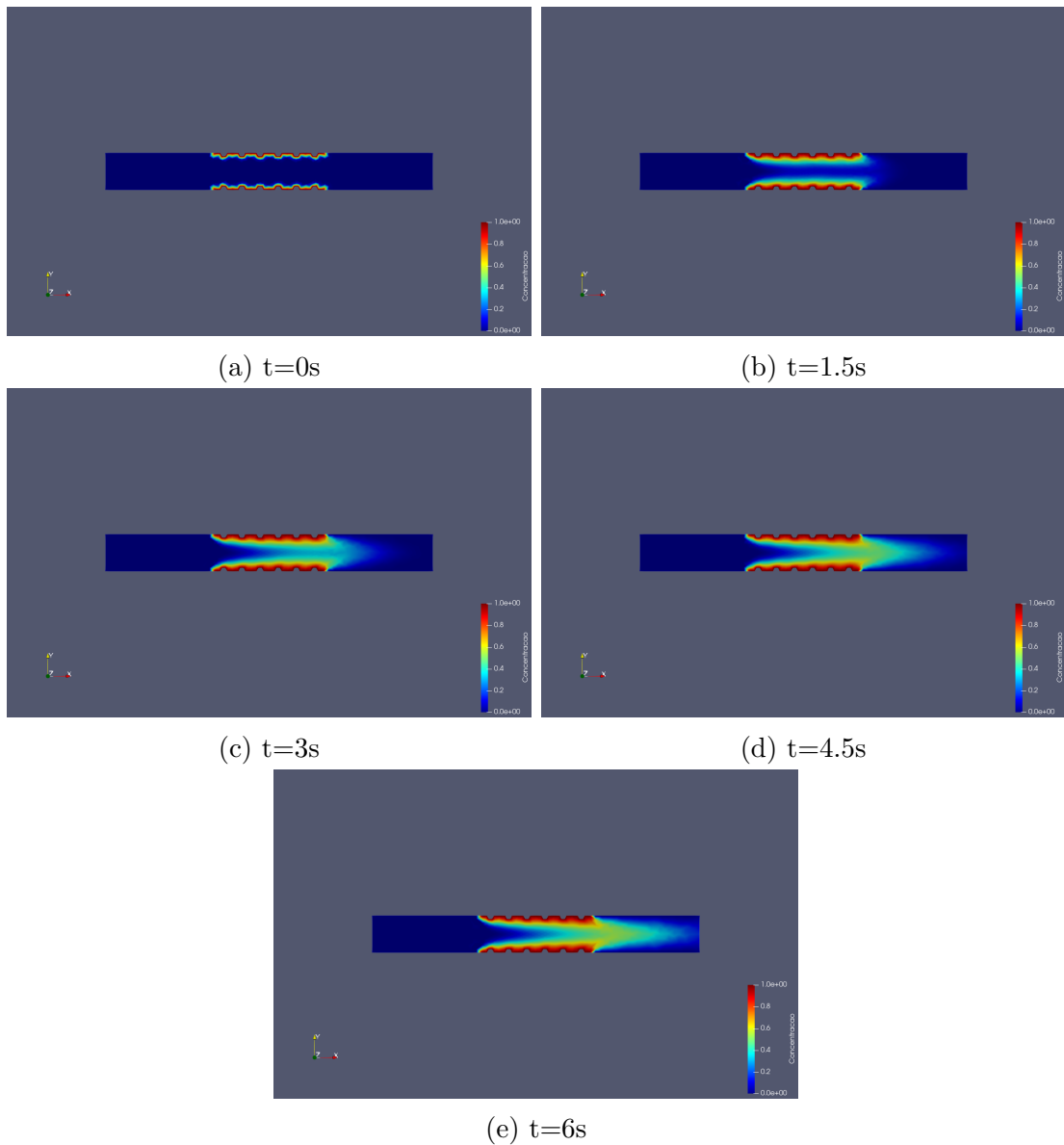


Figura 32: Difusão com  $Sc=0.1$

A Figura 33 similarmente a anterior apresenta uma difusão preponderantemente convectiva, onde a difusão do fármaco ocorre mais para a direita do que para o interior do duto, devido a baixa difusibilidade do químico. Porém como o número de Schmidt aumentou para 1.0 as diferenças são menos perceptíveis de uma tomada de tempo para outra: a difusão ocorre de forma mais lenta.

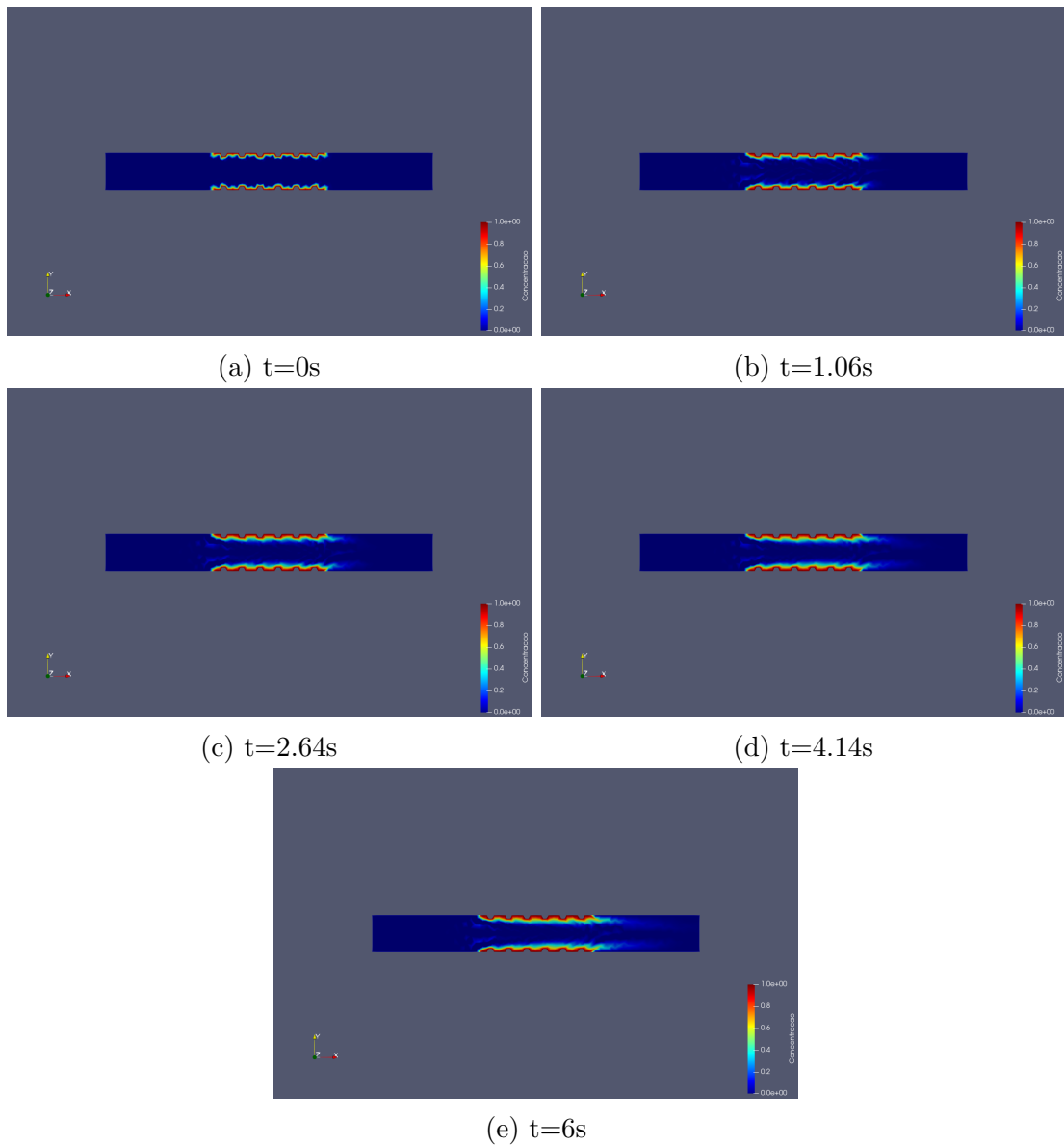


Figura 33: Difusão com  $Sc=1.0$

Já com 10.0 para a constante, como pode ser visto na Figura 34, a difusão passa a ser praticamente imperceptível num intervalo de tempo de 6s (Figura 34(e)). A pouca dissolução que ocorre é majoritariamente convectiva, isto é, ocorre no sentido do deslocamento sanguíneo.

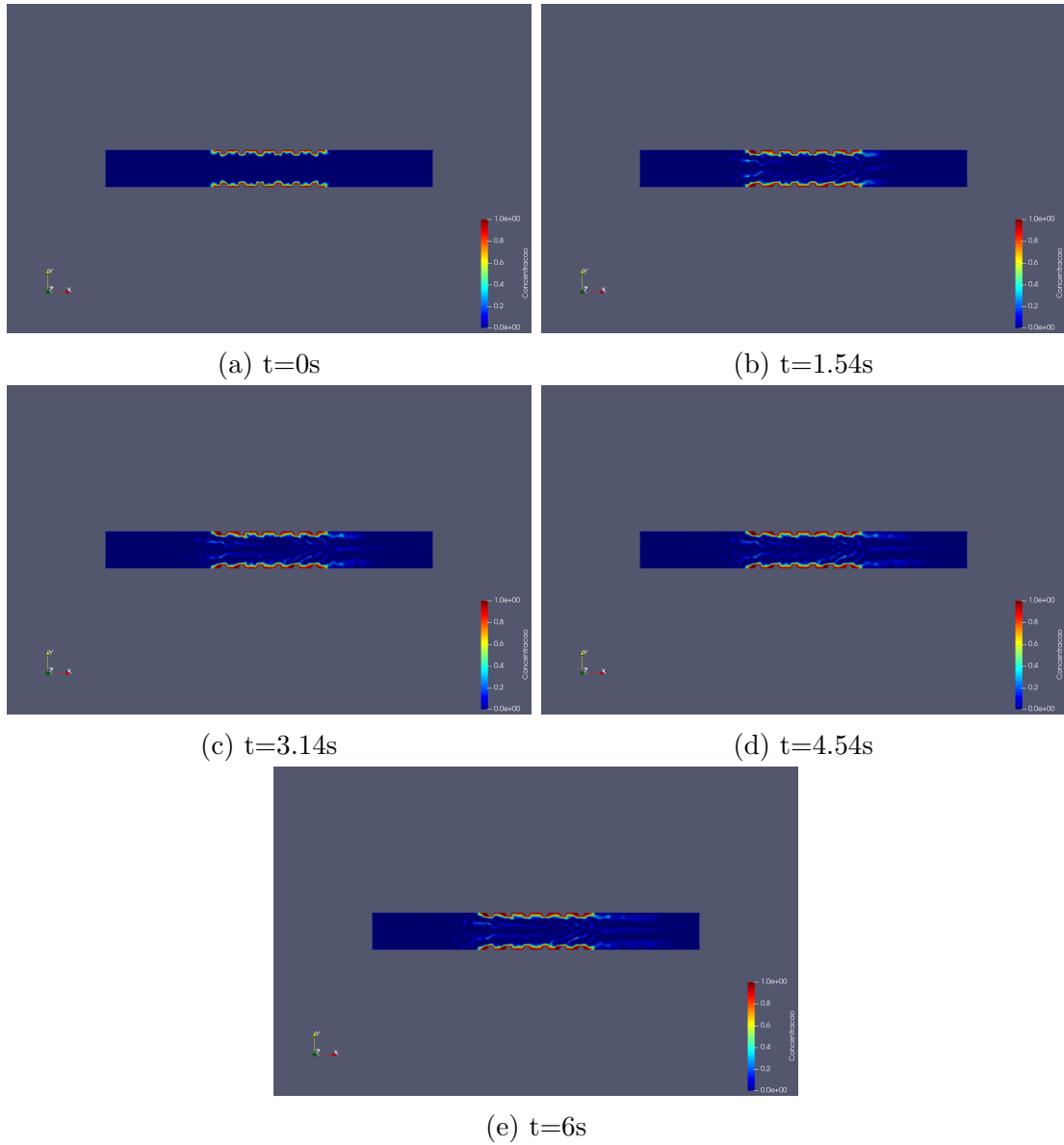


Figura 34: Difusão com  $Sc=10.0$

## 7.5 Stent Circular Fletido

Com  $Sc=0.1$  é possível notar a forte influência da curvatura do stent na difusão do fármaco. O fato do stent estar fletido favorece em larga escala a convecção, de forma que é possível observar com clareza na Figura 35(e) como o produto já se difundiu com alta concentração ao longo de todo o duto arterial em apenas 6s. A difusão foi tão elevada que aparenta maior efetividade do que para o mesmo número de Schmidt com a geometria nomeada de "Stent Atual Fletido".

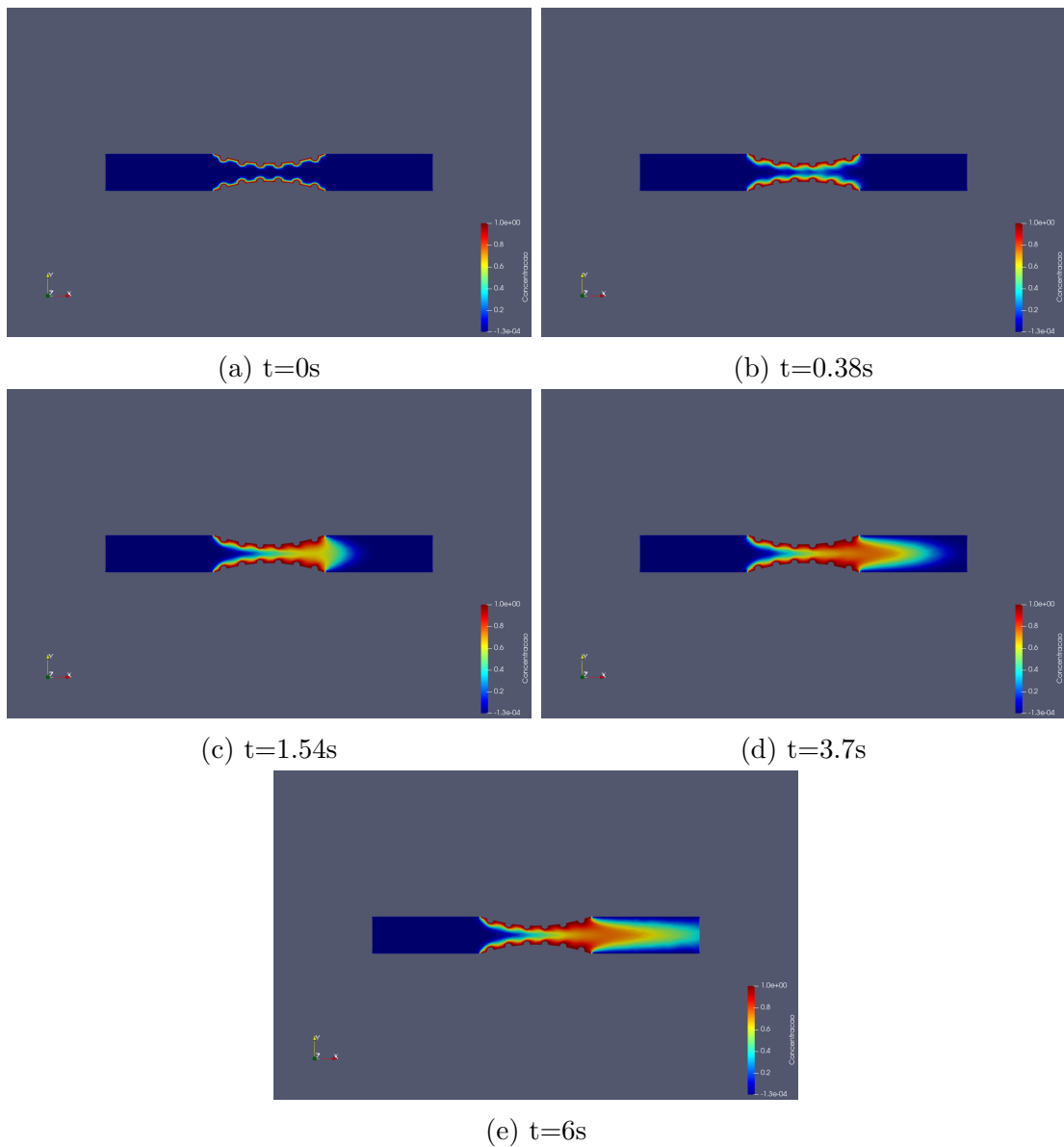


Figura 35: Difusão com  $Sc=0.1$

Na Figura 36, com um valor de 1.0 para Schmidt a simulação possui grandes semelhanças para o mesmo valor de constante no caso do "Stent Atual Fletido". A difusão é majoritariamente convectiva e a curvatura do stent favorece a dissolução do químico em relação ao stent reto.

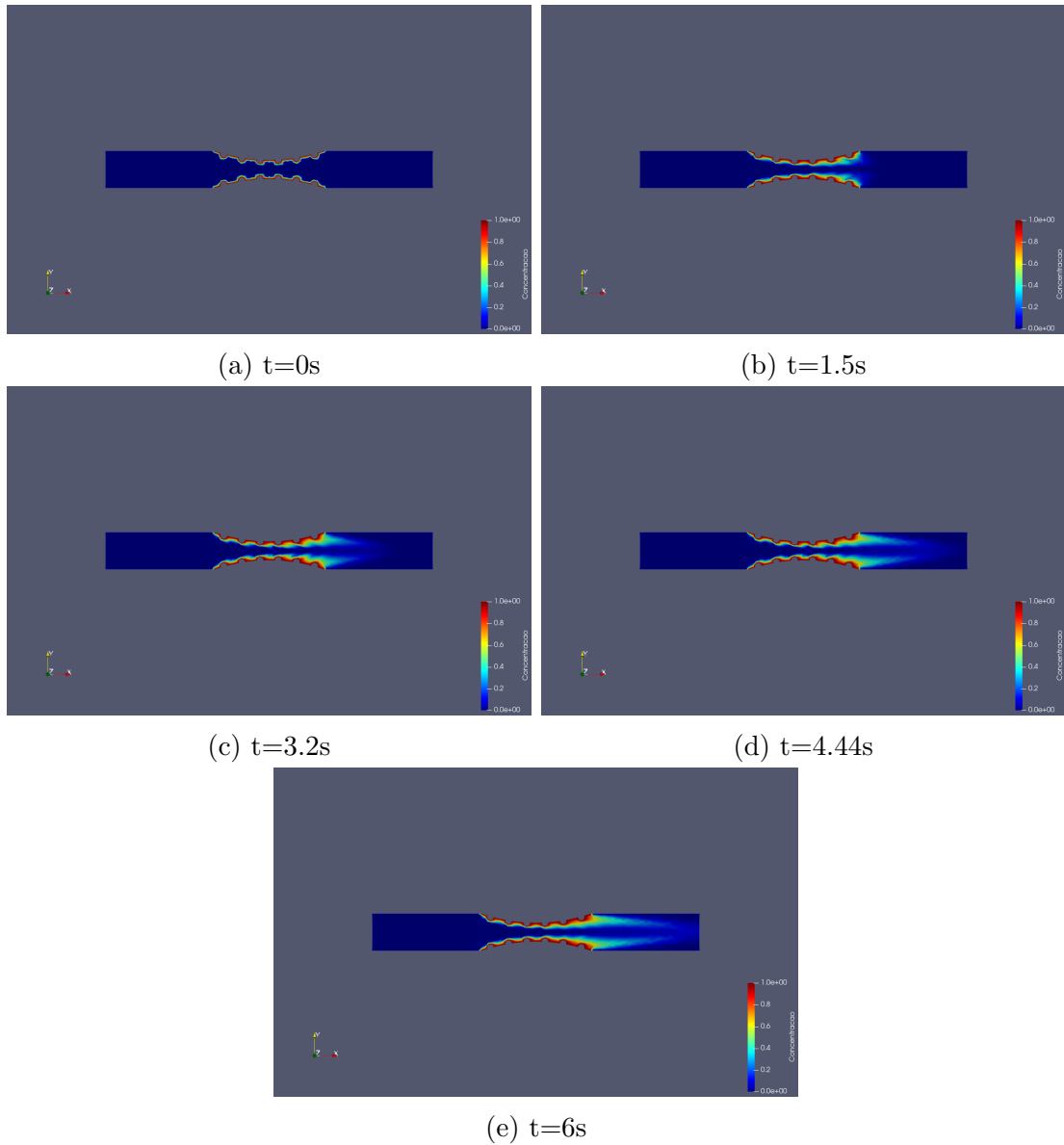


Figura 36: Difusão com  $Sc=1.0$

Em um quadro comparativo com o "Stent Atual Fletido", o caso da Figura 37 ( $Sc=10.0$ ) possui um maior espalhamento do fármaco na corrente sanguínea. A geometria favorece a difusão que ocorre de forma principalmente convectiva, mas que devido a uma baixa difusibilidade possui espalhamento mais lento do que no casos de  $Sc=0.1$  e  $Sc=1.0$ .

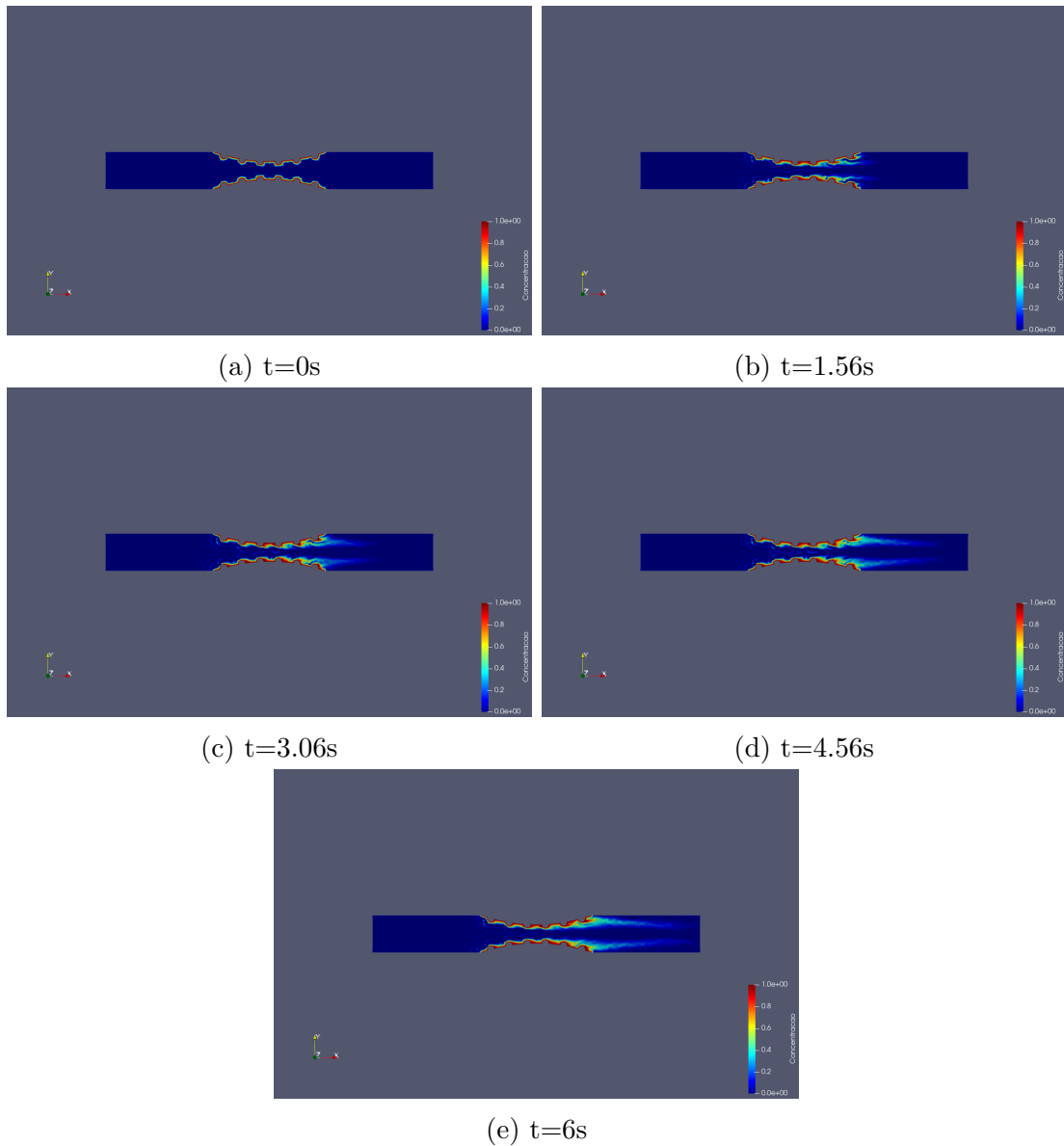


Figura 37: Difusão com  $Sc=10.0$

## 7.6 Stent com Geometria Aleatória

Para o caso do stent com geometria aleatória, a dissolução do fármaco na corrente sanguínea não difere muito dos casos anteriores onde havia um estreitamento da artéria. Com  $Sc=0.1$  a difusão é relativamente rápida. Com apenas 1.6s (Figura 38(c)) já é possível

observar uma altíssima concentração do químico dissolvido. Com 3.8s (Figura38(d)) e 6s (Figura38(e)) é possível notar que ainda não foi atingido um estágio permanente de dissolução, visto que a configuração da concentração ainda está se alterando: crescendo progressivamente com o tempo.

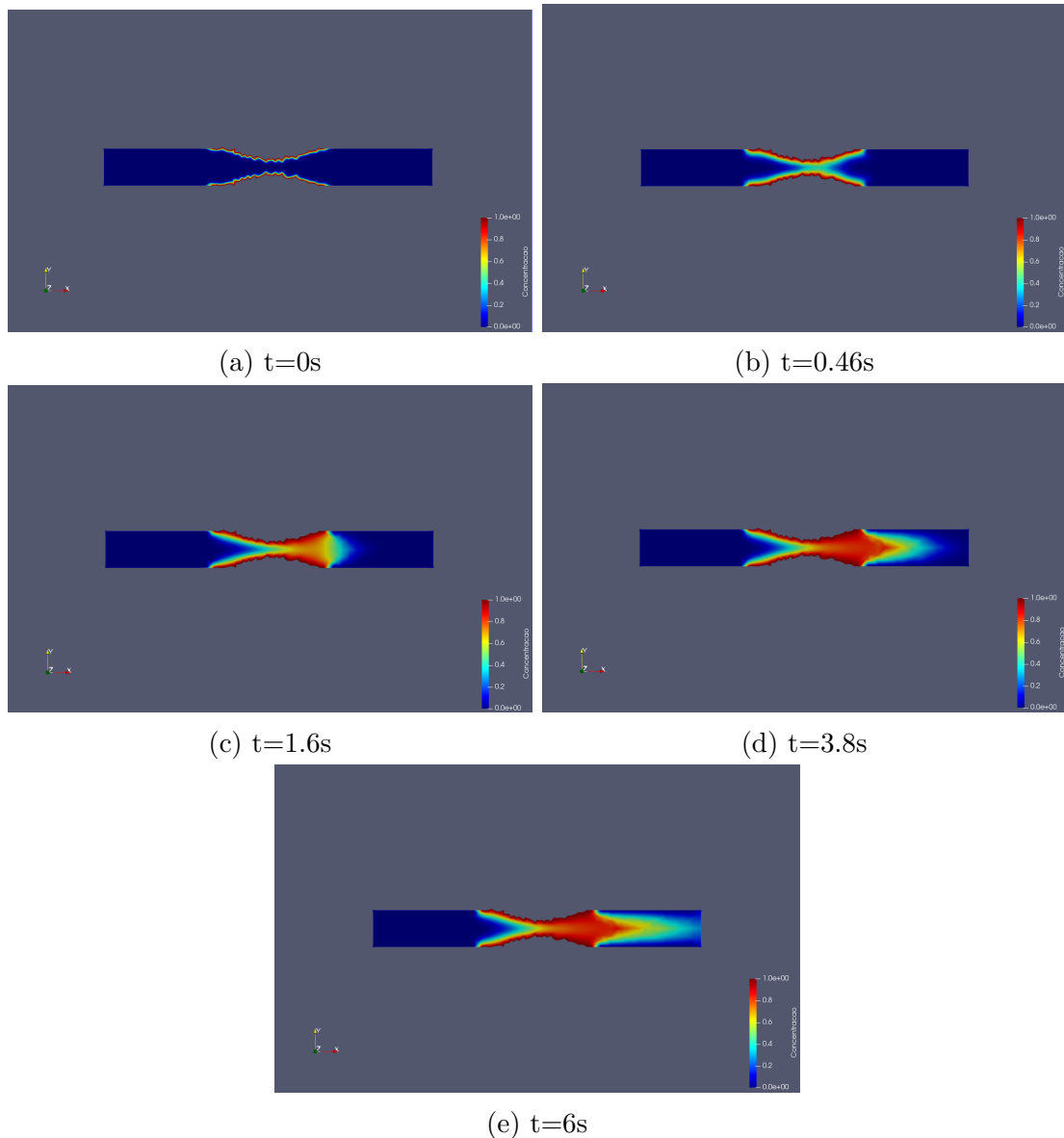


Figura 38: Difusão com  $Sc=0.1$

Já com o número de Schmidt igual a 1.0 a difusão, como era esperado, ocorre de forma mais lenta. Com 1.5s (Figura 39(b)) o quadro inicial pouco se alterou, enquanto que de 3s (Figura 39(c)) a 6s (Figura 39(e)) a mudança na concentração do medicamento é mais visível, entretanto com um quantitativo ainda muito inferior ao observado no caso anterior ( $Sc=0.1$ )

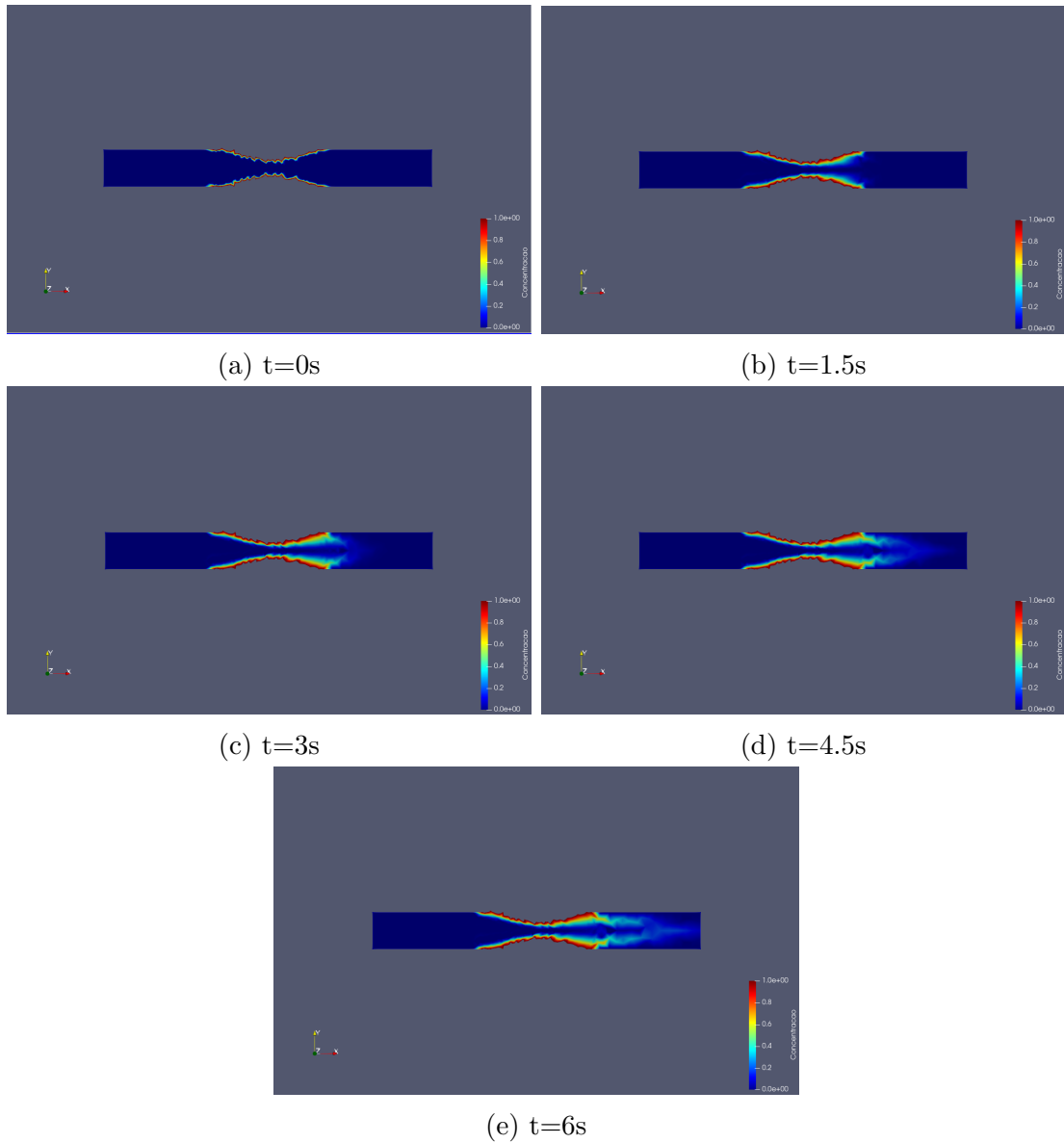


Figura 39: Difusão com  $Sc=1.0$

Da mesma forma, como era de se esperar, a difusão com o maior número de Schmidt é a mais lenta a ocorrer. Com 1.5s percorridos na simulação (Figura 40(b)) a condição inicial do problema permanece praticamente inalterada. Nos frames seguintes é possível já observar uma lenta modificação no campo de concentração. Porém, com 6s decorridos (Figura 40(e)), o campo de concentração se assemelha ao casos de  $Sc=1.0$  com apenas 1.5s (Figura 39(b)) de simulação. O fármaco está se dissolvendo de forma muito mais lenta.

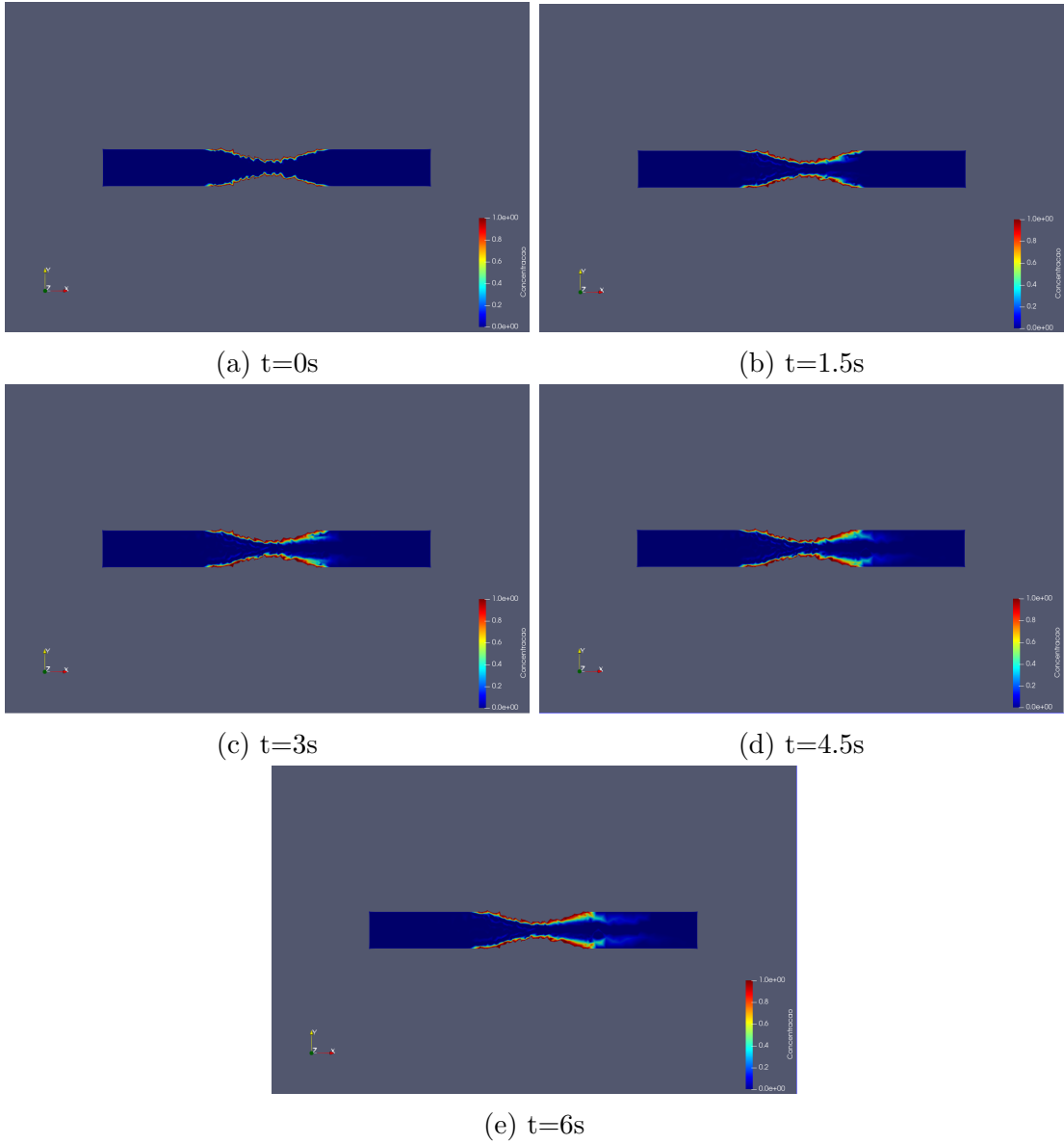


Figura 40: Difusão com  $Sc=10.0$

## 8 Resultados com Dados Reais

O trabalho de *Bozsak* (33) cita o Paclitaxel e o Sirolimus como os principais medicamentos utilizados na colocação dos stents e traz valores reais de difusividade. Para o Paclitaxel  $D = 4.2 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$  e para o Sirolimus  $D = 4.1 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$ . Os valores são muito próximos e produziriam resultados com grande semelhança. Para fins de cálculo, este trabalho utilizou apenas o valor de  $D = 4.2 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$ .

Para os valores reais de viscosidade e massa específica do sangue essa difusividade produz número de Schmidt alto: na ordem de  $10^7$ . Portanto, mais uma vez o método de Taylor-Galerkin - ou Galerkin Característico - ganha importância para conter as oscilações espúrias advindas do termo convectivo da equação da difusão da espécie química.

O valor exato de  $Sc$  é dado por:

$$Sc = \frac{\mu}{\rho D} = \frac{3.2 \cdot 10^{-3}}{1060 \cdot 4.2 \cdot 10^{-12}} \approx 7.19 \cdot 10^6 \quad (92)$$

O elevado número de Schmidt impõe uma importante restrição ao problema: a espécie química irá demorar a se difundir, o que necessita maior gasto computacional. Devido a essa restrição o  $\Delta t$  utilizado em cada iteração teve que ser aumentado para 0.5

Devido ao grande  $\Delta t$  utilizado, a modelagem para a entrada do problema será diferente, pois os efeitos do batimento cardíaco não serão bem detalhados para esse valor da constante de tempo. Assim sendo, as condições de contorno utilizadas nesse capítulo estão detalhadas na Figura 41. O número de Reynolds considerado foi aquele de máxima velocidade (período sistólico): 1200.

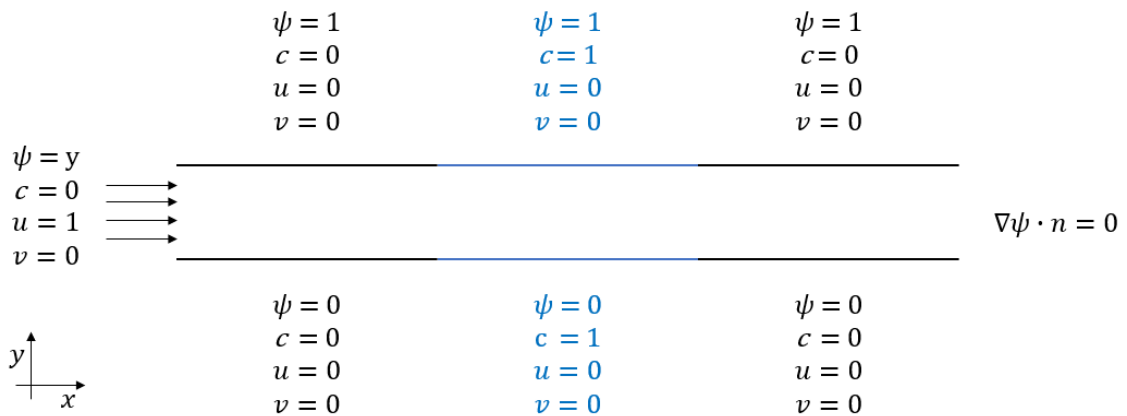


Figura 41: Condições de Contorno do Problema

## 8.1 Stent Atual

Para a geometria intitulada "Stent Atual" (Figura 42) a difusão ocorre claramente de forma bem mais lenta do que nos casos anteriores de número de Schmidt (0.1, 1.0 e 10.0). O estado onde aproximadamente se obtém um valor estacionário ocorre de forma tardia: apenas aos 7s (Figura 42(d)).

A difusão ocorre ainda de forma muito semelhante em relação aos casos anteriores de baixo Schmidt. O fármaco lentamente ocupa o leito do canal arterial devido ao processo convectivo da difusão.

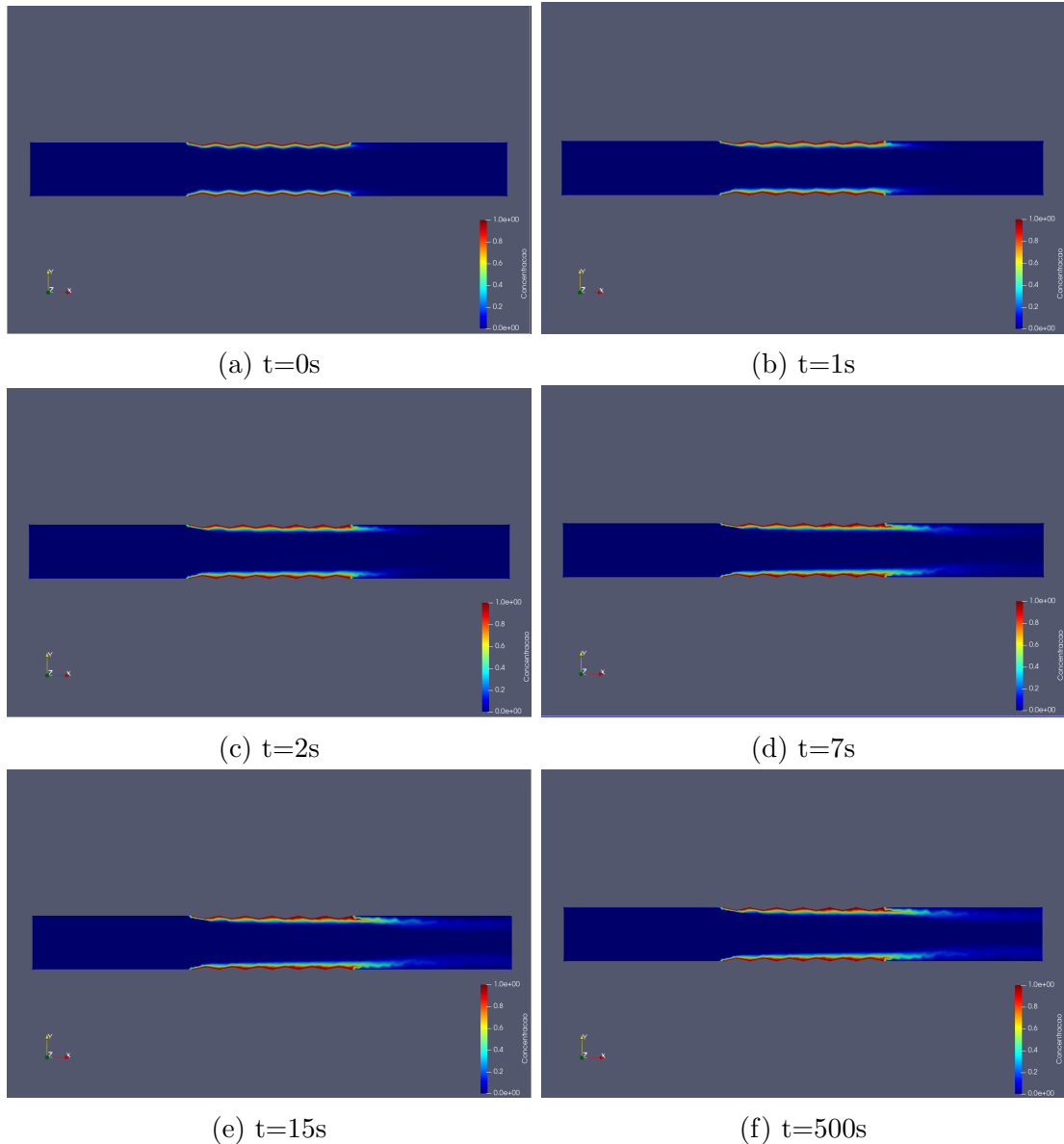


Figura 42: Difusão com  $Sc$  na ordem de  $10^7$

## 8.2 Stent Atual Fletido

Já para o Stent Atual Fletido (Figura 43) mudanças claras em relação a difusão observada anteriormente começam a ser observadas. A partir de 8.5s (Figura 43(d)) já é possível observar claramente o surgimento de vórtices na difusão do medicamento. Com  $t=17s$  (Figura 43(e)) temos já outro estado da difusão, onde de forma notória a difusão está se dando progressivamente em forma de ondas com aspecto senoidal, que se movimentam para a direita com determinada velocidade. Em  $t=500s$  (Figura 43(f)) a concentração do soluto no sangue já é maior, entretanto o aspecto de onda senoidal se deslocando

permanece.

Como principais aspectos que podem ter contribuído para essa diferente percepção dos valores calculados tem-se: o fator de estreitamento do vaso que gerou maior interferência no campo de velocidades do fluido e conseqüentemente na difusão, além do maior valor de  $\Delta t$  utilizado, que proporcionou uma análise de tempo mais longínqua.

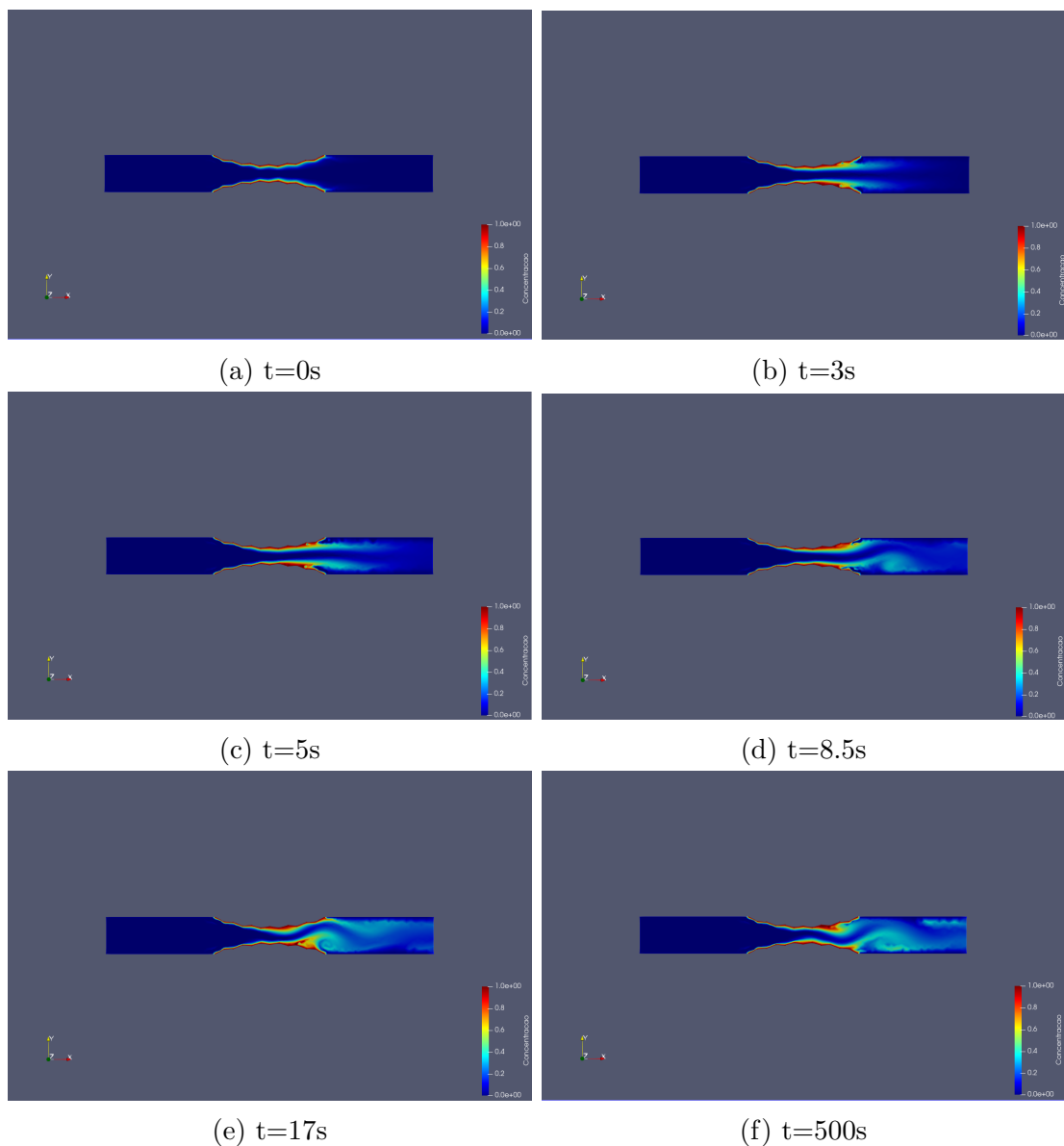


Figura 43: Difusão com  $Sc$  na ordem de  $10^7$

### 8.3 Stent Circular

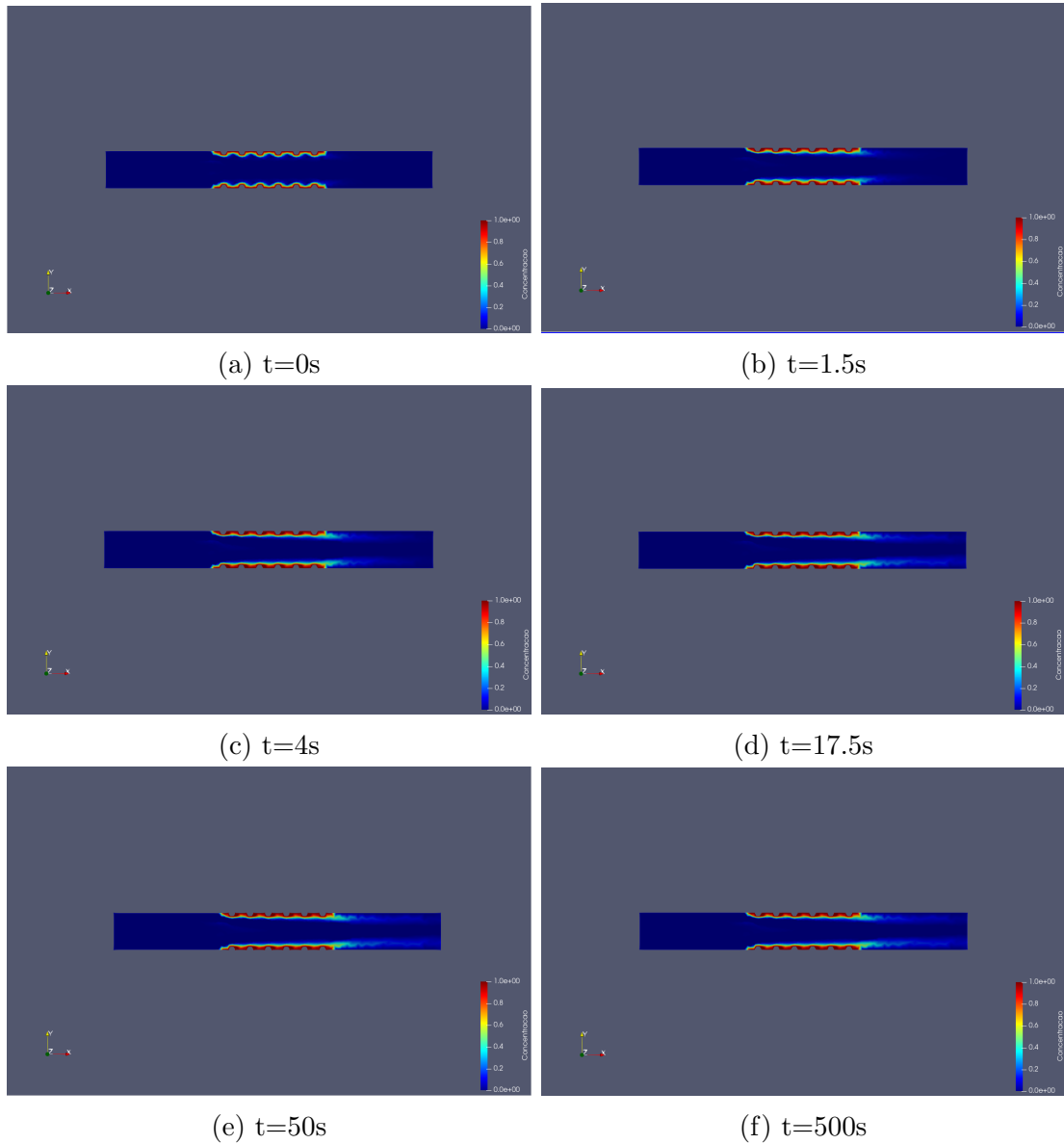


Figura 44: Difusão com  $Sc$  na ordem de  $10^7$

Conforme pode ser observado na Figura 44, assim como a geometria do Stent Atual, esta também não possui curvatura estreitando o canal e restringindo a passagem de sangue. Dessa forma, a difusão se dá de forma muito semelhante aos casos de baixo Schmidt. Gradualmente o produto ocupa as partes mais interiores do canal sanguíneo, de forma que na geometria da simulação realizada o fármaco ainda não ocupa o centro da artéria.

## 8.4 Stent Circular Fletido

Tal como a geometria do Stent Atual Fletido, que possui um estreitamento do duto arterial, nesta geometria o fármaco também se difunde de maneira mais lenta do que para baixos Schmidt (Figura 45), porém, conforme pode ser observado, a distribuição da concentração em um mesmo instante começa a se aproximar de uma curva seno, conforme pode ser visto no tempo  $t=6s$  (Figura 45(c)). Já no tempo  $t=13s$  (Figura 45(d)) a curva se movimento para a direita, tal qual a equação de uma onda. Essa oscilação permanece continuamente conforme a difusão do químico vai ocorrendo. Em  $t=500s$  (Figura45(f)) concentrações maiores já podem ser observadas nas proximidades do stent cardíaco, mas as oscilações em forma de onda permanecem.

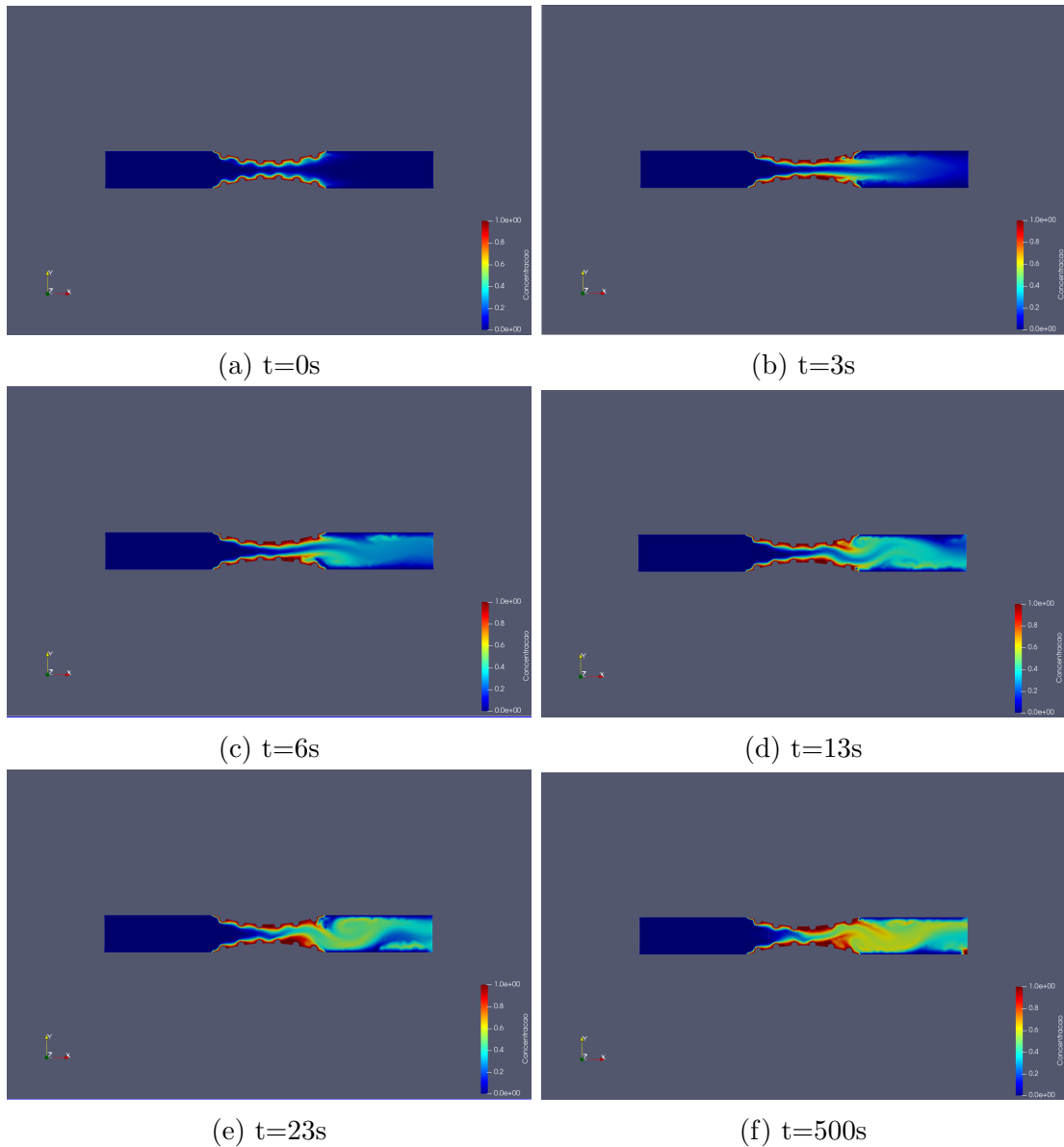


Figura 45: Difusão com  $Sc$  na ordem de  $10^7$

## 8.5 Geometria Aleatória

De forma bem semelhante aos casos anteriores onde havia constrição da artéria coronária, a difusão do medicamento no sangue não atinge um estado permanente. As imagens em  $t=7s$  (Figura 46(c)),  $t=11.5s$  (Figura 46(d)) e  $t=17s$  (Figura 46(e)) mostram claramente três estados diferentes onde a concentração do químico é praticamente a mesma, entretanto possuem arranjos completamente diferentes no duto sanguíneo. Assim como nos casos análogos, a concentração se distribui com uma tendência senoidal que vai se deslocando para a direita (direção do deslocamento do fluido) nos mesmo moldes que

uma equação de onda qualquer.

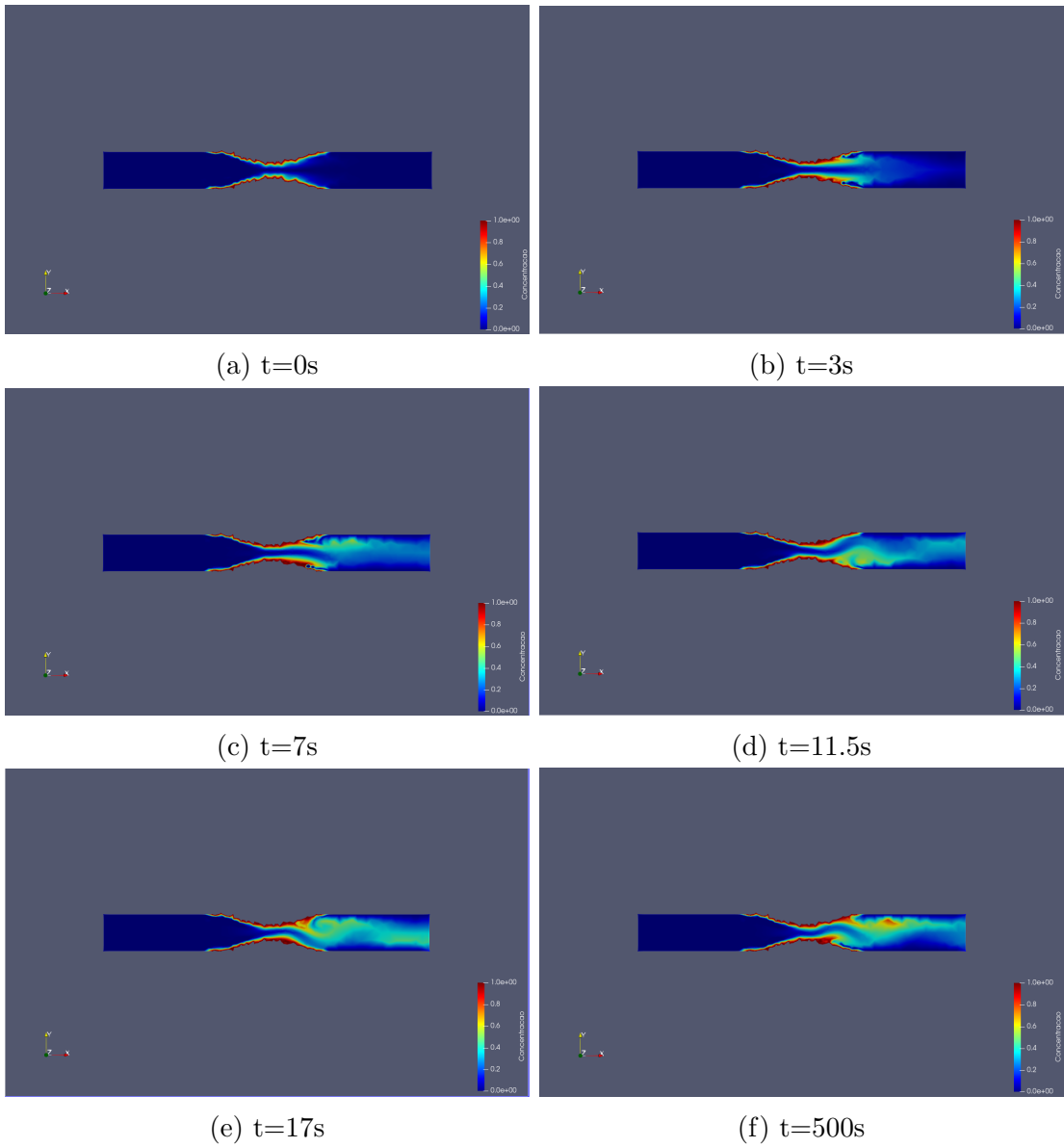


Figura 46: Difusão com  $Sc$  na ordem de  $10^7$

## 9 Conclusão

Este trabalho a partir de equações fundamentais da mecânica dos fluidos e de difusão química gerou resultados importantes para a melhor compreensão e utilização de stents farmacológicos. Para tanto, o (MEF) se mostrou como um poderosíssima ferramenta de cálculo de equações diferenciais. O esquema Taylor-Galerkin se mostrou também eficaz para conter oscilações espúrias que surgiram em trabalhos anteriores que utilizavam constantes com valores elevados.

A programação em *Python* para os problemas aqui propostos se mostrou apropriada. A respeito da validação do código, os resultados obtidos foram satisfatórios tendo em vista a limitação computacional imposta pela máquina utilizada neste estudo em comparação com outras que já foram empenhadas em trabalhos dessa espécie.

Assim como era esperado, pode-se confirmar que o número de Schmidt exerce fortíssima influência sob a difusão de um medicamento nas artérias coronárias. Para baixos números de Schmidt, a difusibilidade é alta, logo o medicamento rapidamente irá se espalhar para as partes mais remotas do corpo humano. No entanto, para altos números de Schmidt, a difusibilidade é baixa, logo o medicamento terá mais dificuldades para se distribuir no corpo humano.

Não necessariamente uma maior difusibilidade é sempre desejada, dependendo de estudos farmacológicos, pode ser que seja necessário o emprego de uma menor difusibilidade no problema real. Esse questionamento no entanto, não faz parte desse trabalho.

A correlação entre o número de Schmidt aplicado e o ponto onde altas concentrações de soluto começam a surgir no leito do canal arterial é bem nítida. Nos estudos que tiveram como base baixos números de Schmidt e simulação do tempo equivalente a 6 segundos (capítulo 7), o centro do duto foi rapidamente atingindo altas concentrações em um trecho bem próximo daquele onde está posicionado o stent no caso da constante ser igual a 0.1. Por outro lado, quando a constante assumiu os valores de 1.0 e 10.0, esse ponto do eixo arterial onde altas concentrações de soluto começam a ser percebidas gradualmente se afastou do ponto onde o stent está posicionado. Essa diferença é extremamente visível

tanto nas geometrias com o stent reto, quanto nas geometrias em que o stent se encontra fletido.

As ranhuras do stent, isto é, a forma como suas paredes são compostas, não interferiram em nenhum dos casos estudados. As geometrias stent atual e stent circular não possuem divergência significativa entre seus casos de difusão, independentemente do valor da constante de Schmidt que se esteja analisando.

Comparando as geometrias análogas é possível perceber que a presença de curvatura na geometria do stent afeta a difusão que irá ocorrer. Assim sendo, o stent quando está fletido favorece a difusão do químico, de forma que esta passa ocorrer de forma mais rápida. Essa propriedade pode ser notada tanto no stent atual, quanto no stent circular. Corroborando com essa análise, os dados obtidos na geometria intitulada "stent com geometria aleatória". Os gráficos obtidos nesse último caso, são extremamente semelhantes aos encontrados nas demais geometrias com constrição de fluxo sanguíneo, de forma que é possível se concluir que a aleatoriedade da presença de quinas e semi-círculos nas paredes desse stent pouco ou nada contribuiu para a difusão ocorrida.

Já para os casos onde foi trabalhado o número de Schmidt com o valor de  $7.19 \cdot 10^6$  é possível observar que a ausência de curvaturas na estrutura do stent proporciona, assim como nos casos anteriores, um regime praticamente estacionário para a difusão da espécie química ao longo do tempo. Como era de se esperar, o ponto do eixo do canal arterial onde concentrações mais altas de soluto começam a ser notadas se encontra bem mais distante do stent do que no casos em que a constante possuía valores menores.

Por outro lado, nos três casos onde há um estreitamento do vaso sanguíneo em determinado trecho foi observado um maior espalhamento da espécie química nas proximidades do stent farmacológico. Todavia, nesses casos também é possível notar a presença de vórtices nos gráficos da concentração da espécie química. Esses vórtices lembram as esteiras de Von Kármán, que surgem na mecânica dos fluidos ao se perturbar um escoamento laminar, que passa então a ser classificado como turbulento. Essas esteiras tem aspecto senoidal e se deslocam no formato de uma onda. Da mesma forma, os vórtices aqui gerados também se deslocam no formato de ondas e continuaram surgindo indefinidamente

até  $t=500s$ .

Para futuros trabalhos é importante avaliar a funcionalidade de outros métodos que não o de Taylor, ou Taylor-Galerkin para a geração de resultados satisfatório ou até melhores dos que aqui foram encontrados, tendo em vista que uma elevadíssima constante de Schmidt foi utilizada nos cálculos. Também é possível mudar a modelagem do problema e passar a analisá-lo como um fluido multifásico para a obtenção de resultados mais realistas. Incluir uma simulação do problema considerando o sangue como um fluido não-newtoniano também é uma possibilidade, visto que há evidências científicas de que dessa forma estaria se aproximando mais do caso real, conforme citado por *Thurston et. al* (34).

## Referências

- 1 GOMES, M. F. *Análise CFD de Escoamento em Artérias Coronárias para Diferentes Configurações de Restrição de Fluxo*. 122 f. Monografia (Graduação) — Curso de Engenharia Mecânica da Escola Politécnica, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2021.
- 2 DONEA, J. A taylor–galerkin method for convective transport problems. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Wiley Online Library, v. 20, n. 1, p. 101–119, 1984.
- 3 BOZSAK, F.; CHOMAZ, J.-M.; BARAKAT, A. I. Modeling the transport of drugs eluted from stents: physical phenomena driving drug distribution in the arterial wall. *Biomechanics and modeling in mechanobiology*, Springer, v. 13, n. 2, p. 327–347, 2014.
- 4 THOMAS, C.; MORGAN, K.; TAYLOR, C. A finite element analysis of flow over a backward facing step. *Computers & Fluids*, Elsevier, v. 9, n. 3, p. 265–278, 1981.
- 5 2021. Url <https://5.imimg.com/data5/IW/CJ/RR/SELLER-67824167/fea-analysis-500x500.jpg>.
- 6 FISH, J.; BELYTSCHKO, T. *A first course in finite elements*. [S.l.]: John Wiley & Sons New York, 2007. v. 1.
- 7 TURNER, M. J. et al. Stiffness and deflection analysis of complex structures. *journal of the Aeronautical Sciences*, v. 23, n. 9, p. 805–823, 1956.
- 8 CLOUGH, R. W. The finite element method in plane stress analysis. In: *Proceedings of 2nd ASCE Conference on Electronic Computation, Pittsburgh Pa., Sept. 8 and 9, 1960*. [S.l.: s.n.], 1960.
- 9 COURANT, R. et al. Variational methods for the solution of problems of equilibrium and vibrations. *Lecture notes in pure and applied mathematics*, MARCEL DEKKER AG, p. 1–1, 1994.
- 10 ANJOS, G. R. dos. *Computação Científica para Engenheiros*. [S.l.]: Disponível em: [https://drive.google.com/file/d/1Vwv0MQztD-sbMidH6-sV1wKXZ5fztw\\_x/view](https://drive.google.com/file/d/1Vwv0MQztD-sbMidH6-sV1wKXZ5fztw_x/view), Acesso em: 19 de fev de 2021.
- 11 CHRISTIE, I. et al. Finite element methods for second order differential equations with significant first derivatives. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Wiley Online Library, v. 10, n. 6, p. 1389–1396, 1976.
- 12 HEINRICH, J. C. et al. An ‘upwind’ finite element scheme for two-dimensional convective transport equation. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, v. 11, n. 1, p. 131–143, 1977.
- 13 BROOKS, A. N.; HUGHES, T. J. Streamline upwind/petrov-galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible navier-stokes equations. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, Elsevier, v. 32, n. 1-3, p. 199–259, 1982.

- 14 AMARAL, T. A. C. do. *Análise CFD de Difusão de Espécie Química para Diferentes Geometrias de Stent Farmacológico*. 117 f. Monografia (Graduação) — Curso de Engenharia Mecânica da Escola Politécnica, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2020.
- 15 TOMBERLI, B. et al. *A brief history of coronary artery stents*. 2018. 312–319 p.
- 16 LIMA, A. L. *Stent: o que é, para que serve e principais tipos*. 2021. Url <https://www.tuasaude.com/stent-farmacologico/>.
- 17 MOSES, J. W. et al. Sirolimus-eluting stents versus standard stents in patients with stenosis in a native coronary artery. *New England Journal of Medicine*, Mass Medical Soc, v. 349, n. 14, p. 1315–1323, 2003.
- 18 SILVA, G. B. G. et al. Stents farmacológicos: estado atual. *Rev. Soc. Cardiol. Estado de São Paulo*, 2018.
- 19 LUCENA, R. et al. On the transport through polymer layer and porous arterial wall in drug-eluting stents. *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, Springer, v. 40, n. 12, p. 1–10, 2018.
- 20 FOX, R. W.; MCDONALD, A. T.; PRITCHARD, P. Introdução à mecânica dos fluidos, 5ª edição. *LTC Editora*, 2001.
- 21 BIRD, R. B.; STEWART, W. E.; LIGHTFOOT, E. N. *Fenómenos de transporte: un estudio sistemático de los fundamentos del transporte de materia, energía y cantidad de movimiento*. [S.l.]: Reverté, 1982.
- 22 CUNHA, L. H. C. *Formulação Corrente-Vorticidade em Problemas de Transferência de Calor Conjugado usando MEF*. 92 f. Monografia (Graduação) — Centro de Tecnologia e Ciências. Faculdade de Engenharia, Rio de Janeiro, 2019.
- 23 SILVA, J. A. *Método de Elementos Finitos em Python com a abordagem lagrangiana euleriana para as oscilações de um cilindro em um escoamento transversal*. 101 f. Monografia (Graduação) — Curso de Engenharia Mecânica da Escola Politécnica, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2020.
- 24 AMARAL, T. A. C. do. *Análise CFD de difusão de espécie química para diferentes geometrias de stent farmacológico*. 117 f. Monografia (Graduação) — Curso de Engenharia Mecânica da Escola Politécnica, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2020.
- 25 LEWIS, R. W.; NITHIARASU, P.; SEETHARAMU, K. N. *Fundamentals of the finite element method for heat and fluid flow*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2004.
- 26 WIKIPÉDIA. *Método dos Elementos Finitos*. 2021. Url [https://pt.wikipedia.org/wiki/M%C3%A9todo\\_dos\\_elementos\\_finitos](https://pt.wikipedia.org/wiki/M%C3%A9todo_dos_elementos_finitos).
- 27 PONTES, J.; MANGIAVACCHI, N. *Fenômenos de Transferência com Aplicações às Ciências Físicas e à Engenharia*. [S.l.]: Rio de Janeiro: SBM, 2016.
- 28 BRENNEN, C. E. An internet book on fluid dynamics. *INDEX for INTERNET BOOK ON FLUID DYNAMICS*, 2006.

- 29 GHIA, U.; GHIA, K. N.; SHIN, C. High-re solutions for incompressible flow using the navier-stokes equations and a multigrid method. *Journal of computational physics*, Elsevier, v. 48, n. 3, p. 387–411, 1982.
- 30 ERTURK, E. Numerical solutions of 2-d steady incompressible flow over a backward-facing step, part i: High reynolds number solutions. *Computers & Fluids*, Elsevier, v. 37, n. 6, p. 633–655, 2008.
- 31 SILVA, I. C. da; JATOBÁ, L. F. C. Analysis of blood flow in the carotid artery using computational fluid dynamics. In: *Proceedings of 18th Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering*. Online: [s.n.], 2020.
- 32 KU, D. N.; GIDDENS, D. P. Pulsatile flow in a model carotid bifurcation. *Arteriosclerosis: An Official Journal of the American Heart Association, Inc.*, Am Heart Assoc, v. 3, n. 1, p. 31–39, 1983.
- 33 BOZSAK, F. Optimization of drug-eluting stents. cardiology and cardiovascular system. *Ecole Polytechnique X*, pastel-00858100f, 2013.
- 34 THURSTON, G.; HENDERSON, N.; JENG, M. Viscoelastic properties of blood on analoges. *Advances in hemodynamics and hemorheology*. Jai Press, Inc, 2004.

## A Resultados Complementares

### A.1 Soluções referentes ao capítulo "Resultados"

Nesta seção é importante ressaltar que foram simuladas a sístole e diástole cardíaca. Logo os resultados gráficos variam de um caso para outro, pois em alguns casos a equação periódica está adiantada e em outros, atrasada.

#### A.1.1 Resultados complementares da geometria stent atual aos 6s

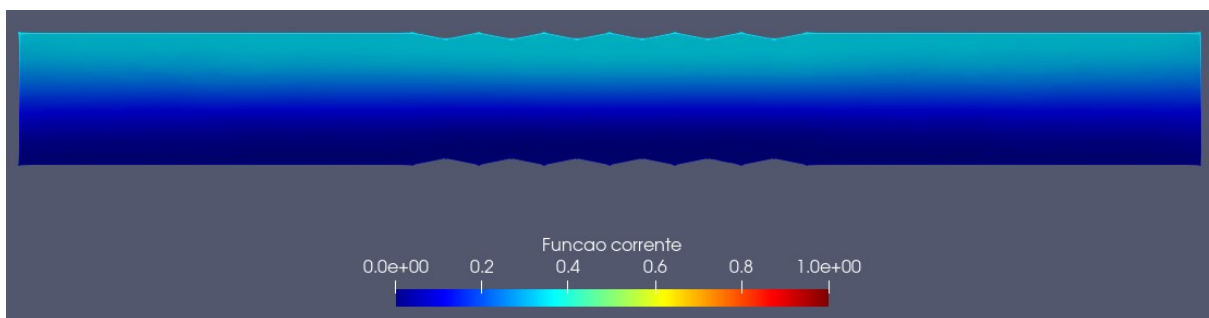


Figura 47: Função Corrente.  $Sc=0.1$

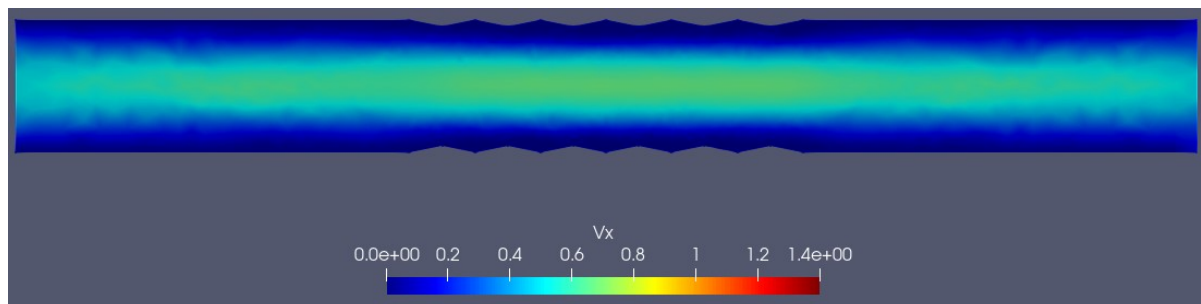


Figura 48:  $V_x$ .  $Sc=0.1$

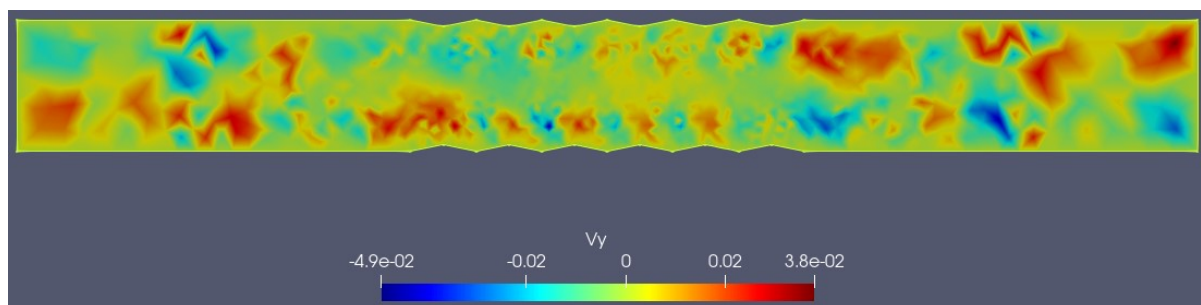


Figura 49:  $V_y$ .  $Sc=0.1$

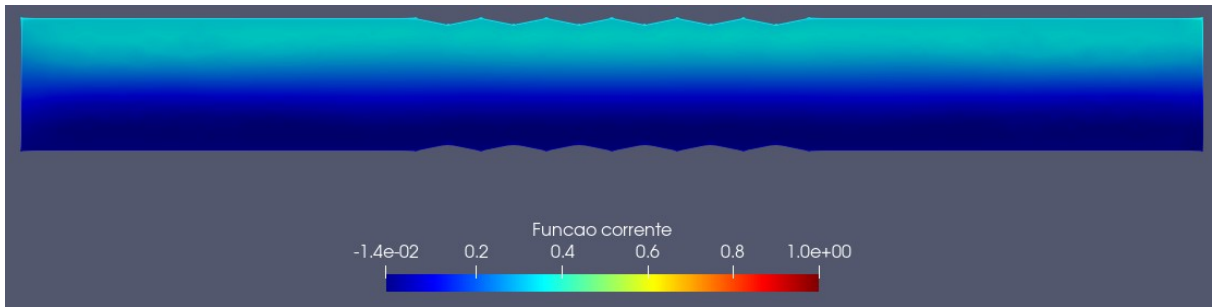


Figura 50: Função Corrente.  $Sc=1.0$

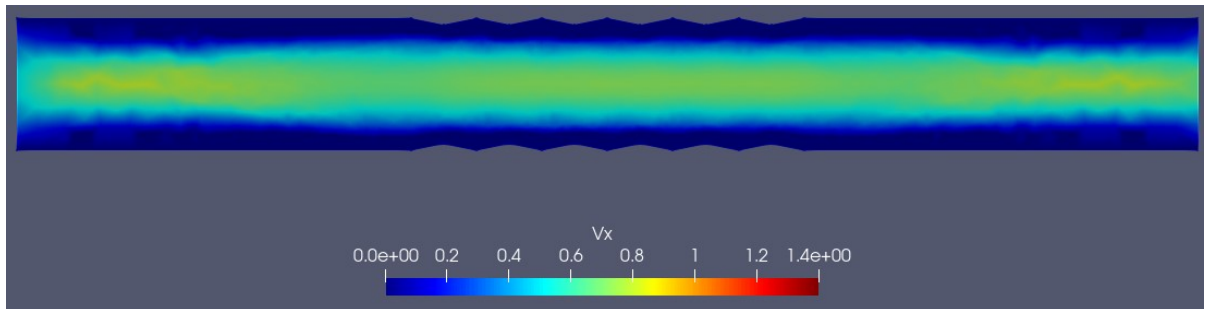


Figura 51:  $V_x$ .  $Sc=1.0$

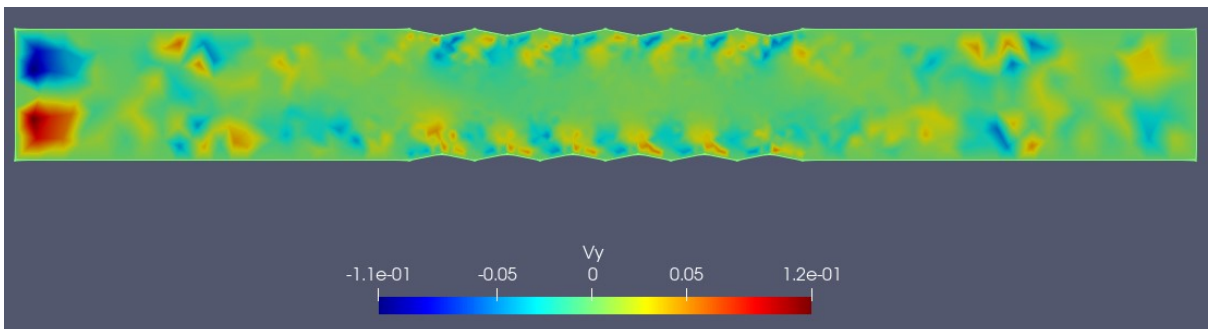


Figura 52:  $V_y$ .  $Sc=1.0$

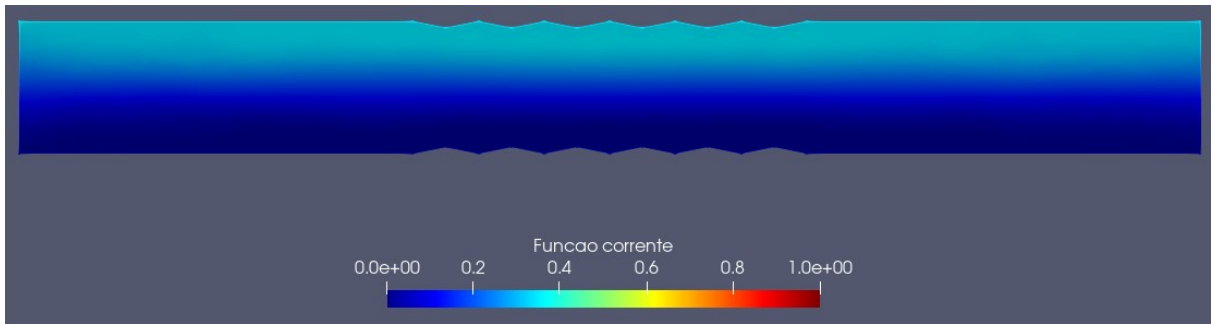


Figura 53: Função Corrente.  $Sc=10.0$

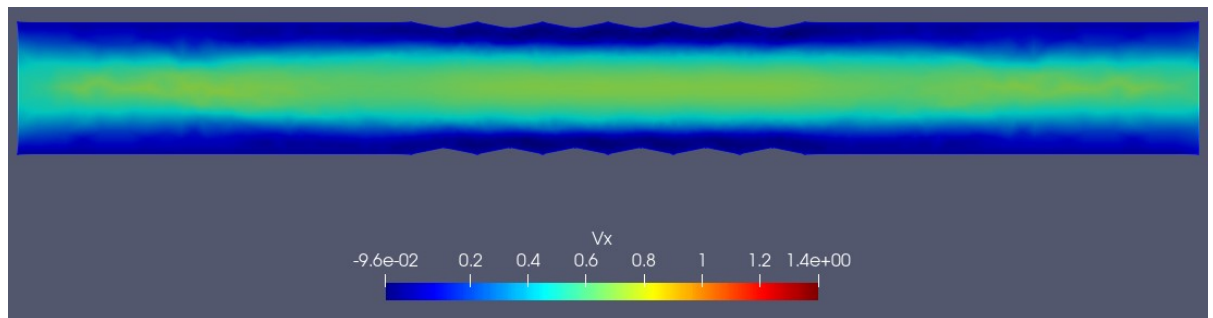


Figura 54:  $V_x$ .  $Sc=10.0$

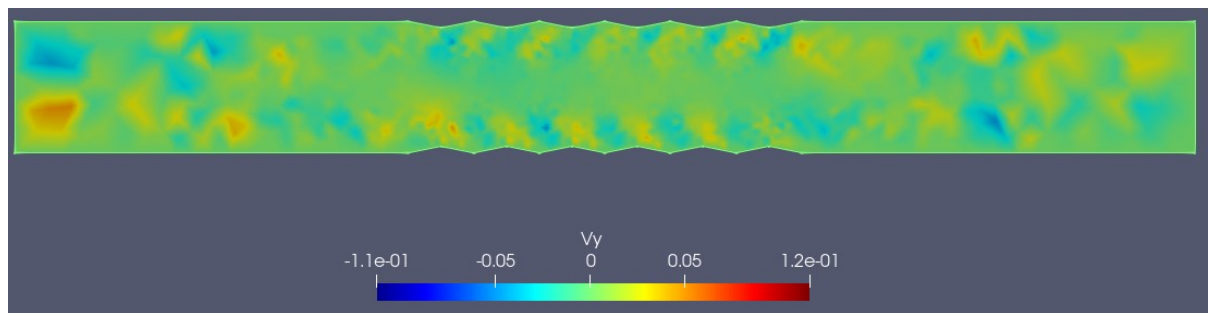


Figura 55:  $V_y$ .  $Sc=10.0$

A.1.2 Resultados complementares da geometria stent atual fletido aos 6s

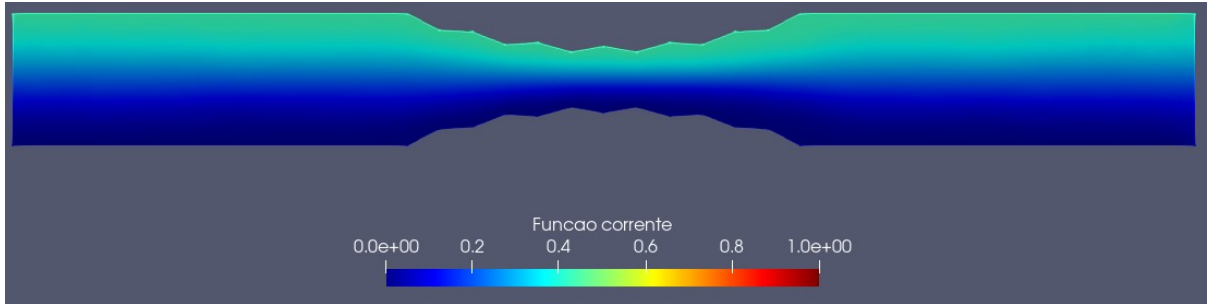


Figura 56: Função Corrente.  $Sc=0.1$

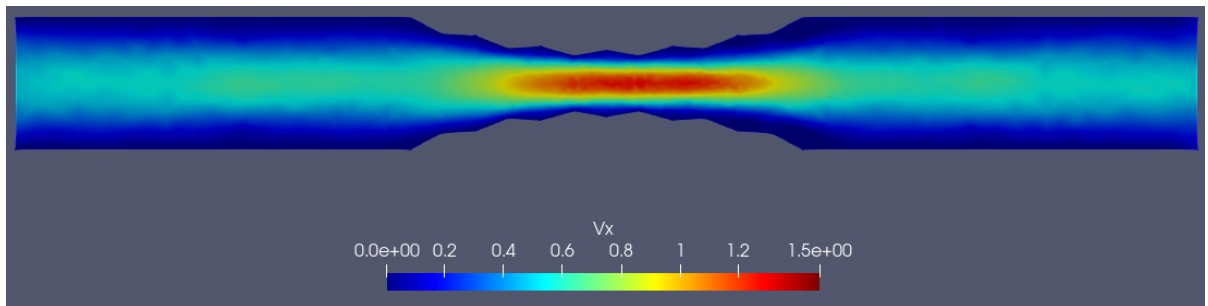


Figura 57:  $V_x$ .  $Sc=0.1$

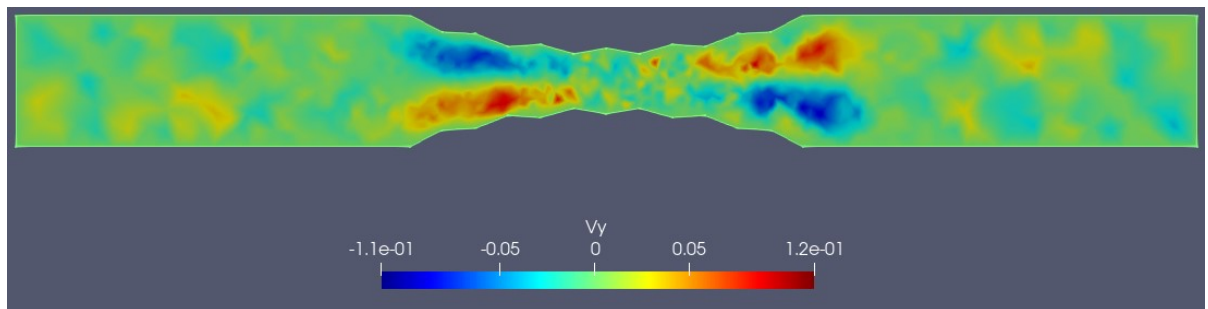


Figura 58:  $V_y$ .  $Sc=0.1$

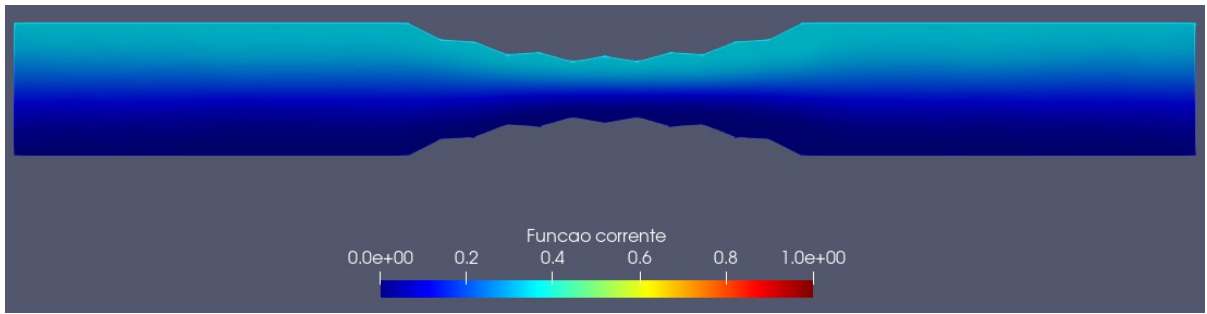


Figura 59: Função Corrente.  $Sc=1.0$

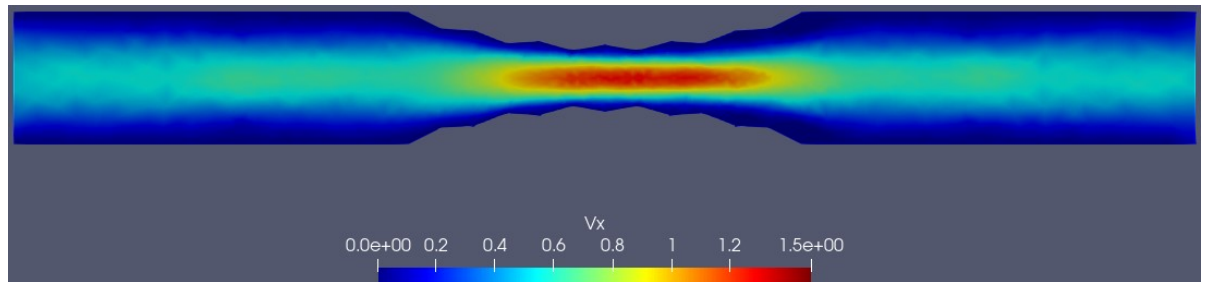


Figura 60:  $V_x$ .  $Sc=1.0$

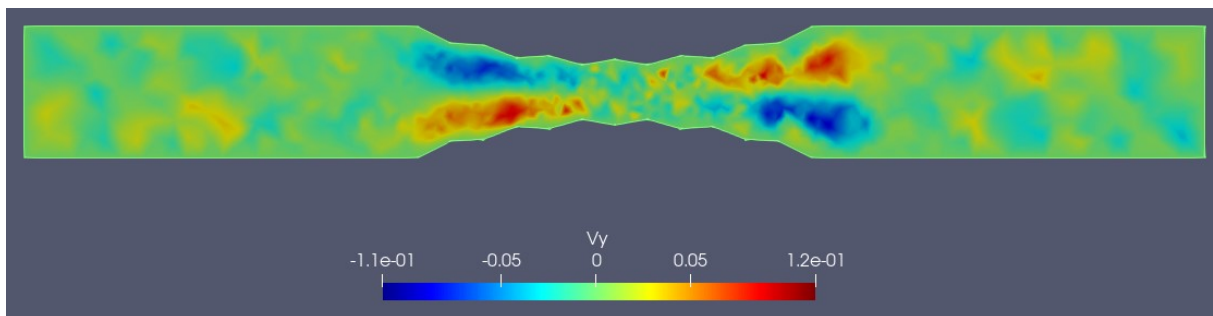


Figura 61:  $V_y$ .  $Sc=1.0$

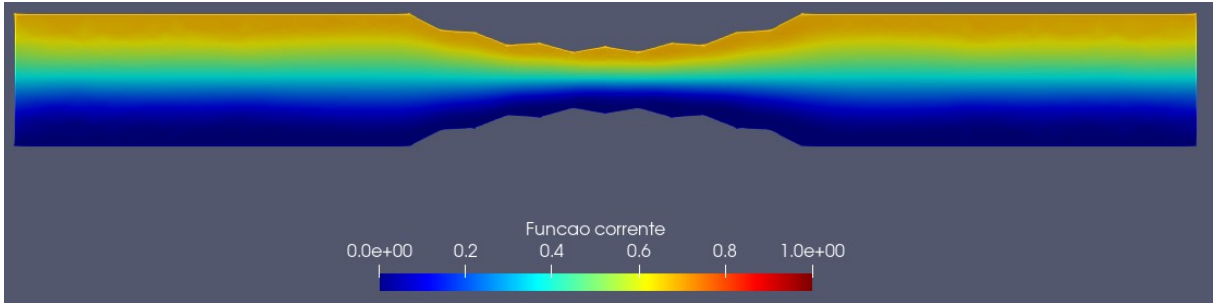


Figura 62: Função Corrente.  $Sc=10.0$

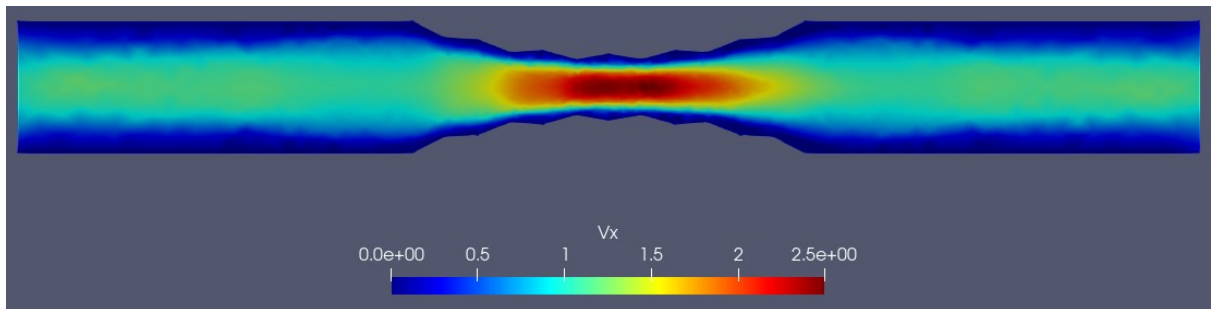


Figura 63:  $V_x$ .  $Sc=10.0$

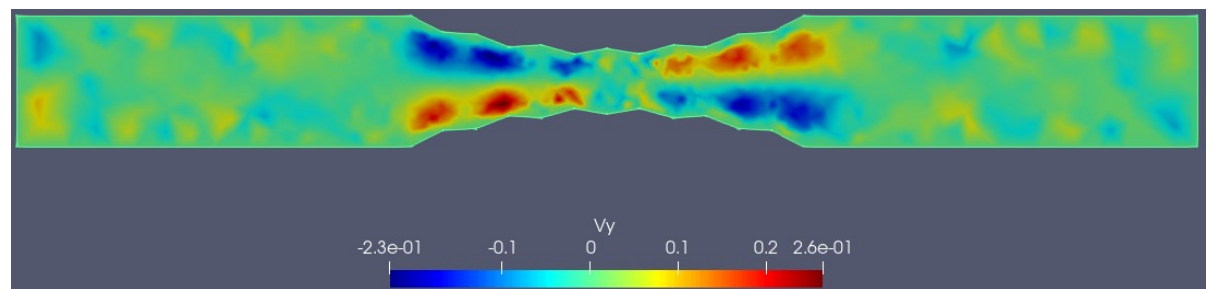


Figura 64:  $V_y$ .  $Sc=10.0$

### A.1.3 Resultados complementares da geometria stent circular aos 6s

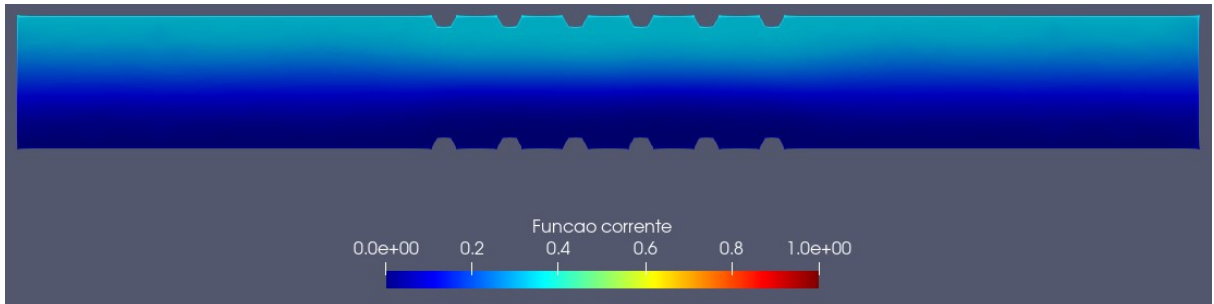


Figura 65: Função Corrente.  $Sc=0.1$

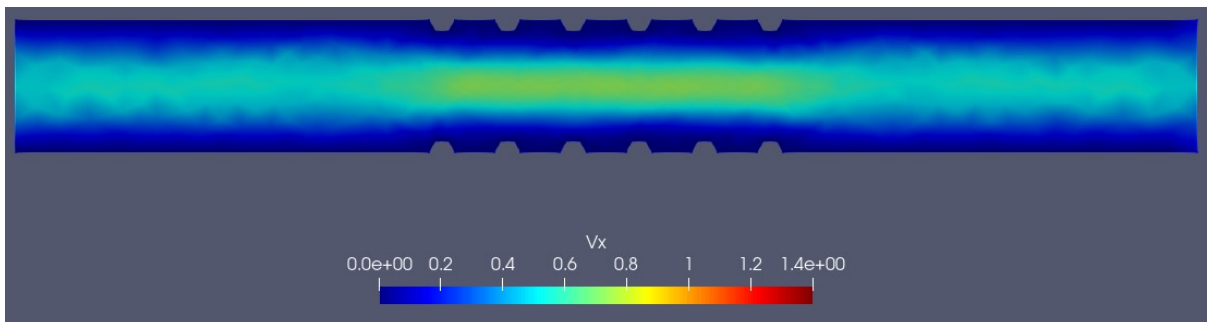


Figura 66:  $V_x$ .  $Sc=0.1$

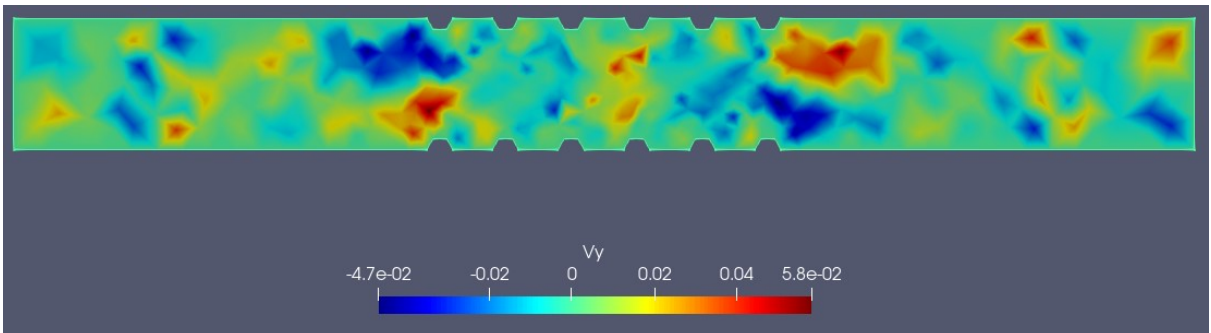


Figura 67:  $V_y$ .  $Sc=0.1$

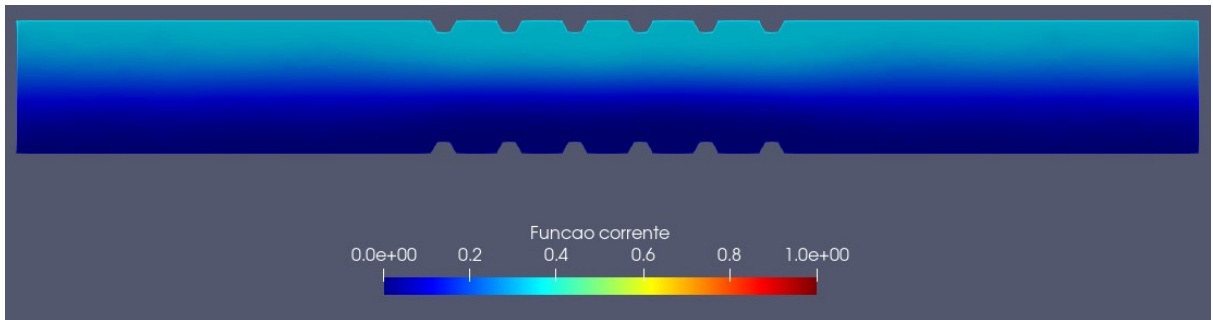


Figura 68: Função Corrente.  $Sc=1.0$

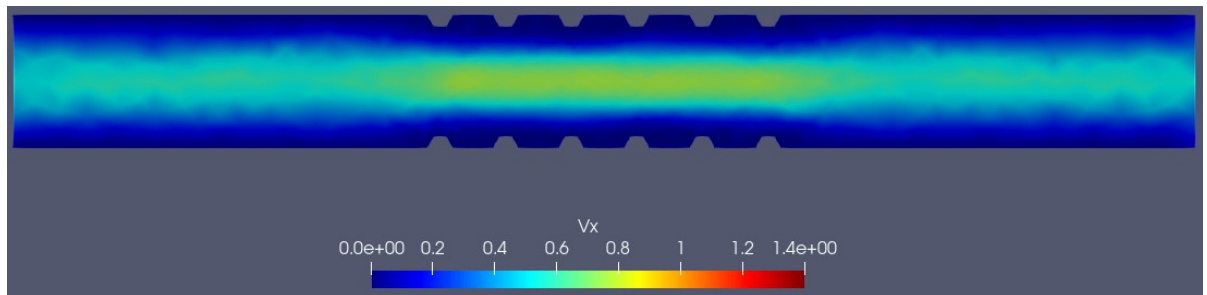


Figura 69:  $V_x$ .  $Sc=1.0$

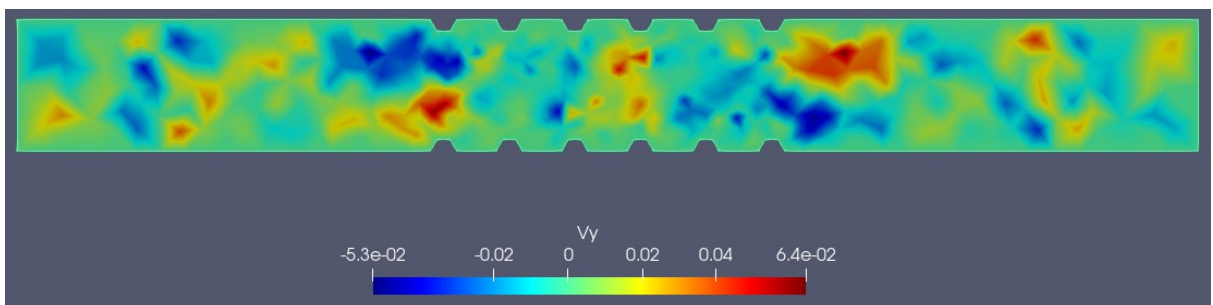


Figura 70:  $V_y$ .  $Sc=1.0$

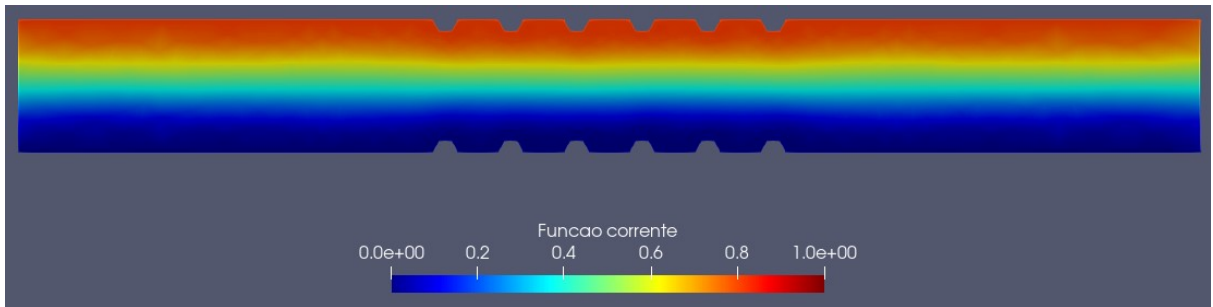


Figura 71: Função Corrente.  $Sc=10.0$

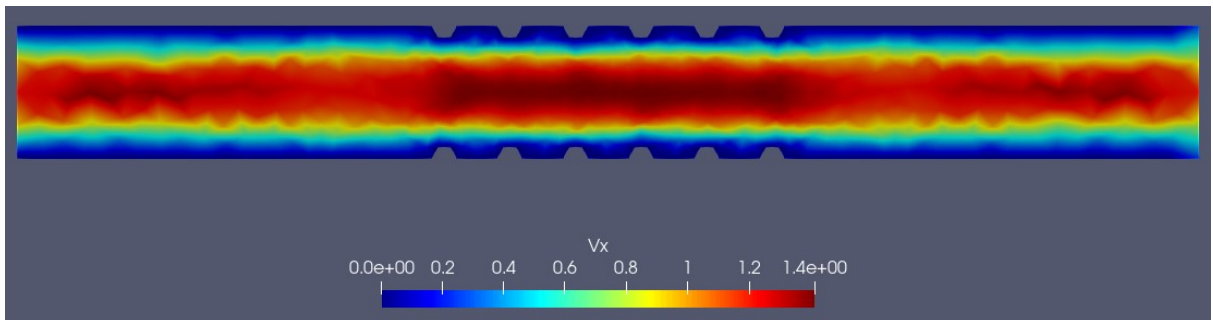


Figura 72:  $V_x$ .  $Sc=10.0$

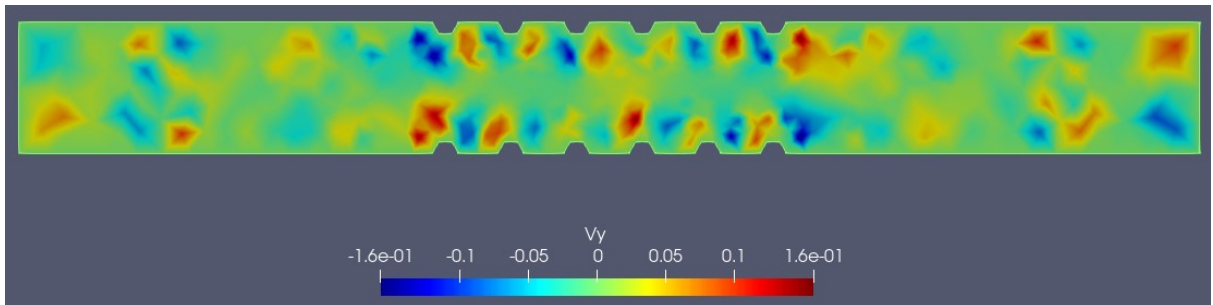


Figura 73:  $V_y$ .  $Sc=10.0$

#### A.1.4 Resultados complementares da geometria stent circular fletido aos 6s

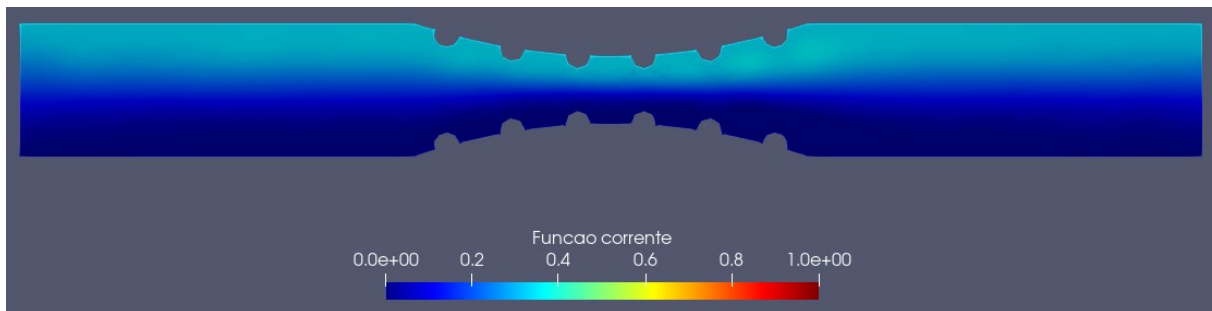


Figura 74: Função Corrente.  $Sc=0.1$

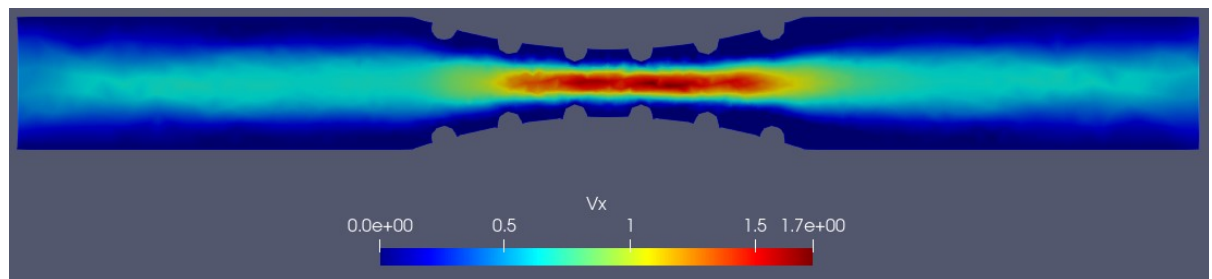


Figura 75:  $V_x$ .  $Sc=0.1$

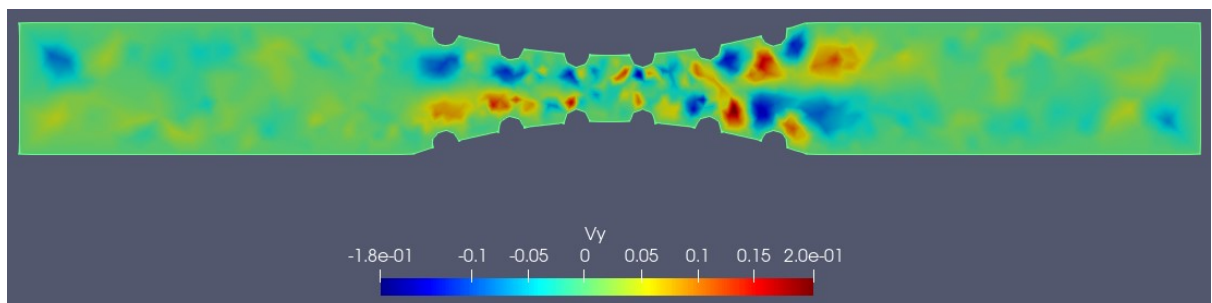


Figura 76:  $V_y$ .  $Sc=0.1$

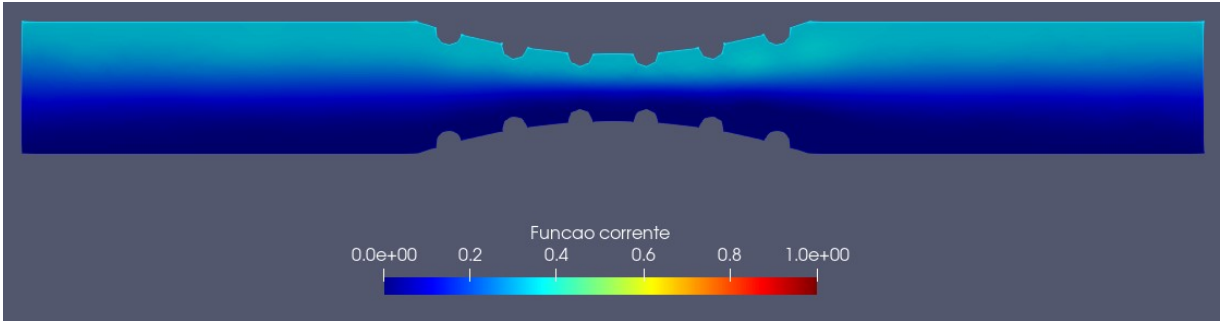


Figura 77: Função Corrente.  $Sc=1.0$

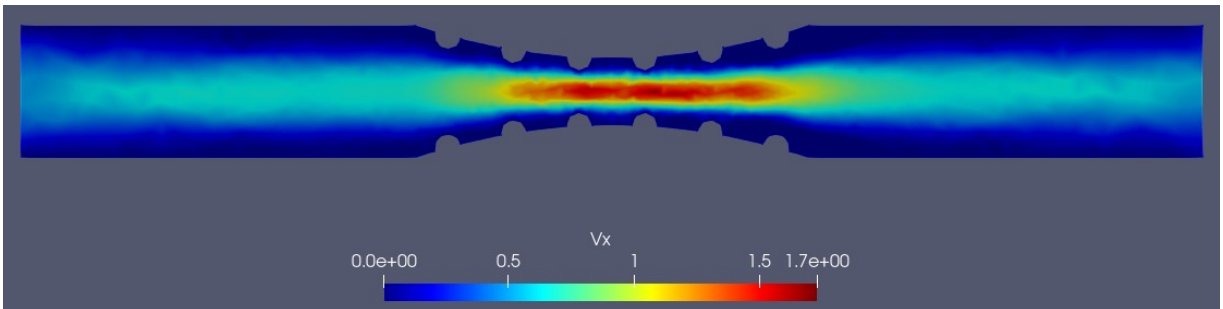


Figura 78:  $V_x$ .  $Sc=1.0$

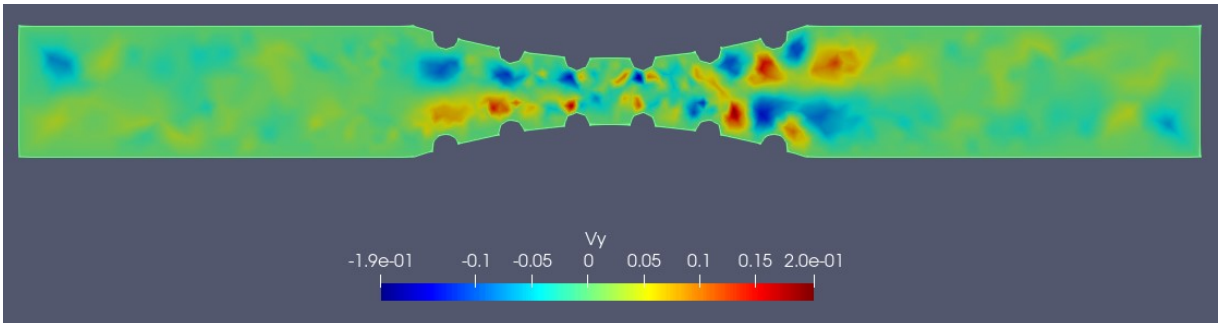


Figura 79:  $V_y$ .  $Sc=1.0$

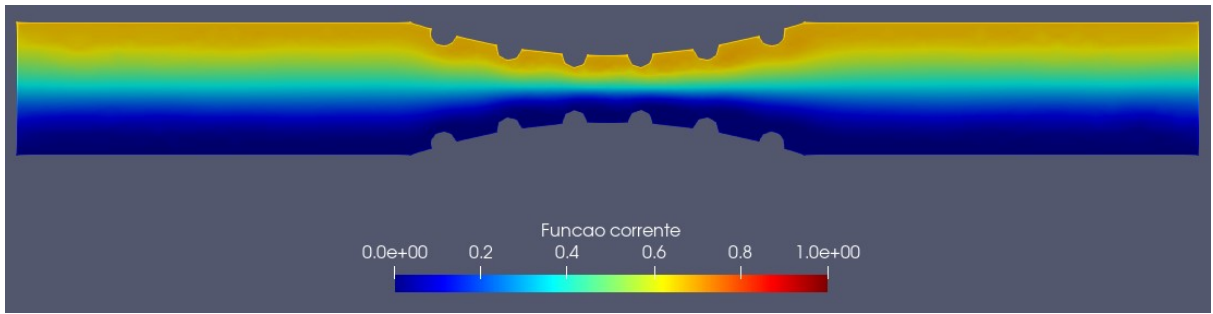


Figura 80: Função Corrente.  $Sc=10.0$

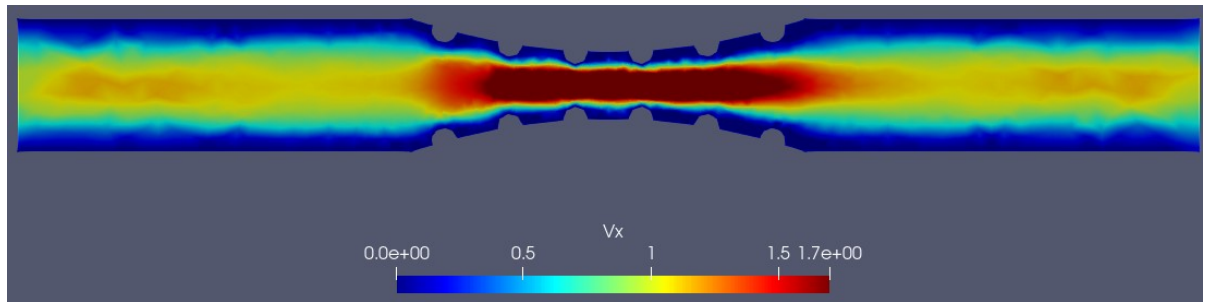


Figura 81:  $V_x$ .  $Sc=10.0$

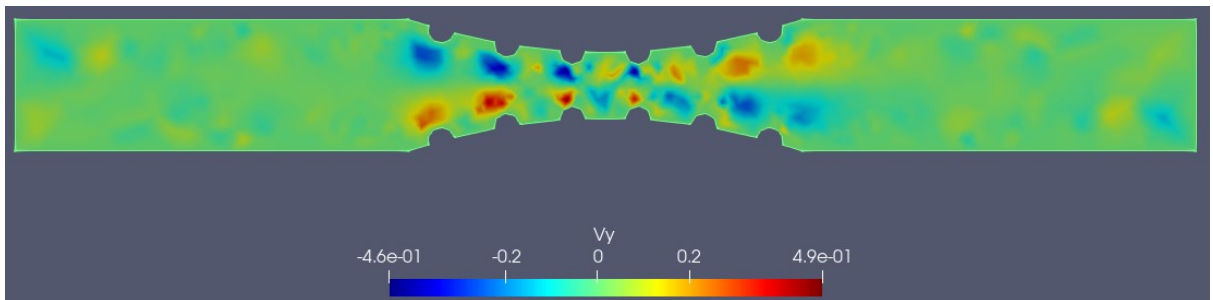


Figura 82:  $V_y$ .  $Sc=10.0$

### A.1.5 Resultados complementares da geometria aleatória aos 6s

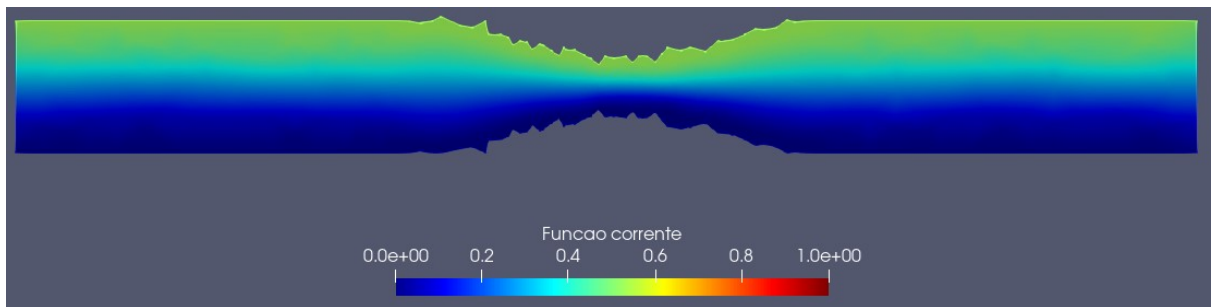


Figura 83: Função Corrente.  $Sc=0.1$

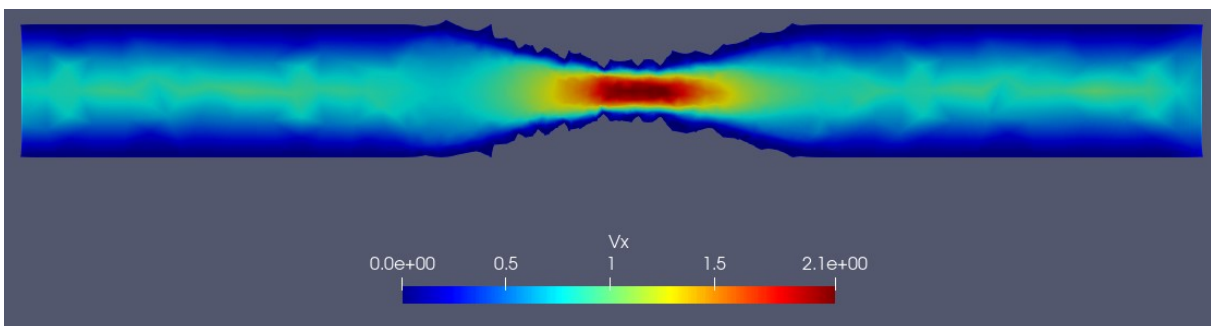


Figura 84:  $V_x$ .  $Sc=0.1$

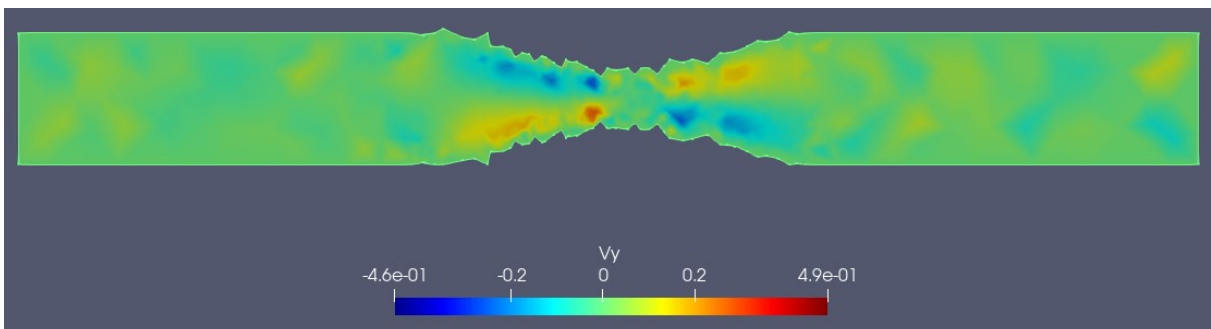


Figura 85:  $V_y$ .  $Sc=0.1$

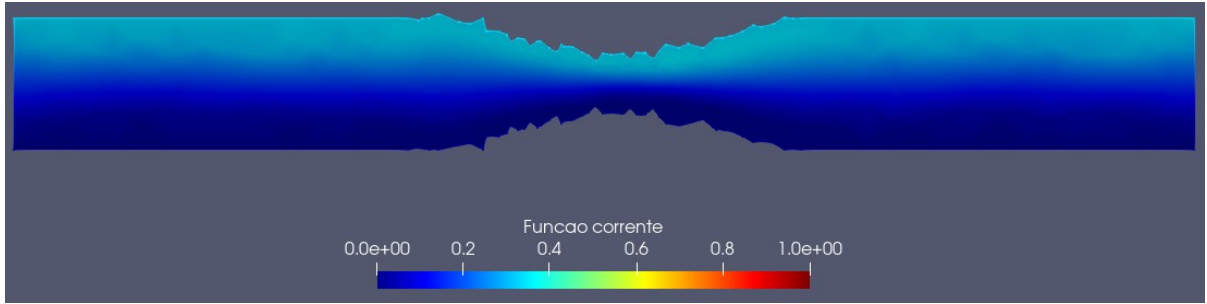


Figura 86: Função Corrente.  $Sc=1.0$

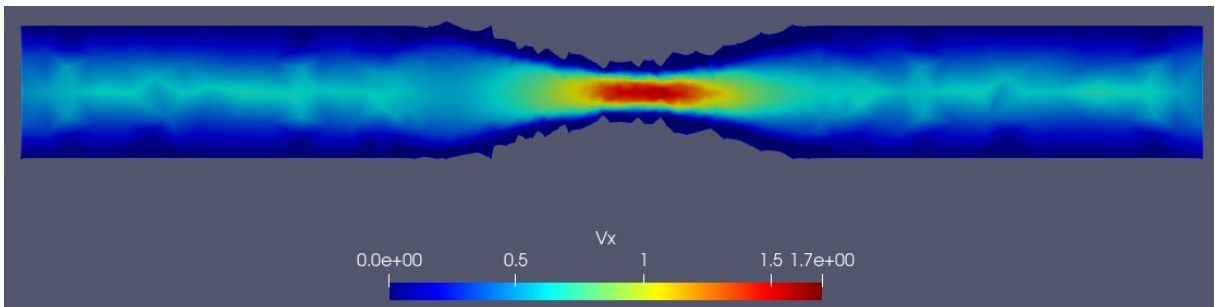


Figura 87:  $V_x$ .  $Sc=1.0$

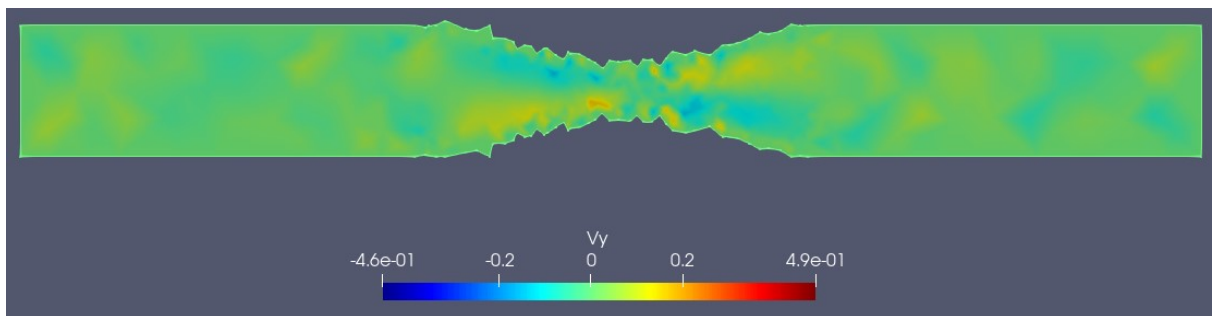


Figura 88:  $V_y$ .  $Sc=1.0$

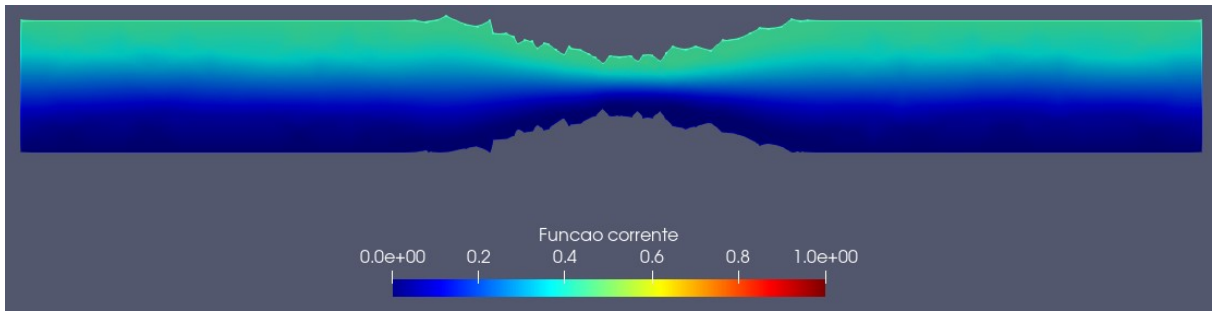


Figura 89: Função Corrente.  $Sc=10.0$

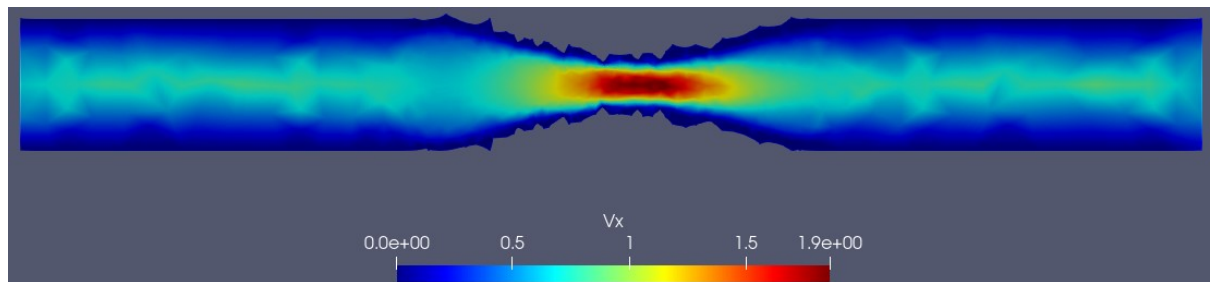


Figura 90:  $V_x$ .  $Sc=10.0$

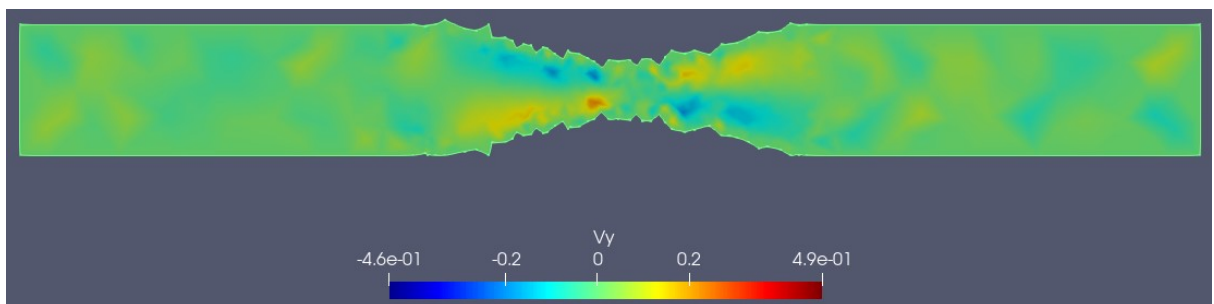


Figura 91:  $V_y$ .  $Sc=10.0$

## A.2 Soluções referentes ao capítulo "Resultados com Dados Reais"

### A.2.1 Resultados complementares da geometria stent atual aos 500s

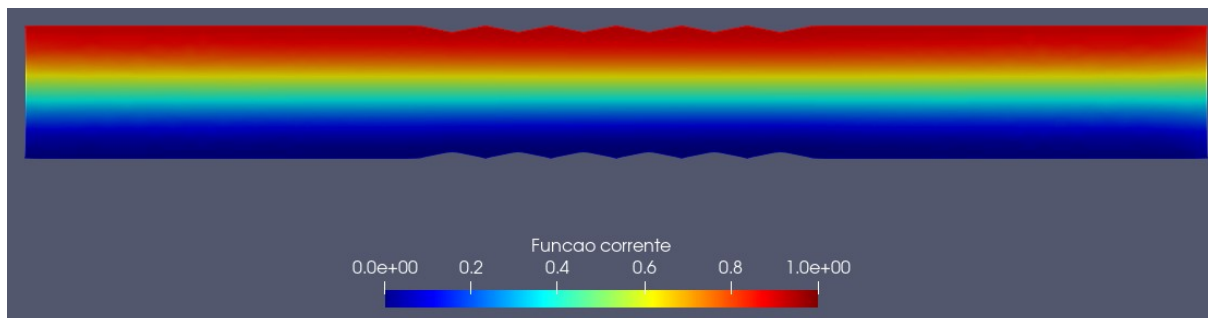


Figura 92: Função Corrente.

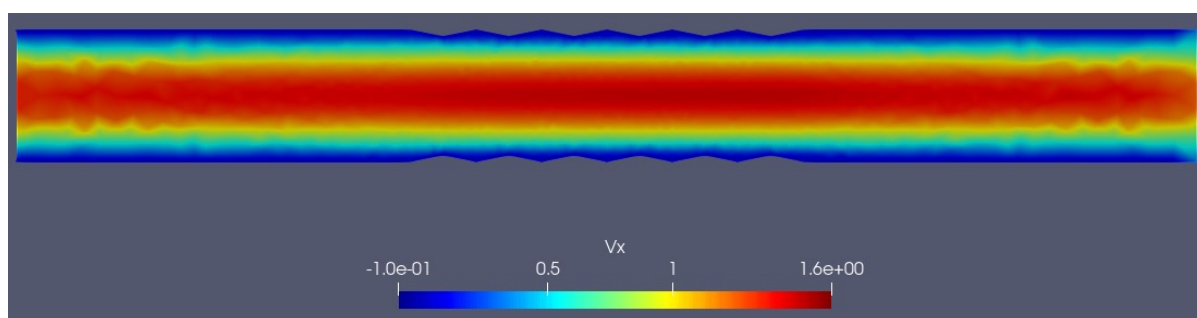


Figura 93:  $V_x$ .

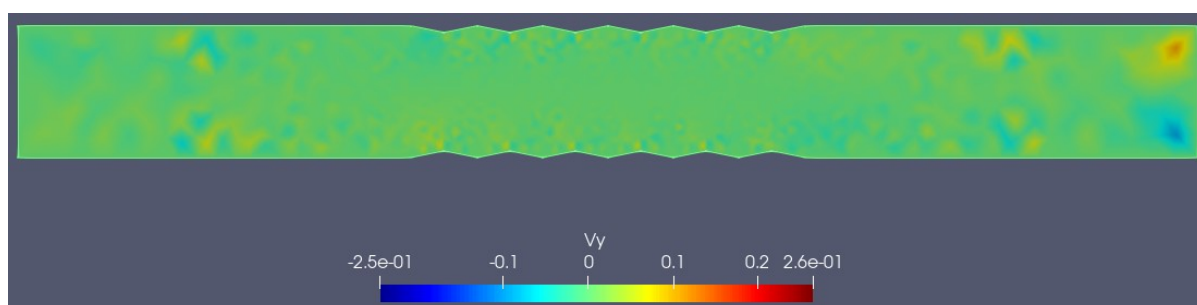


Figura 94:  $V_y$ .

## A.2.2 Resultados complementares da geometria stent atual fletido aos 500s

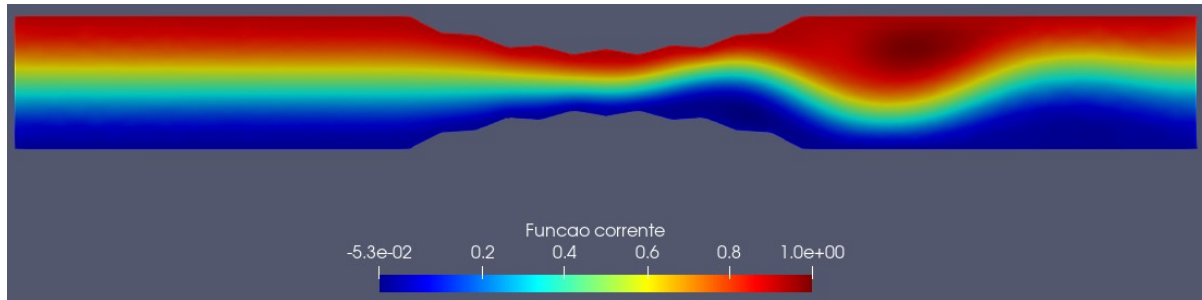


Figura 95: Função Corrente.

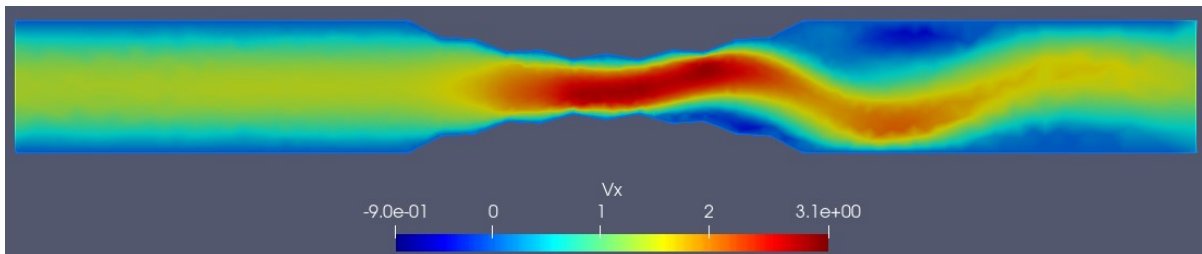


Figura 96: Vx.

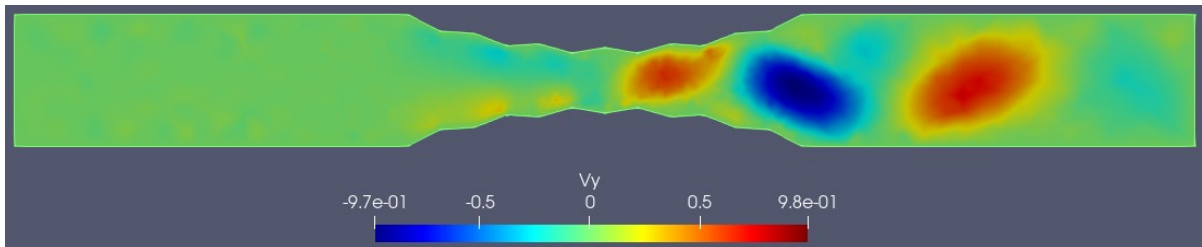


Figura 97: Vy.

### A.2.3 Resultados complementares da geometria stent circular aos 500s

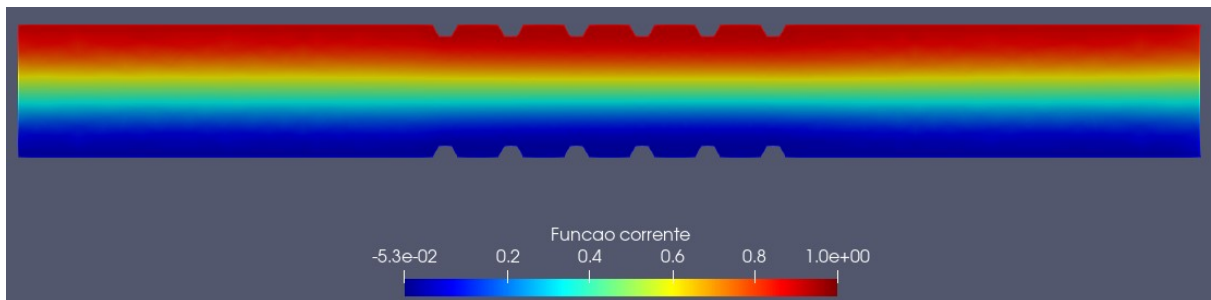


Figura 98: Função Corrente.

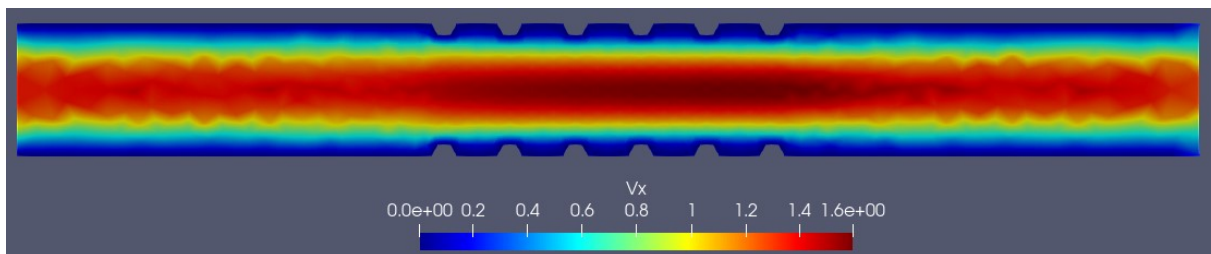


Figura 99: Vx.

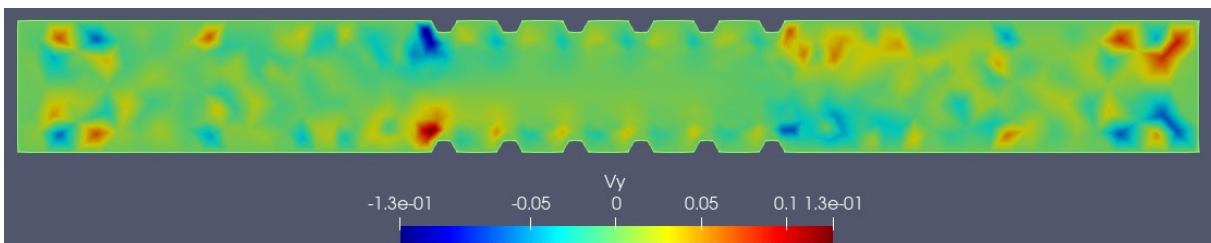


Figura 100: Vy.

#### A.2.4 Resultados complementares da geometria stent circular fletido aos 500s

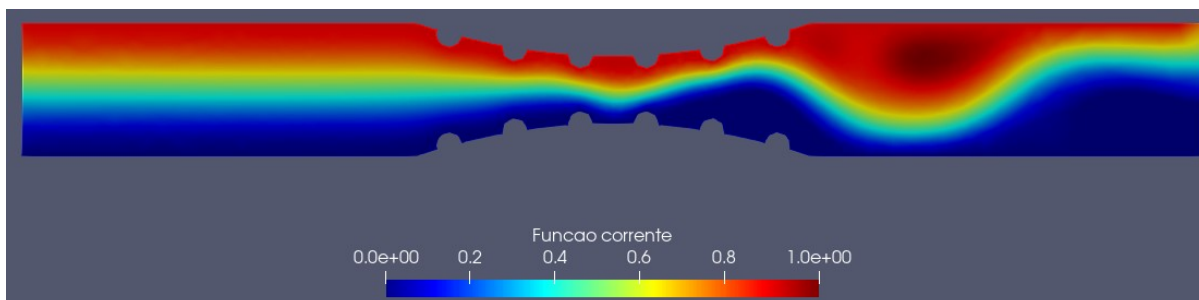


Figura 101: Função Corrente.

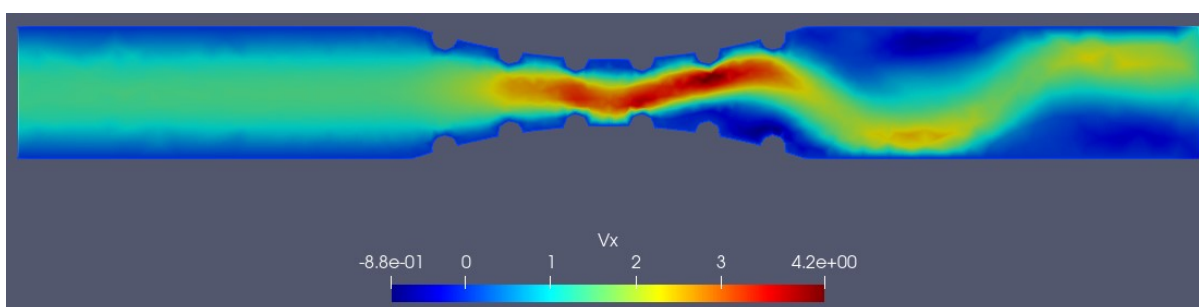


Figura 102: Vx.

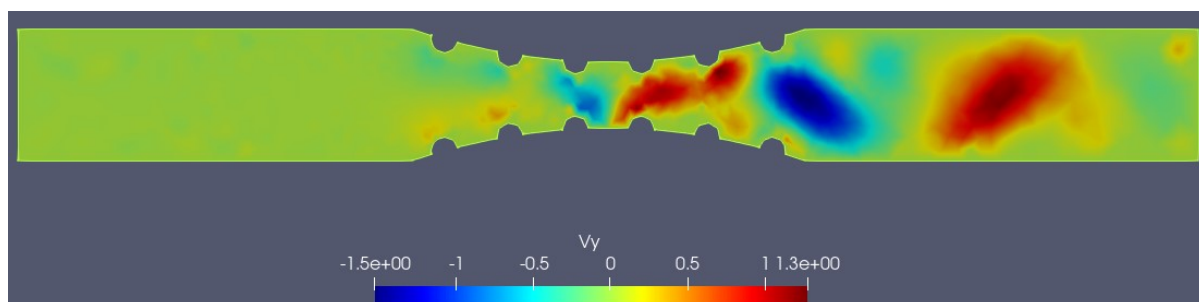


Figura 103: Vy.

### A.2.5 Resultados complementares da geometria aleatória aos 500s

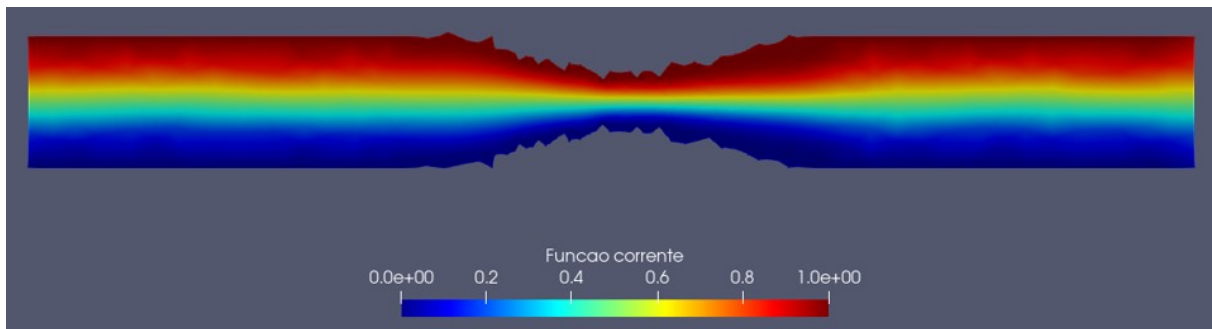


Figura 104: Função Corrente.

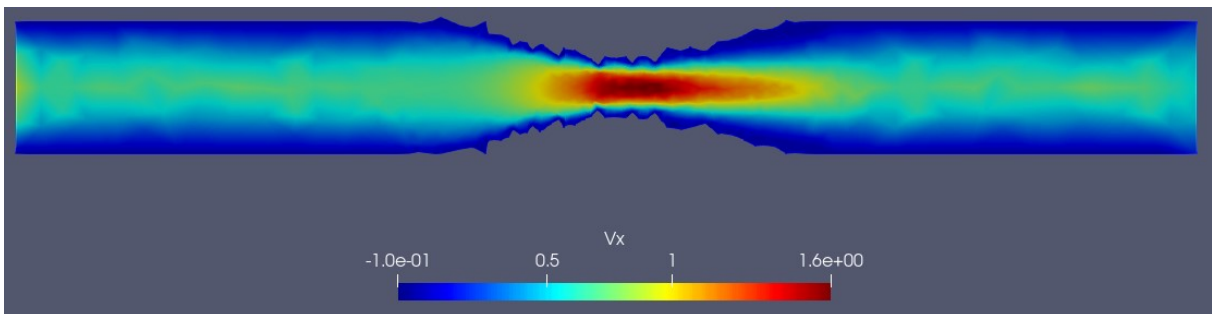


Figura 105:  $V_x$ .

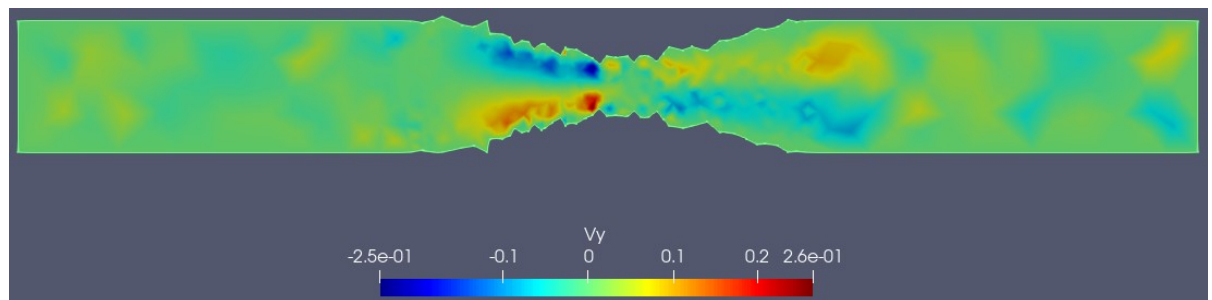


Figura 106:  $V_y$ .