

João Rafael Alves

**Simulação da perfusão cardíaca por contraste no miocárdio utilizando uma
formulação de escoamento em meios porosos**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Modelagem Computacional, da Universidade Federal de Juiz de Fora como requisito parcial à obtenção do grau de Mestre em Modelagem Computacional.

Orientador: Prof. D.Sc. Rodrigo Weber dos Santos

Juiz de Fora

2014

Ficha catalográfica elaborada através do Programa de geração automática da Biblioteca Universitária da UFJF, com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

Alves, João Rafael.

Simulação da perfusão cardíaca por contraste no miocárdio utilizando uma formulação de escoamento em meios porosos / João Rafael Alves. -- 2014.

70 f.

Orientador: Rodrigo Weber dos Santos

Dissertação (mestrado acadêmico) - Universidade Federal de Juiz de Fora, ICE/Engenharia. Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional, 2014.

1. Escoamento Monofásico. 2. Meios Porosos. 3. Perfusão do Miocárdio. 4. Exames de Contraste. I. dos Santos, Rodrigo Weber, orient. II. Título.

João Rafael Alves

**Simulação da perfusão cardíaca por contraste no miocárdio utilizando uma
formulação de escoamento em meios porosos**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Modelagem Computacional, da Universidade Federal de Juiz de Fora como requisito parcial à obtenção do grau de Mestre em Modelagem Computacional.

Aprovada em 30 de setembro de 2014.

BANCA EXAMINADORA

Prof. D.Sc. Rodrigo Weber dos Santos - Orientador
Universidade Federal de Juiz de Fora

Prof. D.Sc. Rafael Alves Bonfim de Queiroz
Universidade Federal de Juiz de Fora

Prof. D.Sc. Eduardo Lúcio Mendes Garcia
Laboratório Nacional de Computação Científica

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente aos meus pais, José Lúcio e Maria Lúcia, pois são meu exemplo de vida e porque sempre me apoiaram nas minhas decisões.

Aos meus irmãos Elisa e Pedro, ao meu cunhado Daniel e à minha sobrinha Manuela, por todo o carinho e força, e por tornarem os meus momentos de repouso em Divinópolis tão prazeroso.

Aos colegas de turma: Janaína, Guilherme e Anna, pelo companheirismo nas horas de estudo e nas horas de não-estudo.

Aos amigos do PPG-MC: Zé, Gustavo, Carla, Lucão, Juvs, Evelyn, Dani, Lemão, Johnny, Ana Amélia, Dênis e Ruy, pelas incontáveis horas de diversão na cozinha e na Bodega, além é claro da ajuda mútua durante as horas de Trabalho!

À minha namorada Patrícia, por todo o carinho e palavras de encorajamento.

Ao meu grande amigo Rafael, por me incentivar a participar do processo seletivo do mestrado.

Aos amigos da Toca: Marlon, David e Quim, pela amizade e pela agradável convivência na república.

Aos amigos de Divinópolis e de Viçosa, que mesmo de longe, sempre me enviaram energias positivas e votos de sucesso.

Aos amigos e orientadores Rodrigo e Rafael, pelas horas dedicadas ao enriquecimento deste trabalho e pelas horas que irão dedicar aos próximos.

À coordenação, aos professores e à secretaria do PPG-MC, pela atenção e pelos conhecimentos transmitidos.

À UFJF, por ter cedido sua estrutura.

À CAPES, pelo apoio financeiro

À todos aqueles que contribuíram para esta conquista, muito obrigado!

*'A noite é sempre mais escura
antes do amanhecer'*

Harvey Dent

RESUMO

Apresenta-se neste trabalho um modelo computacional simplificado que caracteriza a dinâmica espaço-temporal da perfusão sanguínea no miocárdio cardíaco. Especificamente, este modelo visa reproduzir imagens qualitativas obtidas através de exames de contraste, os quais são amplamente utilizados na medicina clínica para avaliar a perfusão cardíaca. A aplicação do contraste permite a detecção de regiões isquêmicas, fibroses e tumores. Aqui foca-se também no caso de um infarto subendocárdico. Para efeitos da modelagem, considera-se o tecido do miocárdio cardíaco como um meio poroso, isto é, uma região sólida com espaços vazios. Para este fim, a modelagem foi baseada em equações diferenciais e na Lei de Darcy, a qual correlacionada a permeabilidade do tecido, a diferença de pressão e o fluxo de sangue no tecido cardíaco.

Palavras-chave: Escoamento Monofásico. Meios Porosos. Perfusão do Miocárdio. Exames de Contraste.

ABSTRACT

We present a simplified computational model that characterizes the spatio-temporal dynamics of blood perfusion in cardiac myocardium. Specifically, we are interested in reproducing qualitative images obtained by contrast-enhanced exams, which are widely used in clinical medicine to evaluate the blood perfusion in the heart. The application of contrast allows the detection of injuries, ischemic regions, fibrosis or tumors. Here we focus on the pathological case associated to subendocardial infarct. In our modelling, we will consider the tissue of cardiac myocardium as a porous media, i.e., a solid region with empty spaces. To this end, the modelling was based on differential equations and Darcy's Law, which correlates tissue permeability, pressure difference and the blood flow in the cardiac tissue.

Keywords: Single-phase Flow. Porous Media. Myocardium Perfusion. Contrast Exams.

SUMÁRIO

| | | |
|-------|---|----|
| 1 | INTRODUÇÃO..... | 14 |
| 1.1 | Justificativa | 14 |
| 1.2 | Objetivos | 16 |
| 1.3 | Contribuições do Autor | 17 |
| 1.4 | Estrutura da Dissertação | 17 |
| 2 | FUNCIONAMENTO DO CORAÇÃO E EXAMES DE CONTRASTE | 19 |
| 2.1 | Ciclo Cardíaco | 19 |
| 2.2 | Circulação Coronariana e Perfusão do Miocárdio | 21 |
| 2.3 | Infarto do miocárdio | 22 |
| 2.4 | Exames de Contraste | 23 |
| 2.4.1 | <i>Tomografia Computadorizada</i> | 23 |
| 2.4.2 | <i>Ressonância Magnética</i> | 23 |
| 3 | MODELAGEM MATEMÁTICA..... | 26 |
| 3.1 | Modelo de Darcy | 27 |
| 3.1.1 | <i>Lei de Darcy</i> | 27 |
| 3.2 | Modelo do Escoamento Monofásico | 28 |
| 4 | MODELAGEM COMPUTACIONAL | 34 |
| 4.1 | Discretização Bidimensional do Modelo de Darcy | 36 |
| 4.2 | Discretização do Modelo do Escoamento Monofásico | 40 |
| 4.3 | Aproximação Numérica do Termo Convectivo | 43 |
| 4.3.1 | <i>Esquema FOU</i> | 45 |
| 4.3.2 | <i>Esquema TOPUS</i> | 46 |
| 4.4 | Algoritmo para simulação da perfusão baseada em contraste | 50 |
| 5 | RESULTADOS NUMÉRICOS E DISCUSSÕES..... | 52 |
| 5.1 | Cenários Simulados de Perfusão de Contraste | 52 |
| 5.2 | Análise de convergência dos esquemas TOPUS e FOU | 54 |
| 5.3 | Cenário 1: meio isotrópico e não-infartado | 57 |

| | | |
|-----|---|----|
| 5.4 | Cenário 2: meio anisotrópico e não-infartado | 58 |
| 5.5 | Cenário 3: meio isotrópico e infartado | 59 |
| 5.6 | Cenário 4: meio anisotrópico e infartado | 60 |
| 5.7 | Discussões sobre os resultados dos cenários simulados | 61 |
| 6 | CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS..... | 64 |
| 6.1 | Trabalhos Futuros | 64 |
| | REFERÊNCIAS | 66 |

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

| | | |
|-----|---|----|
| 1.1 | Meio poroso - um sólido preenchido por espaços vazios. | 15 |
| 1.2 | Corte histológico do miocárdio. Na parte de cima é possível observar um capilar (vaso sanguíneo de menor calibre). A troca de oxigênio e nutrientes ocorre neste tipo de vaso. | 15 |
| 1.3 | Imagens do miocárdio obtidas em exames de contraste (extraído de [1]). | 16 |
| 2.1 | Partes principais do coração humano | 20 |
| 2.2 | Ramificação da rede de artérias coronarianas (extraído de [2]). | 22 |
| 2.3 | Exemplo de coração com infarto do miocárdio (extraído de [3]). | 23 |
| 2.4 | Corte transmural do coração capturado em um exame de TC com contraste: a região escura do miocárdio indica um provável infarto (extraído de [4]). | 24 |
| 2.5 | Intensidade do sinal do contraste usando gadolínio em um exame de ressonância magnética (extraído de [5]). | 25 |
| 2.6 | RM com contraste: a região mais escura do miocárdio indica um infarto (extraído de [6]). | 25 |
| 3.1 | Volume de controle. | 29 |
| 3.2 | Massa atravessando a face perpendicular ao eixo X no ponto (x, y, z) | 30 |
| 3.3 | Massa atravessando a face perpendicular ao eixo X no ponto $(x + dx, y, z)$ | 30 |
| 4.1 | Representação das faces (células computacionais) do volume de controle centrado no ponto P e dos nós vizinhos a este ponto. | 35 |
| 4.2 | Célula computacional mostrando o ponto $P = (i, j)$ de discretização dos termos convectivos, seus vizinhos, as faces envolvidas $m = (i, j + \frac{1}{2})$ e $n = (i, j - \frac{1}{2})$ na direção y (Figura a) ou as faces envolvidas $f = (i + \frac{1}{2}, j)$ e $g = (i - \frac{1}{2}, j)$ na direção x (Figura b). | 44 |
| 4.3 | Aproximação de C_F em $F = f = (i + \frac{1}{2}, j)$ | 47 |
| 4.4 | Aproximação de C_g na face $g = (i - \frac{1}{2}, j)$ | 47 |
| 4.5 | Aproximação de C_m na face $m = (i, j + \frac{1}{2})$ | 48 |
| 4.6 | Aproximação de C_n na face $n = (i, j - \frac{1}{2})$ | 49 |

| | | |
|------|--|----|
| 5.1 | Corte transmural do coração (esquerda) e uma região do ventrículo esquerdo (direita) que compreende o domínio de simulação | 53 |
| 5.2 | Simulação isotrópica e sem infarto. Distribuição de contraste em: a) 0,03 s; b) 0,15 s; c) 0,30 s; e d) 0,45 s. | 57 |
| 5.3 | Campo de pressão do tecido cardíaco para o caso isotrópico sem infarto e uma artéria coronariana próxima a este tecido, em kPa | 57 |
| 5.4 | Simulação anisotrópica e sem infarto. Distribuição de contraste em: a) 0,03 s; b) 0,15 s; c) 0,30 s; e d) 0,45 s. | 58 |
| 5.5 | Campo de pressão do tecido cardíaco para o caso anisotrópico sem infarto e uma artéria coronariana próxima a este tecido, em kPa | 58 |
| 5.6 | Simulação isotrópica e com infarto. Distribuição de contraste em: a) 0,03 s; b) 0,15 s; c) 0,30 s; e d) 0,45 s. | 59 |
| 5.7 | Campo de pressão do tecido cardíaco para o caso isotrópico com infarto e uma artéria coronária próxima a este tecido, em kPa | 59 |
| 5.8 | Simulação anisotrópica e com infarto. Distribuição de contraste em: a) 0,03 s; b) 0,15 s; c) 0,30 s; e d) 0,45 s. | 60 |
| 5.9 | Campo de pressão do tecido cardíaco para o caso anisotrópico com infarto e uma artéria coronária próxima a este tecido, em kPa | 61 |
| 5.10 | Distribuição de pressão no lado esquerdo do domínio. Simulação dos casos isotrópico não infartado (a) e infartado (b). | 62 |
| 5.11 | Imagem de um miocárdio com infarto subendocardial (a), imagem obtida pelo modelo matemático desenvolvido neste trabalho (b). | 63 |

LISTA DE TABELAS

| | | |
|-----|--|----|
| 5.1 | Tensores de Permeabilidade: tanto no caso 3 quanto no caso 4, o primeiro tensor refere-se à região não infartada e o segundo à região infartada. . . . | 53 |
| 5.2 | Tensores de Difusão: tanto no caso 3 quanto no caso 4, o primeiro tensor refere-se à região não infartada e o segundo à região infartada. | 54 |
| 5.3 | Tabela usada para o estudo da ordem de convergência dos métodos. | 55 |
| 5.4 | Estudo da convergência dos esquemas FOU e TOPUS, associado com um método de volumes finitos explícito. | 56 |

1 INTRODUÇÃO

Perfusão coronariana, ou perfusão do miocárdio, é o mecanismo através do qual o coração é preenchido com oxigênio e nutrientes. Simulações numéricas desta perfusão permitem análises tanto quantitativa quanto qualitativa, e possibilitam compreender melhor importantes aspectos da dinâmica do fluxo sanguíneo. Além disso, um experimento *in silico* como este pode contribuir para melhorar diagnósticos e tratamentos, sem falar no baixo custo quando comparado a experimentos *in vitro*. Entretanto, a simulação computacional de qualquer sistema biomédico, incluindo a perfusão cardíaca, ainda é um desafio. É complicado, por exemplo, obter informações anatômicas acuradas acerca da disposição dos vasos sanguíneos, informações estas que, em alguns casos, requerem o preço de destruir a própria amostra do coração. Outro fator que amplia ainda mais o desafio é o custo computacional. Mesmo modelos que adotam diversas simplificações, como o que é tratado neste texto, demandam conceitos matemáticos complexos e implementações computacionais sofisticadas.

Nesta perspectiva, este trabalho teve como foco o desenvolvimento de um modelo simplificado que reproduza um exame utilizado na clínica médica para avaliar a perfusão coronariana.

1.1 Justificativa

Em trabalhos anteriores [7, 8, 9], a perfusão do sangue foi modelada considerando o miocárdio como um meio poroso, que por sua vez é definido como um sólido preenchido com espaços vazios (ver Figura 1.1). O miocárdio possui esta característica (Figura 1.2), logo pode ser tratado como tal. Em um destes trabalhos anteriores [7], um modelo multi-escala foi proposto a fim de se levar em conta as diferenças entre os tamanhos dos diâmetros dos vasos sanguíneos.

Todavia, todos os modelos mencionados [7, 8, 9] foram baseados em equações diferenciais e na Lei de Darcy para meios porosos, e focaram na simulação da distribuição de pressão e fluxo sanguíneo no tecido cardíaco. Atualmente, nem a distribuição da pressão e nem de fluxo sanguíneo podem ser adquiridas de forma não invasiva. No entanto,

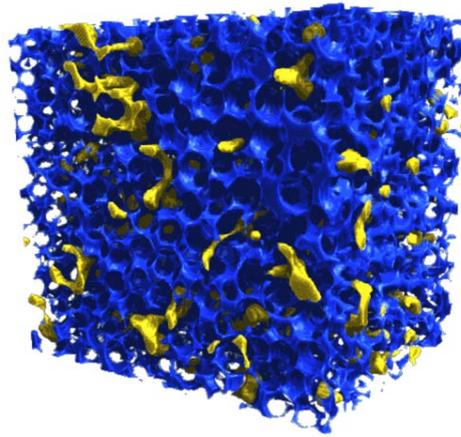


Figure 1.1: Meio poroso - um sólido preenchido por espaços vazios.

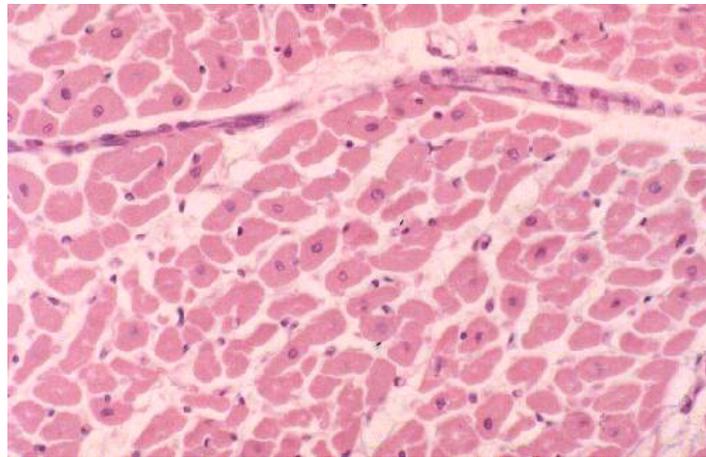


Figure 1.2: Corte histológico do miocárdio. Na parte de cima é possível observar um capilar (vaso sanguíneo de menor calibre). A troca de oxigênio e nutrientes ocorre neste tipo de vaso.

a injeção de um contraste durante exames clínicos baseados em imagens, tais como a Ressonância Magnética Computadorizada (RM) ou a Tomografia Computadorizada (TC), permite a detecção não invasiva de regiões isquêmicas (ver Figura 1.3), fibroses ou tumores. Por exemplo, na perfusão cardíaca por RM [5], um contraste químico, normalmente baseado na substância *Gadolínio*, é injetado no paciente [10]. Após a injeção, diferentes imagens em diferentes instantes de tempo são obtidas para a mesma região do coração e na mesma fase cardíaca, isto é, um instante particular com relação à contração cardíaca (sincronizado através das ondas R de um eletrocardiograma obtido em durante o exame). Com essa série temporal de imagens, o clínico pode observar como o contraste perfunde o tecido cardíaco, uma vez que imagens claras (próximas ao branco) estão altamente relacionadas com a presença de contraste. Portanto, se o sangue perfunde o miocárdio

de maneira ótima, após algumas contrações cardíacas (capturadas pela RM), o tecido cardíaco nas imagens adquiridas irá brilhar homoganeamente branco. Se, no entanto, algumas regiões do coração não estão corretamente perfundidas, pontos mais escuros (próximos ao preto) irão aparecer em algumas imagens.

Vale ressaltar que o mecanismo de perfusão coronariana possui dois tipos de escoamento: o escoamento do sangue nas artérias e o escoamento de oxigênio e nutrientes (e Gadolínio, no caso de um exame de RM) que vão das artérias para o meio extravascular (Figura 1.2) a fim de suprir a demanda do coração por tais substâncias. Este assunto terá um tratamento mais amplo no decorrer deste trabalho.

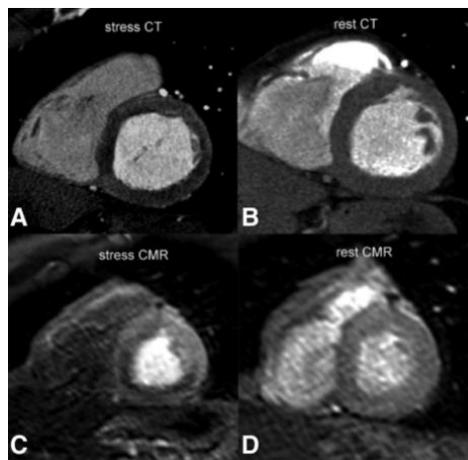


Figure 1.3: Imagens do miocárdio obtidas em exames de contraste (extraído de [1]).

1.2 Objetivos

O objetivo principal deste trabalho é modelar a perfusão cardíaca por uma substância de contraste, por exemplo, o Gadolínio. Para atingir este objetivo, pretende-se:

- Estudar o fluxo de sangue e a distribuição de pressão considerando o modelo de Darcy para fluido em meio poroso conforme a abordagem de Michler et al. [7].
- Propor um modelo matemático baseado em uma equação diferencial parcial (EDP) de convecção-difusão para representar a dinâmica espaço-temporal do Gadolínio durante a perfusão.

Diante do exposto acima, os objetivos específicos neste trabalho são:

- Acoplar a dinâmica espaço-temporal da concentração do contraste no tecido cardíaco ao modelo de Darcy adotado por Michler et al. [7].
- Discretizar as equações de transporte via o Método dos Volumes Finitos (MVF).
- Implementar estratégias *upwind* para o tratamento numérico dos termos convectivos das equações de transporte resolvidas numericamente via MVF, tais como: *First-Order Upwind* (FOU) [11] e *Third-Order Polynomial Upwind Scheme* (TOPUS) [12, 13, 14].

1.3 Contribuições do Autor

Este trabalho corroborou para as seguintes produções científicas:

- Resumo publicado em anais de evento
 - Simulation of coronary perfusion in the myocardium using a Darcy model for fluid in porous media, *VIII Pan-American Workshop Applied and Computational Mathematics*, Barranquilla, Colômbia, 2014.
- Artigos submetidos em periódicos
 - J. R. Alves, R. W. dos Santos, G. M. Novaes and R. A. B. de Queiroz, Simulating the perfusion of contrast in cardiac transmural wall, *IFMBE Proceeding* (aceito e revisado), 2014.
 - J. R. Alves, R. W. dos Santos and R. A. B. de Queiroz, Simulation of cardiac perfusion by a contrast in the myocardium using a formulation of flow in porous media, *Journal of Computational and Applied Mathematics* (sob revisão), 2014.

1.4 Estrutura da Dissertação

O restante dos capítulos está organizado como segue:

Capítulo 2 - Funcionamento do Coração e Exames de Contraste: Neste capítulo apresenta-se uma breve introdução sobre o bombeamento de sangue pelo coração e sobre a perfusão deste pelo sangue vindo das artérias coronarianas. Além disso, descreve-se o contexto no qual exames de contraste são utilizados e como eles são adotados.

Capítulo 3 - Modelagem Matemática: Neste capítulo, aborda-se o modelo clássico de Darcy para meios porosos e o modelo do escoamento monofásico, o que nos leva ao sistema utilizado para modelar a dinâmica espaço-temporal do Gadolínio durante a perfusão.

Capítulo 4 - Modelagem Computacional: Neste capítulo, apresentam-se as discretizações das equações diferenciais via o método MVF e a aproximação do termo convectivo pelos esquemas TOPUS e FOU.

Capítulo 5 - Resultados Numéricos e Discussão: Neste capítulo são apresentados os experimentos numéricos realizados. Além disso, tem-se os resultados das simulações, com os campos de pressão em cada experimento, concentração do contraste em diferentes intervalos de tempo e também discussões qualitativas e quantitativas acerca dos resultados.

Capítulo 6 - Conclusões e Trabalhos Futuros: Por fim, têm-se as conclusões da dissertação juntamente com sugestões para futuros trabalhos.

2 FUNCIONAMENTO DO CORAÇÃO E EXAMES DE CONTRASTE

Neste capítulo é apresentada uma breve introdução acerca de conceitos que serão abordados ao longo deste texto. Inicialmente é apresentado um panorama geral das etapas do funcionamento do coração. Após esta contextualização, é definida a perfusão coronariana (ou perfusão do miocárdio), mecanismo que, conforme dito anteriormente, será objeto principal de estudo da modelagem matemática deste trabalho. Por fim, são exemplificados alguns tipos de exames médicos utilizados para observar se perfusão coronariana em pacientes ocorre da maneira correta, isto é, exames utilizados para investigar regiões onde há falta de oxigenação.

2.1 Ciclo Cardíaco

Inicialmente, é importante dar algumas definições de termos referentes à dinâmica do sangue no coração. Tratam-se aqui o ciclo cardíaco, sístole, diástole e perfusão coronariana. As partes do coração aqui referenciadas podem ser vistas na Figura 2.1 e a teoria pode ser encontrada em [3].

O ciclo cardíaco se refere a um batimento cardíaco completo, isto é, do início de um batimento ao início do próximo, o que inclui a diástole, a sístole, e o período de pausa. Durante o ciclo cardíaco, a pressão sanguínea aumenta e diminui. Ele é coordenado por uma série de impulsos elétricos, os quais são produzidos por células especiais encontradas no nó sinoatrial. Sob circunstâncias normais, cada ciclo dura 0,8 segundos.

O ciclo possui basicamente duas partes:

- *Sístole*: período no qual o miocárdio se contrai e o sangue é ejetado dos ventrículos ou dos átrios.
- *Diástole*: período em que os ventrículos ou os átrios se relaxam.

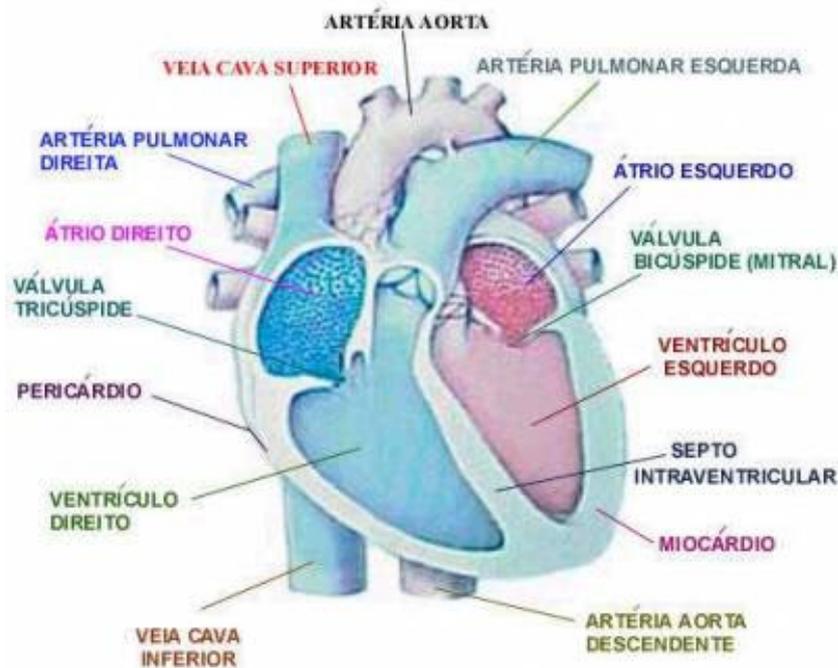


Figure 2.1: Partes principais do coração humano

O estágio de *sístole* é dividido em sístoles atrial e ventricular, conforme explicado a seguir:

A *sístole atrial* é a contração das células do músculo cardíaco dos átrios, através de estímulos elétricos. Com a contração dos átrios, a pressão do sangue em cada átrio aumenta, forçando sangue para os ventrículos. A *sístole atrial*, também conhecida como *sístole auricular dura*, aproximadamente, 0,1 segundos.

A *sístole ventricular* é a contração dos ventrículos esquerdo e direito, através de estímulos elétricos. Nesta fase, o sangue é ejetado pelos ventrículos através das válvulas pulmonar (ventrículo direito) e aórtica (ventrículo esquerdo). Esta etapa dura aproximadamente 0,3 segundos.

A *diástole* é o período de tempo no qual o coração relaxa, se preparando para reabastecimento com a circulação sanguínea. Este período divide-se em:

Diástole ventricular, que remete o período no qual os ventrículos se relaxam, e diástole atrial, a qual consiste no relaxamento dos átrios.

Durante a diástole ventricular, a pressão nos ventrículos cai a partir do pico que se atinge durante a *sístole*. Quando a pressão no ventrículo esquerdo cai para um valor abaixo que a pressão no átrio esquerdo, a válvula mitral (ou válvula bicúspide, que separa o átrio esquerdo do ventrículo esquerdo) se abre, e o ventrículo esquerdo é preenchido com

sangue que estava acumulado no átrio esquerdo. Da mesma forma, quando a pressão no ventrículo direito cai para um valor abaixo do que no átrio direito, a válvula tricúspide (que separa o átrio direito do ventrículo direito) se abre, e o ventrículo direito se enche com o sangue que estava acumulado no átrio direito.

2.2 Circulação Coronariana e Perfusão do Miocárdio

Circulação coronariana é a circulação de sangue nos vasos sanguíneos do músculo cardíaco (miocárdio). Os vasos que “entregam” o sangue rico em oxigênio para o miocárdio são conhecidos como artérias coronarianas. Os vasos que removem o sangue desoxigenado do músculo cardíaco são conhecidos como veias cardíacas. Como as artérias coronarianas esquerda e direita percorrem a superfície do coração (epicárdio), elas podem ser chamadas de artérias coronarianas epicardiais. Estas artérias, quando saudáveis, são capazes de se autorregular para manter o fluxo sanguíneo coronário em níveis apropriados para as necessidades do músculo cardíaco. Estes vasos relativamente estreitos são frequentemente afetados por aterosclerose (acúmulo de placas de gordura nas artérias), o que pode causar ataque do coração. As artérias coronarianas representam a única fonte de suprimento para o miocárdio.

As duas artérias coronarianas se originam no lado esquerdo do coração, na raiz da aorta (logo depois que a aorta sai do ventrículo esquerdo). Elas adentram no músculo cardíaco e se ramificam em artérias de médio e baixo calibre, além das arteríolas, até culminarem nos capilares (ver Figura 2.2).

Perfusão do miocárdio é o mecanismo através do qual o coração é suprido com oxigênio e nutrientes. Durante a contração do miocárdio ventricular (sístole), os vasos coronários subendocárdicos (os vasos que se distribuem no interior do miocárdio) são comprimidos devido às altas pressões intraventriculares. Entretanto, os vasos coronários epicardiais (os vasos da superfície do coração) se mantem desobstruídos. Por este motivo, a perfusão subendocárdica não ocorre. Como resultado, a maior parte da perfusão do miocárdio ocorre durante a diástole, quando os vasos coronários subendocárdicos estão desobstruídos e sob baixa pressão.

É importante ressaltar aqui que, durante a diástole, a pressão nas artérias coronarianas no epicárdio é maior que a dos vasos coronários subendocárdicos. Isto será fundamental

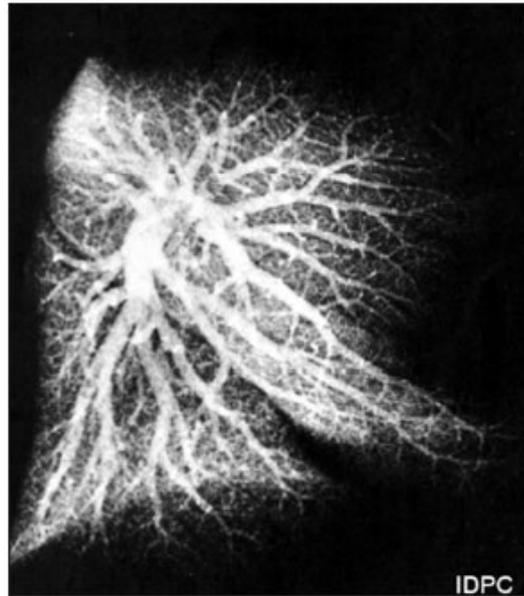


Figure 2.2: Ramificação da rede de artérias coronarianas (extraído de [2]).

para a tratar as condições de contorno do modelo aqui proposto.

2.3 Infarto do miocárdio

Infarto do miocárdio, ou simplesmente infarto, é o termo médico para um evento comumente conhecido como “ataque do coração”. Um infarto ocorre quando o sangue para de fluir adequadamente para alguma parte do coração, e o músculo cardíaco sofre alguma injúria devido à falta de oxigênio, isto é, a perfusão cardíaca não ocorre da maneira correta (ver Figura 2.3). A causa disso pode ser, por exemplo, excesso de colesterol e gordura nas artérias coronarianas.

Importantes fatores de risco são doenças cardiovasculares, idade, uso de tabaco, diabetes, alta pressão de sangue, obesidade, doenças crônicas renais, consumo excessivo de álcool, etc. [15, 16].

Uma maneira de determinar se uma pessoa tem um infarto do miocárdio são eletrocardiogramas, os quais traçam os sinais elétricos no coração. Outra forma é utilizando exames de contraste.

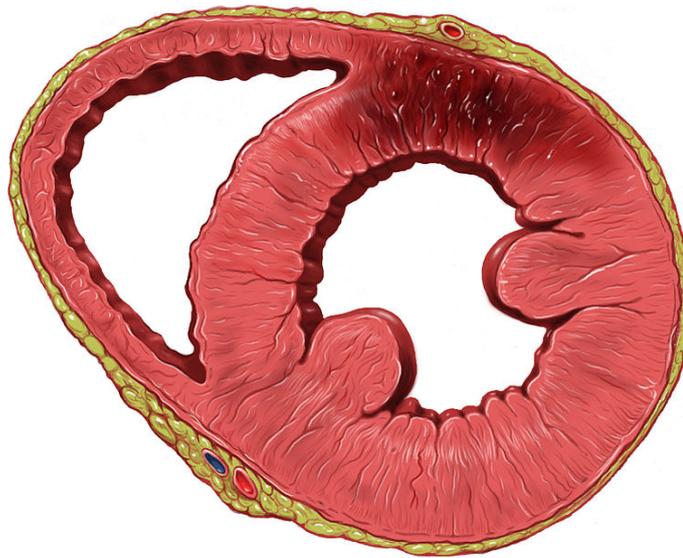


Figure 2.3: Exemplo de coração com infarto do miocárdio (extraído de [3]).

2.4 Exames de Contraste

Exames de contraste são técnicas de radiologia não invasivas de obtenção de imagens com o intuito de investigar a anatomia e a fisiologia do corpo em ambos casos de saúde e doença. Uma substância é injetada no paciente, a qual, nas imagens obtidas através dos exames, adquire uma coloração diferente em regiões onde a perfusão do miocárdio não ocorre da maneira ideal. Duas técnicas muito utilizadas são o exames de TC e de RM.

2.4.1 *Tomografia Computadorizada*

A substância usada no exame de TC não extravasa para o meio extravascular, isto é, ela acompanha o sangue nas artérias. Isso faz com que as imagens sejam geradas ao mesmo tempo em que o sangue perfunde o miocárdio. O tempo gasto para que o sangue e o contraste percorram o miocárdio é o mesmo. É uma situação diferente do caso no exame por RM, como se verá a seguir. Na Figura 2.4 é possível observar uma imagem de um coração com infarto de miocárdio, a qual foi capturada por um exame de TC.

2.4.2 *Ressonância Magnética*

Escâneres de RM usam fortes campos magnéticos para formar imagens do corpo. O exame de perfusão miocárdica por RM com contraste é amplamente utilizado para procurar

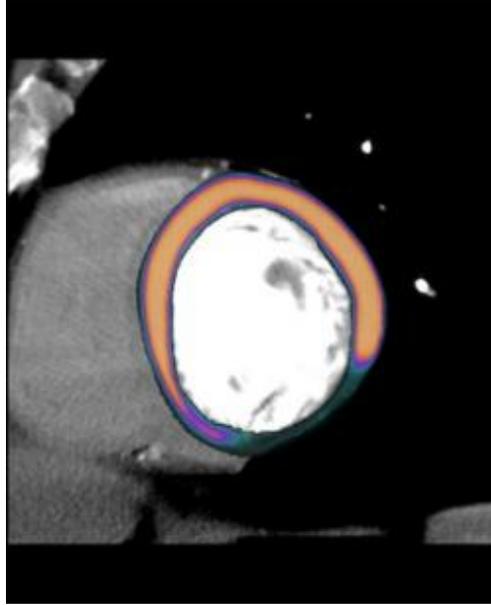


Figure 2.4: Corte transmural do coração capturado em um exame de TC com contraste: a região escura do miocárdio indica um provável infarto (extraído de [4]).

regiões do miocárdio nas quais a perfusão não ocorre corretamente. Tais regiões podem significar alguma isquemia ou então infartos. Uma substância muito utilizada para o contraste é o *Gadolínio* [10]. O diferencial deste exame está no fato de que há um “vazamento” desta substância para o meio extracelular [5]. Este fenômeno também ocorre com o oxigênio e os nutrientes que estão no sangue. Estas substâncias, através de fluxo difusivo e também devido à diferença de pressão (*bulk flow*), permeiam as regiões extravasculares. O Gadolínio fica preso nestas regiões durante um certo tempo, e é neste momento que RM é utilizada para capturar as imagens. O pico de intensidade do sinal do Gadolínio ocorre por volta de 9 segundos depois do instante em que o sangue contendo a substância começa a perfundir o miocárdio [5]. Esta intensidade do sinal do Gadolínio no miocárdio pode ser observada no gráfico obtido por [5] (ver Figura 2.5).

A Figura 2.6 mostra um exame de RM do miocárdio cardíaco do ventrículo esquerdo. Nas regiões escuras do miocárdio (indicadas pelas setas), têm-se indícios de um possível infarto.

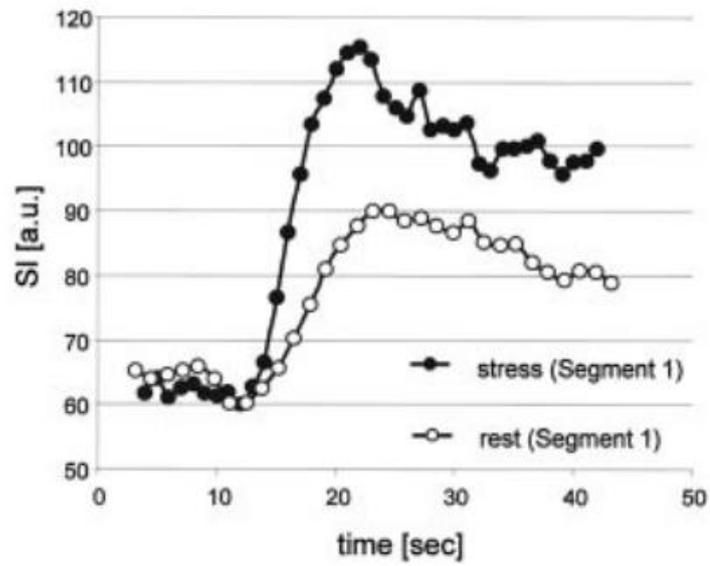


Figure 2.5: Intensidade do sinal do contraste usando gadolínio em um exame de ressonância magnética (extraído de [5]).

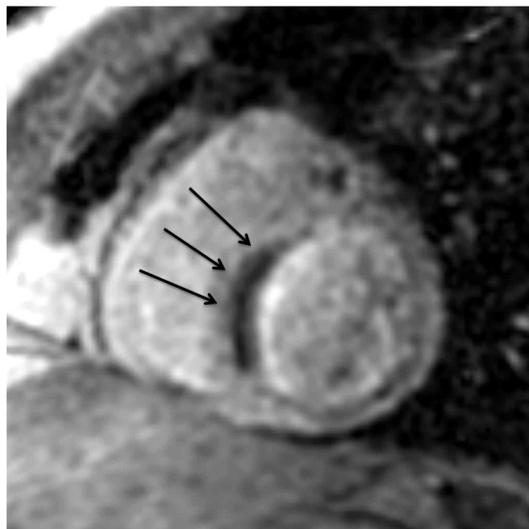


Figure 2.6: RM com contraste: a região mais escura do miocárdio indica um infarto (extraído de [6]).

3 MODELAGEM MATEMÁTICA

Em trabalhos anteriores [7, 8, 9], dividiu-se a vasculatura do tecido do miocárdio em faixas específicas de diâmetro de vaso, o que permitiu tratar cada faixa de diâmetro em um compartimento, cada qual com seu próprio tensor isotrópico de permeabilidade específico. Em tal modelo multi-escala, os compartimentos coexistem em um mesmo domínio e se comunicam através de termos de acoplamento distribuídos no sistema de equações do problema [17]. Uma das motivações para este trabalho em multi-compartimentos é que isso permite a investigação do tipo de vaso sanguíneo (de acordo com o calibre do mesmo) que uma doença ataca primeiro.

Neste trabalho, considera-se uma simplificação com um compartimento único, porém o tensor de permeabilidade é anisotrópico, o que significa que a direção das fibras do miocárdio foi levada em consideração. Além disso, abordou-se aqui a dinâmica da concentração de um contraste no meio intravascular.

Neste Capítulo é detalhado o modelo matemático utilizado para modelar a dinâmica espaço-temporal de um contraste durante a perfusão. Para tanto, adoram-se o modelo de Darcy para fluidos e o modelo do escoamento monofásico, ambos no contexto de meio poroso.

- Modelo de Darcy para fluidos em meio poroso
- Modelo do escoamento monofásico em meio poroso

Em linhas gerais, o modelo de Darcy consiste em um sistema de duas EDP's, as quais, através de uma substituição simples, geram uma EDP elíptica. Estas equações são escritas em termos das variáveis pressão e a velocidade do sangue no miocárdio cardíaco, e tem como parâmetros o tensor de permeabilidade do meio e um termo fonte. Uma vez obtidos os os campos de pressão e velocidade, estes são utilizados no modelo do escoamento monofásico (EDP de convecção-difusão), obtido através do balanço de massa. Este modelo tem como variável a concentração da substância utilizada no exame de contraste (Gadólíneo), e possui o tensor de difusibilidade e a porosidade do meio como parâmetros. É importante lembrar que foi levada em consideração a anisotropia do tecido

cardíaco, isto é, o ângulo da fibra do miocárdio tem influência sobre a intensidade do escoamento.

3.1 Modelo de Darcy

Inicialmente é importante recordar o significado físico de algumas incógnitas que serão usadas ao longo deste trabalho. Um meio poroso nada mais é do que um sólido com espaços vazios em seu interior. O *índice de vazios* ϕ é a relação entre o volume ocupado V_v e o não ocupado (ocupado pelos poros) V_s em um meio poroso e é calculado por:

$$\phi = \frac{V_v}{V_s} = \frac{V_{total} - V_s}{\underbrace{V_s}_{adimensional}}, \quad (3.1)$$

em que $V_{total} = V_s + V_v$

O coeficiente de permeabilidade \mathbf{K} é uma grandeza que influencia na velocidade com que um fluido atravessa uma amostra de um meio poroso. Pode também ser vista como a capacidade de um corpo permitir fluxo de fluido através de seus poros.

3.1.1 Lei de Darcy

A lei foi formulada por Henry Darcy com base nos resultados de experimentos, publicado em 1856 [18] sobre o fluxo de água através de leitos de areia.

Para o fluxo horizontal e laminar de um fluido monofásico, a vazão do fluido (volume por unidade de tempo) que flui através de uma amostra do meio poroso, de comprimento L e seção reta de área A é dada por

$$Q = \frac{-KA}{\mu} \cdot \frac{\Delta P}{L}, \quad (3.2)$$

onde ΔP é a diferença de pressão aplicada na amostra, μ é a viscosidade do fluido e K é a permeabilidade absoluta do meio poroso. Na forma diferencial, o sistema clássico de Darcy é escrito na seguinte forma:

$$\begin{cases} \nabla \cdot \vec{v} = s, & em \Omega \\ \vec{v} = -\mathbf{K}\nabla p, & em \Omega \end{cases} \quad (3.3)$$

onde $\mathbf{K} = \begin{pmatrix} K_x & K_{xy} \\ K_{xy} & K_y \end{pmatrix}$ é o tensor de permeabilidade anisotrópico; p é a pressão; s é um termo de fonte/sumidouro; v é a velocidade de Darcy e Ω é o domínio. Aqui foi considerado $s = 0$. O sinal negativo da segunda equação em (3.3) significa que o fluxo ocorre no sentido contrário ao do gradiente de pressão. Substituindo a segunda equação de (3.3) na primeira, nós obtemos

$$\nabla \cdot \mathbf{K} \nabla p = 0, \text{ em } \Omega, \quad (3.4)$$

a qual é escrita em termos unicamente da pressão.

As condições de contorno da equação (3.4) podem ser dadas por Dirichlet e Neumann, respectivamente:

$$p = p_k \text{ em } \Gamma_D \quad (3.5)$$

$$\nabla p \cdot \vec{\mathbf{n}} = \alpha_p \text{ em } \Gamma_N \quad (3.6)$$

onde $\vec{\mathbf{n}}$ é o vetor normal à superfície do contorno Γ_N , α_p é igual a zero e p_k é um valor constante para a pressão.

3.2 Modelo do Escoamento Monofásico

Vamos obter a equação diferencial que modela o escoamento de um fluido em um meio poroso. O princípio básico é a lei de conservação de massa: “em um volume de controle fixo no espaço, a variação de massa em um intervalo de tempo é igual à massa que entrou menos a que saiu através das fronteiras ou criada devida a ação de fontes ou sumidouros”:

$$\text{Entrada} - \text{Saída} = \text{Acumulado}$$

Considere o volume de controle retangular $V = [x, x + dx] \times [y, y + dy] \times [z, z + dz]$, com velocidade $\vec{v}(x, y, z) = (v_x(x, y, z), v_y(x, y, z), v_z(x, y, z))$. Seja também o fluxo de massa $\vec{J} = (V_x, V_y, V_z)$.

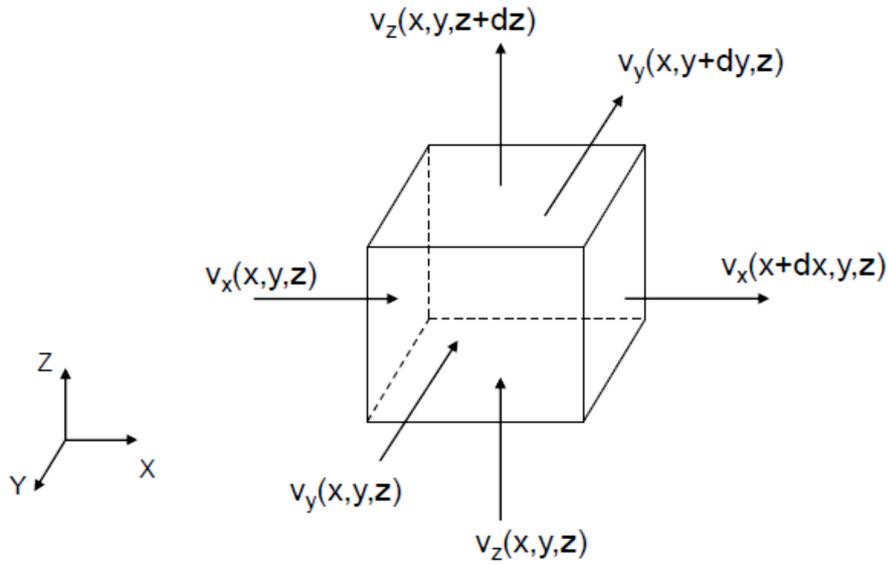


Figure 3.1: Volume de controle.

Denotando a concentração do gadolínio por C , a massa no volume M em um instante t é dada por

$$M(t) = \iiint_V (\phi C)(x, y, z, t) dV \quad (3.7)$$

A variação de massa em um intervalo de tempo $[t, t + dt]$ é dada por:

$$\begin{aligned} M(t + dt) - M(t) &= \iiint_V [(\phi C)(x, y, z, t + dt) - (\phi C)(x, y, z, t)] dV \\ &= \iiint_V \int_t^{t+dt} \frac{\partial(\phi C)}{\partial t} ds dV. \end{aligned} \quad (3.8)$$

O fluxo de massa atravessando a face perpendicular ao eixo X no ponto (z, y, z) no instante t é dada por (figura 3.2):

$$f_x(x, t) = + \int_y^{y+dy} \int_z^{z+dz} V_x(x, y, z, t) dy dz. \quad (3.9)$$

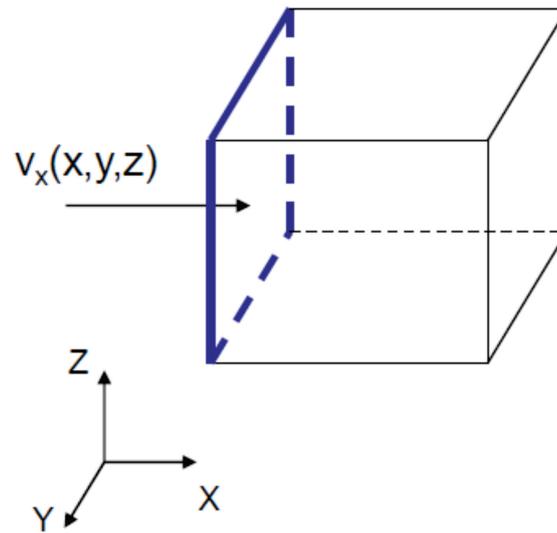


Figure 3.2: Massa atravessando a face perpendicular ao eixo X no ponto (x, y, z)

O fluxo de massa atravessando a face perpendicular ao eixo X no ponto $(x + dx, y, z)$ no instante t é dada por (figura 3.3):

$$f_x(x + dx, t) = - \int_y^{y+dy} \int_z^{z+dz} V_x(x + dx, y, z, t) dy dz. \quad (3.10)$$

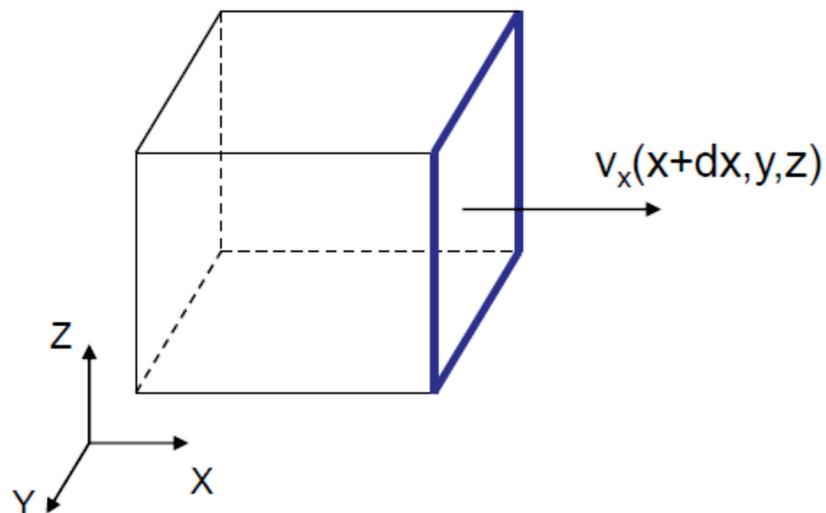


Figure 3.3: Massa atravessando a face perpendicular ao eixo X no ponto $(x + dx, y, z)$.

O sinal positivo da equação (3.9) significa que a massa está entrando no volume de controle. Já o sinal negativo da equação (3.10) significa que a massa está saindo.

O fluxo de massa atravessando as faces perpendiculares ao eixo X no intervalo $[t, t + dt]$ é dada por:

$$\begin{aligned}
\int_t^{t+dt} (f_x(x, t) + f_x(x + dx, t)) dt &= \int_t^{t+dt} \int_z^{z+dz} \int_y^{y+dy} [V_x(x, y, z, t) - V_x(x + dx, y, z, t)] dydzdt \\
&= - \int_t^{t+dt} \left[\int_z^{z+dz} \int_y^{y+dy} \int_x^x \frac{\partial V_x}{\partial x} dx dy dz \right] dt \\
&= - \int_t^{t+dt} \iiint_V \frac{\partial V_x}{\partial x} dV dt.
\end{aligned} \tag{3.11}$$

Raciocinando analogamente para as direções y e z , o fluxo de massa total percorrendo as faces do volume de controle V no intervalo $[t, t + dt]$ é dada por

$$- \int_t^{t+dt} \iiint_V \left[\frac{\partial V_x}{\partial x} + \frac{\partial V_y}{\partial y} + \frac{\partial V_z}{\partial z} \right] dV dt = - \int_t^{t+dt} \iiint_V \nabla \cdot \vec{J} dV dt. \tag{3.12}$$

Seja Q a vazão volumétrica de uma fonte ($Q > 0$, injeção) ou sumidouro ($Q < 0$, produção) situado no volume de controle V . A massa agregada à V por Q no intervalo de tempo $[t, t + dt]$ é dada por

$$\int_t^{t+dt} \iiint_V Q dV dt \tag{3.13}$$

Sinal positivo para injeção (acréscimo de massa) e negativo para produção (retirada de massa). Juntando acumulação, fluxo e termos fontes:

$$\iiint_V \int_t^{t+dt} \frac{\partial(\phi C)}{\partial t} dt dV = - \int_t^{t+dt} \iiint_V (\nabla \cdot \vec{J}) dV dt + \int_t^{t+dt} \iiint_V Q dV dt \tag{3.14}$$

o que implica em

$$\int_t^{t+dt} \iiint_V \left[\frac{\partial(\phi C)}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J} - Q \right] dV dt = 0 \tag{3.15}$$

Como V e o intervalo de tempo $[t, t + dt]$ são arbitrários, o integrando deve ser nulo. Logo:

$$\frac{\partial(\phi C)}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J} - Q = 0 \quad (3.16)$$

A equação (3.16) é chamada equação de balanço de massa. A dedução mostrada aqui levou em consideração o escoamento tridimensional, porém a aplicação para o escoamento monofásico será bidimensional.

Assume-se que o fluxo \vec{J} possui dois componentes: um fluxo convectivo ($\vec{v}C$) e um fluxo difusivo ($-\mathbf{D}\nabla C$). Assim, o fluxo \vec{J} pode ser reescrito por

$$\vec{J} = \vec{v}C - \mathbf{D}\nabla C, \quad (3.17)$$

onde $\mathbf{D} = \begin{pmatrix} Dx & Dxy \\ Dxy & Dy \end{pmatrix}$ é o tensor de difusão, o qual, assim como o tensor de permeabilidade, também leva em consideração a anisotropia do tecido cardíaco. Substituindo a equação (3.17) e adotando $Q = 0$ a equação (3.16) torna-se

$$\frac{\partial\phi C}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{v}C - \nabla \cdot (\mathbf{D}\nabla C) = 0, \quad em \quad \Omega \quad (3.18)$$

Para resolver a equação (3.18), consideram-se as condições de contorno de Neumann e Dirichlet, dadas respectivamente por

$$C = \beta \text{ em } \Gamma_D \quad (3.19)$$

$$\mathbf{D}\nabla C \cdot \vec{n} = \gamma \text{ em } \Gamma_N \quad (3.20)$$

onde β e γ são valores constantes conhecidos.

Como a equação (3.18) é transiente necessita-se também de uma condição inicial, a qual é dada por

$$C(x, 0) = C_0(x) \text{ em } \Omega \quad (3.21)$$

Em resumo, o problema a ser resolvido aqui é formulado através do seguinte modelo matemático:

Para um domínio poroso Ω com contorno $\partial\Omega = \Gamma_D \cup \Gamma_N$ em um intervalo de tempo $I = (0, T]$, dados os tensores de permeabilidade $\mathbf{K} : \Omega \rightarrow \mathfrak{R}^2 \times \mathfrak{R}^2$ e de difusão $\mathbf{D} : \Omega \rightarrow \mathfrak{R}^2 \times \mathfrak{R}^2$, a porosidade ϕ , o campo de velocidade $\vec{v} : \Omega \rightarrow \mathfrak{R}$ e as condições de contorno apropriadas, encontrar a concentração $C : \Omega \rightarrow \mathfrak{R}$ tal que:

$$\nabla \cdot \mathbf{K} \nabla p = 0, \text{ em } \Omega \quad (3.22)$$

$$\vec{v} = -\mathbf{K} \nabla p, \text{ em } \Omega \quad (3.23)$$

$$\frac{\partial \phi C}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{v} C - \nabla \cdot (\mathbf{D} \nabla C) = 0, \text{ em } \Omega \quad (3.24)$$

com as condições de contorno:

$$p = p_k, \text{ em } \Gamma_D \quad (3.25)$$

$$\nabla p \cdot \vec{\mathbf{n}} = 0, \text{ em } \Gamma_N \quad (3.26)$$

$$C = \beta, \text{ em } \Gamma_D \quad (3.27)$$

$$\mathbf{D} \nabla C \cdot \vec{\mathbf{n}} = \gamma \text{ em } \Gamma_N \quad (3.28)$$

e a condição inicial:

$$C(x, 0) = C_0(x) \text{ em } \Omega \quad (3.29)$$

onde $\vec{\mathbf{n}}$ é o vetor normal à fronteira Γ_N . Γ_D e Γ_N são, respectivamente, as porções do contorno com concentração especificada (condição de Dirichlet) e fluxo definido (condição de Neumann).

4 MODELAGEM COMPUTACIONAL

Visando analisar numericamente o fenômeno descrito por modelos matemáticos, existem métodos que são utilizados para transformar equações diferenciais, naturalmente na forma contínua, em equações discretas. Dentre estes, pode-se citar o Método das Diferenças Finitas (MDF) [19], o Método dos Elementos Finitos (MEF) [7], o Método de Lattice-Boltzman (MLB) [20], o Método dos Elementos de Contorno (MEC) [21] e o Método dos Volumes Finitos (MVF) [22]. Nesta perspectiva, foi escolhido para tratar o modelo aqui proposto o método MVF.

O método MVF representa e avalia EDP's em sua forma discretizada [23, 22, 24]. O nome vem do fato de que considera-se um pequeno volume de controle em torno de cada ponto da malha. As integrais de volume em EDP's que possuem um termo de divergência são convertidos em integrais de superfície, usando o teorema da divergência. Estes termos são então avaliados como fluxos através da superfície de cada volume finito. Por garantir o balanço de entrada e de saída de massa, este método é dito conservativo.

Computacionalmente, são criados pontos entre os nós da malha, os quais representam os valores das variáveis avaliadas nas faces do volume. A Figura 4.1 ilustra a situação tratada neste texto (duas dimensões): o nó central é o ponto P de coordenadas (x_i, y_j) , e os pontos (x_{i+1}, y_j) , (x_{i-1}, y_j) e (x_i, y_{j+1}) e (x_i, y_{j-1}) são os vizinhos da direita, esquerda, de cima e de baixo do ponto P , respectivamente. Os pontos $(x_{i+\frac{1}{2}}, y_j)$, $(x_{i-\frac{1}{2}}, y_j)$ e $(x_i, y_{j+\frac{1}{2}})$ e $(x_i, y_{j-\frac{1}{2}})$ representam as faces, respectivamente, da direita, esquerda, de cima e de baixo do volume de controle em torno do ponto P . A fim de simplificar a notação, os pontos das faces serão representados da seguinte forma: $(x_{i+\frac{1}{2}}, y_j) = i + \frac{1}{2}$, $(x_{i-\frac{1}{2}}, y_j) = i - \frac{1}{2}$, $(x_i, y_{j+\frac{1}{2}}) = j + \frac{1}{2}$ e $(x_i, y_{j-\frac{1}{2}}) = j - \frac{1}{2}$

Vale lembrar que o MVF também pode ser aplicado para uma e três dimensões. No primeiro caso haveria fluxo apenas no sentido do eixo x e no outro fluxo no sentido dos eixos x , y e z .

Uma vantagem importante, porém que não será utilizada aqui, é o fato de que o MVF pode ser facilmente adaptado para malhas não estruturadas [25]. Pode-se dizer também

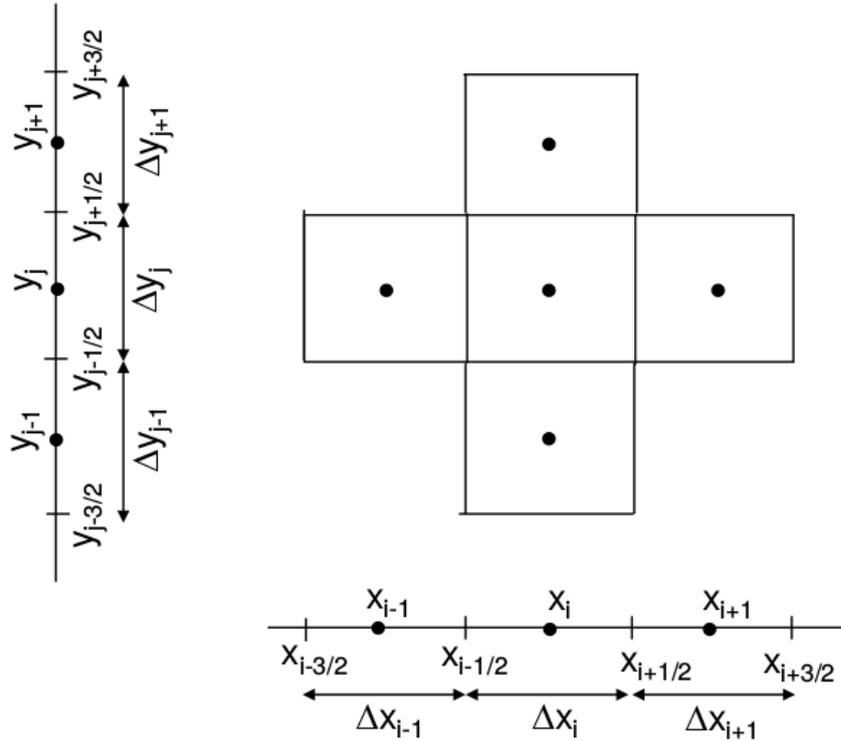


Figure 4.1: Representação das faces (células computacionais) do volume de controle centrado no ponto P e dos nós vizinhos a este ponto.

que ele é amplamente utilizado na mecânica de fluidos [23, 26, 27, 25, 28, 29].

Uma vez definido este contexto, vale ressaltar que o termo convectivo da equação (3.24) necessita de um estudo mais detalhado. Para tanto, existem diferentes técnicas que podem ser utilizadas, e dentre elas destacam-se a proposta do esquema FOU (“First-Order Upwind”) [30], do SMART (“Sharp and Monotonic Algorithm for Realistic Transport”) por Gaskell e Lau [31], do WACEB (“Weighted Average Coefficient Ensuring Boundedness”) por Song et al. [32], do VONOS (“Variable-Order Non-Oscillatory Scheme”) de Varonos e Bergeles [33], a proposta do CUBISTA (“Convergent and Universally Bounded Interpolation Scheme for the Treatment of Advection”) de Alves et al. [34] e do esquema TOPUS (“Third-Order Polynomial Upwind Scheme”) de Queiroz [35]. Foram escolhidas para tratar o problema em questão as técnicas FOU e TOPUS [11, 12, 13, 14]. Estes são métodos já validados e amplamente utilizados no estudos da dinâmica dos fluidos.

Neste capítulo são apresentadas as discretizações das equações ((3.22), (3.23) e (3.24)) que regem o modelo, bem como apresenta-se um algoritmo que descreve os passos para resolver tais equações.

A estrutura da parte de discretizações foi elaborada da seguinte maneira:

1. Discretização do modelo de Darcy.

A discretização das equações de Darcy (Equações (3.22) e (3.23)) é apresentada na seção 4.1.

2. Discretização do modelo do escoamento monofásico.

O detalhamento desta etapa, que é referente à Equação (3.24), é exposto na seção 4.2.

Além destes tópicos, também é tratado neste capítulo o estudo da aproximação numérica do termo convectivo.

Na última seção (4.4), é apresentado um algoritmo capaz de simular a dinâmica da perfusão baseada em contraste e que foi implementado computacionalmente utilizando a linguagem de programação C.

4.1 Discretização Bidimensional do Modelo de Darcy

Baseado nas ideias apresentadas no contexto de volumes finitos, nesta seção será feita uma expansão da equação (3.4) seguida da aplicação dos operadores gradiente e divergente. Temos então:

$$\nabla \cdot \mathbf{K} \nabla p = 0 \quad (4.1)$$

$$\nabla \cdot \begin{pmatrix} K_x & K_{xy} \\ K_{xy} & K_y \end{pmatrix} \cdot \left(\frac{\partial p}{\partial x}, \frac{\partial p}{\partial y} \right)^T = 0 \quad (4.2)$$

$$\nabla \cdot \left(K_x \cdot \frac{\partial p}{\partial x} + K_{xy} \cdot \frac{\partial p}{\partial y}, K_{xy} \cdot \frac{\partial p}{\partial x} + K_y \cdot \frac{\partial p}{\partial y} \right)^T = 0 \quad (4.3)$$

Aplicando o operador divergente, temos:

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \cdot \frac{\partial p}{\partial x} \right)}_1 + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \left(K_{xy} \cdot \frac{\partial p}{\partial y} \right)}_2 + \underbrace{\frac{\partial}{\partial y} \left(K_{xy} \cdot \frac{\partial p}{\partial x} \right)}_3 + \underbrace{\frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \cdot \frac{\partial p}{\partial y} \right)}_4 = 0 \quad (4.4)$$

Integrando (1), obtemos:

$$\int_{j-\frac{1}{2}}^{j+\frac{1}{2}} \int_{i-\frac{1}{2}}^{i+\frac{1}{2}} \frac{\partial}{\partial x} \left(Kx \cdot \frac{\partial p}{\partial x} \right) dx dy = \int_{j-\frac{1}{2}}^{j+\frac{1}{2}} Kx_{i+\frac{1}{2}} \cdot \left[\frac{\partial p}{\partial x} \right]_{i+\frac{1}{2}} dy - \int_{j-\frac{1}{2}}^{j+\frac{1}{2}} Kx_{i-\frac{1}{2}} \cdot \left[\frac{\partial p}{\partial x} \right]_{i-\frac{1}{2}} dy$$

Aproximando estas duas últimas integrais pela regra do ponto médio $\left(\int_a^b f(\alpha) d\alpha \approx (b-a) \cdot f\left(\frac{a+b}{2}\right) \right)$, chegamos em

$$\int_{j-\frac{1}{2}}^{j+\frac{1}{2}} Kx_{i+\frac{1}{2}} \cdot \left[\frac{\partial p}{\partial x} \right]_{i+\frac{1}{2}} dy - \int_{j-\frac{1}{2}}^{j+\frac{1}{2}} Kx_{i-\frac{1}{2}} \cdot \left[\frac{\partial p}{\partial x} \right]_{i-\frac{1}{2}} dy = h \cdot Kx_{i+\frac{1}{2}} \left[\frac{\partial p}{\partial x} \right]_{i+\frac{1}{2}} - h \cdot Kx_{i-\frac{1}{2}} \left[\frac{\partial p}{\partial x} \right]_{i-\frac{1}{2}}. \quad (4.5)$$

onde h é o espaçamento da malha, o qual é considerado idêntico em ambas as direções x e y . Fazendo o mesmo para (2), (3) e (4), obtemos respectivamente:

$$\begin{aligned} \int_{j-\frac{1}{2}}^{j+\frac{1}{2}} \int_{i-\frac{1}{2}}^{i+\frac{1}{2}} \frac{\partial}{\partial x} \left(Kxy \cdot \frac{\partial p}{\partial y} \right) dx dy &= \int_{j-\frac{1}{2}}^{j+\frac{1}{2}} Kxy_{i+\frac{1}{2}} \cdot \left[\frac{\partial p}{\partial y} \right]_{i+\frac{1}{2}} dy - \int_{j-\frac{1}{2}}^{j+\frac{1}{2}} Kxy_{i-\frac{1}{2}} \cdot \left[\frac{\partial p}{\partial y} \right]_{i-\frac{1}{2}} dy \\ &= h \cdot Kxy_{i+\frac{1}{2}} \left[\frac{\partial p}{\partial y} \right]_{i+\frac{1}{2}} - h \cdot Kxy_{i-\frac{1}{2}} \left[\frac{\partial p}{\partial y} \right]_{i-\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (4.6)$$

$$\begin{aligned} \int_{i-\frac{1}{2}}^{i+\frac{1}{2}} \int_{j-\frac{1}{2}}^{j+\frac{1}{2}} \frac{\partial}{\partial y} \left(Kxy \cdot \frac{\partial p}{\partial x} \right) dy dx &= \int_{i-\frac{1}{2}}^{i+\frac{1}{2}} Kxy_{j+\frac{1}{2}} \cdot \left[\frac{\partial p}{\partial x} \right]_{j+\frac{1}{2}} dx - \int_{i-\frac{1}{2}}^{i+\frac{1}{2}} Kxy_{j-\frac{1}{2}} \cdot \left[\frac{\partial p}{\partial x} \right]_{j-\frac{1}{2}} dx \\ &= h \cdot Kxy_{j+\frac{1}{2}} \left[\frac{\partial p}{\partial x} \right]_{j+\frac{1}{2}} - h \cdot Kxy_{j-\frac{1}{2}} \left[\frac{\partial p}{\partial x} \right]_{j-\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (4.7)$$

$$\begin{aligned}
\int_{i-\frac{1}{2}}^{i+\frac{1}{2}} \int_{j-\frac{1}{2}}^{j+\frac{1}{2}} \frac{\partial}{\partial y} \left(Ky \cdot \frac{\partial p}{\partial y} \right) dy dx &= \int_{i-\frac{1}{2}}^{i+\frac{1}{2}} Ky_{j+\frac{1}{2}} \cdot \left[\frac{\partial p}{\partial y} \right]_{j+\frac{1}{2}} dx - \int_{i-\frac{1}{2}}^{i+\frac{1}{2}} Ky_{j-\frac{1}{2}} \cdot \left[\frac{\partial p}{\partial y} \right]_{j-\frac{1}{2}} dx \\
&= h \cdot Ky_{j+\frac{1}{2}} \left[\frac{\partial p}{\partial y} \right]_{j+\frac{1}{2}} - h \cdot Ky_{j-\frac{1}{2}} \left[\frac{\partial p}{\partial y} \right]_{j-\frac{1}{2}}
\end{aligned} \tag{4.8}$$

A aproximação das derivadas nas faces dos volumes fica:

$$\left[\frac{\partial p}{\partial x} \right]_{i+\frac{1}{2}} = \frac{p_{i+1,j} - p_{i,j}}{h}, \quad \left[\frac{\partial p}{\partial x} \right]_{i-\frac{1}{2}} = \frac{p_{i,j} - p_{i-1,j}}{h} \tag{4.9}$$

$$\left[\frac{\partial p}{\partial y} \right]_{j+\frac{1}{2}} = \frac{p_{i,j+1} - p_{i,j}}{h}, \quad \left[\frac{\partial p}{\partial y} \right]_{j-\frac{1}{2}} = \frac{p_{i,j} - p_{i,j-1}}{h} \tag{4.10}$$

$$\left[\frac{\partial p}{\partial x} \right]_{j+\frac{1}{2}} = \frac{p_{i+1,j+1} - p_{i-1,j+1} + p_{i+1,j} - p_{i-1,j}}{4h}, \quad \left[\frac{\partial p}{\partial x} \right]_{j-\frac{1}{2}} = \frac{p_{i+1,j} - p_{i-1,j} + p_{i+1,j-1} - p_{i-1,j-1}}{4h} \tag{4.11}$$

$$\left[\frac{\partial p}{\partial y} \right]_{i+\frac{1}{2}} = \frac{p_{i+1,j+1} - p_{i+1,j-1} + p_{i,j+1} - p_{i,j-1}}{4h}, \quad \left[\frac{\partial p}{\partial y} \right]_{i-\frac{1}{2}} = \frac{p_{i,j+1} - p_{i,j-1} + p_{i-1,j+1} - p_{i-1,j-1}}{4h} \tag{4.12}$$

A aproximação das transmissibilidades nas faces do volume é feita utilizando a média harmônica entre as permeabilidades de nós vizinhos:

$$\begin{aligned}
Kx_{i+\frac{1}{2},j} &= 2 \cdot \frac{Kx_{i+1,j} \cdot Kx_{i,j}}{Kx_{i+1,j} + Kx_{i,j}}, \\
Kx_{i-\frac{1}{2},j} &= 2 \cdot \frac{Kx_{i,j} \cdot Kx_{i-1,j}}{Kx_{i,j} + Kx_{i-1,j}}, \\
Ky_{i,j+\frac{1}{2}} &= 2 \cdot \frac{Ky_{i,j+1} \cdot Ky_{i,j}}{Ky_{i,j+1} + Ky_{i,j}}, \\
Ky_{i,j-\frac{1}{2}} &= 2 \cdot \frac{Ky_{i,j-1} \cdot Ky_{i,j}}{Ky_{i,j-1} + Ky_{i,j}}, \\
Kxy_{i+\frac{1}{2},j} &= 2 \cdot \frac{Kxy_{i+1,j} \cdot Kxy_{i,j}}{Kxy_{i+1,j} + Kxy_{i,j}}, \\
Kxy_{i-\frac{1}{2},j} &= 2 \cdot \frac{Kxy_{i,j} \cdot Kxy_{i-1,j}}{Kxy_{i,j} + Kxy_{i-1,j}}, \\
Kxy_{i,j+\frac{1}{2}} &= 2 \cdot \frac{Kxy_{i,j+1} \cdot Kxy_{i,j}}{Kxy_{i,j+1} + Kxy_{i,j}}, \\
Kxy_{i,j-\frac{1}{2}} &= 2 \cdot \frac{Kxy_{i,j-1} \cdot Kxy_{i,j}}{Kxy_{i,j-1} + Kxy_{i,j}}.
\end{aligned} \tag{4.13}$$

Substituindo (4.9), (4.10), (4.11), (4.12) e (4.13) na equação (4.4) e explicitando $p_{i,j}$ obtemos

$$\begin{aligned}
p_{i,j}^{k+1} &= [(4Kx_{i+\frac{1}{2},j}^k + Kxy_{i,j+\frac{1}{2}}^k - Kxy_{i,j-\frac{1}{2}}^k) \cdot p_{i+1,j}^k \\
&+ (4Kx_{i-\frac{1}{2},j}^k - Kxy_{i,j+\frac{1}{2}}^k + Kxy_{i,j-\frac{1}{2}}^k) \cdot p_{i-1,j}^k \\
&+ (4Ky_{i,j+\frac{1}{2}}^k + Kxy_{i+\frac{1}{2},j}^k - Kxy_{i-\frac{1}{2},j}^k) \cdot p_{i,j+1}^k \\
&+ (4Ky_{i,j-\frac{1}{2}}^k - Kxy_{i+\frac{1}{2},j}^k + Kxy_{i-\frac{1}{2},j}^k) \cdot p_{i,j-1}^k \\
&+ (Kxy_{i+\frac{1}{2},j}^k + Kxy_{i,j+\frac{1}{2}}^k) \cdot p_{i+1,j+1}^k \\
&+ (Kxy_{i-\frac{1}{2},j}^k + Kxy_{i,j+\frac{1}{2}}^k) \cdot p_{i-1,j-1}^k \\
&- (Kxy_{i+\frac{1}{2},j}^k + Kxy_{i,j-\frac{1}{2}}^k) \cdot p_{i+1,j-1}^k \\
&- (Kxy_{i-\frac{1}{2},j}^k + Kxy_{i,j+\frac{1}{2}}^k) \cdot p_{i-1,j+1}^k] \\
&/ 4 \cdot (Kx_{i+\frac{1}{2},j}^k + Kx_{i-\frac{1}{2},j}^k + Kx_{i,j+\frac{1}{2}}^k + Kx_{i,j-\frac{1}{2}}^k)
\end{aligned} \tag{4.14}$$

onde $k + 1$ indica a iteração na qual os valores da pressão estão sendo calculados e k

a iteração anterior.

Tem-se uma equação deste tipo para cada nó da malha, o que nos dá um sistema linear. Este sistema foi resolvido através do método iterativo de Jacobi [36], com o critério de parada $\|p_{i,j}^{k+1} - p_{i,j}^k\|_\infty < \epsilon$, onde $\epsilon = 10^{-6}$.

Uma vez conhecendo o campo de pressão, ele então é utilizado na segunda equação do sistema (3.3) para obtermos a velocidade. Novamente utilizando o método MVF para a discretização desta equação, obtemos as seguintes expressões para cada face do volume de controle:

$$\begin{aligned}
v_{i+\frac{1}{2},j} &= -Kx_{i+\frac{1}{2},j} \cdot \left(\frac{p_{i+1,j} - p_{i,j}}{h} \right) - Kxy_{i+\frac{1}{2},j} \cdot \left(\frac{p_{i,j+1} + p_{i+1,j+1} - p_{i,j-1} - p_{i+1,j-1}}{4 \cdot h} \right) \\
v_{i-\frac{1}{2},j} &= -Kx_{i-\frac{1}{2},j} \cdot \left(\frac{p_{i,j} - p_{i-1,j}}{h} \right) - Kxy_{i-\frac{1}{2},j} \cdot \left(\frac{p_{i-1,j+1} + p_{i,j+1} - p_{i-1,j-1} - p_{i,j-1}}{4 \cdot h} \right) \\
v_{i,j+\frac{1}{2}} &= -Kx_{i,j+\frac{1}{2}} \cdot \left(\frac{p_{i,j+1} - p_{i,j}}{h} \right) - Kxy_{i+\frac{1}{2},j} \cdot \left(\frac{p_{i+1,j+1} + p_{i+1,j} - p_{i-1,j+1} + p_{i-1,j}}{4 \cdot h} \right) \\
v_{i,j-\frac{1}{2}} &= -Kx_{i,j-\frac{1}{2}} \cdot \left(\frac{p_{i,j} - p_{i,j-1}}{h} \right) - Kxy_{i+\frac{1}{2},j} \cdot \left(\frac{p_{i+1,j} + p_{i+1,j-1} - p_{i-1,j} + p_{i-1,j-1}}{4 \cdot h} \right)
\end{aligned} \tag{4.15}$$

A velocidade é usada no segundo termo da equação (3.18) $\left(\frac{\partial \phi C}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{v}C - \nabla \cdot (D\nabla C) = 0 \right)$, cuja discretização é detalhada na seção seguinte.

4.2 Discretização do Modelo do Escoamento Monofásico

Recordando a equação do escoamento monofásico em meios porosos (equação 3.18), tem-se:

$$\underbrace{\frac{\partial \phi C}{\partial t}}_i = \underbrace{\nabla \cdot (D\nabla C)}_{ii} - \underbrace{\nabla \cdot \vec{v}C}_{iii}$$

Os três termos desta equação serão estudados de maneira individual. Após o tratamento, eles são então agrupados novamente.

Aplicando o método de Euler explícito no termo i , e considerando ϕ constante, obtemos

$$\phi \cdot \frac{(C_{i,j}^{t+1} - C_{i,j}^t)}{\Delta t} \quad (4.16)$$

Aplicando o MVF no termo ii (difusivo), obtemos

$$\begin{aligned} dif_{i,j} = & [(4Dx_{i+\frac{1}{2},j} + Dxy_{i,j+\frac{1}{2}} - Dxy_{i,j-\frac{1}{2}}) \cdot C_{i+1,j} \\ & + (4 \cdot Dx_{i-\frac{1}{2},j} - Dxy_{i,j+\frac{1}{2}} + Dxy_{i,j-\frac{1}{2}}) \cdot C_{i-1,j} \\ & + (4 \cdot Dy_{i,j+\frac{1}{2}} + Dxy_{i+\frac{1}{2},j} - Dxy_{i-\frac{1}{2},j}) \cdot C_{i,j+1} \\ & + (4 \cdot Dy_{i,j-\frac{1}{2}} - Dxy_{i+\frac{1}{2},j} + Dxy_{i-\frac{1}{2},j}) \cdot C_{i,j-1} \\ & + (Dxy_{i+\frac{1}{2},j} + Dxy_{i,j+\frac{1}{2}}) \cdot C_{i+1,j+1} \\ & + (Dxy_{i-\frac{1}{2},j} + Dxy_{i,j+\frac{1}{2}}) \cdot C_{i-1,j-1} \\ & - (Dxy_{i+\frac{1}{2},j} + Dxy_{i,j-\frac{1}{2}}) \cdot C_{i+1,j-1} \\ & - (Dxy_{i-\frac{1}{2},j} + Dxy_{i,j+\frac{1}{2}}) \cdot C_{i-1,j+1}] \\ & - 4 \cdot (Dx_{i+\frac{1}{2},j} + Dx_{i-\frac{1}{2},j} + Dx_{i,j+\frac{1}{2}} + Dx_{i,j-\frac{1}{2}}) \cdot C_{i,j} \end{aligned} \quad (4.17)$$

onde as difusões nas faces são dadas pela média harmônica das difusões entre nós vizinhos:

$$\begin{aligned}
Dx_{i+\frac{1}{2},j} &= 2 \cdot \frac{Dx_{i+1,j} \cdot Dx_{i,j}}{Dx_{i+1,j} + Dx_{i,j}}, \\
Dx_{i-\frac{1}{2},j} &= 2 \cdot \frac{Dx_{i,j} \cdot Dx_{i-1,j}}{Dx_{i,j} + Dx_{i-1,j}}, \\
Dy_{i,j+\frac{1}{2}} &= 2 \cdot \frac{Dy_{i,j+1} \cdot Dy_{i,j}}{Dy_{i,j+1} + Dy_{i,j}}, \\
Dy_{i,j-\frac{1}{2}} &= 2 \cdot \frac{Dy_{i,j-1} \cdot Dy_{i,j}}{Dy_{i,j-1} + Dy_{i,j}}, \\
Dxy_{i+\frac{1}{2},j} &= 2 \cdot \frac{Dxy_{i+1,j} \cdot Dxy_{i,j}}{Dxy_{i+1,j} + Dxy_{i,j}}, \\
Dxy_{i-\frac{1}{2},j} &= 2 \cdot \frac{Dxy_{i,j} \cdot Dxy_{i-1,j}}{Dxy_{i,j} + Dxy_{i-1,j}}, \\
Dxy_{i,j+\frac{1}{2}} &= 2 \cdot \frac{Dxy_{i,j+1} \cdot Dxy_{i,j}}{Dxy_{i,j+1} + Dxy_{i,j}}, \\
Dxy_{i,j-\frac{1}{2}} &= 2 \cdot \frac{Dxy_{i,j-1} \cdot Dxy_{i,j}}{Dxy_{i,j-1} + Dxy_{i,j}}.
\end{aligned} \tag{4.18}$$

Aplicando o método MVF no termo *iii* (convectivo), obtemos

$$conv_{i,j} = \left(v_{i+\frac{1}{2},j} \cdot C_{i+\frac{1}{2},j} - v_{i-\frac{1}{2},j} \cdot C_{i-\frac{1}{2},j} + v_{i,j+\frac{1}{2}} \cdot C_{i,j+\frac{1}{2}} - v_{i,j-\frac{1}{2}} \cdot C_{i,j-\frac{1}{2}} \right) \cdot \frac{1}{h} \tag{4.19}$$

onde h é o intervalo espacial entre cada nó da malha.

Um esquema de diferenças centrais entre nós vizinhos para aproximar a variável em questão na face comum aos nós é suficiente no caso do termo difusivo (*ii*). Já no caso da aproximação numérica das concentrações nas faces do volume de controle do termo convectivo (*iii*) este método não se aplica bem, isto é, oscilações podem aparecer nas soluções. Para contornar este obstáculo, outra técnica deve ser utilizada. No caso deste trabalho, foi escolhida como alternativa uma classe de métodos numéricos chamados *upwind*. Foram utilizados os esquemas *upwind FOU* e *TOPUS*. O segundo foi desenvolvido por Queiroz et al. [37], e é um esquema que já foi validado em diferentes problemas da área de dinâmica dos fluidos, em particular, em simulação de escoamentos incompressíveis com superfícies livres. Na próxima seção descrevem-se os dois esquemas.

4.3 Aproximação Numérica do Termo Convectivo

O sucesso em se obter simulações numéricas aceitáveis (precisas e livres de oscilações e suavizações) de problemas de transporte envolvendo convecção e difusão é um dos temas mais interessantes e desafiantes na área de dinâmica dos fluidos computacional, e tem atraído muitos pesquisadores nos últimos anos. Como foi dito anteriormente, para o termo difusivo o esquema de diferenças centrais funciona muito bem, sem maiores problemas. Mas para o termo convectivo é necessário tomar a decisão de qual esquema convectivo deve ser utilizado para garantir precisão e convergência do método numérico. Nesta seção, apresenta-se a discretização do termo convectivo da equação de transporte (3.24) através dos esquemas upwind denominados FOU e TOPUS.

Seja o termo convectivo da equação de transporte (3.24):

$$\nabla \cdot \vec{v}C \Big|_P = \frac{\partial(uC)}{\partial x} \Big|_P + \frac{\partial(vC)}{\partial y} \Big|_P, \quad (4.20)$$

em que $\vec{v} = (u, v)$ é a velocidade de convecção e C é a variável convectada. O ponto P em (4.20) representa a posição em que o termo convectivo é avaliado. Por exemplo, a Figura 4.2 mostra esse ponto $P = (i, j)$ de avaliação, e as faces computacionais f, g, m e n das células computacionais.

As derivadas do lado direito da equação (4.20) são aproximadas no ponto P por

$$\frac{\partial uC}{\partial x} \Big|_P \approx \frac{(uC) \Big|_f - (uC) \Big|_g}{\Delta x} = \frac{u_f C_f - u_g C_g}{\Delta x}, \quad (4.21)$$

$$\frac{\partial vC}{\partial y} \Big|_P \approx \frac{(vC) \Big|_m - (vC) \Big|_n}{\Delta y} = \frac{v_m C_m - v_n C_n}{\Delta y} \quad (4.22)$$

Δx e Δy são os espaçamentos da malha nas direções x e y . Assume-se $\Delta x = \Delta y = h$ nos experimentos numéricos do Capítulo 5.

Levando em conta a representação da célula computacional da Figura 4.2, tem-se que a equação (4.21) é estimada por

$$\frac{\partial uC}{\partial x} \Big|_{(i,j)} = \frac{(u_f C_{i+\frac{1}{2},j} - u_g C_{i-\frac{1}{2},j})}{\Delta x}, \quad (4.23)$$

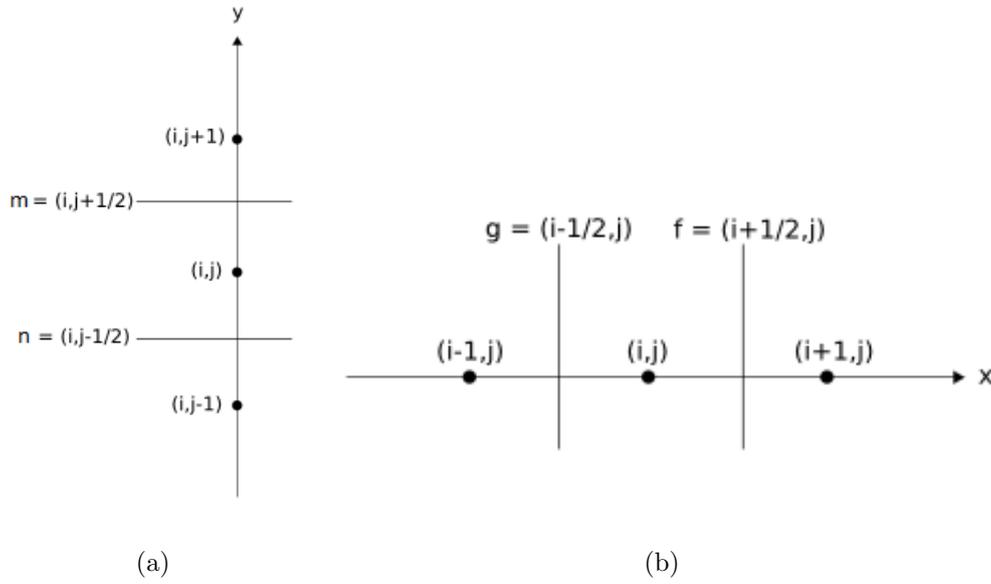


Figure 4.2: Célula computacional mostrando o ponto $P = (i, j)$ de discretização dos termos convectivos, seus vizinhos, as faces envolvidas $m = (i, j + \frac{1}{2})$ e $n = (i, j - \frac{1}{2})$ na direção y (Figura a) ou as faces envolvidas $f = (i + \frac{1}{2}, j)$ e $g = (i - \frac{1}{2}, j)$ na direção x (Figura b).

em que u_f e u_g são aproximadas, respectivamente, utilizando-se as médias harmônicas

$$\begin{aligned} u_f &= u_{i+\frac{1}{2},j} = 2 \cdot \left(\frac{u_{i+1,j} \cdot u_{i,j}}{u_{i+1,j} + u_{i,j}} \right), \\ u_g &= u_{i-\frac{1}{2},j} = 2 \cdot \left(\frac{u_{i,j} \cdot u_{i-1,j}}{u_{i,j} + u_{i-1,j}} \right). \end{aligned} \quad (4.24)$$

Por outro lado, a equação (4.22) é estimada como

$$\frac{\partial vC}{\partial y} \Big|_{(i,j)} = \frac{(v_m C_{i,j+\frac{1}{2}} - v_n C_{i,j-\frac{1}{2}})}{\Delta y}, \quad (4.25)$$

em que v_m e v_n são aproximadas, respectivamente, via médias harmônicas:

$$\begin{aligned} v_m &= v_{i,j+\frac{1}{2}} = 2 \cdot \frac{v_{i,j+1} \cdot v_{i,j}}{v_{i,j+1} + v_{i,j}}, \\ v_n &= v_{i,j-\frac{1}{2}} = 2 \cdot \frac{v_{i,j} \cdot v_{i,j-1}}{v_{i,j} + v_{i,j-1}}. \end{aligned} \quad (4.26)$$

Para completar a aproximação, os esquemas FOU e TOPUS são empregados para estimar os valores $C_{i+\frac{1}{2},j}$ e $C_{i-\frac{1}{2},j}$ da equação (4.23). Bem como, os valores de $C_{i,j+\frac{1}{2}}$ e $C_{i,j-\frac{1}{2}}$ da equação (4.25).

4.3.1 Esquema FOU

Este esquema é dado por $C_F = C_U$, onde F é a face na qual necessita-se aproximar o termo convectivo e U é o ponto *Upstream*, vizinho do ponto P definido de acordo com o sinal da velocidade média de convecção na face computacional.

A aplicação do esquema FOU para estimar os valores $C_{i+\frac{1}{2},j}$, $C_{i-\frac{1}{2},j}$, $C_{i,j+\frac{1}{2}}$ e $C_{i,j-\frac{1}{2}}$ é a seguinte:

- Aproximação para $C_{i+\frac{1}{2},j}$ quando $u_f \geq 0$

$$C_{i+\frac{1}{2},j} = C_{i,j}.$$

- Aproximação para $C_{i+\frac{1}{2},j}$ quando $u_f < 0$

$$C_{i+\frac{1}{2},j} = C_{i+1,j}.$$

- Aproximação para $C_{i-\frac{1}{2},j}$ quando $u_g \geq 0$

$$C_{i-\frac{1}{2},j} = C_{i-1,j}.$$

- Aproximação para $C_{i-\frac{1}{2},j}$ quando $u_g < 0$

$$C_{i-\frac{1}{2},j} = C_{i,j}.$$

- Aproximação para $C_{i,j+\frac{1}{2}}$ quando $v_m \geq 0$

$$C_{i,j+\frac{1}{2}} = C_{i,j}. \quad (4.27)$$

- Aproximação para $C_{i,j+\frac{1}{2}}$ quando $v_m < 0$

$$C_{i,j+\frac{1}{2}} = C_{i,j+1}. \quad (4.28)$$

- Aproximação para $C_{i,j-\frac{1}{2}}$ quando $v_n \geq 0$

$$C_{i,j-\frac{1}{2}} = C_{i,j-1}. \quad (4.29)$$

- Aproximação para $C_{i,j-\frac{1}{2}}$ quando $v_n < 0$

$$C_{i,j-\frac{1}{2}} = C_{i,j}. \quad (4.30)$$

4.3.2 Esquema TOPUS

Aqui, emprega-se o esquema TOPUS para estimar os valores $C_{i+\frac{1}{2},j}$, $C_{i-\frac{1}{2},j}$, $C_{i,j+\frac{1}{2}}$ e $C_{i,j-\frac{1}{2}}$. Por se tratar de um esquema upwind de alta ordem, estes valores da variável transportada C são obtidos utilizando-se os pontos vizinhos D (*Downstream*), R (*Remote-Upstream*) e U (*Upstream*) do ponto $P = (i, j)$ onde necessita-se aproximar o termo convectivo. Tais pontos são definidos de acordo com o sentido das velocidades médias de convecção (sinais das velocidades u_f , u_g , v_m , v_n obtidas anteriormente através dos cálculos das médias harmônicas) conforme exemplificado a seguir.

A formulação do esquema TOPUS [12, 13, 14, 35] é expressa por:

$$C_F = \begin{cases} C_R + (C_D - C_R) [2\hat{C}_U^4 - 3\hat{C}_U^3 + 2\hat{C}_U], & \hat{C}_U \in [0, 1], \\ C_U, & \hat{C}_U \notin [0, 1], \end{cases}$$

em que

$$\hat{C}_U = \frac{C_U - C_R}{C_D - C_R}.$$

A seguir tem-se o emprego do esquema TOPUS:

1. Aproximação para C_F na face $F = f = (i + \frac{1}{2}, j)$ (ver estencil computacional na Figura 4.3)
 - Quando $u_f \geq 0$; nesse caso as posições D , R e U assumem, respectivamente, os valores $D = (i + 1, j)$, $U = (i, j)$ e $R = (i - 1, j)$. E o valor C_f , usando-se o

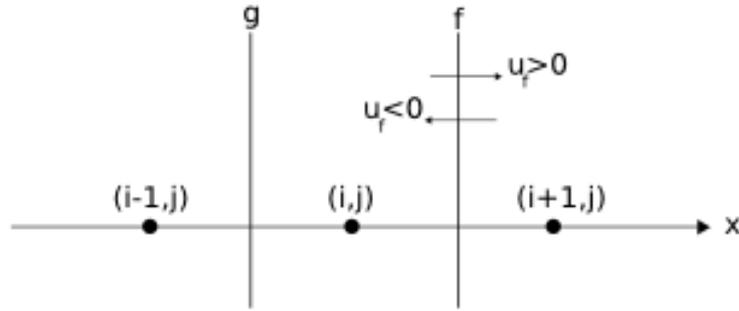


Figure 4.3: Aproximação de C_F em $F = f = (i + \frac{1}{2}, j)$.

esquema TOPUS é obtido como:

$$C_{i+\frac{1}{2},j} = \begin{cases} C_{i-1,j} + (C_{i+1,j} - C_{i-1,j})(2\hat{C}_U^4 - 3\hat{C}_U^3 + 2\hat{C}_U), & \hat{C}_U \in [0, 1], \\ C_{i,j}, & \hat{C}_U \notin [0, 1], \end{cases}$$

em que

$$\hat{C}_U = \hat{C}_{i,j} = \frac{C_{i,j} - C_{i-1,j}}{C_{i+1,j} - C_{i-1,j}}.$$

- Quando $u_f < 0$: $D = (i, j)$, $U = (i + 1, j)$ e $R = (i + 2, j)$.

$$C_{i+\frac{1}{2},j} = \begin{cases} C_{i+2,j} + (C_{i,j} - C_{i+2,j})(2\hat{C}_U^4 - 3\hat{C}_U^3 + 2\hat{C}_U), & \hat{C}_U \in [0, 1], \\ C_{i+1,j}, & \hat{C}_U \notin [0, 1], \end{cases}$$

em que

$$\hat{C}_U = \hat{C}_{i+1,j} = \frac{C_{i+1,j} - C_{i+2,j}}{C_{i,j} - C_{i+2,j}}.$$

2. Aproximação para C_F na face $F = g = (i - \frac{1}{2}, j)$ (ver Figura 4.4)

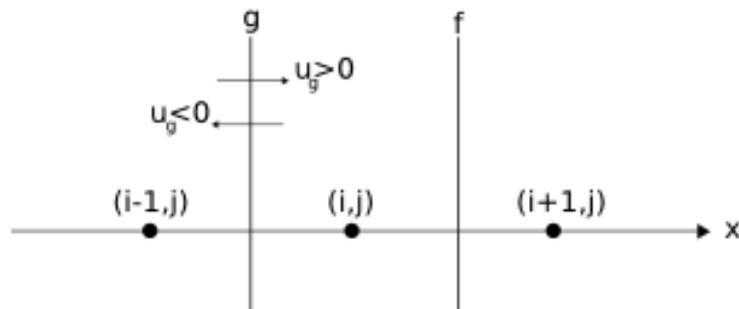


Figure 4.4: Aproximação de C_g na face $g = (i - \frac{1}{2}, j)$.

- Quando $u_g \geq 0$; nesse caso as posições D , R e U assumem, respectivamente, os valores $D = (i, j)$, $R = (i - 2, j)$ e $U = (i - 1, j)$. E o valor $C_{i-\frac{1}{2},j}$, usando-se o esquema TOPUS é calculado como:

$$C_{i-\frac{1}{2},j} = \begin{cases} C_{i-2,j} + (C_{i,j} - C_{i-2,j})(2\hat{C}_U^4 - 3\hat{C}_U^3 + 2\hat{C}_U), & \hat{C}_U \in [0, 1], \\ C_{i-1,j} & \hat{C}_U \notin [0, 1], \end{cases}$$

em que

$$\hat{C}_U = \hat{C}_{i-1,j} = \frac{C_{i-1,j} - C_{i-2,j}}{C_{i,j} - C_{i-2,j}}.$$

- Quando $u_g < 0$; $D = (i - 1, j)$, $U = (i, j)$ e $R = (i + 1, j)$.

$$C_{i-\frac{1}{2},j} = \begin{cases} C_{i+1,j} + (C_{i-1,j} - C_{i+1,j})(2\hat{C}_U^4 - 3\hat{C}_U^3 + 2\hat{C}_U), & \hat{C}_U \in [0, 1], \\ C_{i,j} & \hat{C}_U \notin [0, 1], \end{cases}$$

em que

$$\hat{C}_U = \hat{C}_{i,j} = \frac{C_{i,j} - C_{i+1,j}}{C_{i-1,j} - C_{i+1,j}}.$$

3. Aproximação para C_F na face $F = m = (i, j + \frac{1}{2})$ (Figura 4.5)

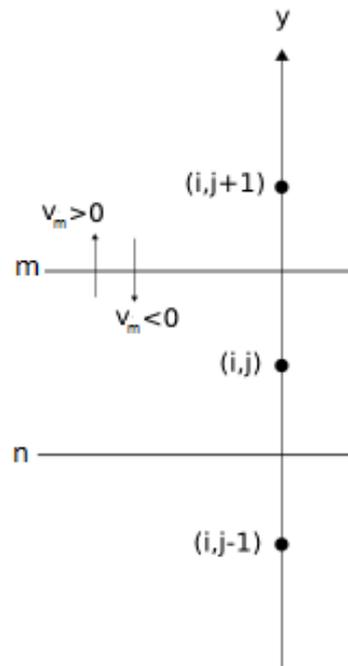


Figure 4.5: Aproximação de C_m na face $m = (i, j + \frac{1}{2})$.

- Quando $v_m \geq 0$: $D = (i, j + 1)$, $R = (i, j - 1)$ e $U = (i, j)$.

$$C_{i,j+\frac{1}{2}} = \begin{cases} C_{i,j-1} + (C_{i,j+1} - C_{i,j-1})(2\hat{C}_U^4 - 3\hat{C}_U^3 + 2\hat{C}_U), & \hat{C}_U \in [0, 1], \\ C_{i,j}, & \hat{C}_U \notin [0, 1], \end{cases}$$

em que

$$\hat{C}_U = \hat{C}_{i,j} = \frac{C_{i,j} - C_{i,j-1}}{C_{i,j+1} - C_{i,j-1}}.$$

- Quando $v_m < 0$: $D = (i, j)$, $R = (i, j + 2)$ e $U = (i, j + 1)$.

$$C_{i,j+\frac{1}{2}} = \begin{cases} C_{i,j+2} + (C_{i,j} - C_{i,j+2})(2\hat{C}_U^4 - 3\hat{C}_U^3 + 2\hat{C}_U), & \hat{C}_U \in [0, 1], \\ C_{i,j+1}, & \hat{C}_U \notin [0, 1], \end{cases}$$

em que

$$\hat{C}_U = \hat{C}_{i,j+1} = \frac{C_{i,j+1} - C_{i,j+2}}{C_{i,j} - C_{i,j+2}}.$$

4. Aproximação para C_F na face $F = n = (i, j - \frac{1}{2})$ (ver Figura 4.6)

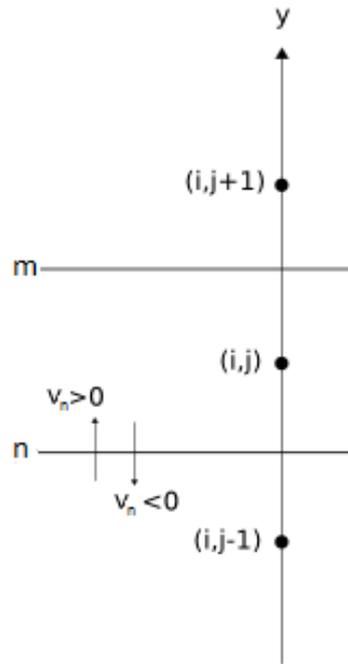


Figure 4.6: Aproximação de C_n na face $n = (i, j - \frac{1}{2})$.

- Quando $v_n \geq 0$: $D = (i, j)$, $R = (i, j - 2)$ e $U = (i, j - 1)$.

$$C_{i,j-\frac{1}{2}} = \begin{cases} C_{i,j-2} + (C_{i,j} - C_{i,j-2})(2\hat{C}_U^4 - 3\hat{C}_U^3 + 2\hat{C}_U), & \hat{C}_U \in [0, 1], \\ C_{i,j-1}, & \hat{C}_U \notin [0, 1], \end{cases}$$

em que

$$\hat{C}_U = \hat{C}_{i,j-1} = \frac{C_{i,j-1} - C_{i,j-2}}{C_{i,j} - C_{i,j-2}}.$$

- Quando $v_n < 0$: $D = (i, j - 1)$, $R = (i, j + 1)$ e $U = (i, j)$.

$$C_{i,j-\frac{1}{2}} = \begin{cases} C_{i,j+1} + (C_{i,j-1} - C_{i,j+1})(2\hat{C}_U^4 - 3\hat{C}_U^3 + 2\hat{C}_U), & \hat{C}_U \in [0, 1], \\ C_{i,j}, & \hat{C}_U \notin [0, 1], \end{cases}$$

em que

$$\hat{C}_U = \hat{C}_{i,j} = \frac{C_{i,j} - C_{i,j+1}}{C_{i,j-1} - C_{i,j+1}}.$$

4.4 Algoritmo para simulação da perfusão baseada em contraste

O algoritmo 1 descrito a seguir foi implementado na linguagem de programação C, e simulado em um computador Intel(R) Core(TM) i7 3GHz 8 Gb.

Seguem algumas explicações referentes a algumas linhas do algoritmo 1:

- Linha 1

Parâmetros: Tensores de permeabilidade \mathbf{K} e de difusão \mathbf{D} , condições de contorno (equações (3.25), (3.26), (3.27) e (3.28)) e condição inicial (equação (3.28)).

- Linha 3

$$\|E_\infty\| = \|p_{i,j}^{k+1} - p_{i,j}^k\|_\infty < \epsilon, \text{ onde } \epsilon = 10^{-6}.$$

- Linha 6

Por se utilizar de um método explícito (Euler), a convergência e a estabilidade da solução estão condicionados às seguintes condições:

$$\Delta t \leq \frac{h}{v} \quad e \quad \Delta t \leq \frac{h^2}{2 \cdot D} \quad (4.31)$$

Algoritmo 1: Cálculo da concentração do contraste no escoamento monofásico em meio poroso

- 1 Configuração dos parâmetros do modelo
 - 2 Calcula transmissibilidades nas faces dos volumes de controle (média harmônica entre permeabilidades de nós vizinhos) - equação (4.13)
 - 3 Calcula o campo de pressão: **enquanto** $\|E_\infty\| \geq 10^{-6}$ **faça**
 - 4 └ Obtém o campo de pressão (*elíptica*) - equação (4.14)
 - 5 Calcula velocidade - equação (4.15)
 - 6 Condição de CFL: $\Delta t \leq \frac{h}{v}$ e $\Delta t \leq \frac{h^2}{2 \cdot D}$
 - 7 $N = \frac{\text{tempo}}{\Delta t}$
 - 8 **para** $t \leftarrow 1$ **até** N **faça**
 - 9 └ Calcula o termo convectivo (*conv*) - equação (4.19)
 - 10 └ Calcula o termo difusivo (*dif*) - eq. 4.17
 - 11 **para cada** *nó x* **faça**
 - 12 └ Concentração: $C_x = \frac{(dif - conv) \cdot \Delta t}{\phi} + C_x$
-

onde Δt é o passo de tempo e h é o intervalo espacial da malha (tanto no sentido do eixo x quanto no sentido do eixo y), v é a velocidade máxima obtida em todo o domínio e D é a entrada de maior valor do tensor de difusão. Esta condição é chamada *condição de CFL* [38, 39].

5 RESULTADOS NUMÉRICOS E DISCUSSÕES

Neste capítulo são apresentados os experimentos numéricos realizados neste trabalho empregando o algoritmo 1. Inicialmente são mostrados os detalhes de cada experimento realizado. Depois é relatado como foi conduzida a verificação da convergência dos esquemas FOU e TOPUS para aproximação do termo convectivo, seguido de um quadro comparativo entre estes esquemas. Após esta contextualização acerca dos cenários de experimentação, são exibidos os resultados destes cenários de perfusão coronariana. O capítulo finaliza-se com a discussão sobre os resultados obtidos.

5.1 Cenários Simulados de Perfusão de Contraste

Quatro diferentes experimentos foram conduzidos: anisotropia e isotropia combinadas com miocárdio infartado e não infartado. A isotropia significa que a permeabilidade e a difusibilidade não variam conforme a direção da fibra no miocárdio cardíaco. O caso anisotrópico se aproxima mais da natureza real do tecido cardíaco, o que implica que os cálculos precisam levar em conta a direção da fibra cardíaca. Conforme é possível observar na Figura 5.1, o domínio utilizado neste trabalho foi um quadrado, o qual representa uma porção do miocárdio que vai do endocárdio até o epicárdio.

As condições de contorno nas superfícies do epicárdio e do endocárdio foram prescritas de acordo com a faixa normal de pressão, conforme descrito anteriormente em [7, 9]: $p_{\Gamma_{west}} = p_{\Gamma_{E1}} = p_{\Gamma_{E3}} = 2,0$ kPa e $p_{\Gamma_{E2}} = 6,0$ kPa (condição de Dirichlet). Para $p_{\Gamma_{north}}$ e $p_{\Gamma_{south}}$, adotou-se a condição de Neumann homogênea, isto é, fluxo nulo ($\gamma = \alpha = 0$). Assumiu-se que a porosidade ϕ é constante e igual a 0,10 [8]. Para as simulações do tecido isotrópico e não-infartado, foram usados $\mathbf{D} = \begin{pmatrix} 0,5 \times 10^{-3} & 0 \\ 0 & 0,5 \times 10^{-3} \end{pmatrix} mm^2/s$ [10] e $\mathbf{K} = \begin{pmatrix} 15,0 & 0 \\ 0 & 15,0 \end{pmatrix} mm^2/kPa.s$. Para levar em conta a natureza anisotrópica do tecido cardíaco, os tensores de difusão e de permeabilidade acompanham a direção da

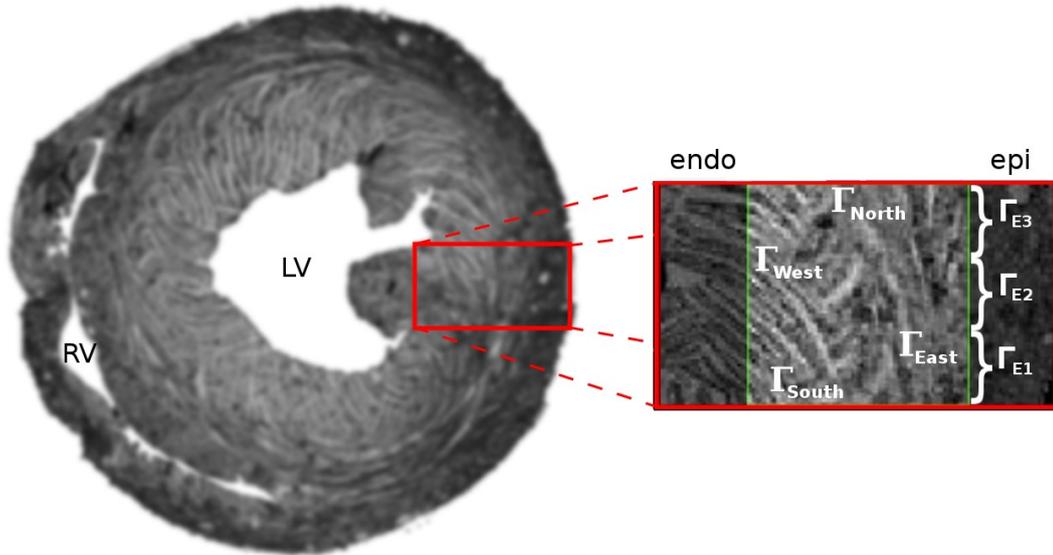


Figure 5.1: Corte transmural do coração (esquerda) e uma região do ventrículo esquerdo (direita) que compreende o domínio de simulação

fibra, a qual é paralela às superfícies do endocárdio e do epicárdio. Dessa forma, o tensor de difusão do Gadolínio foi feito igual a $\mathbf{D} = \begin{pmatrix} 0,1 \times 10^{-3} & 0 \\ 0 & 0,2 \times 10^{-3} \end{pmatrix} mm^2/s$ [10], e o tensor de permeabilidade igual a $\mathbf{K} = \begin{pmatrix} 7,5 & 0 \\ 0 & 15,0 \end{pmatrix} mm^2/kPa \cdot s$ [7]. Nas Tabelas 5.1 e 5.2 há uma síntese dos tensores utilizados nos experimentos.

Para simular um infarto do subendocárdico, os valores de \mathbf{D} e \mathbf{K} foram alterados em uma pequena região retangular próxima à superfície do endocárdio. Nesta região, tanto o tensor de permeabilidade quanto o tensor de difusão foram homoganeamente reduzidos para $\delta\mathbf{K}$ e $\delta\mathbf{D}$, respectivamente, com $\delta = 0,1$.

Table 5.1: Tensores de Permeabilidade: tanto no caso 3 quanto no caso 4, o primeiro tensor refere-se à região não infartada e o segundo à região infartada.

| Cenário | Tensor de Permeabilidade \mathbf{K} ($mm^2/kPa \cdot s$) [7] |
|--------------------------------|---|
| 1 Isotrópico e não infartado | $\begin{pmatrix} 15,0 & 0 \\ 0 & 15,0 \end{pmatrix}$ |
| 2 Anisotrópico e não infartado | $\begin{pmatrix} 7,5 & 0 \\ 0 & 15,0 \end{pmatrix}$ |
| 3 Isotrópico e infartado | $\begin{pmatrix} 15,0 & 0 \\ 0 & 15,0 \end{pmatrix}$ e $\begin{pmatrix} 1,5 & 0 \\ 0 & 1,5 \end{pmatrix}$ |
| 4 Anisotrópico e infartado | $\begin{pmatrix} 7,5 & 0 \\ 0 & 15,0 \end{pmatrix}$ e $\begin{pmatrix} 0,75 & 0 \\ 0 & 1,5 \end{pmatrix}$ |

Table 5.2: Tensores de Difusão: tanto no caso 3 quanto no caso 4, o primeiro tensor refere-se à região não infartada e o segundo à região infartada.

| Cenário | | Tensor de Difusão \mathbf{D} (mm^2/s) [10] | |
|---------|------------------------------|--|--|
| 1 | Isotrópico e não infartado | $\begin{pmatrix} 0,5 \times 10^{-3} & 0 \\ 0 & 0,5 \times 10^{-3} \end{pmatrix}$ | |
| 2 | Anisotrópico e não infartado | $\begin{pmatrix} 0,1 \times 10^{-3} & 0 \\ 0 & 0,2 \times 10^{-3} \end{pmatrix}$ | |
| 3 | Isotrópico e infartado | $\begin{pmatrix} 0,5 \times 10^{-3} & 0 \\ 0 & 0,5 \times 10^{-3} \end{pmatrix}$ | e $\begin{pmatrix} 0,5 \times 10^{-4} & 0 \\ 0 & 0,5 \times 10^{-4} \end{pmatrix}$ |
| 4 | Anisotrópico e infartado | $\begin{pmatrix} 0,1 \times 10^{-3} & 0 \\ 0 & 0,2 \times 10^{-3} \end{pmatrix}$ | e $\begin{pmatrix} 0,1 \times 10^{-4} & 0 \\ 0 & 0,2 \times 10^{-4} \end{pmatrix}$ |

Para representar a porção de interesse do miocárdio, fixou-se um quadrado que de lado 1 cm, e a malha computacional utilizada nos experimentos foi fixada com 100×100 células computacionais.

O tempo de simulação em todos os casos é de 0,55 segundos [8]. A captura de quadros que será mostrada nos resultados dos cenários se deu da seguinte maneira: para cada cenário, são exibidos os intervalos de tempo de 0,03s, 0,15s, 0,30s e 0,45s.

5.2 Análise de convergência dos esquemas TOPUS e FOU

A análise de convergência dos esquemas convectivos foi conduzida da seguinte forma: considerou-se a malha mais refinada do esquema FOU como a solução de referência com a qual as outras malhas, tanto do TOPUS quanto do próprio FOU foram comparadas. A malha referencial foi fixada em 257×257 pontos. As demais malhas foram as seguintes:

$$17 \times 17 \quad 33 \times 33 \quad 65 \times 65 \quad 129 \times 129$$

As condições dos experimentos foram as seguintes: escolheu-se para o cálculo do erro numérico utilizando os esquemas FOU e TOPUS o cenário anisotrópico com infarto. Tomou-se o instante de tempo de 0,25 segundos para a comparação numérica, isto é, considerando que o tempo total de simulação é de 0,55 segundos, foi escolhido um instante próximo à metade do tempo de simulação. Além disso, foram utilizadas duas métricas

para o cálculo do erro: norma 1 ($\|E\|_1$) e norma 2 ($\|E\|_2$), cujas fórmulas para o cálculo são:

$$\|E\|_1 = \frac{\sum_i^n |\phi_i^e - \phi_i^n|}{\sum_i^n |\phi_i^e|}, \quad (5.1)$$

$$\|E\|_2 = \sqrt{\frac{\sum_i^n (\phi_i^e - \phi_i^n)^2}{\sum_i^n (\phi_i^e)^2}} \quad (5.2)$$

onde ϕ_i^e e ϕ_i^n são as soluções exata (e) e numérica (n) no ponto i , respectivamente.

O estudo do erro da convergência do método numérico usando as duas formulações para o termo convectivo foi construído nos moldes da tabela 5.2 [35], onde

$$n_2 = \frac{\log\left(\frac{E_2}{E_1}\right)}{\log\left(\frac{N_1}{N_2}\right)}$$

$$n_3 = \frac{\log\left(\frac{E_3}{E_2}\right)}{\log\left(\frac{N_2}{N_3}\right)}$$

$$n_4 = \frac{\log\left(\frac{E_4}{E_3}\right)}{\log\left(\frac{N_3}{N_4}\right)}.$$

| N × N | Erro | Ordem |
|-----------|-------|-------|
| 17 × 17 | E_1 | — |
| 33 × 33 | E_2 | n_2 |
| 65 × 65 | E_3 | n_3 |
| 129 × 129 | E_4 | n_4 |

Table 5.3: Tabela usada para o estudo da ordem de convergência dos métodos.

A partir da tabela 5.2, na qual tem-se os resultados relacionados à ordem de convergência dos métodos FOU e TOPUS, nota-se que este segundo esquema obteve ordem de convergência superior ao FOU. Isto está de acordo com os resultados disponíveis na literatura [12, 13, 14, 35]

Uma vez que o esquema TOPUS obteve uma ordem de convergência superior no problema tratado aqui, ele foi então utilizado na discretização do termo convectivo da

| Esquema | $N \times N$ | Erro $\ E\ _1$ | Ordem $\ E\ _1$ | Erro $\ E\ _2$ | Ordem $\ E\ _2$ |
|---------|------------------|-------------------|--------------------|-------------------|--------------------|
| FOU | 17×17 | 0,336 | — | 0,315 | — |
| | 33×33 | 0,207 | 0,729 | 0,226 | 0,501 |
| | 65×65 | 0,126 | 0,733 | 0,153 | 0,579 |
| | 129×129 | 0,067 | 0,919 | 0,091 | 0,753 |
| TOPUS | 17×17 | 0,240 | — | 0,273 | — |
| | 33×33 | 0,114 | 1,117 | 0,168 | 0,732 |
| | 65×65 | 0,041 | 1,489 | 0,074 | 1,202 |
| | 129×129 | 0,014 | 1,564 | 0,029 | 1,346 |

Table 5.4: Estudo da convergência dos esquemas FOU e TOPUS, associado com um método de volumes finitos explícito.

equação (3.18) em todos os experimentos descritos na seção 5.1 cujos resultados seguem nas seções 5.3 a 5.6

5.3 Cenário 1: meio isotrópico e não-infartado

Neste cenário, como a permeabilidade não varia com a direção, o tensor de permeabilidade é isotrópico e igual a $\mathbf{K} = \begin{pmatrix} 15,0 & 0 \\ 0 & 15,0 \end{pmatrix} mm^2/kPa \cdot s$ [7] e o tensor de difusão igual a $\mathbf{D} = \begin{pmatrix} 0,5 \times 10^{-3} & 0 \\ 0 & 0,5 \times 10^{-3} \end{pmatrix} mm^2/s$ [10]. Nas Figuras 5.2 e 5.3 pode-se observar, respectivamente, a variação temporal do contraste e a distribuição de pressão.

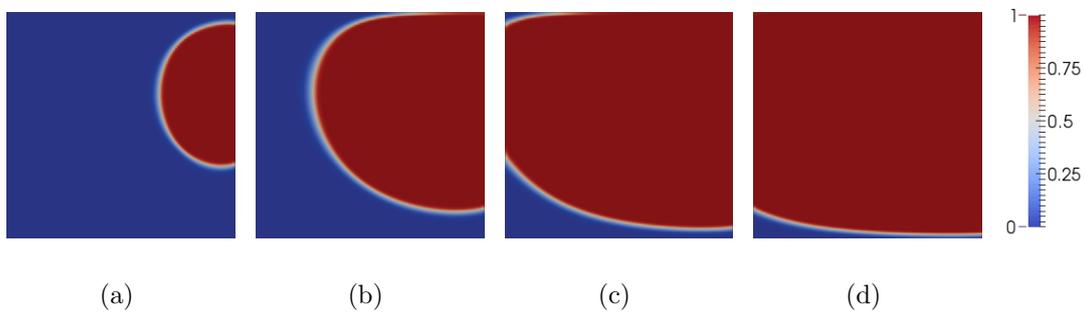


Figure 5.2: Simulação isotrópica e sem infarto. Distribuição de contraste em: a) 0,03 s; b) 0,15 s; c) 0,30 s; e d) 0,45 s.

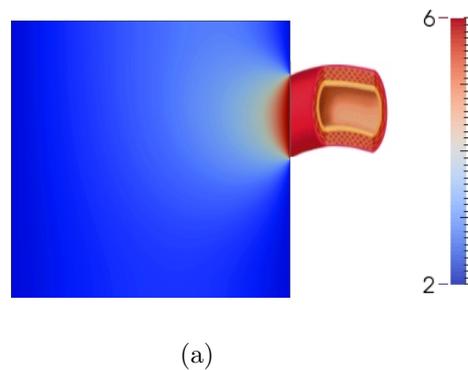


Figure 5.3: Campo de pressão do tecido cardíaco para o caso isotrópico sem infarto e uma artéria coronariana próxima a este tecido, em kPa .

Neste cenário, por se tratar de uma simulação sem infarto, a perfusão se deu normalmente, isto é, o contraste se difundiu e convectou da maneira esperada. O mesmo se pode dizer sobre o campo de pressão: valores mais elevados próximos ao contorno Γ_{E2} e decaimento suave ao longo do domínio.

5.4 Cenário 2: meio anisotrópico e não-infartado

Aqui é mostrado o caso anisotrópico, isto é, permeabilidade variando de acordo com a direção: este tensor é igual a $\mathbf{K} = \begin{pmatrix} 7,5 & 0 \\ 0 & 15,0 \end{pmatrix} mm^2/kPa \cdot s$ [7]. Já o tensor de difusão vale $\mathbf{D} = \begin{pmatrix} 0,1 \times 10^{-3} & 0 \\ 0 & 0,2 \times 10^{-3} \end{pmatrix} mm^2/s$ [10]. Esta situação pode ser observado nas Figuras 5.4 (dinâmica do contraste) e 5.5 (valores para a pressão)

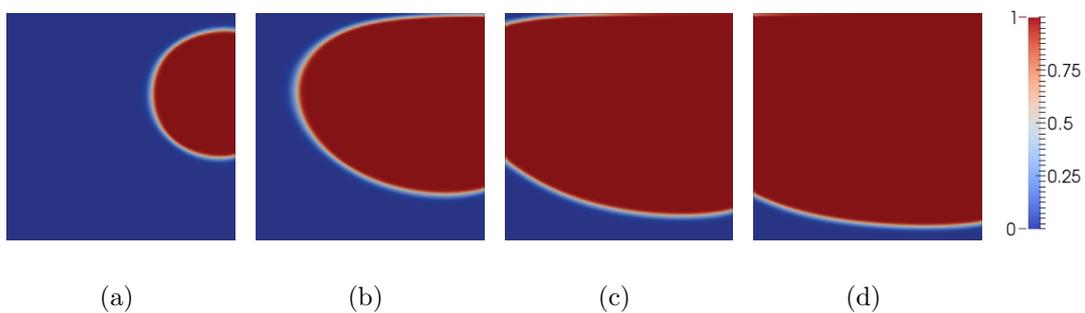


Figure 5.4: Simulação anisotrópica e sem infarto. Distribuição de contraste em: a) 0,03 s; b) 0,15 s; c) 0,30 s; e d) 0,45 s.

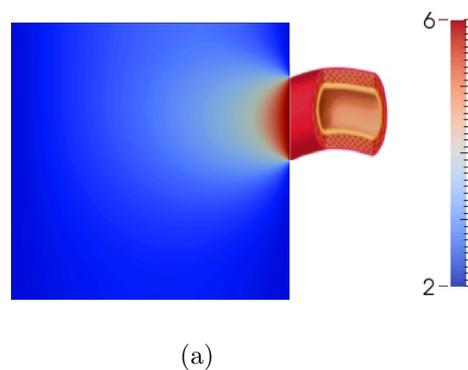


Figure 5.5: Campo de pressão do tecido cardíaco para o caso anisotrópico sem infarto e uma artéria coronariana próxima a este tecido, em kPa .

Novamente a perfusão aconteceu qualitativamente conforme esperado, e também o campo de pressão obtido está de acordo com o que o modelo previa.

5.5 Cenário 3: meio isotrópico e infartado

Neste cenário, onde há uma representação de um infarto do miocárdio, o tensor de permeabilidade é igual a $\mathbf{K} = \begin{pmatrix} 15,0 & 0 \\ 0 & 15,0 \end{pmatrix} mm^2/kPa \cdot s$ [7] na região onde não há infarto e igual a $\mathbf{K} = \begin{pmatrix} 1,5 & 0 \\ 0 & 1,5 \end{pmatrix} mm^2/kPa \cdot s$ na área onde ocorre um infarto. Por sua vez, o tensor de difusão possui os seguintes valores: $\mathbf{D} = \begin{pmatrix} 0,5 \times 10^{-3} & 0 \\ 0 & 0,5 \times 10^{-3} \end{pmatrix} mm^2/s$ [10] fora do infarto e $\mathbf{D} = \begin{pmatrix} 0,5 \times 10^{-4} & 0 \\ 0 & 0,5 \times 10^{-4} \end{pmatrix} mm^2/s$ no infarto. As Figuras 5.6 e 5.7 ilustram tal caso (contraste e pressão, respectivamente).

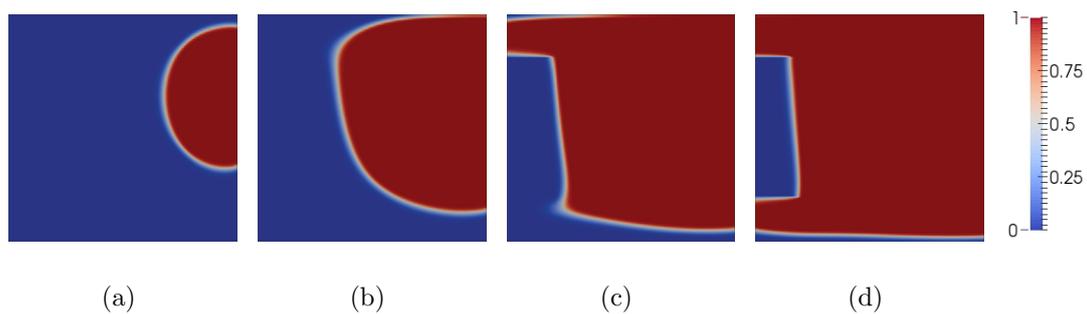


Figure 5.6: Simulação isotrópica e com infarto. Distribuição de contraste em: a) 0,03 s; b) 0,15 s; c) 0,30 s; e d) 0,45 s.

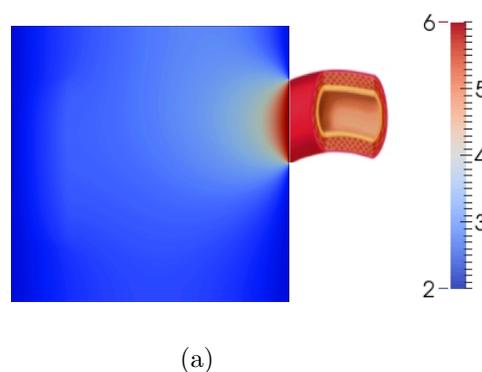


Figure 5.7: Campo de pressão do tecido cardíaco para o caso isotrópico com infarto e uma artéria coronária próxima a este tecido, em kPa .

Neste cenário houve a correta captura de um infarto na região próxima ao endocárdio, além de novamente o campo de pressão estar bem representado.

5.6 Cenário 4: meio anisotrópico e infartado

Por fim, este cenário representa uma situação onde a permeabilidade varia em função da direção e que simula um infarto subendocardial. Seu tensor de permeabilidade na região não infartada vale $\mathbf{K} = \begin{pmatrix} 7,5 & 0 \\ 0 & 15,0 \end{pmatrix} mm^2/kPa \cdot s$ [7] e na região infartada é igual a $\mathbf{K} = \begin{pmatrix} 0,75 & 0 \\ 0 & 1,5 \end{pmatrix} mm^2/kPa \cdot s$. Já os tensores de difusão valem $\mathbf{D} = \begin{pmatrix} 0,1 \times 10^{-3} & 0 \\ 0 & 0,2 \times 10^{-3} \end{pmatrix} mm^2/s$ [10] e $\mathbf{D} = \begin{pmatrix} 0,1 \times 10^{-4} & 0 \\ 0 & 0,2 \times 10^{-4} \end{pmatrix} mm^2/s$, fora e dentro da área infartada, respectivamente.

As Figuras 5.8 e 5.9 mostram os resultados obtidos nas simulações deste cenário.

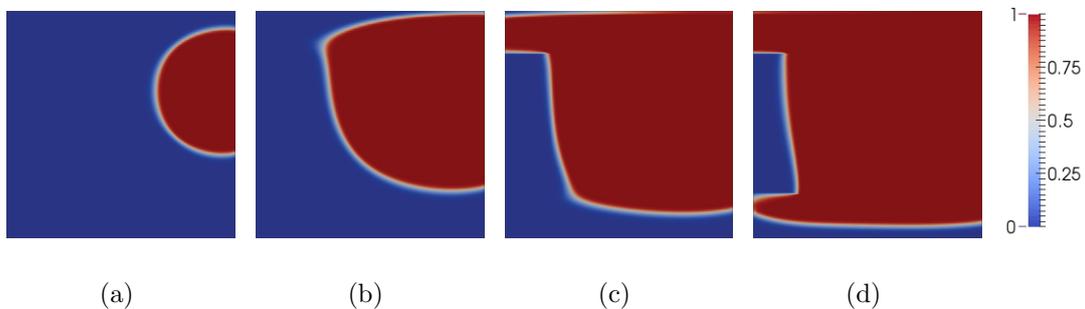
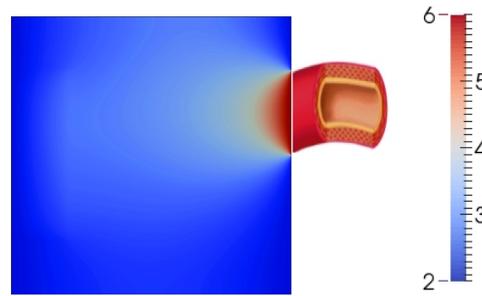


Figure 5.8: Simulação anisotrópica e com infarto. Distribuição de contraste em: a) 0,03 s; b) 0,15 s; c) 0,30 s; e d) 0,45 s.

Novamente houve a devida captura de um infarto. Vale ressaltar que existe uma diferença de perfusão entre os casos isotrópicos e anisotrópicos. Isto serão melhor discutido na subseção seguinte.



(a)

Figure 5.9: Campo de pressão do tecido cardíaco para o caso anisotrópico com infarto e uma artéria coronária próxima a este tecido, em kPa .

5.7 Discussões sobre os resultados dos cenários simulados

Inicialmente, é possível observar que o modelo obteve sucesso no que tange a comparação qualitativa dos resultados. O modelo foi capaz de detectar a ausência de regiões não perfundidas (Figuras 5.2 e 5.4) bem como capturou também regiões infartadas (Figuras 5.6 e 5.8). As simulações numéricas estão de acordo com o fenômeno, isto é, com as imagens obtidas através do exame não invasivo da perfusão cardíaca por ressonância magnética.

Lembrando novamente, a direção da fibra no miocárdio cardíaco é ortogonal às superfícies do epicárdio e do endocárdio. Por este motivo, espera-se que no caso isotrópico, o qual não leva em consideração a direção real da fibra, a perfusão no sentido horizontal ocorra mais rapidamente que no caso anisotrópico, e a perfusão do contraste na vertical deve acontecer com mais velocidade no caso anisotrópico.

De fato, observando as imagens correspondentes das Figuras 5.2 e 5.4 (caso sem infarto), as simulações aqui realizadas capturaram tal efeito. O mesmo se pode afirmar sobre as simulações onde há infarto do miocárdio. Quando há anisotropia, (Figura 5.6), a perfusão é mais rápida no sentido vertical, enquanto que, horizontalmente, ela é mais lenta.

Com relação aos campos de pressão, é possível observar a semelhança entre os quatro cenários simulados. É nítido também o contraste entre a região próxima à Γ_{E2} e as demais regiões Γ_{E1} , Γ_{E3} , Γ_{west} , Γ_{north} e Γ_{south} . A pressão em Γ_{E2} é maior devido à modelagem

da presença de uma artéria coronariana nesta região.

Relembrando o modelo de Darcy (3.3), é explícita a relação matemática entre o tensor de permeabilidade e o campo de pressão. Já com relação aos resultados obtidos, observando a Figura 5.10, a qual representa o lado esquerdo do campo de pressão do caso isotrópico (sem infarto em 5.7 e com infarto em 5.7), pode-se inferir que de fato existe uma grande influência da permeabilidade nos valores do campo de pressão. Enquanto na figura da esquerda a pressão tem um decaimento suave, na da direita tem-se uma redução brusca. Este segundo caso é explicado pela descontinuidade sofrida pelo tensor de permeabilidade na interface entre tecido saudável e tecido infartado. Já no primeiro caso, a continuidade do tensor de permeabilidade explica o decaimento suave.

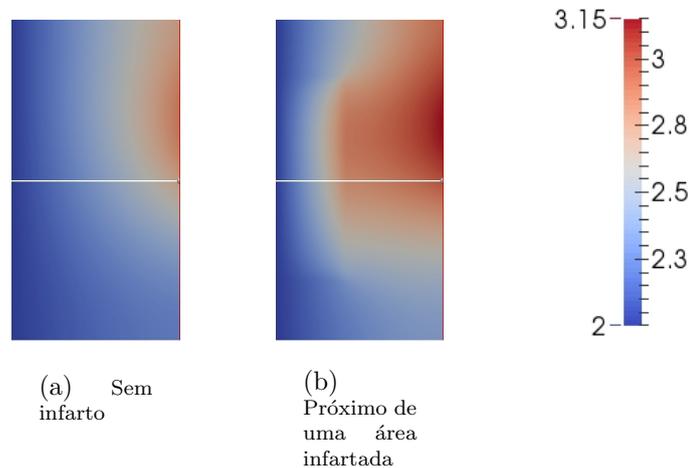


Figure 5.10: Distribuição de pressão no lado esquerdo do domínio. Simulação dos casos isotrópico não infartado (a) e infartado (b).

Quantitativamente, algumas observações podem ser feitas. Os experimentos feitos aqui simulam a perfusão do sangue no miocárdio com um agente de contraste, sendo o Gadolínio a substância de contraste mais comumente utilizada em ressonâncias magnéticas [10]. Além dos parâmetros utilizados (porosidade e tensores de permeabilidade do meio, tensores de difusão do Gadolínio), as condições iniciais e de contorno também estão de acordo com os valores encontrados na literatura, porém o tempo de perfusão obtido não reflete corretamente o tempo da perfusão do tecido cardíaco. A intensidade do contraste no miocárdio atinge seu pico 20 segundos após o sangue com gadolínio perfundi-lo [5] (ver Figura 2.5).

Esta diferença se deve ao fato de que, durante a perfusão, ocorre um extravasamento de gadolínio para o meio extravascular. De fato, o que a ressonância magnética captura

é este excesso da substância de contraste no tecido cardíaco. Nesta dissertação não foi levado em consideração este fato. Para tal, seria necessário acoplar uma fase de sorção do meio intravascular para o tecido.

No tocante à validação do modelo matemático e computacional proposto, observa-se na Figura 5.11 que foi obtido, de maneira qualitativa, sucesso nos resultados. Esta imagem, obtida por um exame de RM, ilustra um miocárdio infartado, e portanto conclui-se que de fato o fenômeno de perfusão de contraste foi satisfatoriamente representado na simulação.

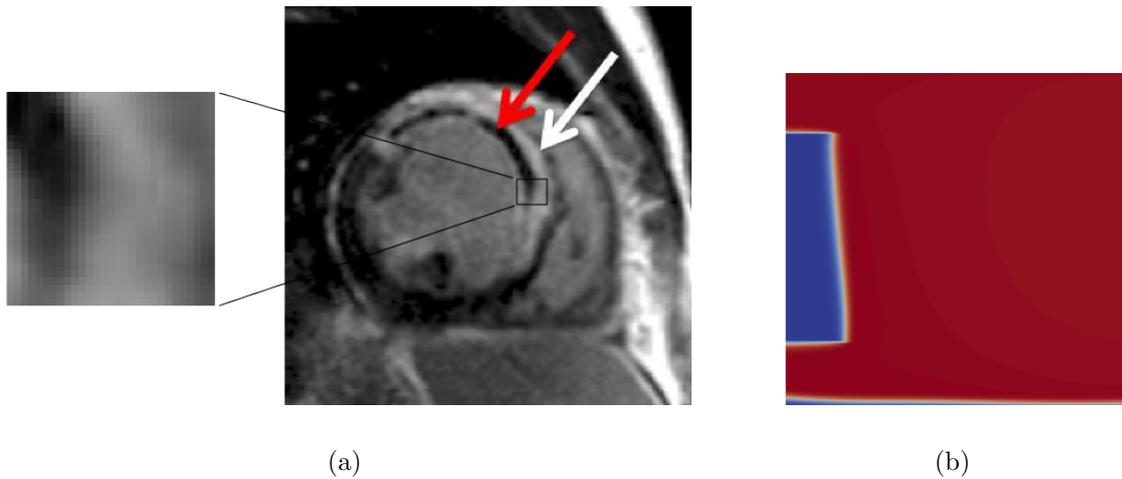


Figure 5.11: Imagem de um miocárdio com infarto subendocardial (a), imagem obtida pelo modelo matemático desenvolvido neste trabalho (b).

6 CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS

Neste trabalho apresenta-se um modelo simplificado que descreve a perfusão do sangue e do contraste na parede do ventrículo esquerdo do coração. O modelo se mostrou capaz de capturar e identificar regiões com baixa permeabilidade no caso de simulações que consideram um infarto subendocárdico. Portanto, os resultados das simulações estão qualitativamente de acordo com o fenômeno esperado, isto é, com imagens obtidas através de exames de ressonância magnética e tomografia computadorizada não invasivas. Entretanto, este primeiro modelo não levou em consideração o extravasamento da substância de contraste baseada em gadolínio para o meio extravascular. Este vazamento faz com que a intensidade do sinal do contraste aumente mais lentamente do que nas simulações aqui feitas.

A importância deste trabalho está no fato de que ele dá abertura para que outros trabalhos mais abrangentes possam modelar de forma mais realista o fenômeno da perfusão coronariana por uma substância de contraste.

Neste sentido, pode-se dizer que é de grande importância que sejam realizados estudos e desenvolvidos modelos matemáticos e computacionais acurados acerca de fenômenos como a perfusão coronariana. Portanto, mesmo que o modelo aqui elaborado tenha limitações no que tange à sua utilização como ferramenta direta para a análise clínica e mesmo que responda a questões relativamente simplificadas, pode-se concluir que, pela sua característica inovadora na forma de modelar a perfusão e por abrir portas para novos estudos, possui importância significativa.

6.1 Trabalhos Futuros

Espera-se que, em trabalhos futuros, sejam desenvolvidos modelos capazes de tratar com mais fidelidade o fenômeno em questão. Neste sentido, pretende-se:

Acoplar ao problema do escoamento monofásico em meios porosos um modelo que aborde o extravasamento do Gadolínio para o tecido cardíaco. Para isto, um modelo de

convecção-difusão poderá ser acoplado, levando em consideração o fenômeno de sorção do Gadolínio do sangue para o tecido.

Utilizar modelos multi-escalas que capturem a estrutura vascular. Pode-se acoplar um modelo que capture características precisas da árvore arterial com um modelo que represente o tecido do miocárdio. Isto poderá oferecer, por exemplo, informações sobre a microcirculação [35].

Investigar a resolução numérica da equação diferencial parcial elíptica 3.4 através de outros métodos. Para este fim, poderá ser utilizado um método mais robusto, como por exemplo o multigrid ou o gradiente conjugado.

Aplicar técnicas de computação paralela. Uma vez que cada cenário de simulação da perfusão demanda um tempo de simulação considerável, poderão ser utilizadas estratégias de programação que aumentem a eficiência do código, tais como programação em GPU's.

Aplicar testes mais abrangentes acerca do estudo da ordem de convergência dos métodos de aproximação do termo convectivo. Pode ser realizada, para este fim, a utilização de outras métricas para o cálculo do erro.

Responder à seguinte questão: Qual relação a obstrução de uma artéria coronariana tem com a perfusão do tecido cardíaco da região desta artéria? Para responder esta pergunta com as tecnologias de hoje em dia seriam necessários dois exames: um de angiografia, que verifica se há obstruções na estrutura vascular do paciente, e um de perfusão, que fornece detalhes sobre a perfusão no tecido em torno daquela obstrução.

Trabalhos futuros poderão tentar desenvolver um software que seja capaz de fornecer estas informações com base em um único exame. Isto se daria da seguinte forma: seria realizado um exame para obter informações sobre possíveis entupimentos arteriais. Caso haja a obstrução, a ferramenta já forneceria dados sobre o progresso da perfusão no tecido cardíaco em torno do local.

Existe um caráter fortemente aplicável e de interesse social neste possível software: menos exames, além de exigir menos esforço dos clínico e de oferecer menos risco ao paciente, geram menos gastos. Por fim, com base nos estudos feitos ao longo do desenvolvimento do presente trabalho, conclui-se a importância e acredita-se na viabilidade de projetos neste contexto.

REFERÊNCIAS

- [1] FEUCHTNER, G., GOETTI, R., PLASS, A., WIESER, M., SCHEFFEL, H., WYSS, C., STOLZMANN, P., DONATI, O., SCHNABL, J., FALK, V., ALKADHI, H., LESCHKA, S., CURY, R. C., “Adenosine Stress High-Pitch 128-Slice Dual-Source Myocardial Computed Tomography Perfusion for Imaging of Reversible Myocardial Ischemia. Comparison With Magnetic Resonance Imaging”, *Circ Cardiovasc Imaging*, v. 4, pp. 540–549, 2011.
- [2] PEDRA, C. A. C., NEVES, J., ARRIETA, S. R., SANTIAGO, J., ARNONI, D., FIGUEIREDO, F., BRAGA, S. L. N., ESTEVES, C. A., FONTES, V. F., “Avaliação Hemodinâmica da Hipertensão Arterial Pulmonar Secundária a Cardiopatias Congênitas”, *Revista Brasileira de Cardiologia Invasiva*, v. 13, 2005.
- [3] BONOW, R. O., MANN, D. L., ZIPES, D. P., LIBBY, P., *Braunwald - Tratado de doenças cardiovasculares*. Elsevier, 2013.
- [4] FIRBELL, D., “Advances in CT Perfusion Imaging”, *Diagnostic and Interventional Cardiology*, 2012.
- [5] NAGEL, E., KLEIN, C., PAETSCH, I., HETTWER, S., SCHNACKENBURG, B., WEGSCHEIDER, L., FLECK, E., “Magnetic Resonance Perfusion Measurements for the Noninvasive Detection of Coronary Artery Disease”, *Circ*, v. 108, pp. 432–437, 2003.
- [6] JENSON, S., CRAIG, S., YORK, G., STEEL, K., “Review of Cardiac MR Perfusion Imaging”, *Journal of the American Osteopathic College of Radiology*, 2013.
- [7] MICHLER, C., COOKSON, A. N., CHABINIOK, R., HYDE, E., LEE, J., SINCLAIR, M., SOCHI, T., GOYAL, A., VIGUERAS, G., NORDSLETTEN, D. A., SMITH, N. P., “A computationally efficient framework for the simulation of cardiac perfusion using a multi-compartment Darcy porous-media flow model”, *Int J Numer Method Biomed Eng*, v. 29, pp. 217–232, 2013.

- [8] HUYGHE, J., ARTS, T., CAMPEN, D. V., RENEMAN, R., “Porous medium finite element model of the beating left ventricle”, *Am J Physiol - Heart C*, v. 262, pp. 1256–1267, 1992.
- [9] CHAPELLE, D., GERBEAU, J.-F., SAINTE-MARIE, J., VIGNON-CLEMENTEL, I. E., “A poroelastic model valid in large strains with applications to perfusion in cardiac modeling”, *Comput Mech*, v. 46, pp. 91–101, 2010.
- [10] POP, M., GHUGRE, N., RAMANAN, V., MORIKAWA, L., STANISZ, G., DICK, A., WRIGHT, G., “Quantification of fibrosis in infarcted swine hearts by ex vivo late gadolinium-enhancement and diffusion-weighted MRI methods”, *Phys Med Biol*, v. 58, pp. 5009–5028, 2013.
- [11] LAUNDER, B., SPALDING, D., “The numerical computation of turbulent flows”, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 3, pp. 269–289, 1974.
- [12] FERREIRA, V., QUEIROZ, R., LIMA, G., CUENCA, R., OISHI, C., AZEVEDO, J., MCKEE, S., “A bounded upwinding scheme for computing convection-dominated transport problems”, *Comput Fluids*, v. 57, pp. 208–224, 2012.
- [13] DE QUEIROZ; M.A. CANDEZANO; G.A.B. LIMA; L. CORREA;C.M. OISHI; F.L.P. SANTOS, V. F. R., “Simulation results and applications of an advection bounded scheme to practical flows”, *Computational and Applied Mathematics*, v. 31, pp. 591–616, 2012.
- [14] QUEIROZ, R.A.B. ; FERREIRA, V. G. . C. R. G., “A New High Resolution TVD Scheme for Unsteady Flows with Shock Waves”, *Tendências em Matemática Aplicada e Computacional*, v. 9, pp. 311–320, 2008.
- [15] GRAHAM, I., ATAR, D., BORCH-JOHNSEN, K., BOYSEN, G., BURELL, G., CIFKOVA, R., DALLONGEVILLE, J., BACKER, G. D., EBRAHIM, S., GJELSVIK, B., HERRMANN-LINGEN, C., HOES, A., HUMPHRIES, S., KNAPTON, M., PERK, J., PRIORI, S. G., PYORALA, K., REINER, Z., RUILOPE, L., SANS-MENENDEZ, S., et al., “European guidelines on cardiovascular disease prevention in clinical practice: executive summary:

Fourth Joint Task Force of the European Society of Cardiology and Other Societies on Cardiovascular Disease Prevention in Clinical Practice (Constituted by representatives of nine societies and by invited experts)”, *Eur. Heart J*, v. 28, pp. 2375–414, 2007.

- [16] DEVLIN, R. J., HENRY, J. A., “Clinical review: Major consequences of illicit drug consumption”, *Crit Care*, v. 12, pp. 202–, 2008.
- [17] MICHLER, C., COOKSON, A. N., CHABINIOK, R., HYDE, E., LEE, J., SINCLAIR, M., D.A., N., M, S., SMITH, N. P., “A novel porous mechanical framework for modelling the interaction between coronary perfusion and myocardial mechanics”, *J of Biomec*, v. 1992, pp. 1–6, 2011.
- [18] DARCY, H., “Les Fontaines Publiques de la Ville de Dijon”, 1856.
- [19] MORTON, K., MAYERS, D., *Numerical Solution of Partial Differential Equations, An Introduction*. Cambridge University Press: Londres, 2005.
- [20] MOHAMMED, A. A., *Lattice Boltzmann Method: Fundamentals and Engineering Applications with Computer Codes*. Springer: Londres, 2011.
- [21] ANG, W. T., *A Beginner’s Course in Boundary Element Methods*. Universal Publishers: Estados Unidos, 2007.
- [22] LEVEQUE, R., *Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems*. Cambridge University Press: London, 2002.
- [23] VERSTEEG, H., MALALASEKERA, W., *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method*. Pearson: Estados Unidos, 2007.
- [24] TORO, E., *Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics*. Springer-Verlag: London, 1999.
- [25] SUN, L., MATHUR, S. R., MURTHY, J. Y., “An unstructured Finite-Volume Method for Incompressible Flows with complex immersed boundaries”, *Numerical Heat Transfer*, v. 58, pp. 217–241, 2010.
- [26] KÜNZE, R., LUNATI, I., LEE, S. H., “A Multilevel Multiscale Finite-Volume Method”, *Journal of Computational Physics*, v. 255, pp. 502–520, 2013.

- [27] HUANG, Q., LIU, T., YANG, J., YAO, L., GAO, L., “Evaluation of radiative transfer using the finite volume method in cylindrical photoreactors”, *Chemical Engineering Science*, v. 66, pp. 3930–3940, 2011.
- [28] CHEN, Z., WU, J., XU, Y., “Higher-order finite volume methods for elliptic boundary value problems”, *Advances in Computational Mathematics*, v. 37, pp. 191–253, 2011.
- [29] CAVIEDES-VOULLIÈME, D., GARCIA-NAVARRO, P., MURILLO, J., “Verification, conservation, stability and efficiency of a finite volume method for the 1D Richards equation”, *Journal of Hydrology*, v. 480, pp. 69–84, 2013.
- [30] COURANT, R., ISAACSON, E., REES, M., “On the solution of nonlinear hyperbolic differential equations by finite differences”, *Community Pure Applied Mathematics*, v. 5, pp. 243–255, 1952.
- [31] GASKELL, P., LAU, A., “Curvature-compensated convective transport: Smart, a new boundedness preserving transport algorithm”, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, v. 8, pp. 617–641, 1988.
- [32] SONG, B., LIU, G., LAM, K., AMANO, R. S., “On a higher-order bounded discretization scheme”, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, v. 32, pp. 881–897, 2000.
- [33] VARONOS, A., BERGELES, G., “Development and assessment of a variable-order non-oscillatory scheme for convection term discretization”, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, v. 26, pp. 1–16, 1998.
- [34] ALVES, M., OLIVEIRA, P., PINHO, E., “A convergent and universally bounded interpolation for the treatment of advection”, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, v. 41, pp. 47–75, 2003.
- [35] DE QUEIROZ, R. A. B., *Construção automática de modelos de árvores circulatórias e suas aplicações em hemodinâmica computacional*, Doutorado em Modelagem computacional, Laboratório Nacional de Computação Científica, 2013.
- [36] RUGGIERO, M. A. G., DA ROCHA LOPES, V. L., *Cálculo Numérico*. Pearson Makron Books: São Paulo, 2009.

- [37] DE QUEIROZ, R. A. B., *Desenvolvimento e teste de esquemas “upwind” de alta resolução e suas aplicações em escoamentos incompressíveis com superfícies livres*, Mestrado em Ciências da Computação e Matemática Computacional, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2009.
- [38] ISAACSON, E., KELLER, H. B., *Analysis of Numerical Methods*. John Wiley and Sons: Estados Unidos, 1966.
- [39] HOLMES, M. H., *Introduction to Numerical Methods in Differential Equations*. Springer: Estados Unidos, 2007.