



UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE
CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA
UNIDADE ACADÊMICA DE ENGENHARIA QUÍMICA
PÓS GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA



**INFLUÊNCIA DE PARÂMETROS GEOMÉTRICOS E OPERACIONAIS NO
PROCESSO DE HEMODIÁLISE VIA CFD**

Autor (a): Hortência Luma Fernandes Magalhães

Orientador: Prof. Dr. Severino Rodrigues de Farias Neto

CAMPINA GRANDE

2021

UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE
CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA
PÓS GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

**INFLUÊNCIA DE PARÂMETROS GEOMÉTRICOS E OPERACIONAIS NO
PROCESSO DE HEMODIÁLISE VIA CFD**

Tese apresentada ao curso de Pós-Graduação
em Engenharia Química, como parte dos
requisitos necessários para obtenção do grau de
Doutor em Engenharia Química.

Curso: Doutorado em Engenharia Química

Área de Concentração: Modelagem e simulação

Autor (a): Hortência Luma Fernandes Magalhães

Orientador: Prof. Dr. Severino Rodrigues de Farias Neto

Campina Grande

2021

M188i Magalhães, Hortência Luma Fernandes.
Influência de parâmetros geométricos e operacionais no processo de hemodiálise via CFD / Hortência Luma Fernandes Magalhães. – Campina Grande, 2021.
132 f. : il. color.

Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Universidade Federal de Campina Grande, Centro de Ciências e Tecnologia, 2021.
"Orientação: Prof. Dr. Severino Rodrigues de Farias Neto".
Referências.

1. Fluidodinâmica Computacional. 2. Hemodiálise. 3. Membranas.
4. Modelagem e Simulação. I. Farias Neto, Severino Rodrigues de.
II. Título.

CDU 544.272:616.61-78(043)

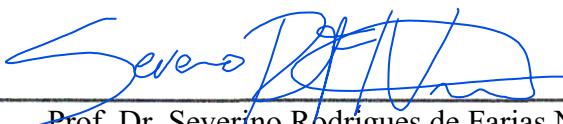
FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA BIBLIOTECÁRIA SEVERINA SUELI DA SILVA OLIVEIRA CRB-15/225

UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE
CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA
PÓS GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

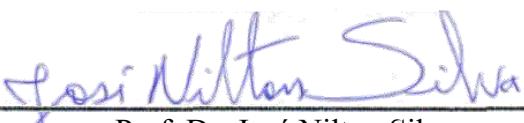
Tese de Doutorado

**INFLUÊNCIA DE PARÂMETROS GEOMÉTRICOS E OPERACIONAIS NO
PROCESSO DE HEMODIÁLISE VIA CFD**

Tese **aprovada** em 16 de setembro de 2021.



Prof. Dr. Severino Rodrigues de Farias Neto
UFCG/CCT/UAEQ — Orientador



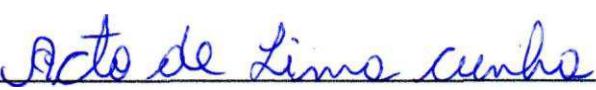
Prof. Dr. José Nilton Silva
UFCG/CCT/UAEQ — Examinador Interno



Prof. Dr. Antonio Gilson Barbosa de Lima
UFCG/CCT/UAEM – Examinador Externo



Prof. Dr. Raniere Henrique Pereira Lira
UFAL/Campus Sertão – Examinador Externo



Prof. Dr. Acto de Lima Cunha
UFS/DEQ – Examinador Externo

Campina Grande

2021

Dedico este trabalho a minha mãe, Maria de Cássia Fernandes Nunes Magalhães, a guerreira que me ensinou a lutar pelos meus sonhos.

AGRADECIMENTOS

À Deus.

A minha família, Maria de Cássia Fernandes Nunes, Antônio Magalhães de Oliveira, Helena Luma Fernandes Magalhães e Leandro Nunes Franca, por todo amor, compreensão e apoio.

Ao professor Dr. Severino Rodrigues de Farias Neto, pela orientação, amizade, dedicação e pelo excelente trabalho desenvolvido em conjunto durante todos esses anos.

Ao professor Dr. Antonio Gilson Barbosa de Lima, pela amizade e oportunidade de fazer parte da equipe LCTF.

Aos meus companheiros/amigos de laboratório, pela troca de experiências, disponibilidade, ensinamentos e companheirismo, em especial a Ricardo Soares Gomez, Túlio Rafael Nascimento Porto e Gicelia Moreira.

A todos que contribuíram direta ou indiretamente para a minha formação e crescimento.

MAGALHÃES, Hortência Luma Fernandes. **Influência de parâmetros geométricos e operacionais no processo de hemodiálise via CFD**, Campina Grande: Pós-Graduação em Engenharia Química, Universidade Federal de Campina Grande, 2021. 132 p. Tese (Doutorado).

RESUMO

A incidência da insuficiente renal tem aumentado gradativamente ao longo dos anos, acometendo uma parcela significativa da população mundial. No Brasil aproximadamente 130.000 pessoas encontram-se em tratamento dialítico em decorrência dessa doença, sendo submetidos normalmente a três sessões semanais de diálise com duração média de quatro horas, prática indispensável para paciente com insuficiência renal crônica. Frente ao exposto, diversas pesquisas vêm sendo desenvolvidas tanto no campo experimental, como por vias analíticas e numéricas, visando compreender e aprimorar o rim artificial (hemodialisador). Neste sentido, o presente trabalho tem como finalidade estudar numericamente o processo de hemodiálise em um dialisador de fibra-oca, contribuindo para a compreensão da dinâmica no interior do equipamento, bem como, avaliar a influência de parâmetros operacionais sobre a eficiência de remoção de toxinas via fluidodinâmica computacional (CFD), empregando o software *Fluent* da Ansys®. Um modelo matemático foi desenvolvido e validado pela comparação com dados experimentais e numéricos disponibilizados na literatura; a qualidade da malha foi avaliada usando o método do Índice de Convergência de Malha (ICM), uma análise da membrana de fibra-oca foi realizada para diferentes contaminantes; o fluxo de alimentação foi investigado juntamente com as alimentações tangencial e pulsada. Os resultados na forma de campos de pressão, velocidade e fração volumétrica, linhas de fluxo e vetores velocidade e *clearance* são apresentados e analisados. Os resultados numéricos mostram que o modelo matemático usado é capaz de expressar o comportamento do fluido no interior da membrana de fibra-oca, apresentando uma maior remoção de toxinas para elevados fluxos de alimentação. Além disso, foi verificado que a alimentação tangencial exerce pouco influência sobre o processo. Por outro lado, a alimentação pulsada apresentou *clearance* superior a alimentação axial para a frequência de 30 rad/s, sendo observado o aumento do *clearance* com a elevação da frequência e diminuição da amplitude de alimentação do lúmen.

Palavras-chave: Hemodiálise, Fluidodinâmica Computacional, Membranas.

MAGALHÃES, Hortência Luma Fernandes. **Influence of geometric and operational parameters on the hemodialysis process by CFD**, Campina Grande: Post-Graduation in Chemical Engineering, Federal University of Campina Grande, 2021. 132 p. Doctoral Thesis.

ABSTRACT

The incidence of renal insufficiency has gradually increased over the years, affecting a significant portion of the world population. In Brazil, approximately 130,000 people are undergoing dialysis due to this disease, being normally submitted to three weekly dialysis sessions with an average duration of four hours, an indispensable practice for patients with chronic renal failure. In view of the above, several researches have been developed both in the experimental field, as well as in analytical and numerical ways, aiming to understand and improve the artificial kidney (hemodialysis). In this sense, the present work aims to numerically study the hemodialysis process in a hollow-fiber dialyzer, contributing to the understanding of the dynamics inside the equipment, as well as to evaluate the influence of operational parameters on the efficiency of toxin removal via Computational Fluid Dynamics (CFD), using Ansys® Fluent software. A mathematical model was developed and validated by comparison with experimental and numerical data available in the literature; the mesh quality was evaluated using the Mesh Convergence Index (ICM) method, an analysis of the hollow fiber membrane was carried out for different contaminants; the feed flow was investigated together with the tangential and pulsed feeds. The results in the form of pressure, velocity and volumetric fraction fields, streamlines, velocity vectors, and *clearance* are presented and analyzed. The numerical results show that the mathematical model used is capable of expressing the fluid behavior inside the hollow-fiber membrane, presenting a greater toxins removal for high inlet fluxes. Furthermore, it was verified that the tangential feeding has little influence on the process. On the other hand, the pulsed inlet had a clearance greater than the axial inlet for the frequency of 30 rad/s, with an increase in clearance being observed with the increase in frequency and a decrease in the amplitude of inletting the lumen.

Keywords: Hemodialysis, Computational Fluid Dynamics, Membranes.

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1: Esquema de um túbulo urinífero (Fonte: Adaptado de Eloot 2004)	24
Figura 2.2: Estimativa de pacientes em tratamento dialítico no Brasil (Fonte: Neves <i>et al.</i> (2020)).....	26
Figura 2.3: Algoritmo de seleção da modalidade de diálise (Adaptado: Cunningham, 2009).....	27
Figura 2.4: Tipos de filtração: microfiltração, ultrafiltração e nanofiltração, de acordo com o grau de retenção de partículas (Magalhães <i>et al.</i> , 2018).	31
Figura 2.5: Esquema de uma membrana de fibra-oca aplicada a hemodiálise.....	32
Figura 2.6: Malha estruturada bidimensional (a) Malha estruturada, (b) Malha estruturada com refinamento próximo a parede interna, (c) : Malha ajustada ao corpo para uma tubulação com curvatura de 90 ° , Adaptado: (Tu <i>et al.</i> , 2013; Tu <i>et al.</i> , 2018).....	44
Figura 2.7: Malhas não estruturadas, (a) Tubulação com curvatura de 90 ° , (b) seção transversal de uma tubulação, adaptado (Tu <i>et al.</i> , 2013).	45
Figura 2.8: Número de estudos envolvendo e a transferência de massa no processo de hemodiálise. Fonte:(Scopus, 2021), modo de Busca: “mass transfer” and “hemodialysis”, acessado em 13/01/2021.....	50
Figura 2.9: Esquema da membrana de fibra-oca (Adaptado: Donato <i>et al.</i> , 2017).	52
Figura 2.10: Esquema do sistema de modulação. (Adaptado: Kanchan & Maniyeri 2019).	53
Figura 3.1: Esquema do funcionamento de um dialisador.	55
Figura 3.2: Representação geométrica da membrana de fibra-oca.....	56
Figura 3.3: Malha bidimensional da seção transversal da membrana tubular: (a) Malha M_1 , (b) Malha M_2 e (c) Malha M_3	57
Figura 3.4: Representação das fronteiras da membrana.....	57
Figura 3.5: Fronteiras do domínio em estudo.....	61
Figura 4.1: Detalhes das malhas confeccionadas (a) M_1 , (b) M_2 , e (c) M_3	68
Figura 4.2: Posições axiais das linhas de coleta de dados da velocidade da ureia.	68
Figura 4.3: A velocidade da ureia na posição axial de 20 mm, para diferentes malhas.....	70
Figura 4.4: A velocidade da ureia na posição axial de 101,6 mm, para diferentes malhas.....	70
Figura 4.5: A velocidade da ureia na posição axial de 183,2 mm, para diferentes malhas.....	71
Figura 4.6: O perfil de velocidade da ureia na posição axial de 20 mm, para diferentes malhas.....	71
Figura 4.7: O perfil de velocidade da ureia na posição axial de 101,6 mm, para diferentes malhas.....	72
Figura 4.8: O perfil de velocidade da ureia na posição axial de 183,2 mm, para diferentes malhas.....	72
Figura 4.9: Posições axiais das linhas de coleta de dados das variáveis de interesse (pressão).....	73
Figura 4.10: A Pressão local na posição axial de 10 mm, para diferentes malhas.	74
Figura 4.11: A Pressão local na posição axial de 101,6 mm, para diferentes malhas.	75
Figura 4.12: A Pressão local na posição axial de 193,2 mm, para diferentes malhas.	75
Figura 4.13: O perfil de pressão na posição axial de 10 mm, para diferentes malhas.	76

Figura 4.14: O perfil de pressão na posição axial de 101,6 mm, para diferentes malhas.....	76
Figura 4.15: O perfil de pressão na posição axial de 193,2 mm, para diferentes malhas.....	77
Figura 4.16: O <i>clearance</i> em função da resistência viscosa da membrana.	79
Figura 4.17: Fração volumétrica da ureia no plano XY, em diferentes tempos: (a) 500s, (b)1000 s, (c) 1500 s, (d) 2000s, e (e) 2500 s.....	80
Figura 4.18: Fração volumétrica da ureia no plano XY.	81
Figura 4.19: Perfil da fração volumétrica da ureia no interior da membrana, nas posições axiais de 20 mm, 101,6 mm e 183,2 mm, em t=6200 s (Caso 9).	82
Figura 4.20: Campo de velocidade local da ureia no plano XY.....	83
Figura 4.21: Perfil de velocidade da ureia no interior da membrana, nas posições axiais de 20 mm, 101,6 mm e 183,2 mm, em t=6200 s (Caso 9).....	83
Figura 4.22: Campo de pressão no plano XY.	84
Figura 4.23: Perfil de pressão no interior da membrana, nas posições axiais de 20 mm, 101,6 mm e 183,2 mm, em t=6200 s (Caso 9).	85
Figura 4.24: Linhas de fluxo da ureia.	86
Figura 4.25: Vetores radiais de velocidade da ureia na interface da membrana de fibra-oca.	86
Figura 4.26: Perfil da fração volumétrica da ureia em função da posição radial, em X igual a 0,2 m... <td>88</td>	88
Figura 4.27: Campo de velocidade da ureia no plano XY: (a) caso 9, (b) caso 10, (c) caso 11.....	89
Figura 4.28: Campo de velocidade da ureia no plano XY: (a) caso 12, (b) caso 13, (c) caso 14.....	90
Figura 4.29:Vetores velocidade normalizados da ureia na interface e no interior da membrana: (a) caso 9, (b) caso 10, e (c) caso 11.	91
Figura 4.30: Vetores velocidade normalizados da ureia na interface e no interior da membrana: (a) caso 12, (b) caso 13 e (c) caso 14.	92
Figura 4.31: Campo de pressão no plano XY, (a) caso 9, (b) caso 10, (c) caso 11.....	93
Figura 4.32: Campo de pressão no plano XY, (a) caso 12, (b) caso 13, (c) caso 14.....	94
Figura 4.33: Linhas de fluxo da ureia: (a) caso 9, (b) caso 10, e (c) caso 11.	95
Figura 4.34: Linhas de fluxo da ureia: (a) caso 12, (b) caso 13, e (c) caso 14.	96
Figura 4.35: <i>Clearance</i> para diferentes contaminantes.	97
Figura 4.36: Perfil da fração volumétrica da $\beta 2$ -microglobulina e creatinina, em $y = 0,0001m$	98
Figura 4.37: Campo de fração volumétrica para: (a) $\beta 2$ -microglobulina e (b) creatinina.....	99
Figura 4.38: Perfil de fração volumétrica da ureia para diferentes ângulos de alimentação, em t igual a 100 s.	101
Figura 4.39: Perfil de fração volumétrica da ureia para diferentes ângulos de alimentação, em t igual a 200 s.	101
Figura 4.40: Perfil de fração volumétrica da ureia para diferentes ângulos de alimentação, em t igual a 300 s.	102

Figura 4.41: Perfil de fração volumétrica da ureia para diferentes ângulos de alimentação, em t igual a 400 s	102
Figura 4.42: Perfil de velocidade da ureia para diferentes ângulos de alimentação na posição axial igual a zero, em t igual a 6200 s	103
Figura 4.43: Perfil de velocidade da ureia para diferentes ângulos de alimentação na posição axial igual a 0,1 mm, em t igual a 6200 s.....	103
Figura 4.44: Perfil de velocidade da ureia para diferentes ângulos de alimentação na posição axial igual a 1 mm, em t igual a 6200 s.....	104
Figura 4.45: Perfil de velocidade da ureia para diferentes ângulos de alimentação na posição radial igual a 0,05 mm, em t igual a 6200 s.....	105
Figura 4.46: Perfil de velocidade da ureia para diferentes ângulos de alimentação na posição radial igual a 0,1 mm, em t igual a 6200 s.....	105
Figura 4.47: Fluxo mássico da ureia na entrada do lúmen em função do tempo, para a frequência de alimentação de 10 rad/s (Caso 20).....	106
Figura 4.48: Fluxo mássico da ureia na entrada do lúmen em função do tempo, para a frequência de alimentação de 20 rad/s (Caso 21).....	107
Figura 4.49: Fluxo mássico da ureia na entrada do lúmen em função do tempo, para a frequência de alimentação de 30 rad/s (Caso 22).....	107
Figura 4.50: Perfil de velocidade da ureia para diferentes frequências de alimentação, na posição x_1	108
Figura 4.51: Perfil de velocidade da ureia para diferentes frequências de alimentação, na posição x_2	109
Figura 4.52: Perfil de velocidade da ureia para diferentes frequências de alimentação, na posição x_3	109
Figura 4.53: Perfil de velocidade da ureia para diferentes frequências de alimentação, na posição x_4	110
Figura 4.54: Linhas de fluxo da ureia para diferentes frequências de alimentação do lúmen: (a) 10 rad/s (Caso 20), (b) 20rad/s (Caso 21), e (c) 30 rad/s (Caso 22).	111
Figura 4.55: Campos de pressão para diferentes frequências de alimentação do lúmen: (a) caso 20, (b) caso 21, e (c) caso 22.....	111
Figura 4.56: Fluxo mássico da ureia na entrada do lúmen em função do tempo, para a amplitude de $Q_B/4$ (Caso 23).	112
Figura 4.57: Fluxo mássico da ureia na entrada do lúmen em função do tempo, para a amplitude de $Q_B/5$ (Caso 24).	112
Figura 4.58: Perfil de velocidade da ureia para diferentes amplitudes de alimentação, na posição axial igual a 0 mm, em t igual a 24000 s.....	114

Figura 4.59: Perfil de velocidade da ureia para diferentes amplitudes de alimentação, na posição axial igual a 0,1 mm, em t igual a 24000 s.....	114
Figura 4.60: Perfil de velocidade da ureia para diferentes amplitudes de alimentação, na posição axial igual a 1 mm, em t igual a 24000 s.....	115
Figura 4.61: Perfil de velocidade da ureia para diferentes amplitudes de alimentação, na posição axial igual a 10 mm, em t igual a 24000 s.....	115
Figura 4.62: Linhas de fluxo da ureia para diferentes amplitudes de alimentação do lúmen: (a) caso 20, (b) caso 23, e (c) caso 24.....	116
Figura 4.63: Campos de pressão para diferentes amplitudes de alimentação do lúmen: (a) caso 20, (b) caso 23, e (c) caso 24.....	117

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1: Dimensões da membrana de fibra-oca	56
Tabela 3.2: Concentração inicial dos contaminantes na corrente de alimentação de sangue.....	61
Tabela 3.3: Propriedades e parâmetros termo-físicos dos fluidos e da membrana.....	63
Tabela 3.4: Casos simulados para a análise do ICM	63
Tabela 3.5: Parâmetros considerados constantes na análise do ICM	63
Tabela 3.6: Condições utilizadas nas simulações da membrana de fibra-oca.....	64
Tabela 3.1: Parâmetros obtidos com o estudo do Índice de Convergência de Malha para a velocidade da ureia como variável de análise ($y=0.159$ mm).....	69
Tabela 3.2: Erro relativo em relação a malha extrapolada	73
Tabela 3.3: Parâmetros obtidos com o estudo do Índice de Convergência de Malha para a pressão como variável de análise ($y=0.159$ mm).	74
Tabela 3.4: Erro relativo em relação a malha extrapolada	77
Tabela 3.5: Parâmetros estatísticos da Equação 3.16 obtidos após ajuste aos dados preditos do <i>clearance</i>	78
Tabela 3.6: Comparação entre resultados obtidos e os disponibilizados na literatura.	78
Tabela 3.7: <i>Clearance</i> da ureia para diferentes fluxos de alimentação.....	87
Tabela 3.8: Comparação entre o <i>clearance</i> da ureia (ml/min), obtido nas simulações numérica, com os dados experimentais disponibilizados na literatura.	88
Tabela 3.9: Porcentagem de remoção dos contaminantes da corrente sanguínea.	98
Tabela 3.10: Fração volumétrica média da ureia no plano XY, no domínio casco, em z igual a 0.	100
Tabela 3.11: Comparação entre o <i>clearance</i> obtido nas simulações com alimentação pulsada e axial.	108
Tabela 3.12: <i>Clearance</i> da ureia obtido para diferentes amplitudes da alimentação do lúmen.	113

LISTA DE SIGLAS

LPFI	–	Laboratório de Pesquisa em Fluidodinâmica e Imagem
LCTF	–	Laboratório Computacional em Térmica e Fluidos
UFCG	–	Universidade Federal de Campina Grande
CFD	–	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
VOF	–	<i>Volume of Fluid</i>
ICM	–	Índice de Convergência de Malha
TFG	–	Taxa de filtração glomerular
MEF	–	Método dos Elementos Finitos
MDF	–	Método de Diferencias Finitas
MVF	–	Método dos Volumes Finitas
USA	–	<i>United States of America</i>
UDF		<i>User Defined Functions</i>

NOMENCLATURA

Letras latinas

A	Amplitude	[kg/s]
C	Concentração	[kg/m ³]
C_{in}	Concentração inicial do contaminante	[kg/m ³]
C_{Bin}	Concentração do contaminante na entrada do lúmen	[kg/m ³]
C_{Bout}	Concentração do contaminante na saída do lúmen	[kg/m ³]
C_{Din}	Concentração do contaminante na entrada do casco	[kg/m ³]
C_{Dout}	Concentração do contaminante na saída do casco	[kg/m ³]
C_D	Coeficiente de arraste	[-]
c	Constante do método ICM	[-]
D	Difusividade	[m ² /s]
d	diâmetro	[m]
E_d	Espessura da região de escoamento de dialisato	[mm]
E_b	Espessura da região de escoamento de sangue	[mm]
E_m	Espessura da membrana	[mm]
f	Fração volumétrica da fase	[-]
f^a	Função de arraste	[-]
H	hematócrito	[-]
h	Tamanho da malha	[-]
J	Fluxo	[kg /m ² s ¹]
K	<i>Clearance</i>	[ml/min]
K_{pq}	Coeficiente interfacial de transferência de momento	[-]

k	Função intrínseca das viscosidades	[-]
L	Comprimento da membrana	[mm]
m	Coeficiente adimensional	[-]
\dot{m}	Fluxo mássico	[kg/s]
M	Taxa de remoção de soluto por unidade de tempo	[kg/s]
N	Número de fibras do dialisador	[-]
N_m	Número de elementos da malha	[-]
n	Espessura do meio poroso qualquer	[mm]
Δn_x	Espessura do meio poroso na direção x	[m]
Δn_y	Espessura do meio poroso na direção y	[m]
Δn_z	Espessura do meio poroso na direção z	[m]
P	Pressão	[Pa]
p	Fase secundária	[-]
q	Fase primária	[-]
Q	Fluxo periódico de alimentação do lúmen	[kg/s]
Q_B	Fluxo de sangue	[kg/s]
Q_D	Fluxo de dialisato	[kg/s]
Q_{Bin}	Fluxo de sangue na entrada	[kg/s]
Q_{Bout}	Fluxo de sangue na saída	[kg/s]
Q_{Din}	Fluxo de dialisato na entrada	[kg/s]
Q_{Dout}	Fluxo de dialisato na saída	[kg/s]
Q_{Uin}	Fluxo de ureia na entrada	[kg/s]
r_p	Raio do poro	[m]
r	Razão de refino	[-]

\vec{R}_{pq}	Forças de interface	[N]
Re	Número de Reynolds	[-]
S_s	<i>Sieving coefficient</i>	[-]
t	Tempo	[s]
v	Velocidade	[m/s]
\vec{v}_q	Vetor velocidade da fase q	[m/s]
\vec{v}_p	Vetor velocidade da fase p	[m/s]
v_{axial}	Velocidade axial	[m/s]
$v_{\text{tangencial}}$	Velocidade tangencial	[m/s]
V	Volume	[m ³]
x	Variável de posição na direção x	[m]
w	Frequência	[rad/s]
y	Variável de posição na direção y	[m]

Letras gregas

α	Permeabilidade de Darcy	[m ²]
$1/\alpha_x$	Resistencia viscosa axial	[m ⁻²]
$1/\alpha_y$	Resistencia viscosa radial	[m ⁻²]
α_d	Difusividade térmica	[m ² / s]
ρ	Densidade	[kg/m ³]
ρ_q	Densidade efetiva da fase q	[kg/m ³]
μ	Viscosidade dinâmica	[kg/m.s]
μ_p	Viscosidade do plasma	[kg/m.s]
μ_q	Viscosidade da fase q	[kg/m.s]

θ	Porosidade da membrana	[-]
ϕ	Soluções do método ICM	[-]
τ	Tensão de cisalhamento	[Pa]
$\bar{\tau}_q$	Tensor deformação da fase q	[N/m ²]
τ'	Fator de tortuosidade	[-]
γ	Taxa de cisalhamento	[s ⁻¹]
δ	Ângulo de alimentação para a entrada tangencia	[Graus]

SUMÁRIO

1.	INTRODUÇÃO.....	20
1.1	Objetivo Geral.....	22
1.1.1	Objetivos Específicos	22
2.	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	23
2.1	A função renal e a síndrome urêmica	23
2.2	Terapias para a insuficiência renal.....	25
2.3	Diálise	26
2.3.1	Características do sangue	28
2.3.2	Características do dialisato	30
2.3.3	Membranas	31
2.4	Fenômenos de transferência no processo de hemodiálise	33
2.5	<i>Clearance</i>	35
2.6	Abordagens para a modelagem multifásica	36
2.6.1	Modelos multifásico	37
2.7	Métodos numéricos.....	41
2.8	A malha computacional	43
2.8.1	Tipos de malha	44
2.8.2	Índice de Convergência de Malha (ICM)	46
2.9	Estado da Arte.....	49
3.	METODOLOGIA.....	55
3.1	Estudo bidimensional do processo de hemodiálise.....	55
3.1.1	Descrição do problema.....	55
3.1.2	Geração do Domínio Computacional 2D	57
3.1.3	Modelo.....	58

3.1.4	Condições utilizadas nas simulações.....	60
3.1.5	Casos estudados.....	63
3.1.5.1	Procedimentos utilizados	65
3	RESULTADOS	67
4.1	Avaliação da qualidade de malha	67
4.2	Análise da membrana de fibra-oca	78
4.2.1	<i>Clearance</i>	78
4.2.2	Fração volumétrica	80
4.2.3	Campos de velocidade e pressão	82
4.2.4	Linhas de Fluxo e vetores velocidade	85
4.3	Análise do fluxo de alimentação.....	86
4.4	Análise da membrana de fibra-oca para outros contaminantes	96
4.5	Alimentação tangencial	99
4.6	Alimentação pulsada.....	105
4.7	Considerações finais.....	117
5	CONCLUSÕES.....	118
6	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	121

CAPÍTULO I

Apresenta os principais temas a serem abordados, justificando e ressaltando a importância da realização deste trabalho, juntamente com os objetivos propostos para realização desta pesquisa.

1. INTRODUÇÃO

No Brasil, de acordo com o censo brasileiro de nefrologia realizado em julho de 2016, aproximadamente 122.825 pessoas se encontram em tratamento dialítico em decorrência da insuficiência renal. Distribuídas disformemente pelo país, encontram-se 747 unidades de diálise ativas (4% na região Norte, 18% na região Nordeste, 7% no Centro-oeste, 49% no Sudeste e 22% situadas na região Sul), responsáveis por disponibilizar esse tratamento para a população (Sesso *et al.*, 2017).

A insuficiência renal pode ser definida como a perda da capacidade dos rins de manter o equilíbrio dos eletrólitos do corpo e efetuar a remoção de produtos de degradação metabólica. Na sua forma aguda, a doença provoca a rápida redução da função renal, sendo reversível se tratada adequadamente. Todavia, a insuficiência renal crônica, diferentemente da aguda, caracteriza-se pela perda gradual e irreversível dessas funções (Ribeiro *et al.*, 2008).

O acúmulo progressivo de compostos pelo metabolismo, normalmente excretados pelos rins saudáveis, é usualmente conhecida como síndrome urêmica. Esse sintoma da insuficiência renal pode ocasionar a redução da taxa de filtração dos rins para valores inferiores a 5 ml/min (Kalra *et al.*, 2006; Vanholder *et al.*, 2003). A incidência dessa doença tem aumentado gradativamente nos últimos anos, como um reflexo do envelhecimento populacional que precisa conviver a cada dia com mais comorbidades (De Rosa *et al.*, 2019).

Os pacientes que sofrem com a insuficiência renal podem ser tratados inicialmente através do controle da pressão arterial, medicamentos e tratamentos dietéticos. Entretanto, posteriormente, o tratamento dialítico ou o transplante renal são necessários (Lu & Junfeng Lu, 2010a; Ribeiro *et al.*, 2008). Na terapia de hemodiálise, utiliza-se um equipamento,

conhecido como dialisador, para suprir a função dos rins. Constituído por uma carcaça munida de um feixe de tubos (membranas de fibra-oca). O dialisador permite que o sangue escoe pelo interior dos tubos, possibilitando a remoção dos resíduos metabólicos pela transferência de massa (difusão, convecção) que ocorre através de uma membrana porosa entre o sangue e a solução de diálise (dialisato), contida do lado do casco (Lu & Junfeng Lu, 2010b).

Clark *et al.* (2017) mencionam que o dialisador é um equipamento constituído primordialmente por três componentes: o compartimento de dialisato, o compartimento sanguíneo e a membrana. Eles ressaltam que o conhecimento sobre os fenômenos e mecanismos físico-químicos envolvidos nesse processo contribuem para otimizar os parâmetros operacionais envolvidos no tratamento de hemodiálise.

Ding *et al.* (2015) ao estudarem um rim artificial, observaram que a simulação de uma dialisador baseada no método dos elementos finitos, consiste em uma alternativa viável para investigar o comportamento dos campos de concentração e velocidade no interior da membrana de fibra-oca, possibilitando a obtenção de resultados expressivos, úteis para prever a taxa de remoção das toxinas do sangue.

Alguns trabalhos têm sido reportados na literatura avaliando o fenômeno de transferência de massa em dialisadores, dos quais podem ser ressaltados os trabalhos experimentais de Klein *et al.* (1976) e Liao *et al.* (2005) ao estudarem as propriedades da transferência de massa em membranas de fibra-oca. Bem como, trabalhos analíticos como o de Lu & JunFeng Lu (2008), ao analisarem a transferência de massa em um sistema de diálise com fluxo concorrente em placas paralelas.

Assim como, podem ser encontrados trabalhos numéricos discutindo o tratamento dialítico sob a perspectiva da transferência de espécies químicas, como os de Gostoli & Gatta (1980), ao estudarem a transferência de massa em fluxo contracorrente e concorrente em um capilar; Ding *et al.* (2003), ao desenvolverem um modelo de dupla zona porosa para a transferência de massa em um hemodialisador; Kanchan & Maniyeri (2019), Liao *et al.* (2003), Lu & Junfeng Lu, (2010a) e Donato *et al.* (2017) ao estudarem bidimensionalmente o transporte de soluto em membranas de hemodiálise. Uma outra possibilidade, entretanto, consiste em modelar o sangue como um fluido multifásico, conforme observado nos trabalhos de Choi *et al.* (2015) e Kim *et al.*, (2013), investigando o processo dialítico sob a perspectiva do transporte de quantidade de movimento.

A hemodiálise configura o principal tratamento para pacientes com insuficiência renal crônica. O procedimento é realizado em serviços especializados de nefrologia e tem duração

média de três a quatro horas, sendo necessário três seções semanas de diálise. Logo, contribuições nessa área, representam uma expectativa na melhoria da qualidade de vida de pacientes com essa comorbidade. Embora, existam trabalhos sendo desenvolvidos, ainda são escassas as investigações acerca de novas formas de alimentação do dialisador, bem como, abordagens multifásicas do problema. Portanto, o presente trabalho tem como pretensão investigar a fluidodinâmica do equipamento e a influência da alimentação do lúmen (compartimento de escoamento do sangue) sobre a remoção de toxinas, buscando melhorar a capacidade de remoção de contaminantes da corrente sanguínea via simulação numérica computacional.

1.1 Objetivo Geral

Avaliar a influência da forma de alimentação do dialisador sobre a remoção de contaminantes no processo de hemodiálise, via fluidodinâmica computacional.

1.1.1 Objetivos Específicos

- Definir uma modelagem matemática capaz de prever o tratamento dialítico;
- Desenvolver uma malha representativa do domínio e avaliar sua convergência pelo Índice de Convergência de Malha;
- Estudar o efeito de parâmetros operacionais, tais como: vazão de alimentação e resistência viscosa radial da membrana sobre a distribuição de pressão, velocidade e fração volumétrica dos componentes sobre a remoção de toxinas da corrente sanguínea;
- Avaliar a influência da forma de alimentação, tangencial ou pulsada, sobre a remoção de toxinas no tratamento dialítico;
- Comparar os resultados das simulações com soluções experimentais e numéricas disponibilizadas na literatura.

CAPÍTULO II

Apresenta a revisão bibliográfica necessária para o desenvolvimento da pesquisa, responsável por nortear e esclarecer conceitos e definições acerca do processo de hemodiálise e simulação numérica, em uma membrana de fibra-oca, objetivando verificar a relevância desses temas na literatura.

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 A função renal e a síndrome urêmica

Composto pelos rins, ureteres, bexiga e uretra, o sistema urinário exerce um papel fundamental na homeostase corpórea, sendo responsável pelo controle de líquidos e eletrólitos e eliminação de resíduos metabólicos (Motta, 2009).

Segundo a literatura os rins são órgãos no formato de um grão de feijão, com aproximadamente 12 cm de comprimento, 6 cm de largura, e 3 cm de espessura, presentes no corpo humano em par logo acima da cintura, entre a parede abdominal e o peritônio (membrana que reveste as paredes da cavidade abdominal e recobre órgãos abdominais e pélvicos).

Gartner & Hiatt (2006) comentam que o rim apresenta como a sua menor unidade funcional o túbulo urinífero (Figura 2.1), composto por um túbulo coletor e um néfron. Cada rim contem aproximadamente 1.3 milhões de néfrons (unidades responsáveis pela remoção de excreções e filtragem do sangue).

Diversos fatores podem ocasionar a redução da função renal, a exemplo de doenças como diabetes e hipertensão arterial, bem como o uso prolongado de alguns medicamentos. Essa redução ocasiona patologias que podem ser classificadas em insuficiência renal aguda e insuficiência renal crônica.

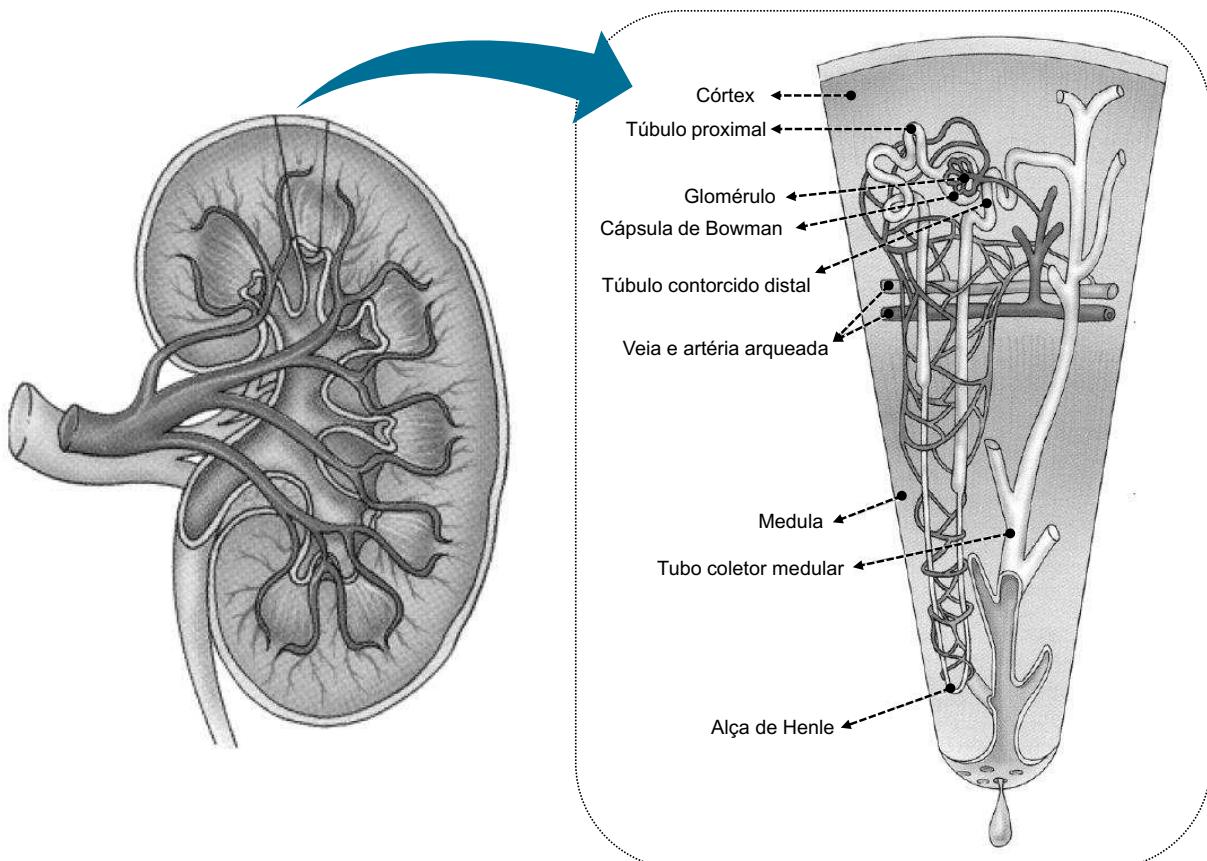


Figura 2.1: Esquema de um túbulo urinífero com o néfron em detalhes (Fonte: Adaptado de Eloot 2004).

A insuficiência renal aguda consiste em uma rápida redução da função renal, com diminuição do volume urinários e da taxa de filtração glomerular. De acordo com Star (1998) a insuficiência renal aguda é uma doença que inflige risco a vida e que apresentou alta mortalidade até o surgimento da hemodiálise na década de 50.

A ineficiência renal crônica diferentemente da insuficiente renal aguda, consiste na perda gradativa da função renal, sendo normalmente irreversível. Kipp & Kellerman (2009) mencionam que a insuficiência é caracterizada como crônica quando há evidências de danos renais com duração de pelo menos três meses com ou sem diminuição da taxa de filtração glomerular (TFG), ou quando a TFG for inferior a $60 \text{ ml/min}/1,73\text{m}^2$, por pelo menos três meses, com ou sem lesão renal.

Quando a redução da função e/ou massa renal, ocasionam a elevação de resíduos nitrogenados nos níveis sanguíneos, como creatinina e ureia, ocasionando uma série de sinais clínicos como anorexia, letargia, vômito e fluxo urinário alterado, o paciente é diagnosticado com uremia, uma síndrome causada pela insuficiência renal (Finco, 1997).

Dobre *et al.* (2015) relatam que o tratamento moderno para síndrome urêmica é capaz de manter os solutos inorgânicos em parâmetros normais no corpo humano, e assim evitar aspectos anteriormente letais, como hipercalemia (níveis altos de potássio no sangue) e acidose (excesso de compostos ácidos no sangue), atenuando os principais sintomas da síndrome, como fadiga, diminuição do apetite, anemia, hipertensão e náusea.

2.2 Terapias para a insuficiência renal

Existem três tipos básicos de tratamento para a substituição da função renal, o tratamento conservador, que utiliza suporte nutricional e medicamentoso para retardar o início da terapia dialítica, destinados a pacientes que ainda possuem a função renal residual; a terapia renal substitutiva (diálise peritoneal e hemodiálise), recomendado para pacientes com insuficiência renal aguda ou crônica grave; e o transplante renal, indicado especialmente para casos de doença renal em estado terminal.

A partir do momento do diagnóstico de doença renal crônica é responsabilidade da equipe médica retardar a progressão da doença e discutir com o paciente e familiares a terapia adequada para os estágios finais da doença renal (Castro, 2019).

Davison (2020) comenta que o manejo conservador da doença consiste em um conjunto de serviços centrados no paciente, destinados a pessoas com insuficiência renal que provavelmente não apresentam um quadro clínico propenso para a terapia dialítica. Esse tratamento é baseado na tomada de decisão compartilhada (paciente, familiares e médico) e envolve intervenções focadas em retardar o avanço da doença e minimizar complicações, incorporando planejamento e cuidados avançados com apoio psicossocial e familiar.

Outra possibilidade terapêutica é a terapia de substituição renal por transplante. Yeh *et al.* (2007) expõe que essa modalidade de tratamento é uma escolha adequada para um espectro de patologias que levam a doença renal em estágio terminal, como diabetes mellitus insulinodependente (Diabetes tipo 1), glomerulonefrite (inflamação do glomérulo, unidade funcional dos rins) e nefroesclerose hipertensiva (dano do rim devida à hipertensão). Embora o transplante melhore a qualidade de vida e sobrevida do paciente com insuficiência renal terminar, essa terapia é limitada pela escassez de órgãos disponíveis para transplante.

A terapia dialítica, por outro lado, consiste na separação de substâncias através de uma membrana. Clinicamente usada para se referir a qualquer processo pelo qual solutos (incluindo drogas e toxinas) são removidos dos fluidos corporais por intervenção artificial

(Field *et al.*, 2010), a diálise é a terapia mais utilizada atualmente para tratar a insuficiência renal. Neves *et al.* (2020) relatam que, conforme o último Censo Brasileiro de Diálise, referentes a década de 2009 à 2018, o número de pacientes com diálise crônica tem aumento significativamente no Brasil, com aumento médio de pacientes em diálise de 6,4% ao ano (Figura 2.2).

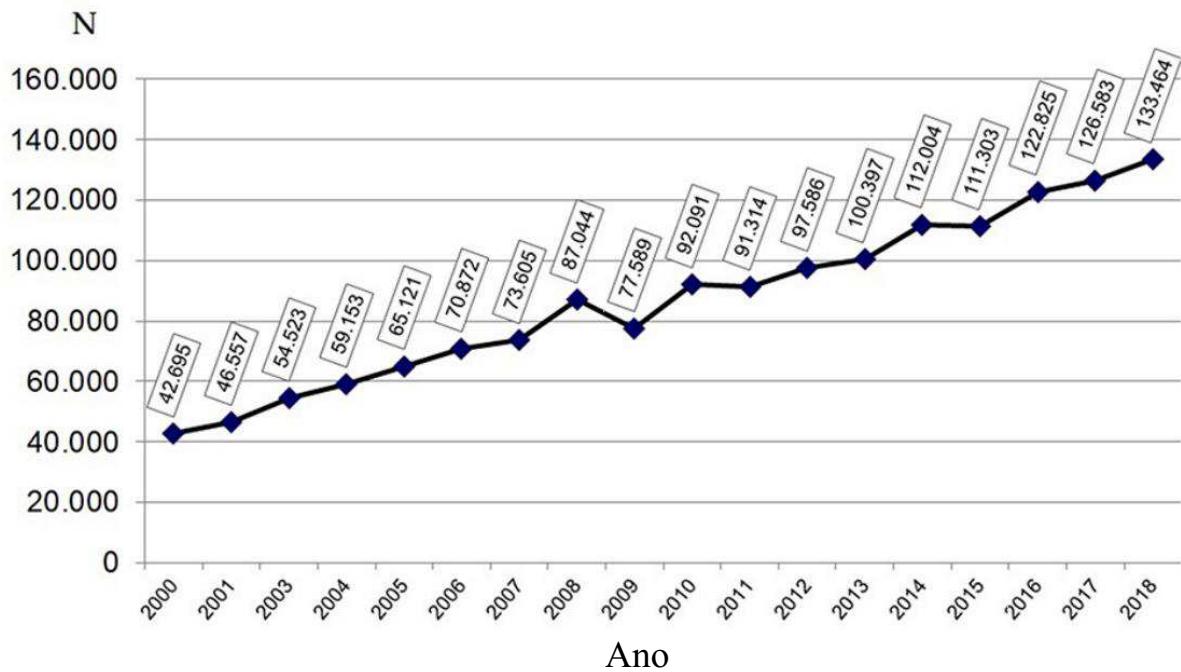


Figura 2.2: Estimativa de pacientes em tratamento dialítico no Brasil (Fonte: Neves *et al.*, 2020).

2.3 Diálise

Técnica utilizada para suplementar a função dos rins em pacientes com insuficiência renal, a diálise consiste no movimento molecular bidirecional através uma membrana porosa. Quando esse processo é realizado através de uma membrana externa ao corpo, o procedimento é conhecido como hemodiálise. Contudo, quando esse método de tratamento é realizado através de uma membrana peritoneal, utiliza-se o termo hemofiltração para designar o processo (Ahmad, 2009).

Cunningham (2009) relata que diversos fatores são considerados para determinar a melhor terapia de diálise, dentre eles: as restrições financeiras, motivação e limitações físicas do paciente, a modalidade do tratamento, além de fatores médicos, preferências baseadas na experiência do nefrologista, a serem analisados para cada paciente. Cunningham (2009)

ilustrou estas informações no fluxograma apresentado na Figura 2.3. Todavia, a hemodiálise ainda é a principal tratamento de substituição renal utilizado no mundo (Sesso *et al.*, 2017).

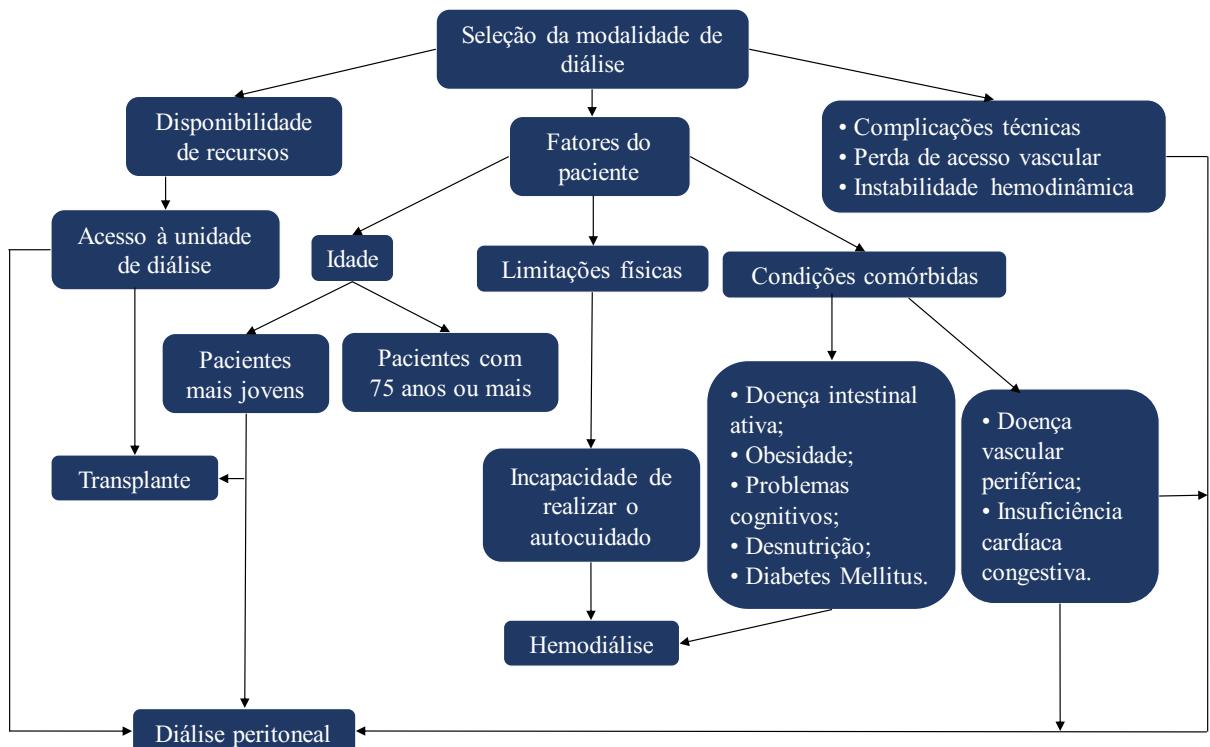


Figura 2.3: Algoritmo de seleção da modalidade de diálise (Adaptado: Cunningham, 2009).

Historicamente, a primeira hemodiálise foi realizada em 1924 pelo médico alemão Georg Haas, em um menino sofrendo de insuficiência renal grave. Porém, nesta época a técnica utilizada apresentava diversas limitações, e encontrava-se ainda, na sua forma rudimentar. Posteriormente, Willem Kolff, desenvolveu a terapia moderna de hemodiálise em 1950, aprimorando técnicas e equipamentos para remoção de impurezas do sangue, contudo, o acesso venoso ainda permanecia um desafio. Somente em 1960, como o desenvolvimento do implante arteriovenoso, viver com uma doença renal terminal tornou-se possível, a partir dos esforços de três pesquisadores Belding Scribner (nefrologista), Wayne Quinton (engenheiro) e Dave Dillard (médico cirurgião) (Shalhub *et al.*, 2017).

No Brasil, registros indicam que a primeira hemodiálise foi realizada no ano 1949. Surgindo posteriormente na década de 70, o programa de terapia de substituição renal, que disponibilizava aos pacientes, acometidos pela insuficiência renal crônica, o tratamento dialítico continuado (Junior *et al.*, 2003).

De acordo com Ismail *et al.* (2019), a hemodiálise é definida como um processo de purificação sanguínea, que utiliza um módulo (hemodialisador) munido de milhares de

membranas (fibra-oca), para remover produtos residuais como a ureia, β_2 -microglobulina e creatinina do sangue, além de eliminar o excesso de água, possibilitando equilibrar os eletrólitos, tais como: bicarbonato, sódio e potássio, pelo movimento de água contendo o soluto através da membrana, mediante os fenômenos de difusão e convecção.

Na hemodiálise a membrana é responsável por realizar a transferência de massa entre o sangue e a solução de diálise (dialisato), eliminando assim, produtos de degradação metabólica. Em um dialisador padrão, o sangue flui pelo interior das fibras, propiciando a permeação das toxinas através da membrana porosa, sendo constituído por uma carcaça com diâmetro de 3 cm e comprimentos 30-60 cm aproximadamente, na forma de uma feixe de fibras (Baker, 2004).

2.3.1 Características do sangue

Descrito pela primeira vez em 1674 pelo pesquisador Antonj van Leeuwenhoek, o sangue é um líquido heterogêneo, composto por vários elementos celulares. Dentre eles, pode-se citar os eritrócitos (glóbulos vermelhos), responsáveis por remoção de dióxido de carbono e fornecimento de oxigênio aos tecidos; os leucócitos (glóbulos brancos), encarregados do combate a infecções; e os trombócitos (plaquetas) que auxiliam na coagulação do sangue, todos suspensos em um fluido denominado plasma (Green, 2016). Além disso, vários nutrientes, metabólitos, eletrólitos e produtos celulares são transportados pela corrente sanguínea.

Um adulto de altura mediana, possui um volume total de sangue de aproximadamente 5L, 7% do peso corporal. Os homens apresentam 42% do volume total do sangue composto de células sanguíneas já as mulheres possuem em média 38%, sendo o restante composto por plasma. Essa porcentagem de células, comumente conhecida como hematocrito, é um parâmetro importante influenciado por diversos fatores, tais como anemia, grau de atividade corporal e altitude onde a pessoa reside (Guyton & Hall, 2006).

Baskurt & Meiselman (2003) relatam que o sangue pode ser considerada um tecido composto de vários tipos de células (vermelhas, brancas e plaquetas) e um material intercelular líquido (plasma), do ponto de vista biológico. Entretanto, do ponto de vista reológico, existem várias abordagens: o sangue pode ser considerado um líquido bifásico, uma suspensão sólido-líquido onde os elementos celulares seriam a fase sólida, bem como,

uma emulsão líquido-líquido, baseado no comportamento característico das células vermelhas sob cisalhamento.

Na literatura, alguns autores tratam o sangue como um fluido não newtoniano, caracterizando o sangue pela relação não linear entre a tensão de cisalhamento (τ) em (Pa), e a taxa de cisalhamento, $\gamma = (\partial\nu/\partial y)$, em (s^{-1}) (Eloot 2004) (Equação 2.1).

$$\tau = \mu \left(\frac{\partial \nu}{\partial y} \right)^m = \mu \gamma^m \quad (2.1)$$

sendo ν a velocidade na direção axial (m/s), μ a viscosidade dinâmica (Pa.s), y é a direção perpendicular ao fluxo (m), e m é um coeficiente ($m = 1$ para fluidos newtonianos, $m < 1$ para fluidos que apresentam diluição por cisalhamento).

Quemada (1983) descreve o comportamento da diluição por cisalhamento do sangue, ou seja, a diminuição da viscosidade pela deformação por cisalhamento (comportamento não-newtonianos) e sua relação com o hematócrito (H) (Equação 2.2).

$$\mu = \frac{\mu_p}{\left(1 - \frac{1}{2}kH\right)^2} \quad (2.2)$$

Onde μ_p é a viscosidade do plasma e k é uma função intrínseca das viscosidades.

$$k = \frac{k_0 + k_\infty \sqrt{\gamma/\gamma_c}}{1 + \sqrt{\gamma/\gamma_c}} \quad (2.3)$$

onde, $k_0(H)$ que caracterizam a agregação das células vermelhas a uma tensão de cisalhamento zero, e $k_\infty(H)$, que descreve a orientação e deformação das células vermelhas uma dada tensão e taxa de cisalhamento (γ).

$$\begin{cases} \ln k_0 = 3,874 - 10,410H + 13,80H^2 - 6,738H^3 \\ \ln k_\infty = 1,3435 - 2,803H + 2,711H^2 - 0,6479H^3 \\ \ln \gamma_c = -6,1508 + 21,923H - 25,6H^2 + 3,697H^3 \end{cases} \quad (2.4)$$

Portanto, para uma taxa de cisalhamento fixa, a viscosidade do sangue aumentará com o hematócrito, e para uma hematócrito fixo, a viscosidade diminuirá com o aumento da taxa de cisalhamento.

Na literatura são encontrados diversos trabalhos que tratam o sangue como fluido newtoniano. Dentre eles, pode-se mencionar os trabalhos de Clark *et al.* (2015), ao estudarem cateteres de hemodiálise usando fluidodinâmica computacional; Fulker *et al.* (2017), ao investigarem a hidrodinâmica de uma cânula de plástico para hemodiálise; Keshavarzi *et al.* (2014), ao avaliarem o fluxo tridimensional de um detector de ar, responsável por proteger o paciente da entrada de bolhas no retorno do sange durante o tratamento dialítico; Legallais *et al.* (2000), ao desenvolverem um modelo teórico para prever o desempenho de um hemodialisador e Liao *et al.* (2003), ao estudarem experimentalmente e numericamente um rim artificial.

2.3.2 Características do dialisato

Composto por soluções de eletrólitos formuladas com concentrações semelhantes ao plasma humana, o dialisato pode conter sódio, cloreto, cálcio, bicarbonato, magnésio, glicose, potássio, aminoácidos e icodextrina, sendo fornecido de forma concentrada e estéril as unidades de saúde para posterior diluição com água antes de ser utilizado no processo de hemodiálise (Aronson, 2016).

Uma sessão padrão de hemodiálise tem duração de aproximadamente 4 horas e expõe o paciente a 120 a 160 litros de água. Portanto, a qualidade da água utilizada na hemodiálise é um parâmetro importantíssimo para evitar o surgimento de outras comorbidades. Os autores comentam que a água utilizada no dialisato, normalmente é submetida a processos como filtração, abrandamento de dureza, deionização e osmose reversa, para a remoção de possíveis contaminantes (Kotanko *et al.*, 2010).

Segundo a literatura a solução final de dialisato é ajustada comumente com as necessidades de cada paciente, sendo o próprio equipamento responsável por dosar precisamente a quantidade de água e sais concentrados, monitorando continuamente a composição final e os valores de condutividade exigidos (Serfass & Troutner, 1970). Além disso, um fluxo adequado dessa solução é estipulado para fornecer uma diálise eficiente. Pittard (2008) relata que as taxas de fluxo do dialisato podem variar de 500 ml/min, utilizada em dialisadores convencionais, a 800 ml/min comum em dialisadores de alta eficiência/alto fluxo.

2.3.3 Membranas

Membranas são estruturas utilizadas como barreira seletiva semipermeáveis (Figura 2.4), capazes de restringir o transporte de espécies (total ou parcialmente), objetivando realizar um processo de separação, utilizando como forma motriz gradientes de concentração e pressão (microfiltração, nanofiltração, ultrafiltração e osmose reversa) (Magalhães *et al.*, 2018).

Os processos de separação com membranas apresentam como principais vantagens: baixo custo energético, alta seletividade, capacidade de separação de compostos termolábeis e simplicidade de operação. Sendo amplamente aplicados nos ramos da química, biotecnologia, farmácia, indústria de alimentos e bebidas, tratamentos de águas, tratamento de efluentes e na medicina. Na área de saúde em particular, são utilizadas como rim artificial na hemodiálise, como pulmão artificial em oxigenadores e na estabilização de soluções injetáveis (Habert, 2006).

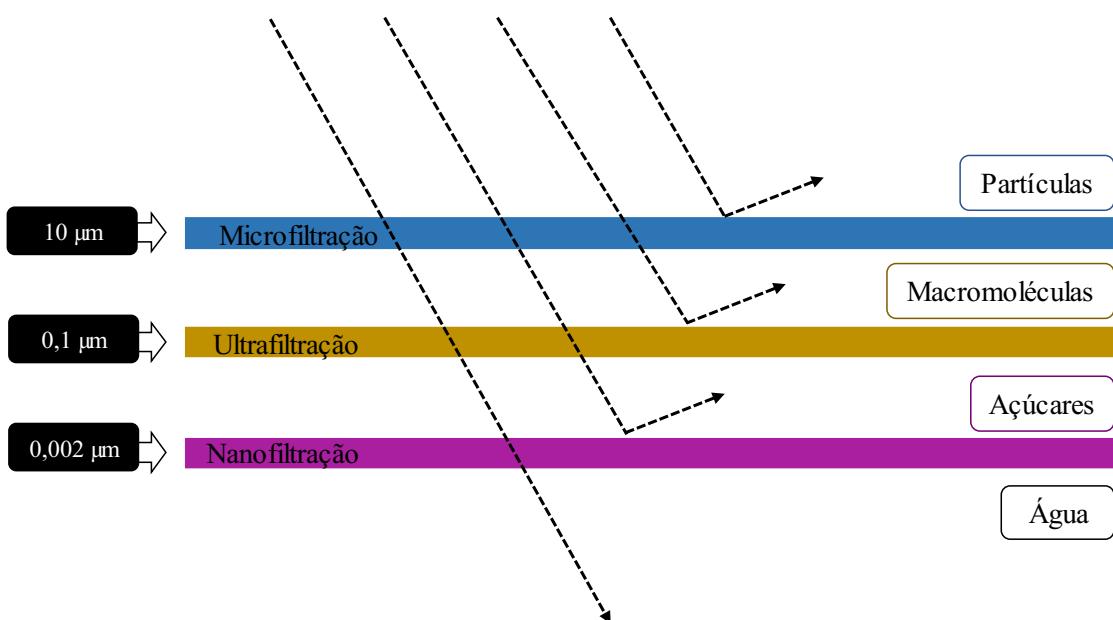


Figura 2.4: Tipos de filtração: microfiltração, ultrafiltração e nanofiltração, de acordo com o grau de retenção de partículas (Magalhães *et al.*, 2018).

2.3.3.1 Características da membrana de fibra-oca

As membranas de fibra-oca são sintetizadas normalmente pelo método de inversão de fase, compostas por milhares de fibras capilares de interior oco, dispostas paralelamente em

uma carcaça para obtenção de um módulo de separação com alta área de transferência superficial (1 a 2 m² de membrana). O diâmetro dessas fibras podem variar entre 50 a 3000 µm, contudo, para aplicação em hemodiálise as fibras possuem comumente diâmetros entre 200 a 500 µm, com alimentação na parte interna da fibra e permeado sendo coletado do lado do casco (Figura 2.5) (Baker, 2004; Madsen, 2010).

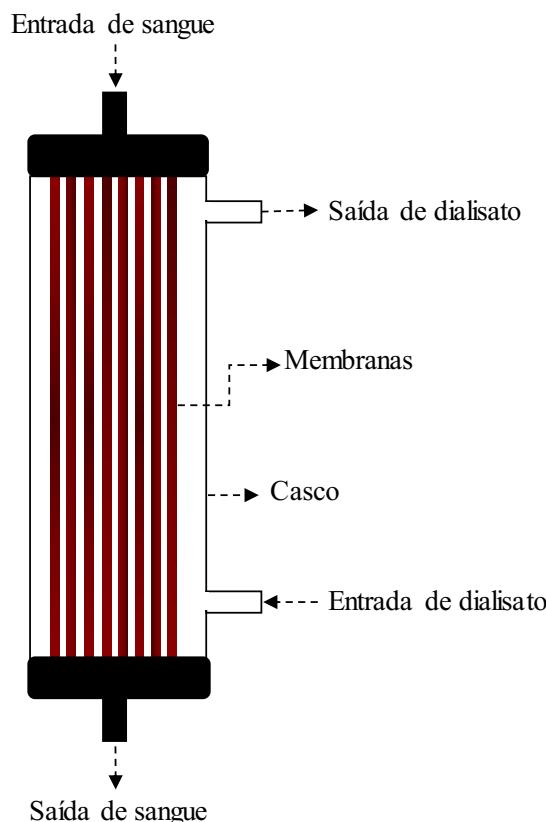


Figura 2.5: Esquema de uma membrana de fibra-oca aplicada a hemodiálise.

No processo de fabricação dessas membranas, duas categorias de matérias são utilizadas: sintéticos e celulósicos. Na década de 60 costumava-se utilizar celulose regenerada para sua confecção, obtendo as membranas pelo processo de extrusão. Mais tarde, pesquisadores observaram que os grupos hidroxila presentes nesse material apresentava baixa compatibilidade sanguínea, sendo posteriormente substituídos por grupos acetilados ou benzila, passaram a utilizar a celulose revestida com polietilenoglicol (Stamatialis *et al.*, 2008).

Por outro lado, as membranas produzidas a partir de matérias sintéticos são preparadas com copolímeros hidrofílicos (polimetilmetacrilato e álcool polietileno vinílico) ou misturas hidrofílicas (polissulfona e polivinilpirrolidona), a partir de um processo contínuo de fiação de

fibra. Sendo assim, utiliza-se comumente quatro tipo de membranas no processo de hemodiálise: as membranas de celulose, as membranas de celulose modificada, as membranas de celulose sintética e as membranas sintética (Daugirdas & Van Stone, 2001).

2.4 Fenômenos de transferência no processo de hemodiálise

As propriedades de transporte dos solutos através de uma membrana porosa são estabelecidas conforme a permeabilidade da membrana e a força motriz atuante, que por sua vez, pode ser proveniente de uma diferencial de pressão ou de concentração. O transporte de soluto pode ser influenciado também pelos fenômenos de convecção longitudinal do solvente, difusão axial do soluto, e pelo arraste induzido pelo fluxo de partículas na superfície da membrana (Singh, 2005).

A difusão e a convecção são os mecanismos de transporte atuantes no processo de hemodiálise. A difusão consiste no transporte de massa de uma região para outra devido ao diferencial de concentração de uma espécie, e a convecção constitui o transporte de matéria como consequência do movimento do meio (Beek *et al.*, 1999).

A difusão é o principal mecanismo de separação do processo de hemodiálise. Esse fenômeno proporciona a remoção de um maior número de solutos indesejáveis, de baixo peso molecular, encontrado no sangue de pacientes acometidos pela insuficiência renal terminal. O favorecimento da difusão durante a hemodiálise propicia a separação, aumentando a eficiência do hemodialisador. Em contrapartida, a convecção atua na remoção de partículas maiores, maximizando a separação (Ronco *et al.*, 2002).

Difusão

Na hemodiálise o processo de difusão é conduzido pelo gradiente de concentração existente entre as correntes dos dois compartimentos (lúmen-casco), ou seja, envolvendo a água, contida no plasma e a solução de diálise.

O fluxo difuso de soluto através da membrana, pode ser expresso pela primeira lei de Fick, que pormenoriza a difusão de um soluto em um solvente pela relação entre o fluxo molar do soluto, J_A , o gradiente de concentração, dC_A/dx , e o coeficiente de difusividade, D_{AB} (Equação 2.5).

$$J_A = -D_{AB} \frac{dC_A}{dx} \quad (2.5)$$

Segundo Ford *et al.* (2009), a primeira lei de Fick pode ser expressa como:

$$J_D = \frac{\theta D_M S_s}{\tau'} \left(\frac{\Delta C}{E_m} \right) \quad (2.6)$$

onde, J_D é o fluxo difusivo através da membrana, D_M é a difusividade do soluto na membrana, θ é a porosidade da membrana, τ' é o fator de tortuosidade, E_m é a espessura da membrana, ΔC é a diferença de concentração entre os compartimentos (sangue/dialisato) e S_s é a razão entre as concentrações de soluto no compartimento do dialisato e do sangue (*sieving coefficient*).

A remoção difusa de soluto é afetada principalmente pelas taxas de fluxo de dialisato e do sangue, bem como pela área superficial de transferência de massa, temperatura e espessura da membrana, considerando como constante todos os fatores, a difusão só dependerá do gradiente de concentração existente entre os dois compartimentos (Ronco *et al.*, 2002).

Convecção

O fenômeno de convecção através da membrana porosa ocorre em decorrência da diferença de pressão hidrostática que se forma entre os dois lados da membrana, compartimento de sangue (lúmen) e compartimento de dialisato (casco). Na hemodiálise o soluto é transportado pela água através da membrana, respeitando o tamanho do poro.

Kruczek (2015) comenta que para membranas de ultrafiltração a rejeição é determinada principalmente pelo tamanho e forma do soluto em relação ao tamanho dos poros da membrana, onde o transporte do solvente é diretamente proporcional a pressão. Logo, para fluxo convectivo laminar através de uma membrana porosa as Equações de Hagen-Poiseuille e Carman-Kozeny podem ser aplicadas.

Quando o transporte é puramente convectivo, e a membrana consiste de capilares retos (fluxo através de um canal cilíndrico), a relação de Hagen-Poiseuille pode ser aplicada. Portanto, o fluxo de soluto através da membrana, J_C , pode ser expresso pela Equação 2.7.

$$J_C = \frac{\theta r_p^2 S C_B}{8\mu\tau'} \left(\frac{\Delta P}{t} \right) \quad (2.7)$$

onde, r_p é o raio do poro, μ é a viscosidade do fluido dentro do poro da membrana, C_B é a concentração de soluto na superfície da membrana no compartimento de sangue, ΔP é a diferença de pressão hidrostática entre o compartimento de sangue e dialisato.

Durante o transporte convectivo de soluto, o coeficiente S diminui com o aumento do peso molecular da partícula. Logo, a remoção convectiva de soluto torna-se mais relevante que a remoção difusa à medida que a partícula de soluto aumenta. O processo que possui a convecção como principal mecanismo de transporte é conhecido como hemofiltração, utilizado, por exemplo, para remoção de algumas proteínas do sangue. Todavia, nos processos de hemodiálise de alto fluxo, predomina-se o processo difusivo. Quando esses dois processos são combinados, o procedimento é denominado de hemodiafiltração (Ford *et al.*, 2009).

2.5 Clearance

Segundo Garzotto *et al.* (2019), o *clearance* (K) pode ser definido como um parâmetro representativo da razão entre a taxa de remoção de soluto por unidade de tempo (M) pela concentração de soluto no sangue (C_C) (Equação 2.8).

$$K = \frac{M}{C_C} \quad (2.8)$$

Em hemodiálise, consiste na taxa de remoção de soluto, expressa pela diferença entre os produtos dos fluxos volumétricos pelas concentrações das correntes de entrada e saída do lúmen dividido pela concentração de entrada.

$$K = \frac{(Q_{Bin}C_{Bin}) - (Q_{Bout}C_{Bout})}{C_{Bin}} \quad (2.9)$$

onde K é o *clearance* total do sangue, ou depuração total do sangue, C_B é a concentração do soluto no sangue, Q_B é a taxa de fluxo de sangue, sendo os subíndice *in* e *out*, referentes a entrada e saída do sangue do equipamento, respectivamente.

De acordo com Liao *et al.* (2003), o *clearance* é um importante parâmetro de desempenho de um rim artificial, representa o fluxo volumétrico de solutos tóxicos removidos

da corrente sanguínea do paciente, podendo ser utilizado para calcular o tempo necessários de tratamento dialítico.

Além da transferência de massa do compartimento de sangue para o dialisato, também ocorre a transferência no sentido inverso, conhecida como retrofiltração (*backfiltration*). A água é transportada do compartimento de dialisato para o compartimento de sangue para controlar o volume de distribuição do paciente, ocorrendo sempre que a pressão transmembrana torna-se negativa (Eloot, 2004).

Baurmeister (1989) relata que a retrofiltração está presente especialmente em dialisadores de alto fluxo, e auxilia na remoção de um maior número moléculas grandes, entretanto, apresenta como principal problema a contaminação bacteriana por concentrado de bicarbonato líquido e pelo transporte de endotoxinas (toxina presente na membrana externa de algumas bactérias) para o compartimento de sangue.

2.6 Abordagens para a modelagem multifásica

Caracterizado pelo fluxo simultâneo de duas ou mais fases, o escoamento multifásico na fluidodinâmica computacional apresenta duas abordagens: a Euleriana-Lagrangeana e a Euleriana-Euleriana.

Na abordagem Euleriana-Lagrangeana existirá uma fase tratada como contínua, para qual as equações de Navier-Stokes serão resolvidas, e as demais fases serão abordadas como dispersas, sendo resolvidas pelo rastreamento de um grande número de partículas em um campo de fluxo calculado, sem restringir a troca de massa, momento e energia entre as fases. As trajetórias das partículas serão calculadas individualmente em intervalos especificados durante o cálculo da fase contínua, tornando essa abordagem indicadas para problemas como combustão de carvão e secadores de pulverização por exemplo, entretanto apresenta pouco eficiente para misturas líquido-líquido, ou seja, qualquer aplicação onde a fração volumétrica da segunda fase seja relevante (Fluent, 2015).

Sokolichin *et al.* (1997), em seu estudo sobre a fluidodinâmica das fases (gás-líquido) em uma coluna de bolhas, ressaltam a relevância da abordagem Euleriana-Lagrangeana para o estudo em questão, nessa abordagem o movimento da fase líquida é considerado homogêneo, e cada partícula da fase gasosa tem seu caminho rastreado individualmente através do reator.

Por outro lado, na abordagem Euleriana-Euleriana, as fases envolvidas são tratadas matematicamente como contínua e interpenetrantes, sendo introduzido o conceito de fração

volumétrica da fase, visto que o volume ocupado por uma fase não pode ser ocupado pelas demais, sendo a soma dessas frações (funções contínuas de tempo e espaço) igual a um.

Chiesa *et al.* (2005) estudaram o fluxo de partículas utilizando as abordagens Euleriana-Lagrangeana e Euleriana-Euleriana em um leito fluidizado. No modelo Euleriano-Lagrangiano o movimento bidimensional de cada partícula esférica é calculado individualmente a partir das forças atuantes, contabilizando a interação entre as fases envolvidas. Já no modelo Euleriano-Euleriano, o gás e as fases sólidas são considerados contínuos. Nessa abordagem ambas as fases são descritas por um conjunto de equações de conservação distinto, entretanto, apresentam termos de interação para o acoplamento entre as fases.

Costa Pereira *et al.* (2021), no trabalho sobre o tratamento de águas oleosas por membranas cerâmica, utilizaram uma abordagem Euleriana-Euleriana para modelar o processo de separação em um módulo munido de membrana cerâmica. Os autores avaliaram os efeitos da porosidade da membrana e da velocidade de entrada da mistura no comportamento de fluxo bifásico no interior do equipamento.

2.6.1 Modelos multifásicos

O modelo Euleriano é o mais robusto dos modelos multifásicos, ele resolve um conjunto de equações de continuidade e momento para cada fase envolvida, sendo o acoplamento obtido pelos coeficientes de troca de interface e pressão. Nesse modelo diversas funções de coeficiente de arraste entre as fases estão disponíveis, sendo apropriados para vários tipos de regimes multifásicos, aplicado principalmente para problemas que envolvam colunas de bolhas, suspensão de partículas, leitos fluidizados e risers.

Diversos trabalhos podem ser encontrados na literatura utilizando o modelo Euleriano para descrever o comportamento do escoamento multifásico. Dentre eles podem ser mencionados os trabalhos de Li *et al.* (2011), ao investigarem o fluxo de calor crítico e a ebulação em uma parede; Huang (2005), ao modelar o fluxo multifásico (água/óleo) no interior de um hidrociclone; Cornejo & Farias (2011), ao estudarem a gaseificação de carvão em um reator de leito fluidizado e Oliveira Neto *et al.* (2021), ao pesquisarem sobre a hidrodinâmica de um módulo munido de membrana cerâmica para o tratamento de águas oleosas usando CFD.

O modelo VOF (*Volume of Fluid*), por sua vez, consiste em uma técnica de rastreamento de superfície, desenvolvido para modelar dois ou mais fluidos imiscíveis, especialmente para casos onde a interface entre os dois fluidos é de interesse. Zhou *et al.*, (2011) estudaram o enchimento de uma tubulação em regime transitório contendo bolsões de ar, verificando que o comportamento observado experimentalmente e numericamente (modelo VOF) apresentaram boa concordância, sendo eficaz para simular o movimento dos bolsões de ar e o aumento de pressão.

O modelo de Mistura, por outro lado, foi desenvolvido para duas ou mais fases fluidas ou particuladas, onde as fases são tratadas como contínuas interpenetrantes semelhante ao modelo Euleriano. Entretanto, nesse modelo a equação de momento é resolvida para a mistura e as velocidades relativas que descrevem as fases dispersas são prescritas, sendo indicado para problemas como separadores ciclônicos, fluxo borbulhante e sedimentação, por exemplo (Nascimento, 2017). Em muitas aplicações práticas, o modelo de mistura apresenta uma aproximação suficientemente precisa, com baixo esforço computacional para simulações multifásicas.

No modelo de mistura as equações de campo da mistura são derivadas das equações de continuidade e momento escritas para cada fase do sistema multifásico. As equações do modelo são semelhantes as equações de um fluxo monofásico, no entanto, apresentam um termo adicional na equação de momento da mistura que representa o deslizamento das fases dispersas em relação a fase contínua, sendo a fração volumétrica de cada fase dispersa calculada a partir da equação de continuidade da fase (Manninen *et al.*, 1996).

Guerrero *et al.* (2017), no trabalho sobre o escoamento bifásico em tubulações verticais, realizaram um comparativo entre os modelos Euleriano e VOF. Os autores constataram que, para a simulação em questão, o modelo Euleriano apresentou um erro quadrático médio (13,86%) inferior ao obtido com o modelo (VOF), bem como, observaram que o modelo Euleriano denotou independência da malha, reduzindo o tempo de simulação quando comparado ao modelo VOF. Portanto, para a realização de qualquer simulação o primeiro passo consiste na escolha do modelo ideal para o problema em análise.

2.6.1.1 O modelo Euleriano

Como mencionado anteriormente, a abordagem Euleriana-Euleriana introduz o conceito de fração volumétrica da fase, onde f_q expressa o espaço ocupado por dada fase. As

leis de conservação (massa, momento e energia) nesse modelo são satisfeitas para cada fase individualmente. Portanto, algumas expressões importante precisam ser destacadas.

As equações (2.10) e (2.11) apresentam o volume da fase q e sua densidade efetiva, respectivamente.

$$V_q = \int_V f_q dV \quad (2.10)$$

$$\hat{\rho}_q = f_q \rho_q \quad (2.11)$$

sendo,

$$\sum_{q=1}^n f_q = 1 \quad (2.12)$$

Equação de conservação de massa

A equação da continuidade para a fase q , pode ser expressa como:

$$\frac{\partial}{\partial t} (f_q \rho_q) \nabla (f_q \rho_q \vec{v}_q) = \sum_{p=1}^n (\dot{m}_{pq} - \dot{m}_{qp}) + S_q \quad (2.13)$$

onde f é a fração volumétrica da fase q , \vec{v}_q é o vetor velocidade da fase q , \dot{m}_{pq} caracterizam a transferência de massa da fase p para a fase q (analogamente \dot{m}_{qp}), ρ é a densidade da fase e S_q é um termo fonte.

Equação de conservação de momento linear

A equação de momento para a fase q , pode ser expressa como:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (f_q \rho_q \vec{v}_q) + \nabla (f_q \rho_q \vec{v}_q \vec{v}_q) &= -f_q \nabla P + \nabla \bar{\tau}_q + f_q \rho_q \vec{g} + \\ &\sum_{p=1}^n (\vec{R}_{pq} + \dot{m}_{pq} \vec{v}_{pq} - \dot{m}_{qp} \vec{v}_{qp}) + (\vec{F}_q + \vec{F}_{lift,q} + \vec{F}_{vm,q}) \end{aligned} \quad (2.14)$$

onde $\bar{\tau}_q$ é o tensor-deformação, \vec{v}_{pq} é a velocidade interfase, \vec{F}_q é a força externa do corpo, $\vec{F}_{lift,q}$ é a força de sustentação, $\vec{F}_{vm,q}$ é uma força de massa virtual, \vec{R}_{pq} é uma força de interação entre fases e P é a pressão compartilhada por todas as fases.

Quando $\dot{m}_{pq} > 0$, a massa fase p está sendo transferida para a fase q , então $\vec{v}_{pq} = \vec{v}_p$; se $\dot{m}_{pq} < 0$, a massa fase q está sendo transferida para a fase p , logo $\vec{v}_{pq} = \vec{v}_q$. Analogamente para \dot{m}_{qp} e \vec{v}_{qp} .

O tensor deformação é definido pela Equação 2.15.

$$\bar{\tau}_q = f_q \mu_q (\nabla \vec{v}_q + \nabla \vec{v}_q^T) + f \left(\lambda_q - \frac{2}{3} \mu_q \right) \nabla \cdot \vec{v}_q \vec{I} \quad (2.15)$$

onde μ_q e λ_q são a viscosidade e o cisalhamento da fase q .

O termo referente as forças de interface, \vec{R}_{pq} depende da pressão, atrito, coesão e outros efeitos atuantes, e está sujeita as condições das Equações (2.16) e (2.17).

$$\vec{R}_{pq} = -\vec{R}_{qp} \quad (2.16)$$

$$\vec{R}_{qq} = 0 \quad (2.17)$$

O *Ansys Fluent*[®] utiliza um termo de interação, descrito por:

$$\sum_{p=1}^n \vec{R}_{pq} = \sum_{p=1}^n K_{pq} (\vec{v}_p - \vec{v}_q) \quad (2.18)$$

$$K_{pq} = K_{qp} \quad (2.19)$$

Sendo K_{pq} o termo de troca de momento da interface.

Kleinstreuer, (2003) afirma que para o escoamento bifásicos a fase secundária assume a forma de gotículas ou bolhas, impactando a forma como cada fluido é atribuído a uma fase específica. Normalmente, o fluido em maior quantidade (predominante) é modelado como fluido primário, uma vez que o fluido mais escarço tem mais possibilidade de assumir a característica de gota ou bolha, passando a ser modelado como fluido secundário. Portanto, o coeficiente de troca interfacial para este caso é expresso pela Equação (2.20).

$$K_{pq} = \frac{f_q f_p \rho_p f^a}{\tau_p} \quad (2.20)$$

Onde f^a é a função de arraste, definido de forma diferente para cada modelos de coeficiente de troca, e τ_p é o tempo de relaxamento particulado, definido como:

$$\tau_p = \frac{\rho_p d_p^2}{18\mu_q} \quad (2.21)$$

Sendo d_p o diâmetro da gota ou bolha da fase secundária.

Equação de conservação de energia

Objetivando expressar a equação da energia para a fase q , uma equação de entalpia pode ser escrita para cada fase individualmente.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (f_q \rho_q h_q) + \nabla (f_q \rho_q \vec{v}_q h_q) &= f_q \frac{\partial P_q}{\partial t} + \bar{\tau}_q : \nabla \vec{v}_q - \nabla \cdot \vec{q}_q + S_q + \\ &\sum_{p=1}^n (Q_{pq} + \dot{m}_{pq} h_{pq} - \dot{m}_{qp} h_{qp}) \end{aligned} \quad (2.22)$$

onde h_q é a entalpia específica da fase, \vec{q}_q é o fluxo de calor, S_q é o termo fonte de entalpia, Q_{pq} representa as trocas de calor entre as fases e h_{pq} é a entalpia interfase.

2.7 Métodos numéricos

Para descrever o fluxo de fluidos são necessárias equações diferenciais ordinárias ou parciais. Entretanto, não existem métodos analíticos capazes de solucionar a maioria dessas equações, consequentemente, diferentes métodos numéricos devem ser utilizados para produzir soluções aproximadas, utilizando para tantas ferramentas computacionais e softwares especializados (Petrila & Trif, 2004).

O método numérico possui como tarefa resolver uma ou mais equações diferenciais, realizando a substituição das derivadas das equações por expressões algébricas, para posteriormente, utilizando de um método analítico apropriado, calcular os valores das variáveis dependentes, para um número infinito de pontos.

Na aproximação numérica de uma equação diferencial, é possível obter apenas uma solução para um número discreto de pontos, admitindo-se que, quanto maior o número de pontos mais próxima a solução numérica (aproximada) estará da solução exata. Contudo, ao realizar esse acréscimo do número de pontos, o número de incógnitas e equações também aumentam, implicando em maior esforço computacional (Maliska, 1995).

Para modelar fluxos multifásicos em meios porosos os métodos numéricos tem sido a abordagem mais utilizada, devido a sua capacidade de lidar com a natureza não linear das equações governantes e com a complexidade e condições dos fluxos multifásicos (Wu, 2016).

Moaveni (1999) relata que existem duas classes comuns de métodos numéricos, o MDF (Método de Diferencias Finitas), onde as equações diferenciais são escritas para os nós e as derivadas são substituídas por equações de diferença, resultando na obtenção de conjunto de equações lineares simultâneas; e o MEF (Método dos Elementos Finitos), que utiliza de formulações integrais objetivando um sistema de equações algébricas, e de uma função aproximada contínua para representar a solução em cada elementos, obtendo uma solução completa pela conexão das soluções individuais.

Além dos métodos das diferenças finitas e o dos elementos finitos já mencionados, o método dos volumes finitos deve ser citado, devido a sua relevância na literatura especializada. Esse método surge pelo aprimoramento dos métodos pré-existentes e de observações do caráter físico das equações diferenciais, sendo amplamente empregado na área de fluidodinâmica (Maliska, 1995).

Segundo Moukalled *et al.* (2016), o MVF (Método dos Volumes Finitos) consiste em uma técnica numérica que converte equações diferenciais parciais, representativas das leis de conservação sobre volumes diferenciais, em equações algébricas discretas sobre volumes finitos. Semelhante ao MDF, o processo de solução do MVF inicia com a discretização do domínio geométrico, onde as equações diferenciais parciais são discretizadas em equações algébricas, integrando-as sobre cada elemento discreto, para posteriormente, o sistema de equações algébricas ser resolvido, objetivando calcular os valores das variáveis dependentes para cada um dos elementos.

O MVF é método de discretização adequado para uma série de tipos de simulações numéricas (elípticas, hiperbólicas, parabólicas), sendo amplamente utilizada na engenharia,

especialmente em mecânica dos fluidos, petróleo, transferência de massa e calor. Os autores relatam que o MVF apresenta a versatilidade como característica, podendo ser usado em diversas geometrias arbitrárias, com malhas estruturadas ou não estruturadas. Além disso, no método o fluxo numérico é conservado de uma célula discretizada para a célula vizinha, sendo atraente para modelagem de problemas nos quais os fluxos são importantes, como na área de fluidodinâmica (Eymard *et al.*, 2000).

O Método dos Elementos Finitos (MEF), por sua vez, foi utilizado pela primeira vez para solucionar problemas de tensão, e desde então, vem sendo aplicado a inúmeros situações de engenharia. Basicamente, o MEF busca uma solução aproximada da distribuição das variáveis de campo no domínio em estudo, que seriam de difíceis obter analiticamente. No método, uma função contínua de uma variável de campo desconhecida é aproximada usando funções lineares por partes em cada subdomínio, chamados de elementos, levando a um conjunto de equações algébricas lineares simultâneas para todo o sistema, que podem ser facilmente resolvidas para produzir as variáveis de campo desejadas (Liu & Quek, 2003).

O método das diferenças finitas (MDF), por outro lado, consiste em uma metodologia para solucionar de forma aproximada equações diferenciais parciais em conjunto as suas condições, sejam elas de contorno, valor inicial ou mistas. O MDF é baseado na aproximação das derivadas parciais por um quociente de diferenças correspondente, obtidos pelo teorema de Taylor (Oliveira & Nascimento, 2014).

2.8 A malha computacional

A etapa de geração de malha pode ser considerada primordial para obtenção dos resultados nas simulações numéricas. Por meio de volumes interligados, para os quais serão resolvidas as equações governantes, a malha representa o domínio contínuo em estudo de uma maneira discreta (Cunha, 2014).

Para obtenção de soluções computacionais confiáveis é essencial a geração de uma malha de qualidade, capaz de melhorar a estabilidade numérica aumentando a probabilidade de obtenção de soluções representativas da realidade. De acordo Tu *et al.* (2013), o conjunto fundamental de equações matemáticas que representam a física do problema são aplicados a cada célula dentro do domínio, gerando os valores discretos correspondentes as variáveis de campos de velocidade, fluxo, temperatura e pressão.

2.8.1 Tipos de malha

As malhas podem ser classificadas em três categorias básicas: a malha estruturada, a malha curvilínea ou adaptada ao corpo, e a malha não estruturada.

A malha estruturada (Figura 2.6), comumente aplicada a inúmeras investigações no universo da fluidodinâmica computacional, corresponde a construção direta de uma malha ortogonal em um sistema cartesiano. Sua utilização propicia certos benefícios em cálculos multifásicos devido a simplicidade e distribuição uniforme da grade, sendo relativamente de fácil construção (Tu *et al.*, 2018).

Entretanto, para lidar com geometrias mais complexas, muitas vezes é necessária a aplicação de malhas ajustadas ao corpo ou malhas curvilíneas estruturadas (Figura 2.6-c), centradas no mapeamento da região distorcida no espaço físico em uma região retangular no espaço de coordenadas curvilíneas, de tal forma que o limite computacional no espaço físico coincida com uma linha de coordenadas em espaço de coordenadas curvilíneas (Yeoh & Tu, 2019).

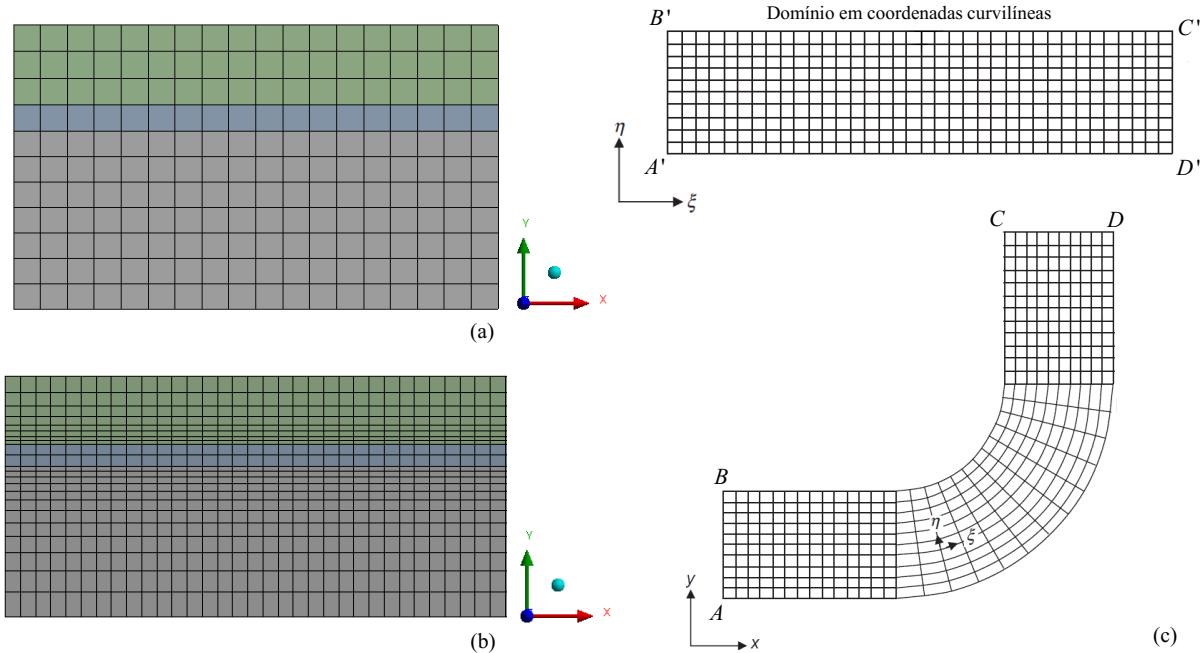


Figura 2.6: Malha estruturada bidimensional (a) Malha estruturada, (b) Malha estruturada com refinamento próximo a parede interna, (c) : Malha ajustada ao corpo para uma tubulação com curvatura de 90 °, Adaptado: (Tu *et al.*, 2013; Tu *et al.*, 2018).

Outra abordagem possível, consiste na utilização de uma malha não estruturada (Figura 2.7), formada por elementos triangulares em duas dimensões, ou tetraédricos em três dimensões, esse tipo de malha adapta-se a geometria proposta, fornecendo flexibilidade

geométrica ilimitada e permitindo o uso eficiente de recursos computacionais para problemas fluidodinâmicos complexos.

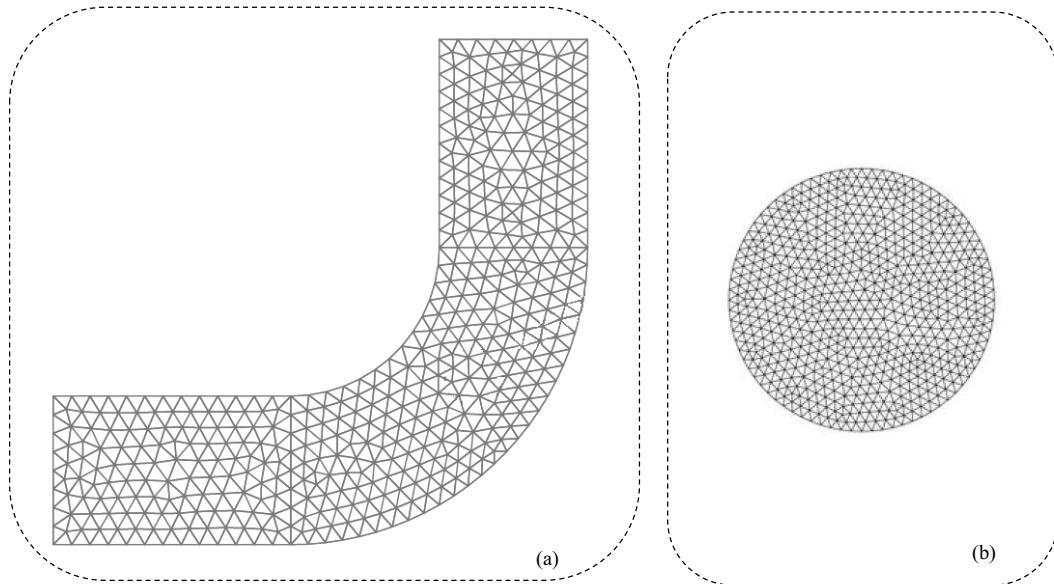


Figura 2.7: Malhas não estruturadas, (a) Tubulação com curvatura de 90 °, (b) Seção transversal de uma tubulação, adaptado (Tu et al., 2013).

A escolha do tipo de malha deve ser baseada nos seguintes critérios: tempo de preparação da malha, esforço computacional exigido e minimização da difusão numérica.

Para geometrias robustas o tempo de criação de malhas estruturadas (elementos quadriláteros ou hexaédricos) pode ser extremamente demorado. Logo, esse parâmetro pode ser uma das principais motivações para utilização de malhas não estruturadas em geometrias complexas. Para essas geometrias o uso de malhas triangulares/tetraédricas minimiza o número de elementos da malha e reduz assim o esforço computacional, permitindo o agrupamento de células em região selecionadas do domínio, diferentemente das malhas estruturadas que geralmente força a criação de células em região onde não são necessárias (Vieira, 2011).

Outro fator importante na tomada de decisão é a difusão numérica, conhecida comumente como uma falsa difusão, apresenta efeitos no cálculo de fluxo semelhante ao aumento do coeficiente de difusão real. Esse fenômeno é uma relevante fonte de erro em simulações, sendo mais perceptível em casos onde a difusão real é pequena, ou seja, em situações predominantemente convectivas.

Geraldes et al. (2000), no estudo sobre simulação numérica da transferência de massa em uma membrana, mencionam que a difusão numérica pode se tornar um problema em

resultados obtidos com esquemas de discretização de primeira e segunda ordem, especialmente para os casos onde a orientação das linhas de fluxos não esteja alinhada com a malha, reforçando o que foi dito anteriormente.

2.8.2 Índice de Convergência de Malha (ICM)

No desenvolvimento de uma simulação é necessário ter atenção tanto na modelagem adequada da física do problema quanto na geração da malha computacional que será utilizada, objetivando minimizar as fontes de incerteza dos modelos CFD, que podem afetar diretamente as soluções numéricas.

Baker *et al.* (2020) relatam que as fontes de incertezas mais comuns podem ter origem numérica, ser proveniente das aproximações realizadas no modelo matemático ou das condições de entrada utilizadas. As incertezas numéricas, por sua vez, são provenientes da etapa de discretização, e estão diretamente relacionada com a resolução da malha, ou seja, configura um erro de discretização espacial, o qual pode ser minimizado pelo refinamento da mesma, aumentando a ordem do esquema de discretização e melhorando o tamanho/qualidade pela adaptação da malha. Segundo os autores para obter uma solução precisa, todos os fatores que possam afetar a qualidade da malha devem ser devidamente considerados.

O Índice de Convergência de Malha (*Grid Convergence Index*, ICM), proposto por Roache em 1994, é uma alternativa para avaliar a qualidade da malha. O ICM é um parâmetro de estimativa de erro que possui como finalidade garantir a confiabilidade dos resultados de convergência da malha em análise (Lira, 2018).

O ICM pode ser definido como uma porcentagem de erro capaz de fornecer uma estimativa de convergência da solução numérica para a solução exata, fornecendo uma banda percentual da diferença entre o valor assintótico e o valor computado. Nunes (2019) relata que, valores pequenos desse índice indicam que a solução obtida se encontra na região assintótica, portanto, dentro dos escala de valores considerados aceitáveis pelo método.

O ICM foi desenvolvido com base na extrapolação de Richardson (Richardson & Gaunt, 1927), utilizando o princípio da representação em série das soluções discretas das equações diferenciais parciais (Roache, 1994). Esse método possui como objetivo quantificar as incertezas em relação ao erro de discretização, sendo uma ferramenta primordial para a tomada de decisão.

Baker *et al.* (2020), ao estudarem sobre aplicação do ICM para avaliar a qualidade de malha sobre os resultados numéricas do perfil de fluxo de ar, constataram que a malha hexaédrica estruturada, com sucessivos refinamentos de malha, apresentou melhor convergência ao ser comparada com duas outras malhas não estruturadas, sob a mesma metodologia.

Longest & Vinchurkar (2007) pesquisaram uma ampla variedade de estilos de malha e níveis de convergência na deposição de partículas em modelos de sistemas biológicos ramificados, avaliando quatro tipos de malha: tetraédrica não estruturada, hexaédrica estruturada, tetraédrica adaptável ao fluxo e malha híbrida. Os autores observaram que a malha hexaédrica apresentou ICM abaixo dos valores obtidos para a malha tetraédrica não estruturada em uma ordem de magnitude, além de reduzir o tempo de simulação, esse estilo de malha apresentou melhor aproximação com os resultados empíricos disponibilizados na literatura.

Almohammadi *et al.* (2013) investigaram numericamente a convergência e a independência da malha desenvolvida para uma turbina eólica de eixo vertical de lâmina reta, utilizando três métodos: o método de extrapolação de Richardson, o método do índice de convergência da malha (ICM) e o método de ajuste. Os autores observaram que o método de ajuste produz um pequeno erro nos padrões e nas curvas de potência, já o método GRE, embora eficiente para prever a independência da malha não é capaz de detectar comportamentos oscilatórios, diferentemente do ICM, que possiblidade identificar tanto a convergência monotônica como qualquer comportamento oscilatório da solução, sendo, portanto, o mais adequado para o problema em questão.

Kwaśniewski (2013) relata que o ICM é um método popular na fluidodinâmica computacional, sendo recomendado, também, para tratar de elementos finitos. De acordo com o autor, o método geralmente utiliza resultados de três malhas com refinamentos diferentes, para estabelecer, de forma objetiva, a ordem de convergência para determinar a solução assintótica e os limites para o erro de discretização.

Celik *et al.* (2008) desenvolveram o ICM, baseada na Extrapolação de Richardson, para a análise de convergência de malhas. Esse método estima a solução pela extrapolação das soluções das malhas existentes e pelo índice de convergência relativo das malhas produzidas (Lira, 2018). Celik *et al.* (2008) relatam que o procedimento para determinação do ICM começa pela determinação do tamanho representativo da malha, h (Equação 2.23).

$$h = \left[\frac{1}{N_m} \sum_{i=1}^{N_m} (\Delta V_i) \right]^{1/3} \quad (2.23)$$

Sendo N_m o número de elementos da malha e ΔV_i o volume ocupado pelo elemento i .

Utilizando como base o valor obtido na Equação 2.23, malhas são geradas, com diferentes quantidades de elementos. O método determina que a razão, $r = h / h_{refinado}$, seja superior a 1,3 para cada malha gerada.

Nessa metodologia $h_1 > h_2 > h_3$, ou seja, h_1 corresponderá a malha mais refinada e h_3 a malha de menos refinamento, e ϕ_1 , ϕ_2 e ϕ_3 serão os respectivos resultados de uma dada variável analisada. Sendo assim, foram definidas as razões entre as malhas r_{21} e r_{32} , de acordo com as equações a seguir:

$$r_{21} = \frac{h_2}{h_1} \quad (2.24)$$

$$r_{32} = \frac{h_3}{h_2} \quad (2.25)$$

Utilizando as equações 2.24 e 2.25, a ordem de convergência, ou ordem aparente, é calculada.

$$p = \frac{1}{\ln(r_{21})} \left| \ln \left| \frac{\varepsilon_{32}}{\varepsilon_{21}} \right| + q(p) \right| \quad (2.26)$$

$$q(p) = \ln \left(\frac{r_{21}^p - s}{r_{32}^p - s} \right) \text{ para } \begin{cases} r_{21} = r_{32} = \text{constante} \\ q(p) = 0 \end{cases} \quad (2.27)$$

$$s = sign \left(\frac{\varepsilon_{32}}{\varepsilon_{21}} \right) \quad (2.28)$$

sendo,

$$\varepsilon_{21} = \phi_2 - \phi_1 \quad (2.29)$$

$$\varepsilon_{32} = \phi_3 - \phi_2 \quad (2.30)$$

De acordo com Paudel & Saenger (2017) o valor da constante c determina a convergência (Equação 2.31).

$$c = \frac{\phi_1 - \phi_2}{\phi_2 - \phi_3} \quad (2.31)$$

Para $c > 1$ tem-se uma divergência monotônica da solução, $0 < c < 1$ uma convergência monotônica, $-1 < c < 0$ uma convergência oscilatória e $c < -1$ indica uma divergência oscilatória.

As soluções extrapoladas e o erro relativo aproximado podem ser determinadas pela Equação 2.32, 2.33 e 2.34, respectivamente.

$$\phi_{ext}^{21} = \left(\frac{r_{21}^p \phi_1 - \phi_2}{r_{21}^p - 1} \right) \quad (2.32)$$

$$e_a^{21} = \left(\frac{\phi_1 - \phi_2}{\phi_1} \right) \quad (2.33)$$

$$e_a^{32} = \left(\frac{\phi_2 - \phi_3}{\phi_2} \right) \quad (2.34)$$

Portanto, com base nas equações apresentadas, os Índices de Convergência de Malha (ICM) podem ser obtidos utilizando as Equações 2.35 e 2.36.

$$ICM_{21} = \frac{1,25e_a^{21}}{r_{21}^p - 1} \quad (2.35)$$

$$ICM_{32} = \frac{1,25e_a^{32}}{r_{32}^p - 1} \quad (2.36)$$

Quando a soluções exata não é conhecida, Roache (1994) menciona que a Equação 2.37 pode indicar se o intervalo assintótico foi atingido.

$$ICM_{32} \simeq r^p ICM_{21} \quad (2.37)$$

2.9 Estado da Arte

Sesso *et al.* (2017), ao realizarem o Inquérito Brasileiro de Diálise Crônica no ano de 2016, mediante levantamentos de dados em unidades de diálise em todo território nacional, constataram que apenas 41% das unidades se disponibilizaram a fazer parte da pesquisa. Entretanto, mesmo com números pouco expressivos, constataram a existência de um total de 122.825 pacientes em diálise, e uma a taxa de mortalidade proveniente do acometimento

dessa doença de 18,2%. Dentre os pacientes envolvidos na pesquisa, 92% encontravam-se em tratamento de hemodiálise, 8% em diálise peritoneal e 24% estavam na fila de espera para transplante renal. Evidenciando a utilização da terapia dialítica como principal tratamento para a insuficiência renal.

Segundo a base de dados da Scopus, (2021) (Figura 2.8), diversos estudos sobre a transferência de massa no processo de hemodiálise vêm sendo realizados nos últimos anos, embora o número de pesquisas publicadas na área ainda não ultrapasse de 20 trabalhos/ano. Corroborando com a importância da temática e com a necessidade constate de desenvolvimento de novas pesquisas que possam contribuir para o desenvolvimento de um equipamento mais eficiente, capaz de melhorar a qualidade de vida dos pacientes acometidos por essa patologia.

Dentre esses, pode-se mencionar o trabalho de Ding *et al.* (2015), ao estudarem numericamente a transferência de massa em um rim artificial. Os autores simularam os campos de velocidade e concentração em ambos os comportamentos (sangue-dialisato) de um rim artificial, considerando a influência dos aspectos geométricos de entrada e saída do equipamento sobre o fluxo, bem como a transferência de massa entre o compartimento do sangue e do dialisato. Observando, devido ao efeito dos perfis de fluxo induzidos, significativa influência da estrutura geométrica sobre o compartimento de dialisato, além de uma menor remoção de toxinas para baixas taxas de fluxo do dialisato ou altas taxas de fluxo de sangue.

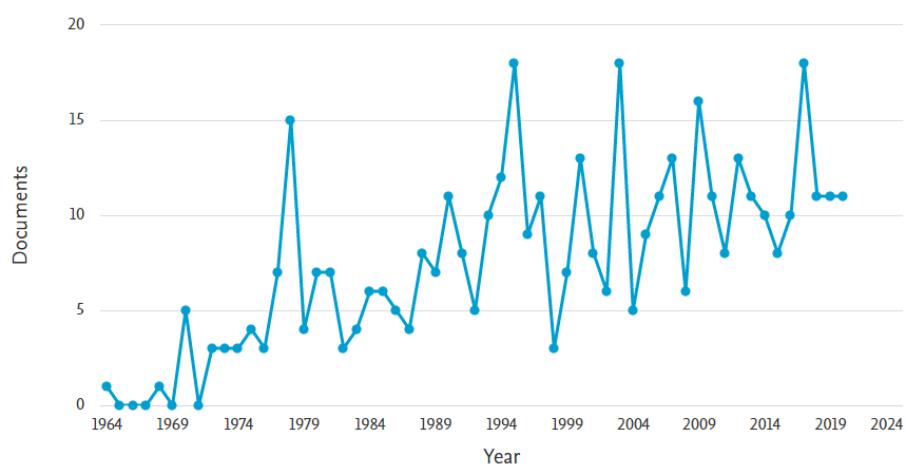


Figura 2.8: Número de estudos envolvendo a transferência de massa no processo de hemodiálise. Fonte: (Scopus, 2021), modo de Busca: “mass transfer” and “hemodialysis”, acessado em 13/01/2021.

Linares *et al.* (2015) desenvolveram um modelo unidimensional de uma fibra oca operando em contracorrente, baseado em equações diferenciais ordinárias e parciais, para estimar a remoção de metadona pelo processo de hemodiálise. Os resultados obtidos pelos

autores revelaram que o aumento do fluxo de dialisato ocasiona um aumento significativo da transferência de massa da metadona, sendo capaz de prever com precisão a remoção de metadona do sangue em pacientes com doença renal terminal, permitindo o monitoramento das concentrações de opioides no plasma.

Casagrande *et al.* (2016) desenvolveram um modelo matemáticos multicompartmental, que se adapta a cada paciente, assumindo uma abordagem diferente de outros trabalhos encontrados na literatura, caracterizados por apresentarem a cinética do soluto específica para pacientes com uremia média. Esses autores utilizaram dados obtidos clinicamente para validar seu modelo, observando que a modelagem elaborada é capaz de descrever a concentração de catabólicos e eletrólitos ao longo da hemodiálise, bem como expor a tendência de concentração plasmática, possibilitando acompanhar em tempo real as grandezas hematoquímicas via simulação.

Yahya *et al.* (2016) comentam que durante a hemodiálise não é investigada a transferência de água através da membrana, sendo negligenciado o estado de hidratação do paciente. Para solucionar essa problemática esses autores investigaram a transferência de massa, o conceito de bioimpedância, e a constituição do corpo do paciente e seus diferentes compartimentos (água intracelular, água extracelular, água corporal total, massa gorda e massa livre de gordura) objetivando desenvolver um sistema capaz de detectar pequenas variações de bioimpedância. Por intermédio dessas análises, elaboraram um equipamento que pode ser acoplado a máquina de hemodiálise, possibilitando ao nefrologista obter informação sobre o estado de hidratação (hiper-hidratação ou desidratação) dos pacientes.

Fukuda *et al.* (2017), ao estudarem a caracterização da técnica de hemodiálise avaliando a influência do coeficiente de filtração sobre o fluxo dos fluidos e coeficiente de transferência de massa em um dialisador, observaram que maiores coeficientes de filtração resultavam em elevados valores de coeficiente de transferência de massa, influenciando diretamente no processo de difusão.

De acordo com Lim *et al.* (2018), é necessário um rígido controle sobre permeabilidade da membrana no processo de hemodiálise para evitar a perda da proteína albumina, primordial para a manutenção da pressão osmótica sanguínea. Esses autores, analisaram o desempenho de dois dialisadores, mediante modelo cinético e análises clínicas, constatando que os novos dialisadores de alto fluxo, constituídos por membranas de polissulfona modificada com uma tecnologia de fiação nano, são capazes de aumentar a remoção de toxinas urêmicas, bem como propiciar o controle da albumina, impossibilitando o

deslocamento dessa proteína através da membrana, se comparado com os dialisadores tradicionais.

Donato *et al.* (2017), ao estudarem a maximização da remoção de soluto no processo de hemodiálise (Figura 2.9), propõem um modelo bidimensional com simetria axial para investigar o efeito dos principais grupos adimensionais (geométricos e operacionais) na remoção de toxinas. Em sua modelagem os autores utilizaram as equações de Darcy-Brinkman e Navier-Stokes para descrever o transporte de momento, assumindo o sangue como um fluido não newtoniano e considerando o efeito da polarização por concentração. Ao longo da pesquisa, os grupos adimensionais responsáveis por determinar a eficiência do equipamento foram identificados. Além disso, os resultados demonstraram que a remoção de soluto pode ser maximizada projetando a geometria do dialisador de forma a obter a minimização do número máximo de Peclet reduzido.

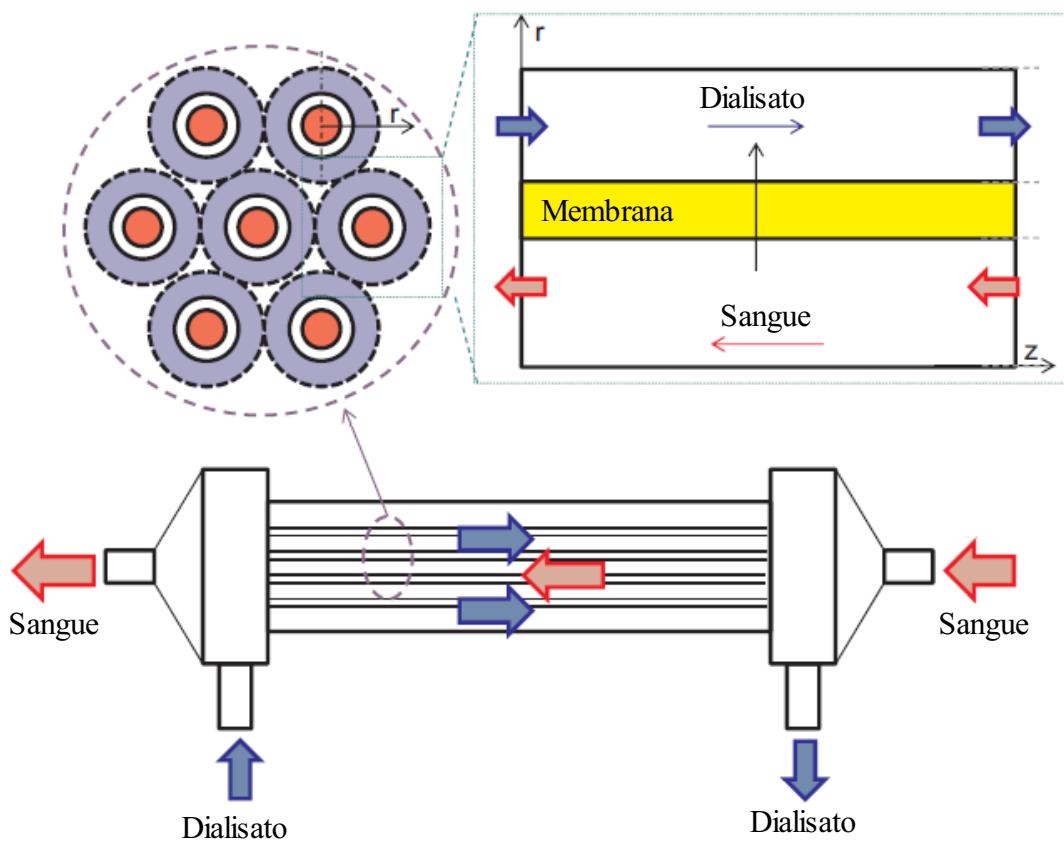


Figura 2.9: Esquema da membrana de fibra-oca (Adaptado: Donato *et al.*, 2017).

Snisarenko *et al.* (2017) estudaram os mecanismos de transporte de soluto através de uma membrana de dupla camada, munida de micropartículas adsorventes em sua estrutura porosa, por meio do desenvolvimento de um modelo matemático baseado nos fenômenos de

difusão, convecção e adsorção, validado pela comparação com dados teóricos e experimentais. Esses autores observaram que o acréscimo de uma segunda camada adsorptiva possibilita o aumento da remoção de toxinas urêmicas de tamanho médio e pequeno, embora seja um modelo simplificado, o mesmo possibilita o desenvolvimento de pesquisas futuras voltados para a otimização dessa tecnologia.

Jabbar *et al.* (2018) afirmam que durante a hemodiálise há um aumento da temperatura corporal, que deve ser monitorada para evitar possíveis complicações no tratamento. Os autores estudaram o processo de transferência de massa e calor em um dialisador objetivando monitorar a temperatura do sangue ao longo do equipamento, observando por intermédio do modelo desenvolvido, que existe uma troca térmica dentro do equipamento diferentes das perdas de calor comumente observadas para o ambiente, bem como, uma redução na temperatura do sangue em 1,15°C utilizando dialisado a frio nas configurações. Além disso, a taxa de eliminação de toxinas foi calculada e validada para diferentes taxas de fluxo sanguíneo.

Kanchan & Maniyeri (2019), ao estudarem o escoamento de fluidos em canais ondulados em um dialisador, relatam que o escoamento nesse equipamento é laminar, exigindo dessa forma a utilização de um sistema de modulação para melhorar a eficiência da mistura (Figura 2.10). Nesse trabalho, os autores desenvolveram um modelo bidimensional, fundamentado no método de volumes finitos, utilizando a equações de Navier-Stokes e o algoritmo SIMPLE, obtendo resultados que apontam os canais ondulados como a melhor alternativa para melhorar a eficiência de mistura em micro canais estreitos, com obtenção de melhores resultados para o fator de geometria de onda (amplitude/comprimento) igual a 0,1.

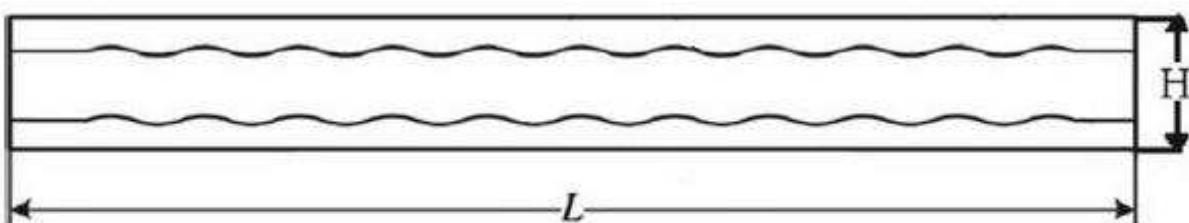


Figura 2.10: Esquema do sistema de modulação. (Adaptado: Kanchan & Maniyeri, 2019).

Glancey (2020), ao estudar a transferência de proteínas plasmáticas de baixo peso molecular durante a hemodiálise, desenvolveu um modelo unidimensional de convecção-difusão objetivando analisar e quantificar a extração de proteínas e a perda de albumina durante o tratamento dialítico. Foi observado que o modelo desenvolvido é aplicável a

qualquer técnica de diálise extracorpórea e a qualquer tipo de hemodialisador, sendo capaz de prever, em condições operacionais clínicas normais, as perdas de albumina usando hemodiafiltração. Além disso, verificou-se que o modelo pode fornecer estimativas de taxas de filtração de hemodialisadores operando *in vivo*.

Van Gelder *et al.* (2020) estudaram estratégias de remoção de ureia para regeneração de dialisato em um rim artificial, investigando a possibilidade do desenvolvimento de um equipamento de diálise portátil. O conceito desse dispositivo consiste na regeneração de um pequeno volume de dialisato operando em um círculo fechado, capaz de remover a ureia, dando mais mobilidade e qualidade de vida para pacientes que necessitam de tratamento dialítico. Os autores realizam uma revisão sobre as diferentes estratégias de remoção de ureia para a aplicação nesse dispositivo.

CAPÍTULO III

Apresenta a descrição do modelo matemático implementado, com o objetivo de validar a modelagem do problema físico do escoamento bidimensional em uma membrana de fibra-oca.

3. METODOLOGIA

3.1 Estudo bidimensional do processo de hemodiálise

3.1.1 Descrição do problema

A pesquisa é baseada em um dialisador modelo CT190G (Baxter Healthcare Co., McGaw Park, IL, USA) constituído por uma carcaça e um feixe de 12000 fibras-ocas de triacetato de celulose. Um esquema do equipamento e detalhes sobre a seção da membrana usadas na metodologia pode ser observado na Figura 3.1, conforme descrito por Liao *et al.* (2003).

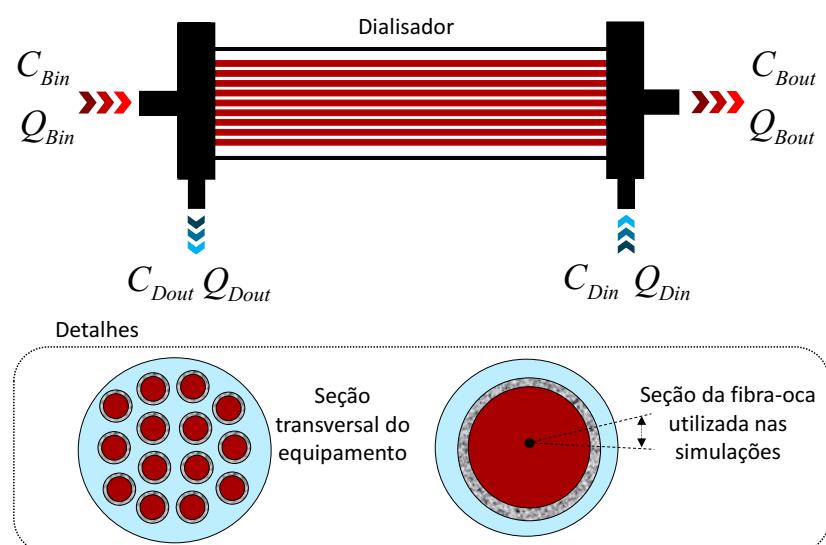


Figura 3.1: Esquema do funcionamento de um dialisador.

A membrana de fibra-oca é constituída por três partes: o casco (região de escoamento de dialisato), a membrana porosa e o lúmen (região de escoamento do sangue). No interior do equipamento, o sangue e o contaminante ureia escoam no domínio lúmen e o dialisato no domínio casco, sendo o fluxo dos compartimentos em contracorrente, como ilustrado na Figura 3.2. As dimensões do equipamento estão listadas na Tabela 3.1.

Tabela 3.1: Dimensões da membrana de fibra-oca.

Dimensões do equipamento (mm)	
Comprimento (L)	203,2
Espessura da seção (E)	0,0208962
Espessura da região de escoamento de dialisato (E_d)	0,04475
Espessura da membrana (E_m)	0,015
Espessura de escoamento de sangue (E_b)	0,1

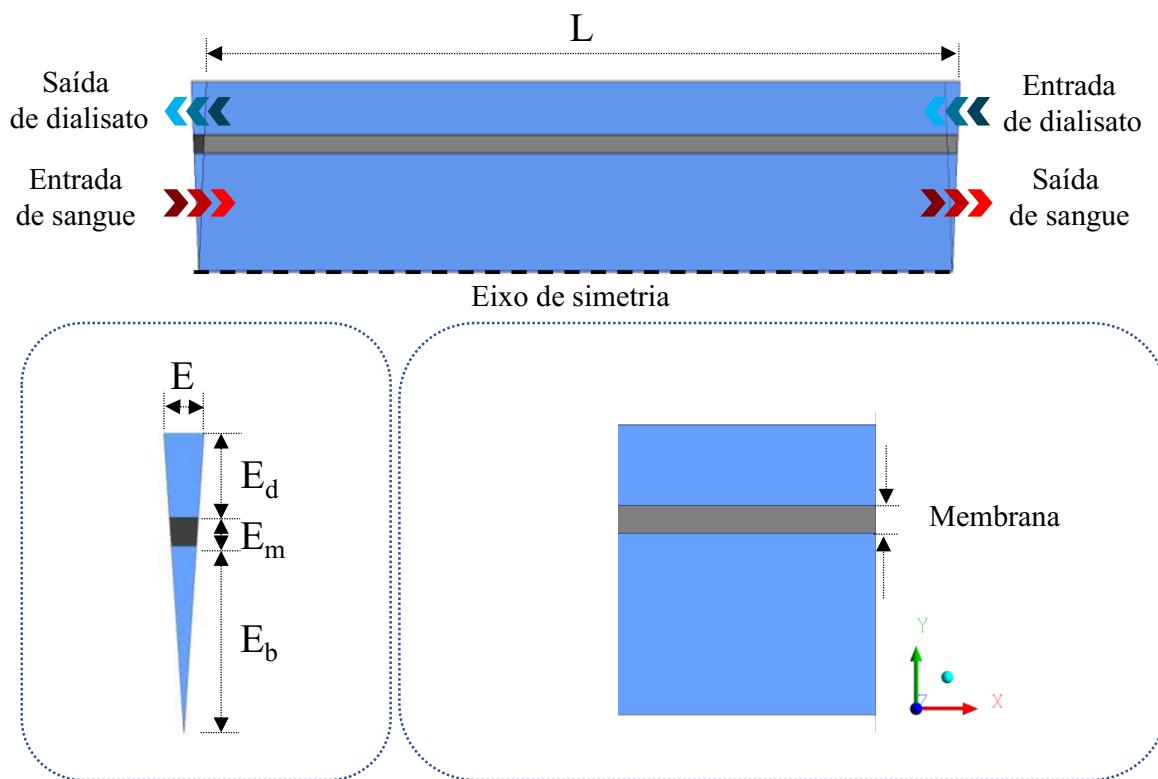


Figura 3.2: Representação geométrica da membrana de fibra-oca.

3.1.2 Geração do Domínio Computacional 2D

Para a realização das simulações numérica, três malhas numéricas (M_1 , M_2 e M_3) foram geradas utilizando o Designer Modeler e Meshing da Ansys[®], conforme ilustrada na Figura 3.3. As fronteiras do domínio em estudo podem ser observadas na Figura 3.4.

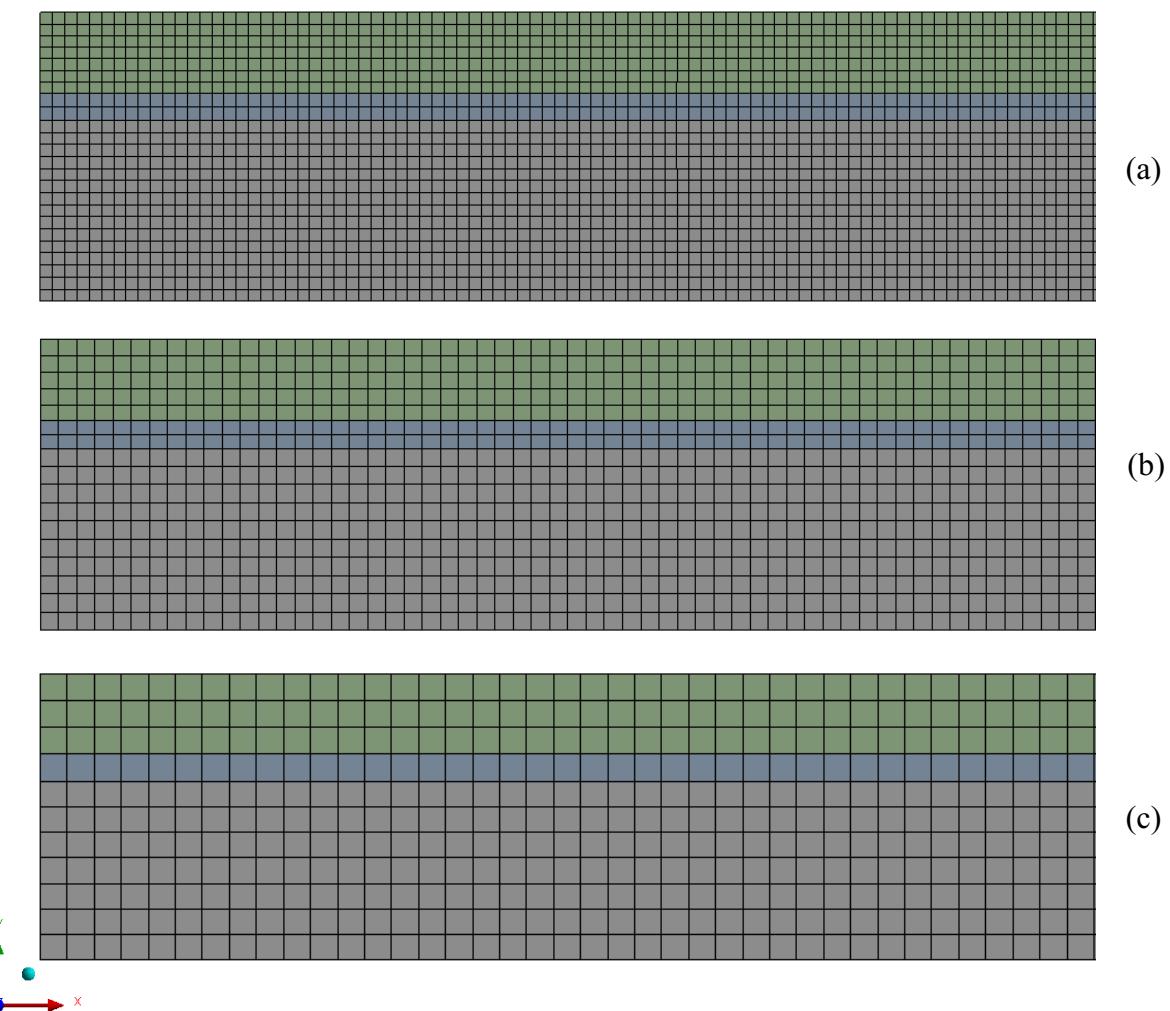


Figura 3.3: Malha bidimensional da seção transversal da membrana tubular: (a) Malha M_1 , (b) Malha M_2 e (c) Malha M_3 .

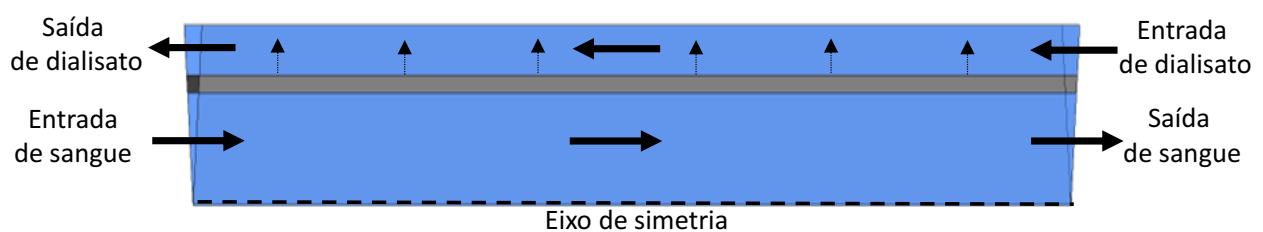


Figura 3.4: Representação das fronteiras da membrana.

3.1.3 Modelo

Para o estudo do processo de hemodiálise utilizando uma seção da membrana de fibra-oca, foram assumidas as seguintes considerações:

- Fluidos newtonianos com propriedades físico-químicas constantes;
- Escoamento em regime laminar, incompressível, isotérmico e transiente;
- Propriedades termo-físicas constantes;
- Meio poroso anisotrópico;
- Efeito gravitacional desprezível;
- As proteínas presentes no sangue foram desconsideradas;
- A adsorção da ureia na superfície de contato da membrana, a obstrução dos poros da membrana, a formação de camada de polarização por concentração, e reações químicas são desconsideradas;
- Apenas uma seção da membrana de fibra-oca é considerada, devido a simetria angular e radial apresentada pela geometria;
- Adotou-se a abordagem Euleriana-Euleriana para o escoamento multifásico.

Feitas as devidas considerações a equação de conservação da massa para a fase q (Equação 3.1) e momento linear (Equação 3.2) podem ser escritas como:

- Equação de conservação de massa

$$\frac{\partial}{\partial t} (f_q \rho_q) + \nabla \cdot (f_q \rho_q \vec{v}_q) = 0 \quad (3.1)$$

onde f é a fração volumétrica da fase q , \vec{v}_q é o vetor velocidade da fase q e ρ é a densidade da fase.

- Equação de momento linear

$$\frac{\partial}{\partial t} (f_q \rho_q \vec{v}_q) + \nabla \cdot (f_q \rho_q \vec{v}_q \vec{v}_q) = -f_q \nabla P + \nabla \cdot \bar{\tau}_q + \sum_{p=1}^n (\vec{R}_{pq}) + S_i \quad (3.2)$$

onde P é a pressão compartilhada por todas as fases.

Para determinar a função de arraste, da Equação 2.20, o modelo de Schiller e Naumann foi utilizado. Sendo f^a expresso por:

$$f^a = \frac{C_D Re}{18\mu_q} \quad (3.3)$$

onde C_D é o coeficiente de arraste, e Re o número de Reynolds relativo, definido para a fase primária (q) e para a fase secundária (p).

O coeficiente de arraste e o número de Reynolds relativo são calculados utilizando as Equações 3.4 e 3.5 (Fluent, 2015).

$$C_D = \begin{cases} 24 \times (1 + 0,15 \times Re^{0,687}) / Re & Re \leq 1000 \\ 0,44 & Re > 1000 \end{cases} \quad (3.4)$$

$$Re = \frac{\rho_q |\vec{v}_p - \vec{v}_q d_p|}{\mu_q} \quad (3.5)$$

- Equação de momento para o meio poroso

O modelo de meio poroso é formado incorporando-se uma resistência extra ao fluxo na região porosa, na forma de um sumidouro de momento. Isto ocorre pela adição de um termo fonte na equação de momento, aplicada para os elementos dessa região. O termo fonte adicionado é composto de duas partes: um termo de perda viscosa (Darcy) e um termo de perda inercial, como pode ser visto na (Equação 3.3).

$$S_i = - \left(\sum_{j=1}^3 D_{ij} \times \mu \times v_j + \sum_{j=1}^3 C_{ij} \frac{1}{2} \rho \times |v| \times v_j \right) \quad (3.3)$$

onde S_i é o termo fonte para as i (x, y ou z) equações de momento, $|v|$ é a magnitude da velocidade e μ é a viscosidade. O termo fonte adicionado (sumidouro de momento) contribui com o gradiente de pressão na célula porosa, criando uma queda de pressão que é proporcional à velocidade do fluido.

Para meios porosos homogêneos simples, a Equação 3.3 pode ser reescrita como:

$$S_i = -\left(\frac{\mu}{\alpha} v_i + C_2 \frac{1}{2} |v| v_i\right) \quad (3.4)$$

onde α é a permeabilidade e C_2 é o fator de resistência inercial.

Ao usar o modelo de meio poroso, considera-se que as células porosas estarão completamente abertas e a única resistência imposta ao escoamento, são implementadas na forma de coeficientes de resistência viscosa ($1/\alpha$) e inercial (C_2).

Para fluxos laminar através de meio poroso, a constante C_2 pode ser considerada zero pois a queda de pressão é normalmente proporcional à velocidade. Ao desconsiderar a difusão e a aceleração convectiva, o modelo de meio porosa pode ser expresso pela Lei de Darcy, como segue:

$$\nabla P = -\frac{\mu}{\alpha} \vec{v} \quad (3.5)$$

Logo, o gradiente de pressão dentro da região porosa pode ser dado por:

$$\nabla P_x = -\sum_{j=1}^3 \frac{\mu}{\alpha_{xj}} \vec{v}_j \Delta n_x \quad (3.6)$$

$$\nabla P_y = -\sum_{j=1}^3 \frac{\mu}{\alpha_{yj}} \vec{v}_j \Delta n_y \quad (3.7)$$

$$\nabla P_z = -\sum_{j=1}^3 \frac{\mu}{\alpha_{zj}} \vec{v}_j \Delta n_z \quad (3.8)$$

onde Δn_x , Δn_y e Δn_z são as espessuras do meio poroso nas direções x, y e z respectivamente.

3.1.4 Condições utilizadas nas simulações

a) Condições iniciais e de contorno

Para completar a modelagem matemática, as seguintes condições iniciais e de contorno ilustradas na Figura 3.5, foram usadas:

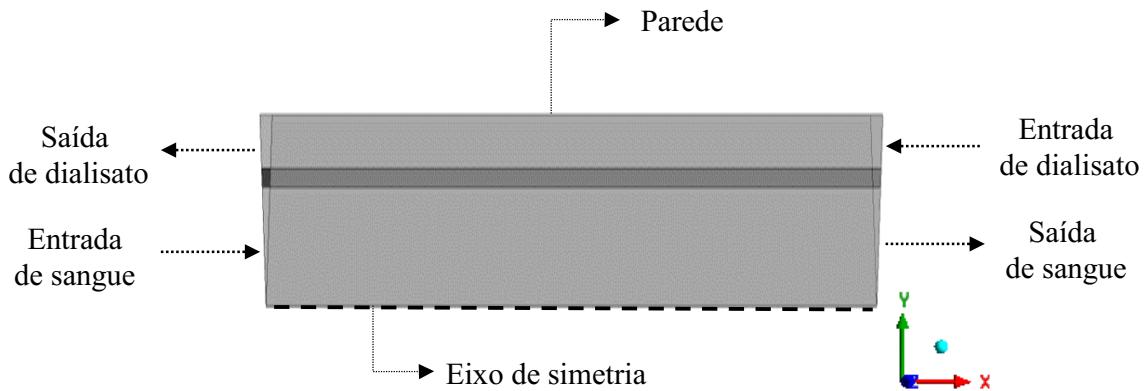


Figura 3.5: Fronteiras do domínio em estudo.

- Condições iniciais

Admitiu-se concentração inicial do contaminante na entrada do lúmen, C_{in} , em t igual a zero, de tal forma que:

$$C = C_{in} \quad (3.9)$$

A Tabela 3.2 apresenta as concentrações iniciais para os diferentes contaminantes, como segue:

Tabela 3.2: Concentração inicial dos contaminantes na corrente de alimentação de sangue.

Contaminante	C_{in} [kg/m ³]
Ureia	0,7
$\beta 2$ -microglobulina	0,01
Creatinina	0,02

Fonte: (Liao *et al.* 2003 e Kim *et al.* 2013)

- Condições de contorno

No eixo de simetria

Admitiu-se axissimetria no eixo x, bem como as seguintes condições:

$$\frac{\partial v_x}{\partial y} = \frac{\partial v_y}{\partial y} = 0 \quad (3.10)$$

$$\frac{\partial C}{\partial y} = 0 \quad (3.11)$$

$$v_y = 0 \quad (3.12)$$

Nas entradas do domínio

Admite-se uma condição de fluxo periódico na alimentação do lúmen (Equação 3.13), e fluxo constante na alimentação do casco (Equação 3.15). Uma UDF (*User Defined Functions*) foi utilizada para descrever o comportamento da alimentação do lúmen.

$$Q = Q_B + I A \sin(wt) \quad (3.13)$$

$$Q_B = \frac{Q_{Bin} \rho_b}{N} \quad (3.14)$$

$$Q_D = \frac{Q_{Din} \rho_d}{N} \quad (3.15)$$

onde A é a amplitude, w é a frequência, Q_{Bin} é o fluxo de sangue, Q_{Din} é o fluxo de dialisato, N é o número de fibras do dialisador proposto por Liao *et al.* (2003), e I é uma constante, onde $I = 0$ caracteriza a alimentação axial, e $I = 1$ a alimentação pulsada.

Nas saídas do domínio

Assumiu-se uma condição de pressão nula nas saídas de fluxo de massa.

b) Parâmetros termo-físicos da membrana e dos fluidos

Os parâmetros termo-físicos dos fluidos e da membrana são mostrados na Tabela 3.3.

Tabela 3.3: Propriedades e parâmetros termo-físicos dos fluidos e da membrana.

Fluidos	Densidade ρ [kg/m ³]	Viscosidade μ [kg/m. s]	Resistência viscosa axial $1/\alpha_x$ [m ⁻²]	Porosidade
Dialisato	998,2	0,001003	-	-
Sangue	Água	998,2	0,001003	-
	Ureia	1280	0,0023	-
$\beta 2$ -microglobulina	1060	0,0035	-	-
Creatinina	1090	0,0035	-	-
Membrana	-	-	$7,75 \times 10^8$	0,2

3.1.5 Casos estudados

Com o objetivo de avaliar a influência da malha sobre os resultados das simulações, o método do índice de convergência de malha (ICM) foi aplicado para três malhas com densidade de elementos diferentes, conforme ilustrado na Tabela 3.4. Nas simulações realizadas, foram mantidas constantes os fluxos de alimentação do lúmen, Q_{Bin} , o fluxo de alimentação do casco, Q_{Din} , a resistência viscosa axial, $1/\alpha_x$, a resistência viscosa radial, $1/\alpha_y$, e a concentração de ureia na alimentação do lúmen, C_{in} (Tabela 3.5).

Tabela 3.4: Casos simulados para a análise do ICM.

Casos	Nº de elementos da malha [N_m]
01	718920
02	344267
03	147785

Tabela 3.5: Parâmetros considerados constantes na análise do ICM.

Fluxos de alimentação do lúmen [ml/min]	Q_{Bin}	300
Fluxo de alimentação do casco [ml/min]	Q_{Din}	300
Resistência viscosa axial [m ⁻²]	$1/\alpha_x$	$7,75 \times 10^8$
Resistência viscosa radial [m ⁻²]	$1/\alpha_y$	$2,15 \times 10^{14}$
Concentração de ureia na alimentação do lúmen [kg/m ³]	C_{in}	0,7

Após o estudo da malha ter sido completado, a malha otimizada foi selecionada. Com a malha adequada realizou-se diferentes simulações conforme a Tabela 3.6. Foram variados: a resistência viscosa radial nos casos de 04 a 09, os fluxos de alimentação do lúmen e do casco nos casos de 10 a 14, o contaminante e consequentemente a concentração nos casos 15 (β 2-microglobulina) e 16 (Creatinina), o ângulo de alimentação do lúmen (no eixo X) nos casos 17 a 19, a frequência de alimentação do lúmen nos casos 20 a 22, e a amplitude de alimentação do lúmen nos casos 23 e 24.

Tabela 3.6: Condições utilizadas nas simulações da membrana de fibra-oca.

Casos	$1/\alpha_y$ [m^{-2}]	Q_{Bin} [ml/min]	Q_{Din} [ml/min]	C_{in} [kg/m ³]	δ [-]	I [-]	w [rad/s]	A [kg/s]
04	$2,40 \times 10^{10}$	300	300	0,7	0°	0	-	-
05	$2,40 \times 10^{11}$	300	300	0,7	0°	0	-	-
06	$2,40 \times 10^{13}$	300	300	0,7	0°	0	-	-
07	$2,40 \times 10^{14}$	300	300	0,7	0°	0	-	-
08	$2,40 \times 10^{15}$	300	300	0,7	0°	0	-	-
09	$2,15 \times 10^{14}$	300	300	0,7	0°	0	-	-
10	$2,15 \times 10^{14}$	300	200	0,7	0°	0	-	-
11	$2,15 \times 10^{14}$	300	400	0,7	0°	0	-	-
12	$2,15 \times 10^{14}$	400	200	0,7	0°	0	-	-
13	$2,15 \times 10^{14}$	400	400	0,7	0°	0	-	-
14	$2,15 \times 10^{14}$	400	500	0,7	0°	0	-	-
15	$2,15 \times 10^{14}$	300	300	0,01	0°	0	-	-
16	$2,15 \times 10^{14}$	300	300	0,02	0°	0	-	-
17	$2,15 \times 10^{14}$	300	300	0,7	20°	0	-	-
18	$2,15 \times 10^{14}$	300	300	0,7	40°	0	-	-
19	$2,15 \times 10^{14}$	300	300	0,7	60°	0	-	-
20	$2,15 \times 10^{14}$	300	300	0,7	0°	1	10	$Q_B/3$
21	$2,15 \times 10^{14}$	300	300	0,7	0°	1	20	$Q_B/3$
22	$2,15 \times 10^{14}$	300	300	0,7	0°	1	30	$Q_B/3$
23	$2,15 \times 10^{14}$	300	300	0,7	0°	1	10	$Q_B/4$
24	$2,15 \times 10^{14}$	300	300	0,7	0°	1	10	$Q_B/5$

As simulações numéricas foram realizadas no software Fluent 15.0, utilizando máquinas com processador Intel Core I7-3770, 3.4GHz e 16,0 GB de memória RAM, disponibilizadas pelos laboratórios LCTF (Laboratório Computacional de Térmica e Fluidos) e LPFI (Laboratório de Pesquisa em Fluidodinâmica e Imagem) da UFCG (Universidade Federal de Campina Grande).

3.1.5.1 Procedimentos utilizados

a) Avaliação da malha

As Equações 2.23 a 2.36, da seção 2.11.2, foram implementadas em um código VBA/Excel para realização dos cálculos, utilizando a razão ($r = h/h_{refinado}$) de 1.5.

b) Validação da modelagem matemática

Para obter a resistência viscosa radial (na direção y) correspondente a resistência da membrana usada por Liao *et al.* (2003) em seus experimentos, seis simulações (Casos 04, 05, 06, 07, 08 e 09) foram realizadas, mantendo constante os fluxos de alimentação e resistência viscosa axial ($1/\alpha_x$), e variando a resistência viscosa radial ($1/\alpha_y$).

Após o término de cada simulação determinou-se um parâmetro de processo conhecido como *clearance*, que representa a taxa de remoção de soluto expressa pela diferença entre os produtos dos fluxos volumétricos pelas concentrações das correntes de entrada e saída do lúmen (Equação 2.9).

Com os dados obtidos do *clearance* para cada caso simulado, foi feita uma regressão linear do *clearance* em função da resistência viscosa radial (Equação 3.16) usando o software Excel.

$$\text{Clearance} = a \times \ln\left(\frac{1}{\alpha_y}\right) + b \quad (3.16)$$

onde a e b são constantes.

Determinados os parâmetros a e b, da Equação (3.16), e utilizando-se do *clearance* obtido experimentalmente por Liao *et al.* (2003), obteve-se um valor de $1/\alpha_y$, o qual foi implementado no software Fluent. Com esses dados, fez-se uma nova simulação de onde obteve-se um novo *clearance*, o qual foi comparado com aquele obtido experimentalmente

por Liao et al. (2003), sob as mesmas condições operacionais. Verificado o erro desta comparação, fez correção no valor de $1/\alpha_y$ e repetiu-se o processo até um erro mínimo ser obtido (método de tentativa e erro).

c) Configuração da entrada tangencial

Para modelar a entrada tangencial admitiu-se axissimetria com rotação (*Swirl*) no eixo x, com as velocidades axial e tangencial calculadas com base no ângulo de alimentação desejado (Equações 3.17 e 3.18).

$$v_{\text{axial}} = v \cos(\delta) \quad (3.17)$$

$$v_{\text{tangencial}} = v \sin(\delta) \quad (3.18)$$

CAPÍTULO IV

Apresenta a discussão dos resultados referentes as simulações numéricas realizadas para uma seção transversal da membrana de fibra-oca, validando a modelagem matemática pela comparação dos resultados numéricos com trabalhos encontrados na literatura compatíveis com o problema físico.

3 RESULTADOS

4.1 Avaliação da qualidade de malha

Como já mencionado, o método do Índice de Convergência de Malha (ICM) foi utilizado para avaliar a qualidade das malhas desenvolvidas. Para realizar as análises, três malhas computacionais com diferentes refinamentos foram geradas (M_1 , M_2 , M_3) sob uma razão de refinamento de 1,5, aplicada ao comando *Sizing* do software de geração de malha, *Meshing* da *Ansys®*. Essa razão de refinamento está de acordo com a metodologia proposta por Roache (1994). O número de elementos das malhas utilizadas pode ser visualizado na Tabela 3.4. As malhas foram confeccionadas de forma estruturada, com um refinamento padronizado ao longo de todo o domínio, detalhes podem ser visualizados nas Figuras 3.3 e 4.1.

Para o teste de malha, as variáveis hidrodinâmicas: velocidade da ureia e pressão, foram investigadas aplicando o ICM. Para a análise da velocidade da ureia utilizando o método do ICM, foram traçadas três linhas radiais nas posições axiais, 20 mm, 101,6 mm, e 183,2 mm, conforme ilustrado na Figura 4.2.

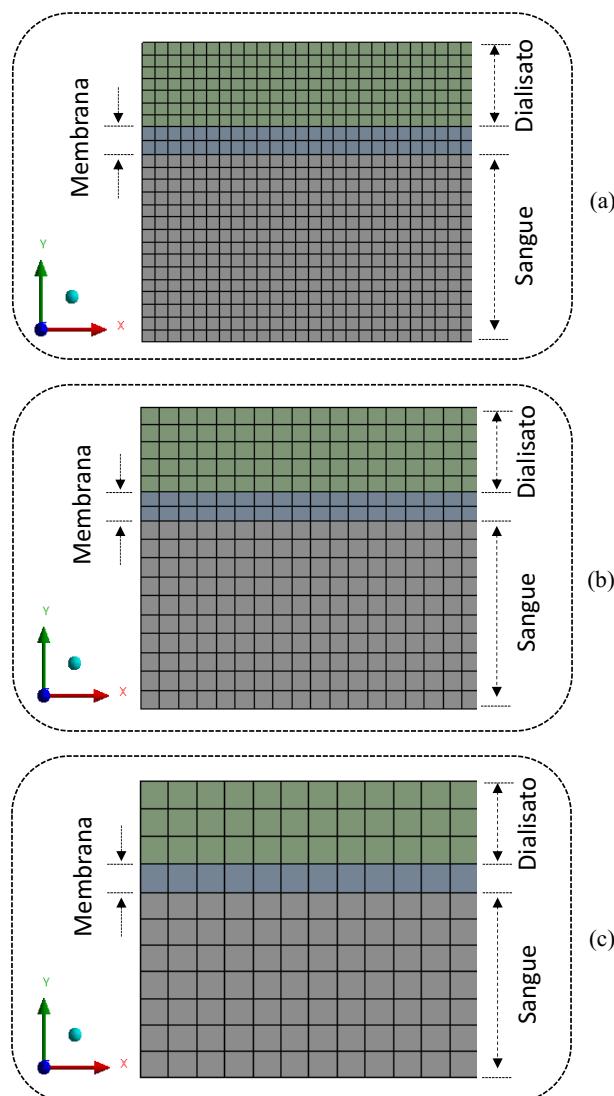


Figura 3.1: Detalhes das malhas confeccionadas (a) M_1 , (b) M_2 , e (c) M_3 .

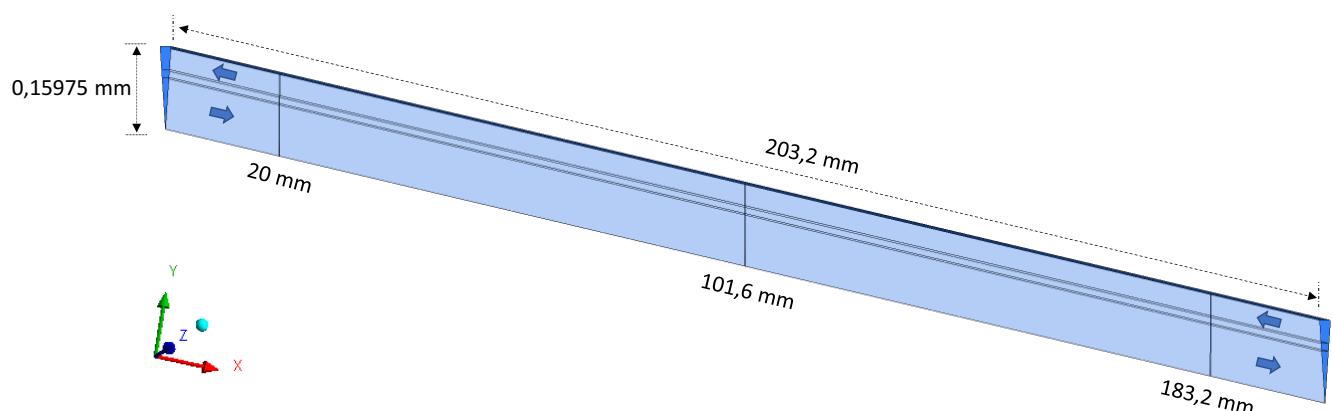


Figura 3.2: Posições axiais das linhas de coleta de dados da velocidade da ureia.

A Tabela 4.1 apresenta os resultados obtidos no estudo do ICM para a velocidade da ureia na posição radial de 0,159 mm, para as três posições axiais, para as posições axiais $x=20$ mm, 101,6 mm e 183,2 mm. Após análise da Tabela 4.1 observa-se que os valores do coeficiente c encontram-se no intervalo de $0 < c < 1$, caracterizando a convergência monotônica. Além disso, o $ICM_{21} < ICM_{32}$ indicando que a dependência dos resultados com o tamanho dos elementos da malha foi reduzida e se aproxima de uma condição de independência. Pode-se constatar também, que os valores de ICM_{21} e ICM_{32} estão abaixo do limite de 10%, como estipulado por Celik & Karatekin (1997). Os valores das variáveis ICM_{32} e $r^p ICM_{21}$ são suficientemente próximos, indicando que a solução extrapolada está próxima o suficiente da solução exata para esta variável.

Tabela 3.1: Parâmetros obtidos com o estudo do Índice de Convergência de Malha para a velocidade da ureia como variável de análise ($y=0,159$ mm).

Parâmetro	Posição axial		
	x_1 (20 mm)	x_2 (101,6 mm)	x_3 (183,2 mm)
Velocidade da Ureia [m/s]	Malha M ₁	$3,709 \times 10^{-3}$	$2,422 \times 10^{-3}$
	Malha M ₂	$3,706 \times 10^{-3}$	$2,399 \times 10^{-3}$
	Malha M ₃	$3,698 \times 10^{-3}$	$2,340 \times 10^{-3}$
p		1,384	1,509
$\phi_{ext}^{21} = M_e$ [m/s]		$3,712 \times 10^{-3}$	$2,441 \times 10^{-3}$
ICM_{21}		$1,067 \times 10^{-3}$	$1,031 \times 10^{-2}$
ICM_{32}		$2,104 \times 10^{-3}$	$2,179 \times 10^{-2}$
c		0,394	0,368
$r^p ICM_{21}$		$2,102 \times 10^{-3}$	$2,159 \times 10^{-2}$
			$6,813 \times 10^{-4}$

As Figuras 4.3 e 4.4 e 4.5 apresentam os resultados obtidos com a análise do ICM para a velocidade da ureia nas três posições axiais x_1 , x_2 e x_3 , para diferentes tamanhos de malha (M_1 , M_2 e M_3) em comparação com a solução extrapolada (M_e), em $y = 0,159$ mm. Observa-se que, conforme a malha é refinada a solução da variável de interesse se aproxima do valor da solução assintótica, representado graficamente pela solução extrapolada em M_e . Esse comportamento é evidenciado nas três posições axiais. As malhas M_2 e M_1 apresentam soluções próximas, e uma leve diferença é verificada para a malha M_3 , de menor refinamento, ao apresentar valores de velocidade distante das demais, especialmente na posição axial de

101,6 mm. Além disso, as análises dos gráficos demonstram que as malhas, M₁ e M₂ são as que mais se aproximam da solução assintótica.

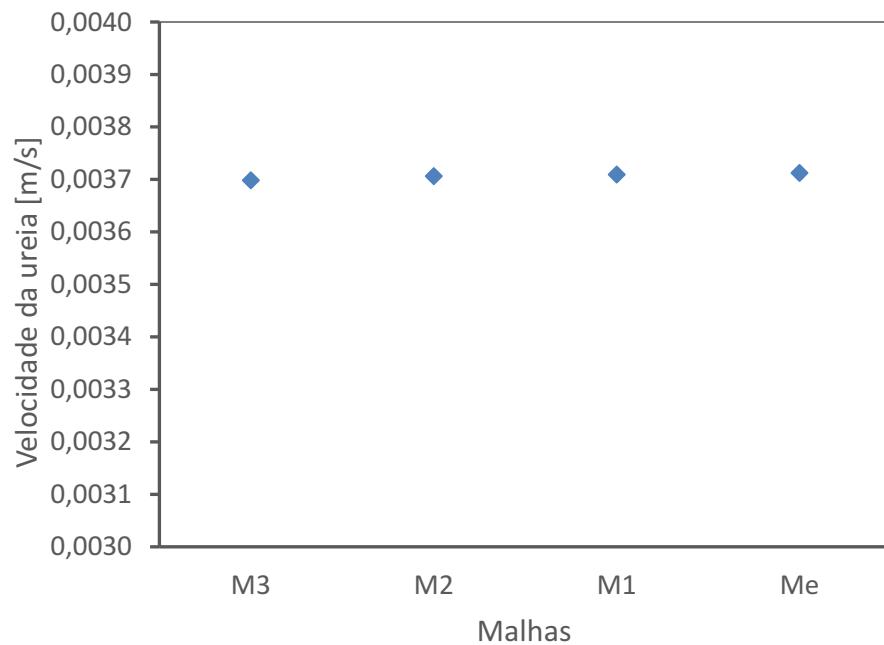


Figura 3.3: A velocidade da ureia na posição axial de 20 mm, para diferentes malhas.

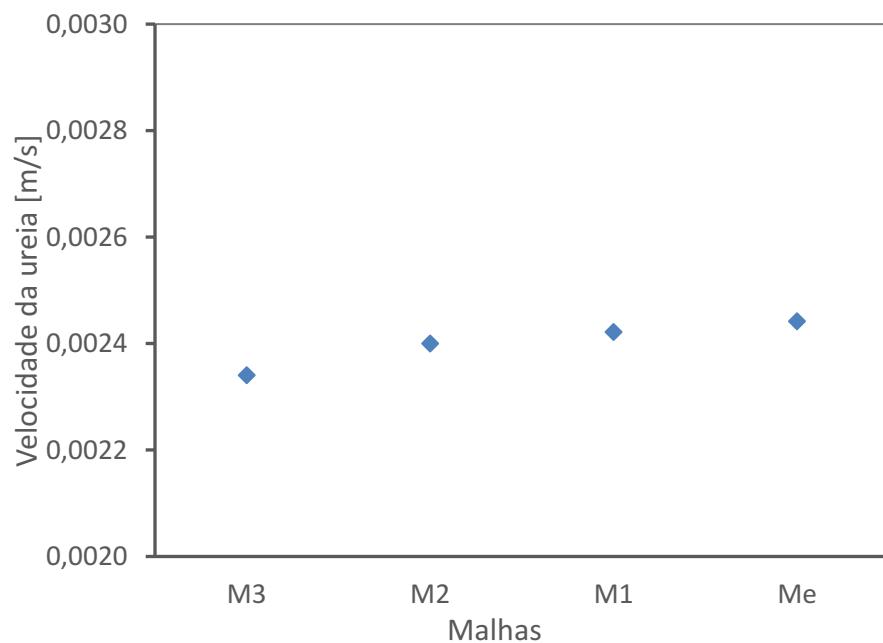


Figura 3.4: A velocidade da ureia na posição axial de 101,6 mm, para diferentes malhas.

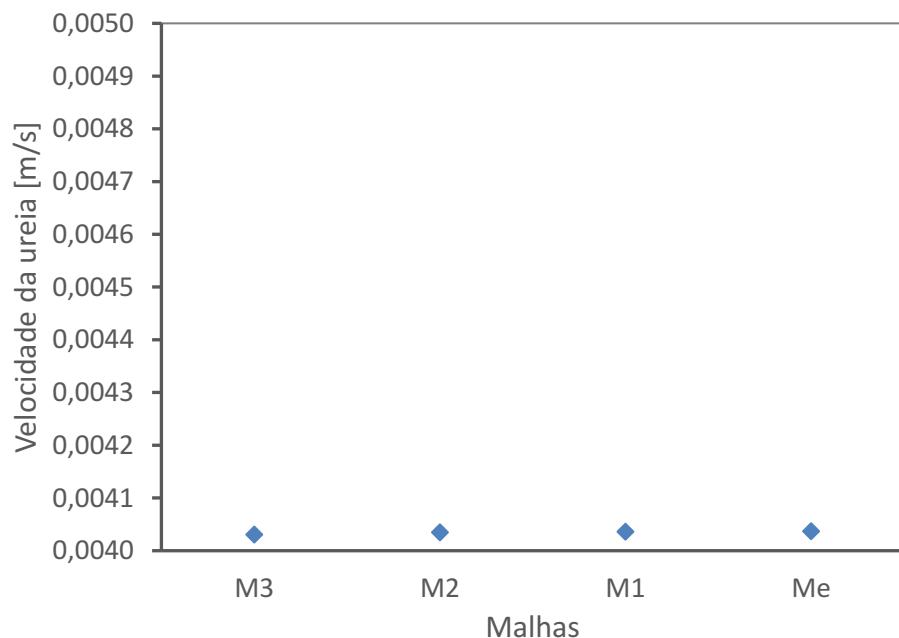


Figura 3.5: A velocidade da ureia na posição axial de 183,2 mm, para diferentes malhas.

As Figuras 4.6, 4.7 e 4.8 expressam os perfis de velocidade da ureia nas três posições axiais: 20 mm, 101,6 mm, e 183,2 mm, para diferentes malhas, M_1 , M_2 , M_3 , em comparação com o resultado obtido para a malha extrapolada, M_e . Observa-se nas três figuras um perfil de velocidade bem ajustado. Para todas as malhas (M_1 , M_2 e M_3) verificam-se valores de velocidades próximos em relação à solução assintótica, obtida com a malha extrapolada. Além disso, pode-se constatar um decréscimo da velocidade da ureia com a posição Y , especialmente no intervalo $0,1 \leq Y \leq 0,115\text{mm}$, devido a resistência ao escoamento, imposta pelo meio poroso (membrana).

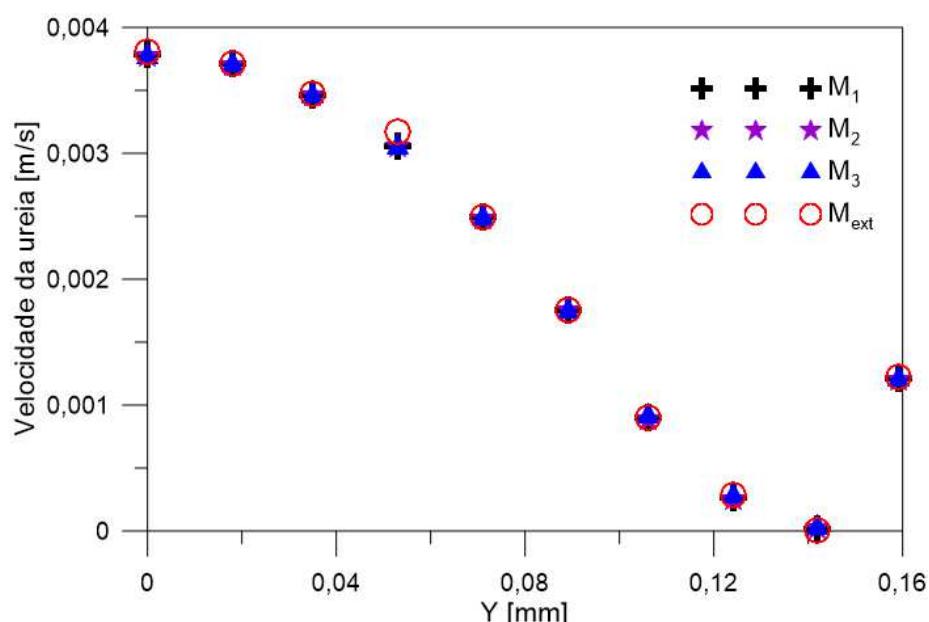


Figura 3.6: O perfil de velocidade da ureia na posição axial de 20 mm, para diferentes malhas.

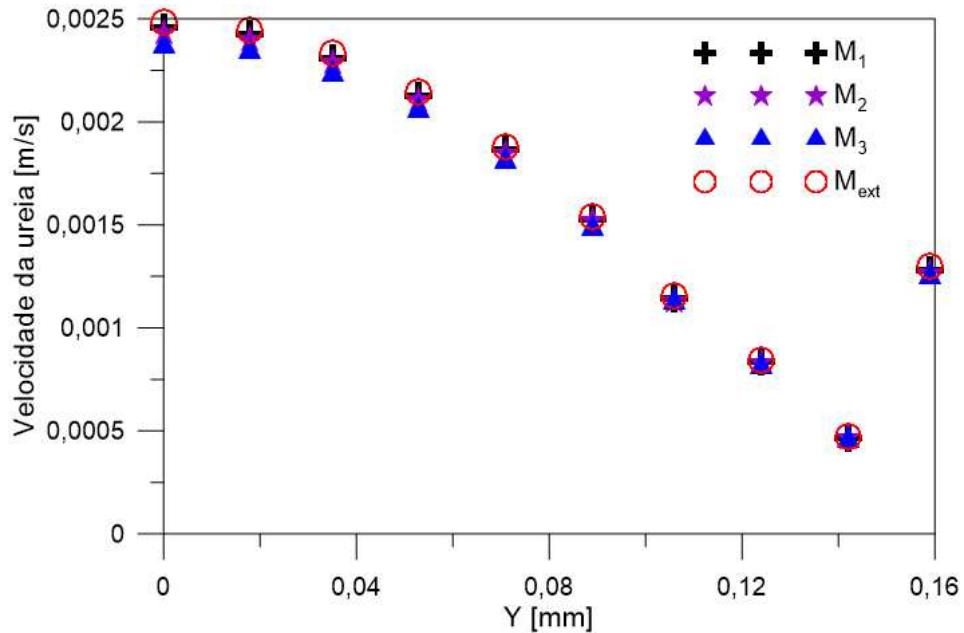


Figura 3.7: O perfil de velocidade da ureia na posição axial de 101,6 mm, para diferentes malhas.

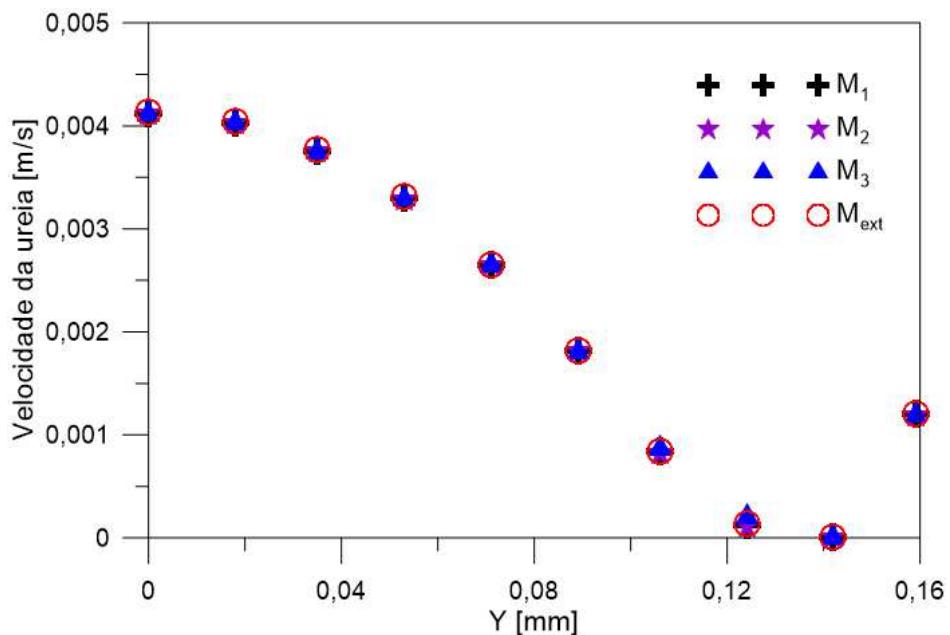


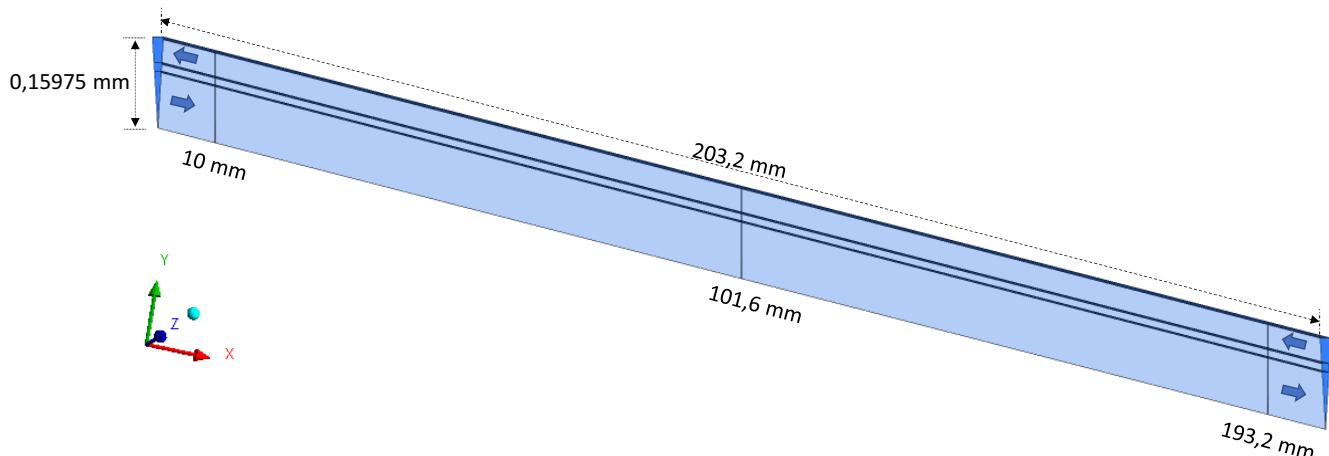
Figura 3.8: O perfil de velocidade da ureia na posição axial de 183,2 mm, para diferentes malhas.

A Tabela 4.2 resume o erro relativo médio em relação a malha extrapolada, para as três posições axiais x_1 , x_2 e x_3 . Observa-se um menor erro relativo médio para a malha mais refinada (M_1) em relação a malha extrapolada, apresentando os valores de 1,44%, 0,82% e 0,2%. Resultado semelhantes são observados para a malha M_2 , com erros relativos médios próximos aos obtidos para M_1 .

Tabela 3.2: Erro relativo em relação a malha extrapolada.

Malhas	Erro relativo médio [%]		
	x ₁ (20 mm)	x ₂ (101,6 mm)	x ₃ (183,2 mm)
M1	1,44	0,82	0,2
M2	2,04	1,66	0,36
M3	1,50	3,86	0,59

Para garantir a qualidade (convergência) das malhas analisadas e auxiliar na tomada de decisão, avaliou-se, além da velocidade da ureia, mais uma variável hidrodinâmica: a pressão. Sendo assim, a pressão foi investigada utilizando o método do ICM, nas posições axiais, 10 mm, 101,6 mm, e 193,2 mm, conforme ilustrado na Figura 4.9.

**Figura 3.9:** Posições axiais das linhas de coleta de dados das variáveis de interesse (pressão).

Na Tabela 4.3, são apresentados os valores das pressões nas posições x₁, x₂ e x₃, bem como os parâmetros utilizados no método ICM. Observa-se que o parâmetro *c*, encontra-se no intervalo entre 0 e 1, indicando convergência monotônica, com solução dentro do intervalo assintótico, como esperado para $ICM_{32} \simeq r^p ICM_{21}$ (Roache, 1994). Os parâmetros ICM_{21} e ICM_{32} apresentam valores inferiores a 10%, estando dentro das especificações para soluções convergentes proposto por Celik & Karatekin (1997). Além disso, o ICM_{21} é menor que ICM_{32} , caracterizando a independência dos resultados com relação ao refinamento da malha. Comportamento análogo é observado para as outras duas posições axiais, x₂ e x₃.

Tabela 3.3: Parâmetros obtidos com o estudo do Índice de Convergência de Malha para a pressão como variável de análise ($y=0,159$ mm).

Parâmetro		Posição axial		
		x_1 (10 mm)	x_2 (101,6 mm)	x_3 (193,2 mm)
Pressão [Pa]	Malha M ₁	188,42	135,71	80,58
	Malha M ₂	185,58	134,78	81,96
	Malha M ₃	177,54	132,85	87,39
	p	1,598	1,03	2,205
$\phi_{ext}^{21} = M_e$ [Pa]		190,81	137,14	79,88
ICM_{21}		$1,58 \times 10^{-2}$	$1,31 \times 10^{-2}$	$1,09 \times 10^{-2}$
ICM_{32}		$3,52 \times 10^{-2}$	$2,19 \times 10^{-2}$	$3,16 \times 10^{-2}$
c		0,35	0,483	0,252
$r^p ICM_{21}$		$3,47 \times 10^{-2}$	$2,17 \times 10^{-2}$	$3,22 \times 10^{-2}$

As Figuras 4.10, 4.11 e 4.12 apresentam o comportamento da variável de interesse (pressão) em relação ao tamanho das malhas na determinação do ICM, em $y = 0,159$ mm.

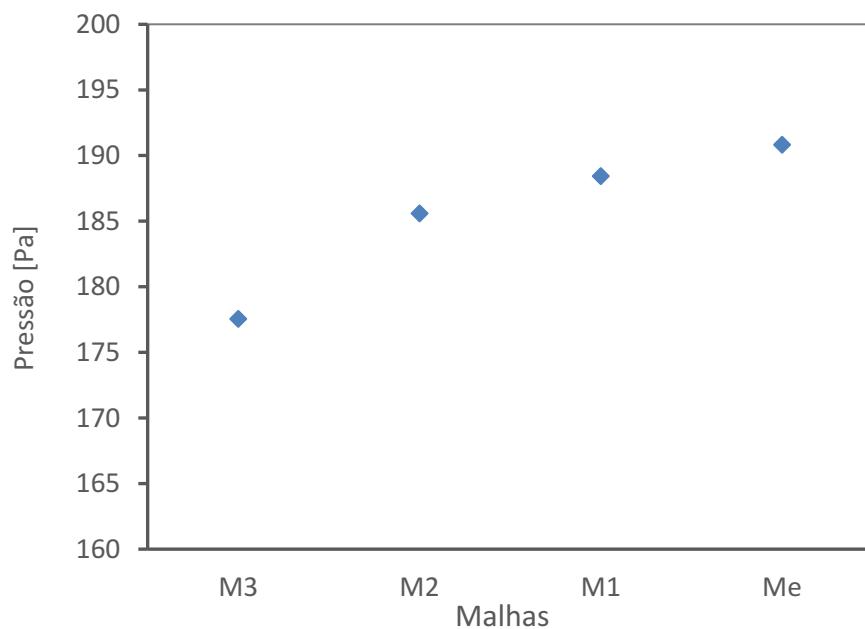


Figura 3.10: A Pressão local na posição axial de 10 mm, para diferentes malhas.

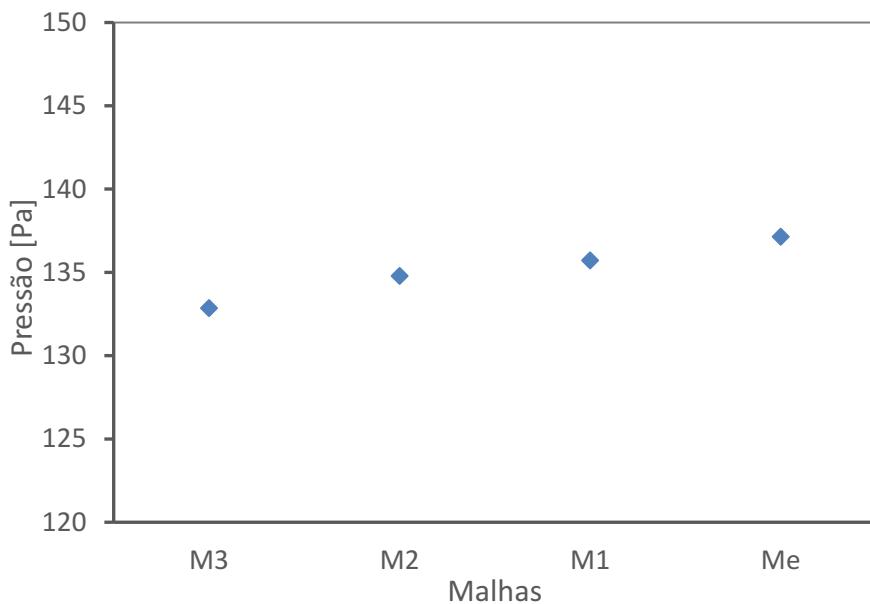


Figura 3.11: A Pressão local na posição axial de 101,6 mm, para diferentes malhas.

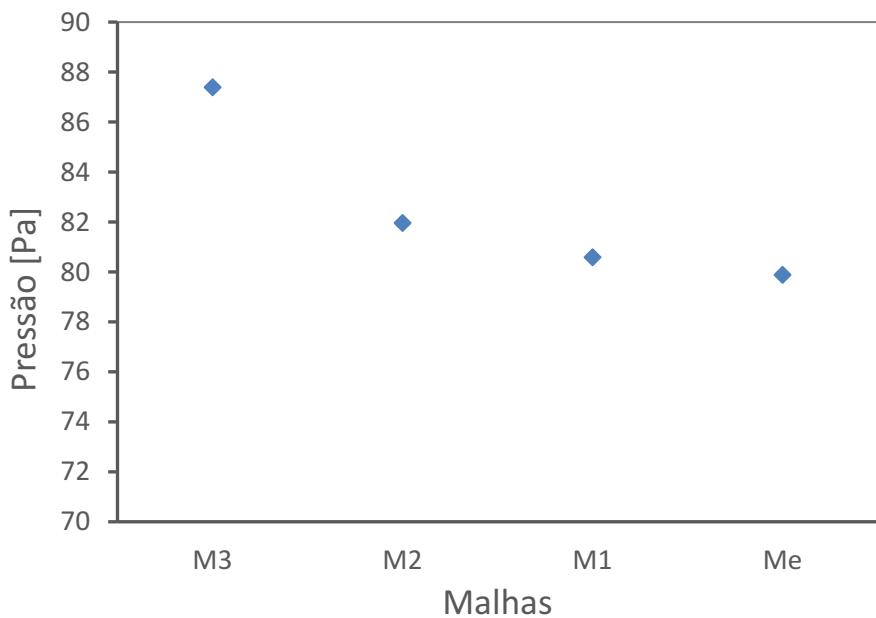


Figura 3.12: A Pressão local na posição axial de 193,2 mm, para diferentes malhas.

Nas Figuras 4.10, 4.11 e 4.12 observar-se que as malhas, M₁ M₂ e M₃, apresentam valores de pressão próximos, especialmente as malhas M₁ e M₂, com uma diferença de pressão de apenas 2,83 Pa na posição x₁, 0,93 Pa na posição x₂ e 1,37 Pa na posição x₃. Esse comportamento indica que as soluções obtidas com as malhas analisadas se aproximam da solução extrapolada. Além disso, verifica-se um comportamento decrescente na Figura 4.12, inverso ao observado para as Figura 4.10 e 4.11. Isso ocorre devido à proximidade da posição x₃ com a alimentação de dialisato.

As Figuras 4.13, 4.14 e 4.15 expressam os perfis de pressão nas três posições axiais x_1 , x_2 e x_3 , na posição $y = 0.159$ m, para diferentes tamanhos de malha, M_1 , M_2 , M_3 , em comparação com o resultado obtido para a malha extrapolada, M_e . Nestas figuras evidenciam-se a boa aproximação das soluções obtidas com as malhas M_1 , M_2 e M_3 , com aquelas obtidas com soluções assintóticas (M_e). Esse comportamento indica que as soluções obtidas se aproximam da solução extrapolada. Como os fluxos de fluidos estão em contracorrente, verifica-se valores de pressões mais elevadas nas regiões próximas às entradas do lúmen e do casco.

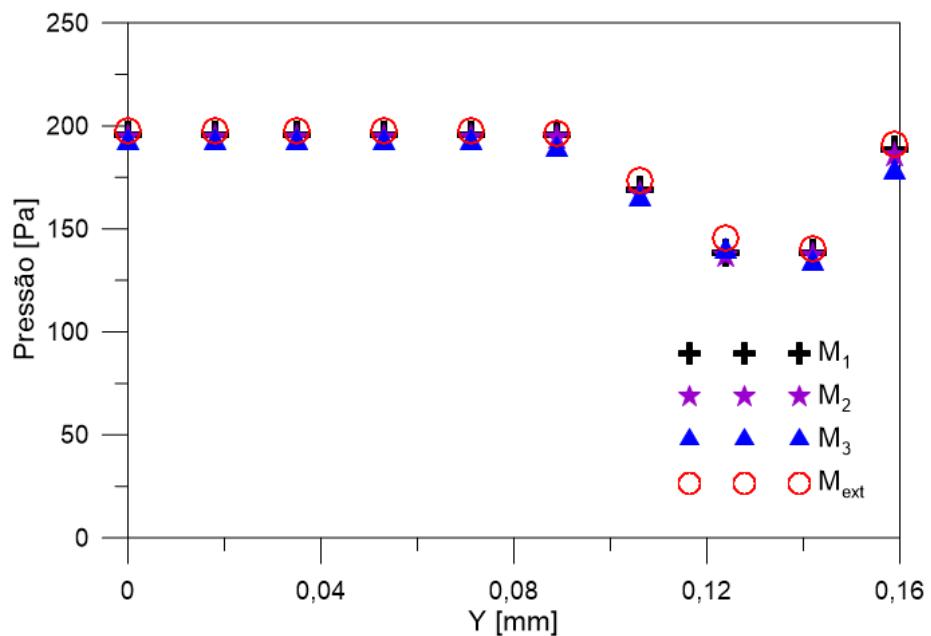


Figura 3.13: O perfil de pressão na posição axial de 10 mm, para diferentes malhas.

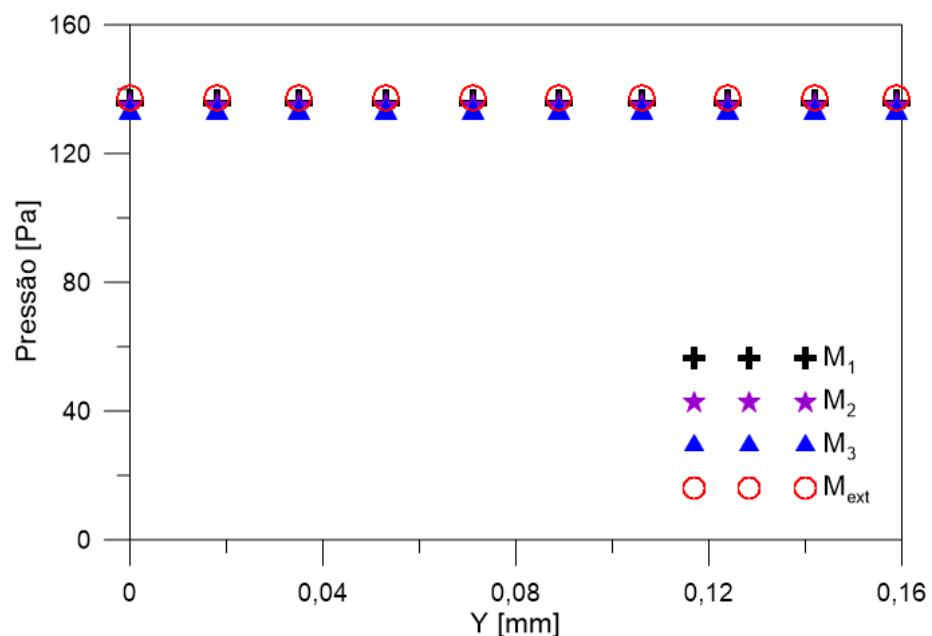


Figura 3.14: O perfil de pressão na posição axial de 101,6 mm, para diferentes malhas.

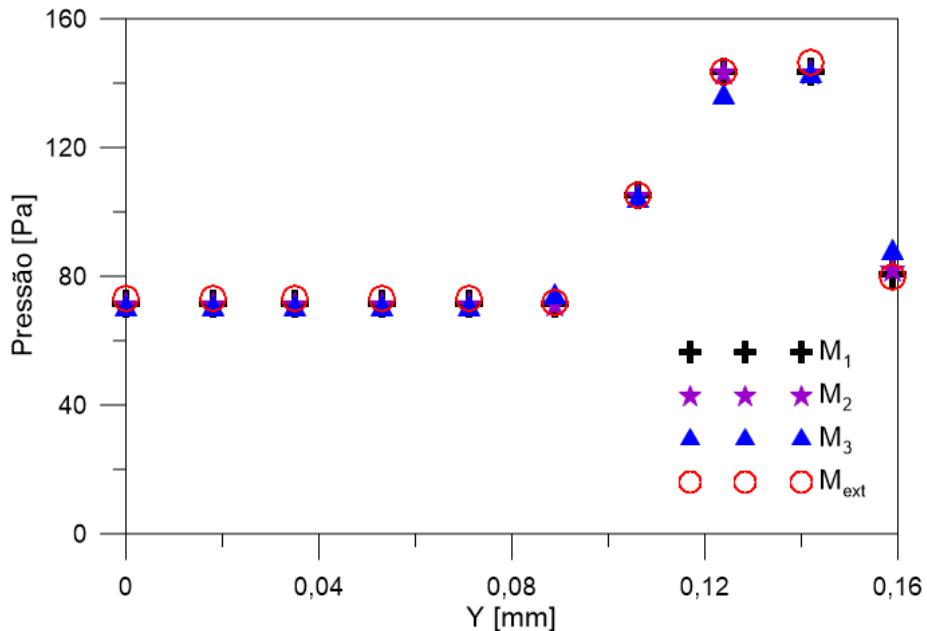


Figura 3.15: O perfil de pressão na posição axial de 193,2 mm, para diferentes malhas.

A Tabela 4.4 ilustra o erro relativo médio em relação a malha extrapolada, para as três posições axiais: 10 mm, 101,6 mm e 193,2 mm, além do tempo de simulação para as malhas M₁, M₂ e M₃. Corroborando com os resultados apresentados nas Figura 4.13, 4.14 e 4.15, observa-se que a malha M₁ apresenta o menor erro relativo médio em relação a malha extrapolada, com valores inferiores a 2%, nas três posições analisadas, resultado semelhante é observado para a malha M₂, que apresenta erros relativos médios próximos aos valores obtidos para M₁. Contudo, a Malha M₂ apresenta um menor esforço computacional, com o tempo de simulação reduzido em comparação ao observado para a malha M₁, além de soluções independentes do tamanho dos elementos. Sendo, portanto, a melhor opção para as simulações subsequentes.

Tabela 3.4: Erro relativo em relação a malha extrapolada.

Malhas	Erro relativo médio [%]			Tempo de simulação, t
	X ₁ (10 mm)	X ₂ (101,6 mm)	X ₃ (193,2 mm)	
M ₁	1,46	1,04	1,17	4d 15h 44'
M ₂	2,30	1,72	1,56	2d 22h 51'
M ₃	4,00	3,13	1,90	12h 46'

4.2 Análise da membrana de fibra-oca

4.2.1 Clearance

Parâmetro representativo do fluxo volumétrico de ureia removido da corrente sanguínea, o *clearance* foi utilizado para validação da modelagem matemática desenvolvida, sendo calculado pela Equação 2.9. A Tabela 4.5 resume os parâmetros estatísticos da Equação 3.16.

Tabela 3.5: Parâmetros estatísticos da Equação 3.16 obtidos após ajuste aos dados preditos do *clearance*.

Parâmetro		R^2
a (mL/min)	b (mL/min)	
-10,19	559,54	0,84

Na Figura 4.16 ilustra o comportamento do *clearance* em função da resistência viscosa radial da membrana obtidos nos casos 04 a 08. Observa-se que o *clearance* diminui com o aumento da resistência viscosa, uma vez que, a permeação através da membrana no modelo matemático utilizado é controlada pela atuação da resistência viscosa, responsável por regular o transporte de partículas no domínio poroso. Portanto, ao se aumentar a resistência viscosa verifica-se a diminuição do fluxo através da membrana e, consequentemente, a redução da taxa de remoção de ureia na corrente sanguínea.

A Tabela 4.6 resume o comparativo entre o melhor resultado obtido para o *clearance* nas simulações no processo de ajuste por tentativa e erro (Caso 9) e os dados experimentais e numéricos disponibilizados por Liao *et al.* (2003), sob as mesmas condições operacionais.

Tabela 3.6: Comparaçao entre resultados obtidos e os disponibilizados na literatura.

Caso	Resistência viscosa radial, $1/\alpha_y [m^{-2}]$	Clearance [ml/min]				
		Simulação	Experimental (Liao <i>et al.</i> , 2003)	Erro	Numérico (Liao <i>et al.</i> , 2003)	Erro
09	$2,15 \times 10^{14}$	235,18	$235 \pm 7,4$	0,08%	220	6,81%

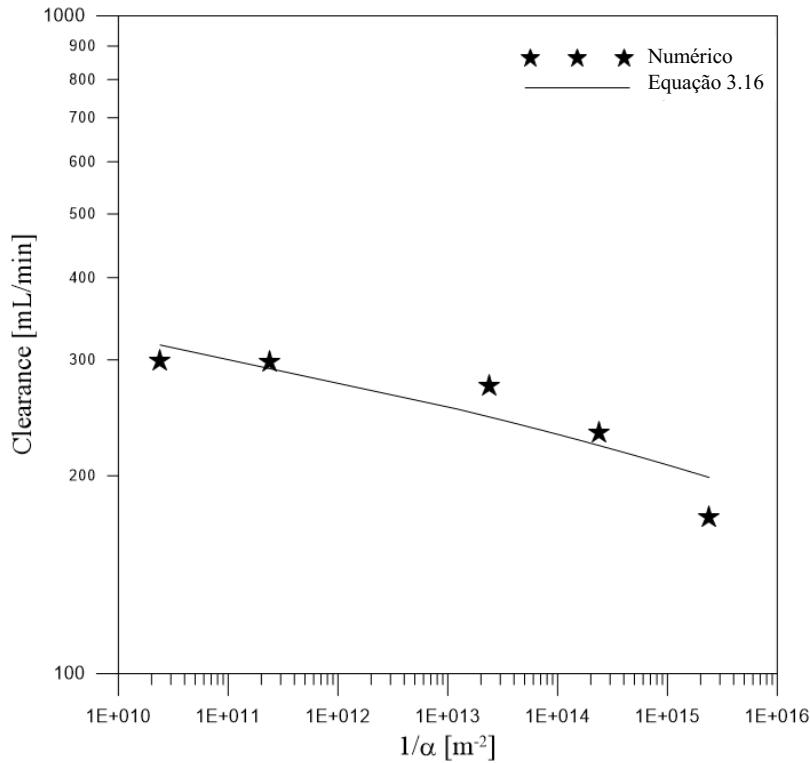


Figura 3.16: O *clearance* em função da resistência viscosa da membrana.

Ao analisar a Tabela 4.6 verifica-se que o *clearance* obtido após sucessivas simulações, apresenta um valor próximo do resultado experimental reportado por Liao *et al.* (2003), com erro de apenas 0,08%. Por outro lado, ao comparar o *clearance* simulado com os dados numéricos dos autores, o erro é elevado para 6,81%. Possivelmente isso acontece devido a diferença de abordagem dos dois modelos. Liao *et al.* (2003) utiliza uma metodologia baseada no acoplamento dos fluxos dos domínios (casco, lúmen e membrana), considerando o domínio casco como uma zona porosa, com as equações de Darcy sendo aplicadas para predizer o fluxo do lado do casco, as equações de Navier-Stokes para simular o fluxo do lado do lúmen, e as equações de Kedem-Katchalsky para calcular o fluxo transmembrana. Já o presente trabalho, utiliza uma abordagem multifásica Euleriana-Euleriana para todos os domínios, utilizando as equações de Navier-Stokes com uma resistência extra incorporada a equação de momento linear para predizer o escoamento no domínio poroso, sendo, portanto, um modelo mais robusto e preciso.

4.2.2 Fração volumétrica

A Figura 4.17 mostra o campo de fração volumétrica da ureia no plano XY em $Z = 0$, para diferentes tempos, 500, 1000, 1500, 2000 e 2500 s, para o caso 9. Analisando esta figura, observa-se que o fluido demora aproximadamente de 2500 segundos para percorrer a totalidade da fibra-oca, com maiores concentrações de ureia, como previsto, nas proximidades da região de entrada do lúmen. Na membrana, é possível constatar a permeação axial da ureia devido a característica do meio poroso anisotrópico, com resistência viscosa axial menor do que a radial (Figuras 4.17 a, b e c), entretanto, esse comportamento não se mantém para valores de t superiores a 1500 s, devido a aproximação do fluxo com a entrada em contracorrente de dialisato.

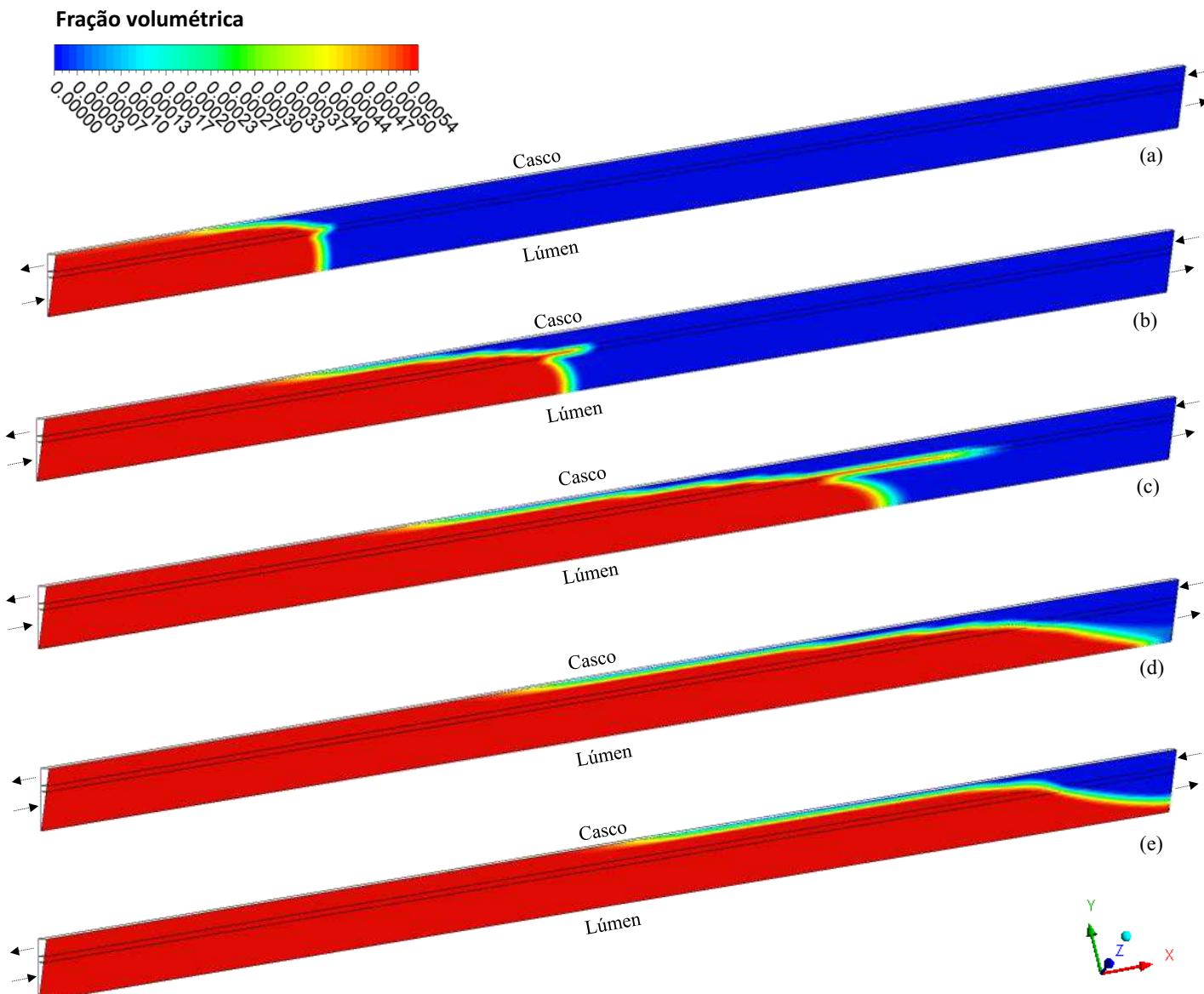


Figura 3.17: Fração volumétrica da ureia no plano XY, em diferentes tempos: (a) 500s, (b) 1000 s, (c) 1500 s, (d) 2000 s, e (e) 2500 s.

A Figura 4.18 apresenta o campo de fração volumétrica da ureia nos domínios: casco, membrana porosa e lúmen, no plano XY em $Z = 0$, no tempo t igual a 6200 s, para o caso 9. Observa-se a diminuição da fração volumétrica da ureia no final da região de escoamento do sangue e no início da região de escoamento do dialisato. Esse comportamento está associado ao fluxo em contracorrente e as características do meio poroso, que propiciam a permeação do soluto, com maiores concentrações de ureia na alimentação e na saída de dialisato.

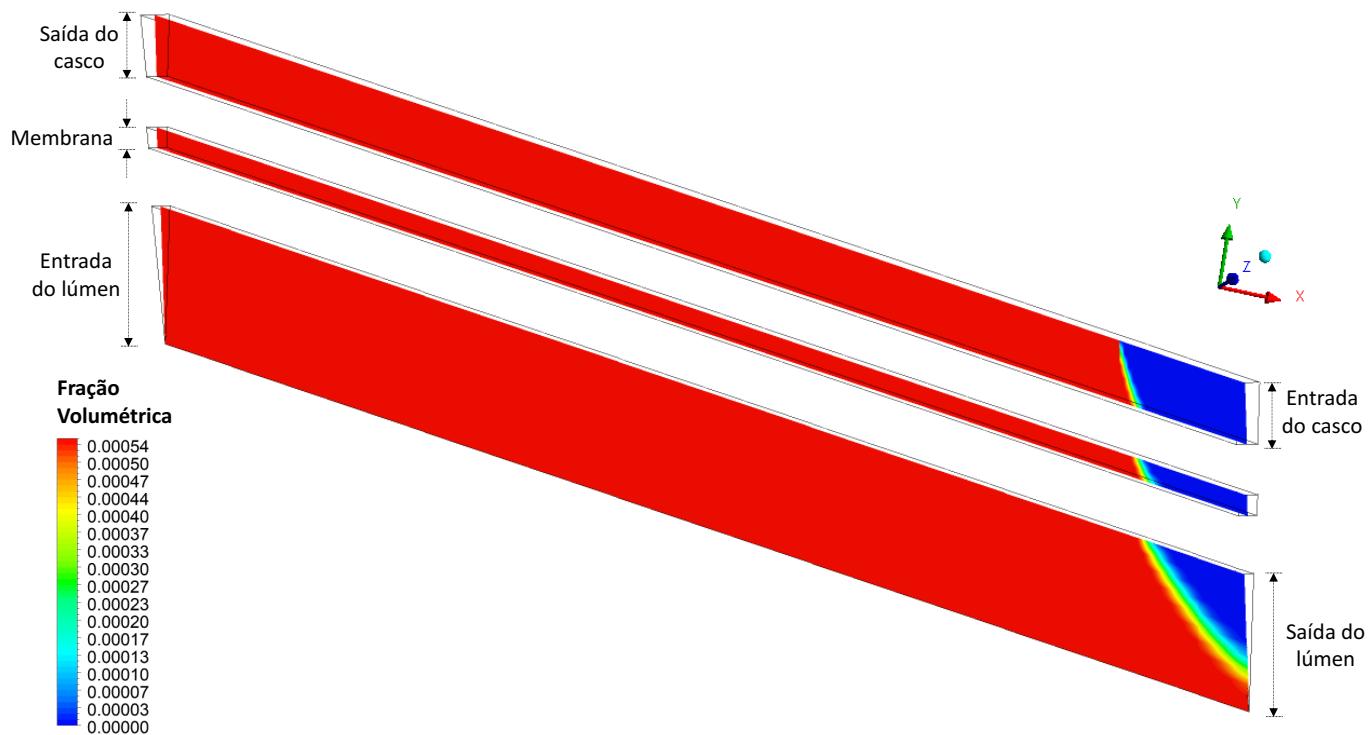


Figura 3.18: Fração volumétrica da ureia no plano XY.

A Figura 4.19 expressa o perfil de fração volumétrica da ureia em três posições axiais, 20 mm, 101,6 mm e 183,2 mm, no interior do domínio poroso, em t igual a 6200 s. Observa-se um perfil de fração volumétrica praticamente constante nas posições axiais de 20 mm e 101,6 mm, e um comportamento decrescente com a posição radial, na posição de 183,2 mm, justamente devido à proximidade com a entrada de dialisato em contracorrente.

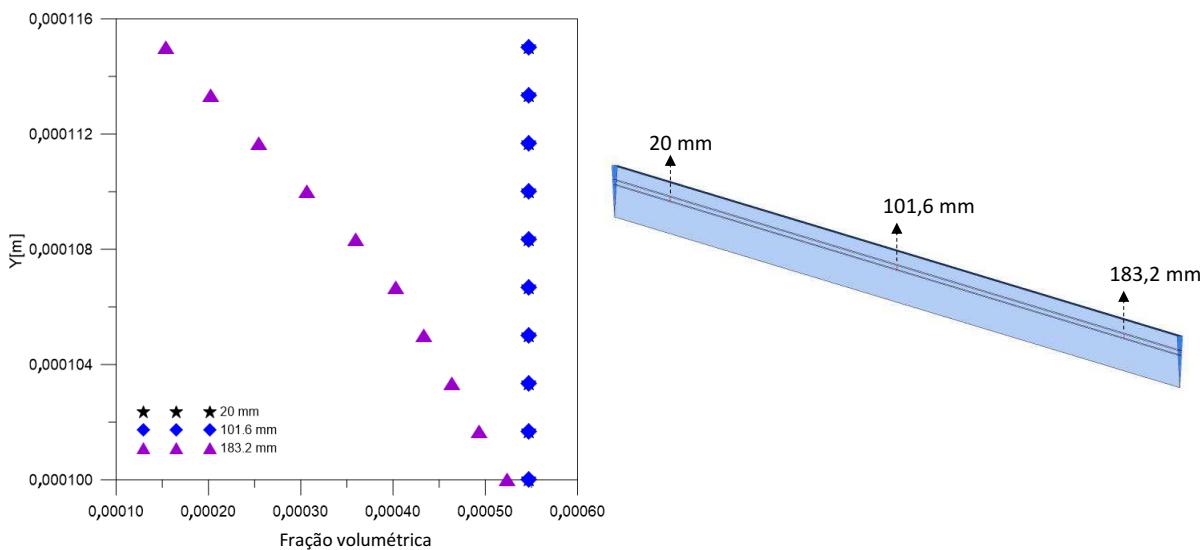


Figura 3.19: Perfil da fração volumétrica da ureia no interior da membrana, nas posições axiais de 20 mm, 101,6 mm e 183,2 mm, em $t = 6200$ s (Caso 9).

4.2.3 Campos de velocidade e pressão

A Figura 4.20 ilustra o campo de velocidade local da ureia nos domínios: casco, lúmen, e membrana porosa, no plano XY em $Z = 0$, no tempo t igual a 6200 s, para o caso 9. Após análise da Figura 4.20, podem-se observar maiores velocidades locais de ureia nas seções de entrada e saída do lúmen, e na região de saída do casco. Os fluxos em contracorrente, através de uma membrana com baixa resistência ao escoamento, e a força de arraste, auxiliam o transporte do soluto, provocando maiores frações volumétricas de ureia nas regiões de elevada velocidade. Além disso, pode-se constatar variações de velocidade no interior do meio poroso, associado a membrana anisotrópica, com resistência viscosa axial ($7,75 \times 10^8 m^{-2}$) superior a resistência viscosa radial ($2,15 \times 10^{14} m^{-2}$), propiciando maior permeação a longo da membrana. É importante notar que as escalas de valores na legenda são diferentes.

A Figura 4.21 apresenta o perfil de velocidade da ureia em três posições axiais, 20 mm, 101,6 mm e 183,2 mm, no interior do domínio poroso, em t igual a 6200 s. Analisando esta figura, observa-se que a velocidade da ureia decresce com o aumento da posição radial, devido à resistência imposta ao escoamento pela membrana. Além disso, verifica-se um comportamento semelhante nas três posições analisadas, com maior gradiente de velocidade na posição axial de 183,2 mm.

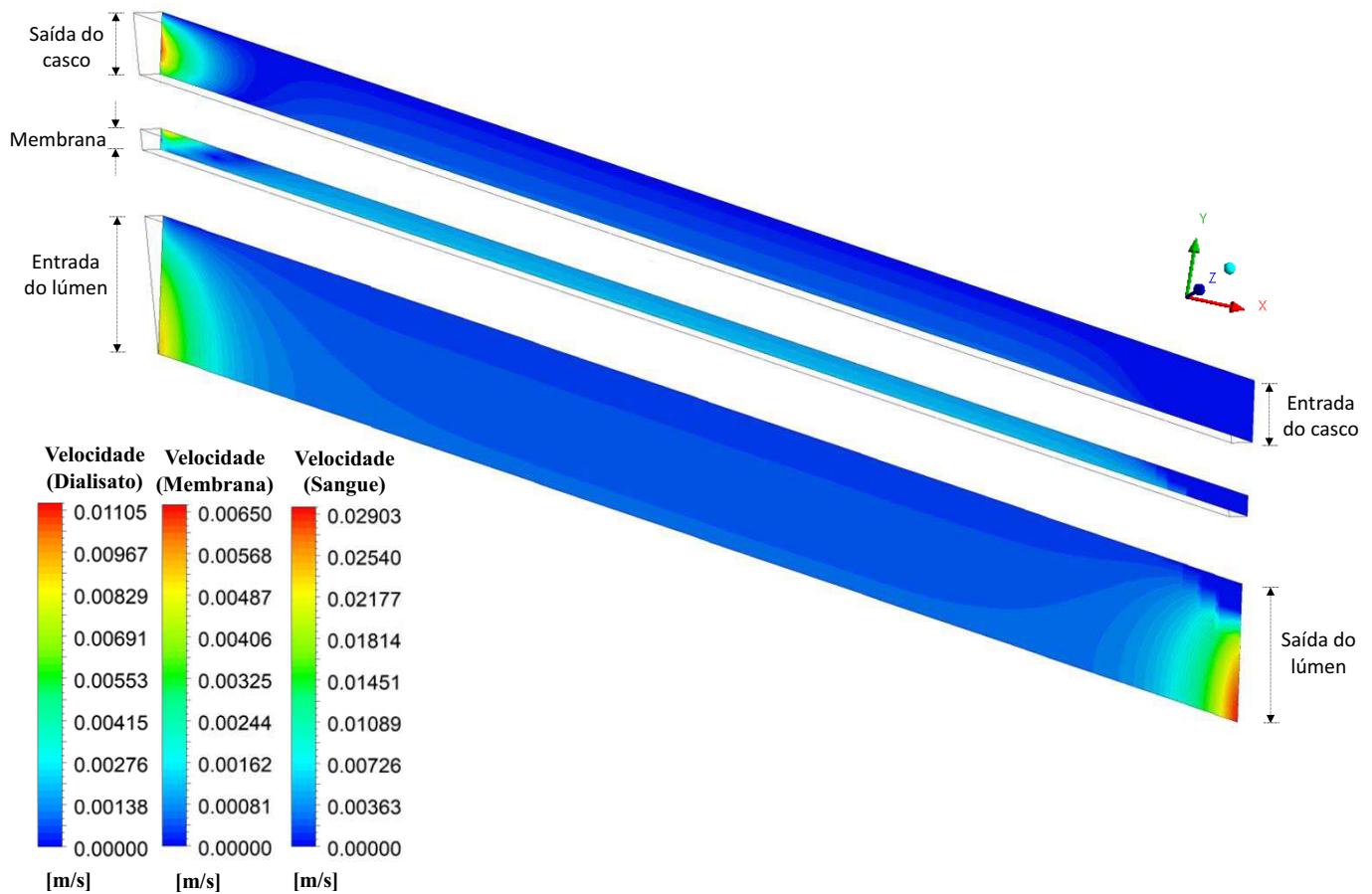


Figura 3.20: Campo de velocidade local da ureia no plano XY.

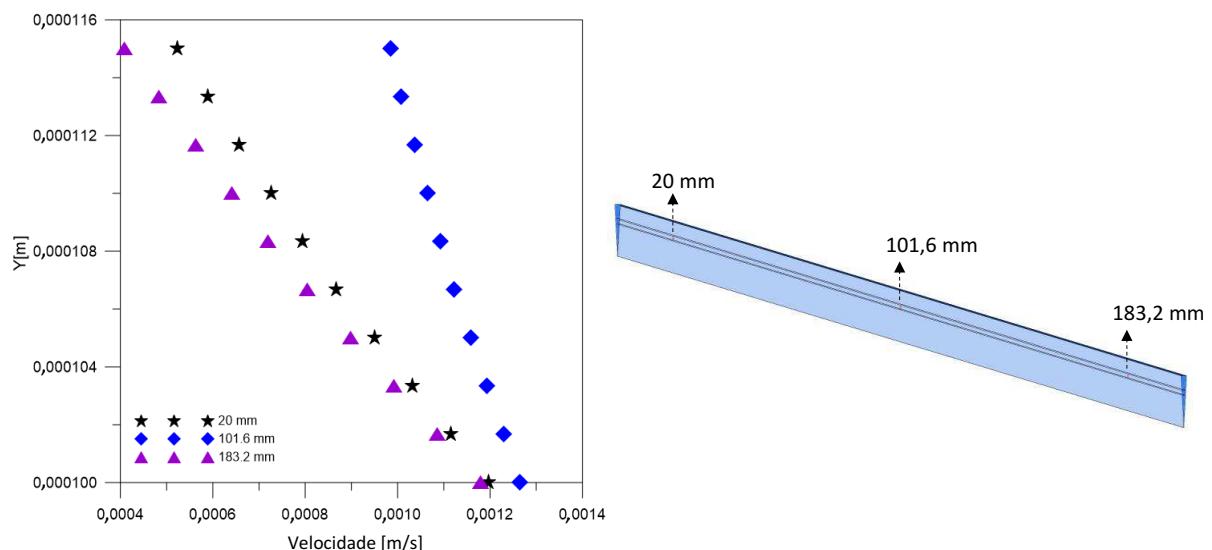


Figura 3.21: Perfil de velocidade da ureia no interior da membrana, nas posições axiais de 20 mm, 101,6 mm e 183,2 mm, em $t = 6200$ s (Caso 9).

A Figura 4.22 apresenta o campo de pressão in interior dos domínios: casco, lúmen, e membrana porosa, no plano XY em $Z = 0$, em tempo t igual a 6200 s, para o caso 9.

Analizando esta figura, observa-se pressões elevadas nas regiões de entrada dos domínios, devido ao fluxo nesses locais, apresentando um maior gradiente de pressão na região do casco. Essa distribuição de pressão no interior do equipamento também está associada ao rígido controle das condições de saída do dialisador. As altas pressões nas entradas auxiliando no transporte convectivo de soluto em direção a membrana, especialmente na região próximo a entrada do lúmen, bem como no surgimento de uma possível retrofiltração nas proximidades da saída do lúmen.

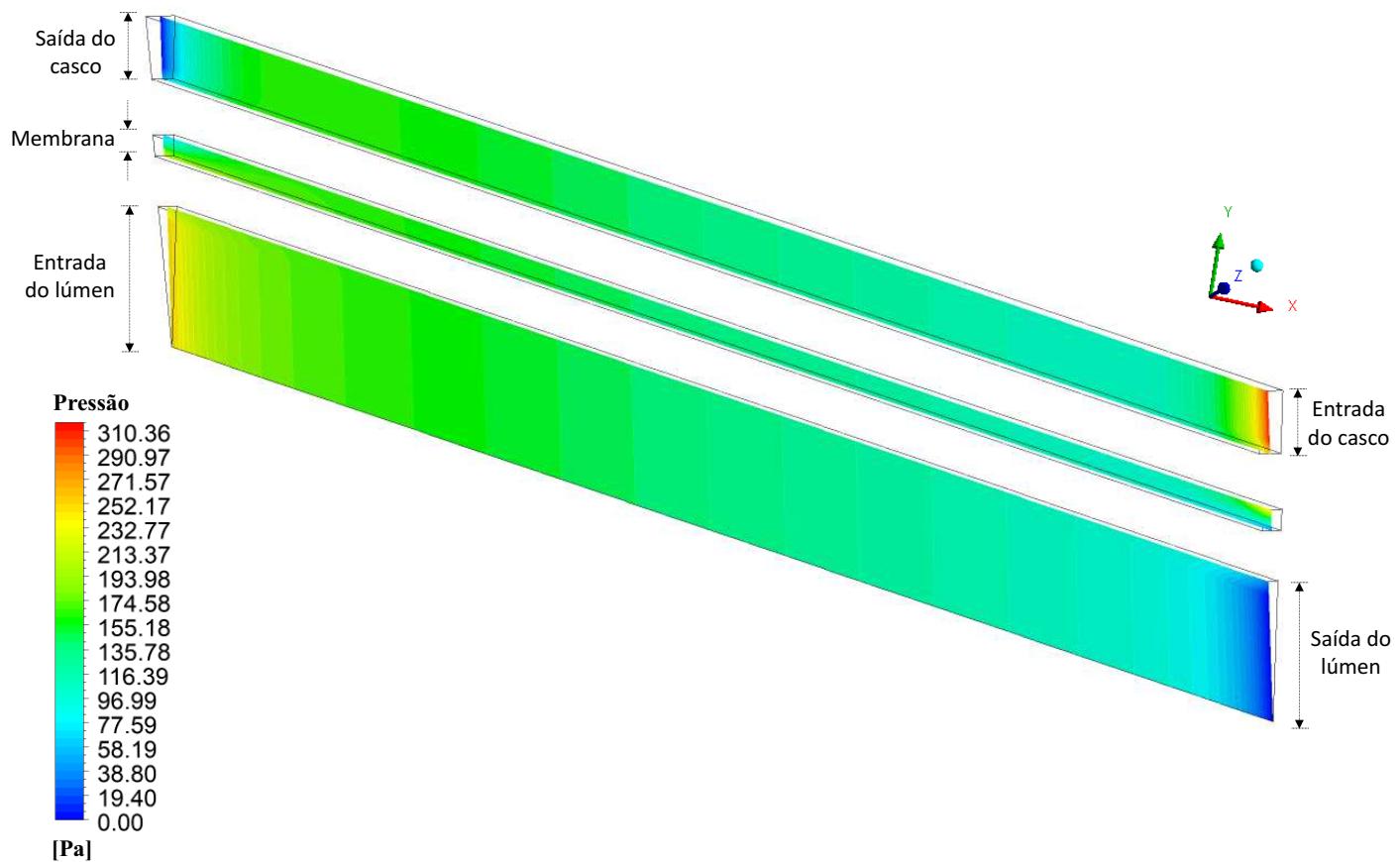


Figura 3.22: Campo de pressão no plano XY.

A Figura 4.23 mostra o perfil de pressão em três posições axiais, 20 mm, 101,6 mm e 183,2 mm, no inteiro do domínio poroso, em t igual a 6200 s. Observa-se na posição axial igual a 20 mm, que a pressão decresce com o aumento da posição radial, comportamento oposto ao verificado na posição de 183,2 mm. Nessas regiões os gradientes de pressão são acentuados devido a influência das entradas e saídas do equipamento, conforme constatado nos campos de pressão (Figura 4.22). Observe que este comportamento oposto da pressão nas posições 20 e 183,2 mm provoca fluxo de fluido em direções opostas, do lúmen para o casco em $x=20$ mm e do casco para o lúmen em $x=183,2$ mm.

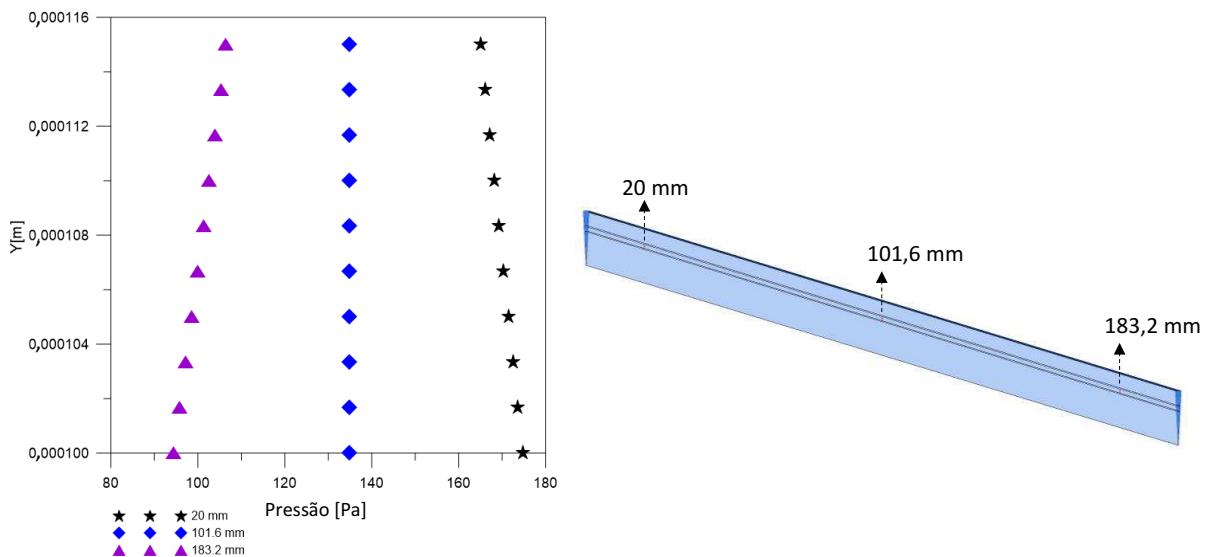


Figura 3.23: Perfil de pressão no interior da membrana, nas posições axiais de 20 mm, 101,6 mm e 183,2 mm, em $t = 6200$ s (Caso 9).

4.2.4 Linhas de Fluxo e vetores velocidade

A Figura 4.24 evidencia o comportamento da velocidade da ureia na forma de linhas de fluxo nos domínios: casco, lúmen, e membrana porosa, no plano XY em $Z = 0$, no tempo t igual a 6200 s, para o caso 9. Observa-se, pela velocidade da ureia na forma de linhas de fluxo, um comportamento análogo ao da Figura 4.20, com maior fluxo mássico na região próxima a entrada do lúmen. Além disso, é possível visualizar o arraste de partículas e permeação do soluto através da membrana, além da presença de retrofiltração.

A Figura 4.25 mostra os vetores velocidade da ureia na interface da membrana de fibra-oca na direção Y, para o caso 9. Pode-se observar uma maior permeação de ureia na primeira metade da membrana, reduzida ao longo do escoamento pela influência do fluxo de dialisato em contracorrente. A retrofiltração fica evidente ao se mostrar o campo de velocidade na forma de vetores. Além disso, verifica-se claramente o fluxo de fluido do lúmen para o casco, na região à esquerda do centro do domínio, e em oposto na região à direita. Esse comportamento é esperado para membranas de hemodiálise, conforme observado por Eloot (2004).

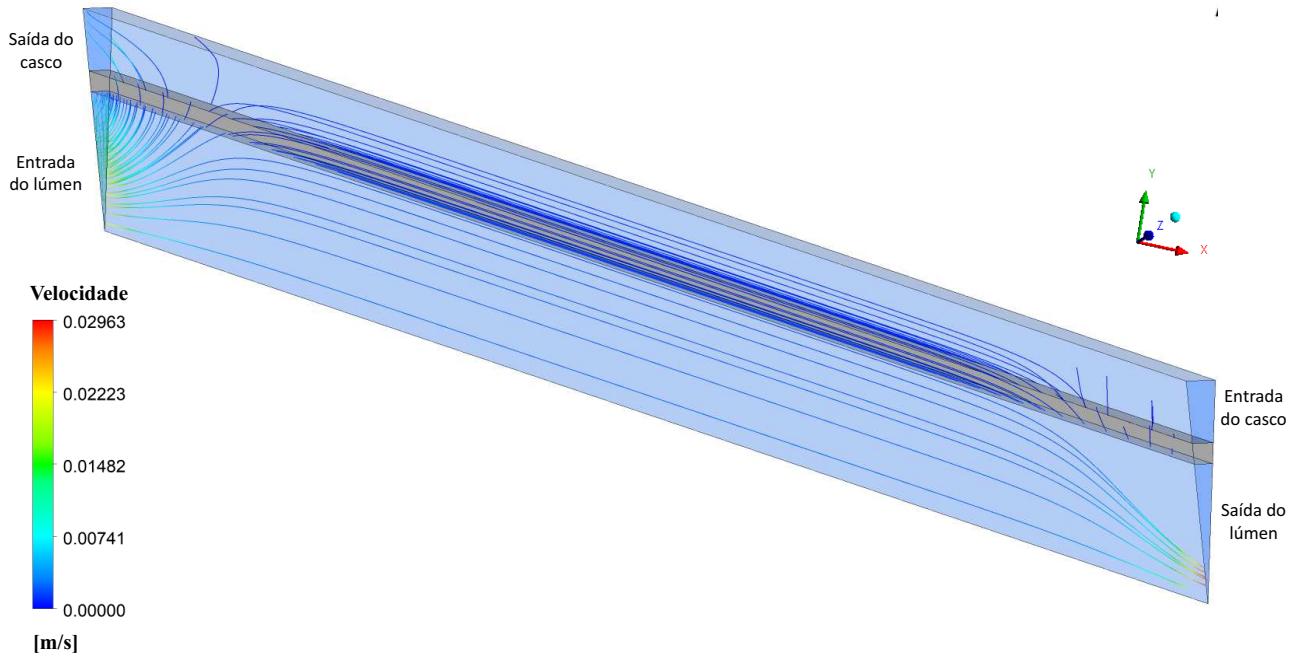


Figura 3.24: Linhas de fluxo da ureia.

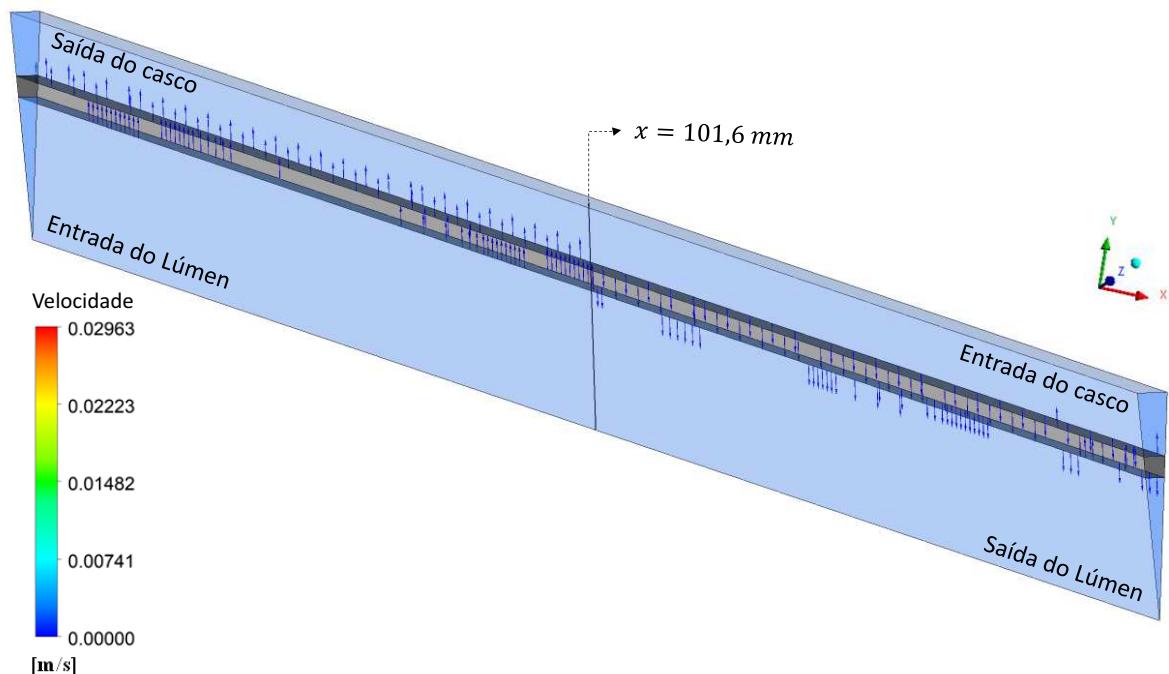


Figura 3.25: Vetores radiais de velocidade da ureia na interface da membrana de fibra-oca.

4.3 Análise do fluxo de alimentação

A Tabela 4.7 apresentam os resultados do *clearance* da ureia para diferentes fluxos de alimentação (casco e lúmen). Observa-se que o aumento do fluxo de alimentação do casco

ocasiona a elevação do *clearance*, ou seja, maior eliminação de ureia da corrente sanguíneo. A elevação do fluxo de dialisato provoca tanto a difusão de momento devido a elevação do gradiente de velocidade como o movimento global do fluido (convecção) possibilitando uma maior remoção de ureia do lúmen. Além disso, é possível constatar maior porcentagem de remoção de ureia para o caso 11, ao utilizar os fluxos de alimentação do lúmen de 300 ml/min e do casco de 400 ml/min, com remoção de aproximadamente 82,78% do contaminante (ureia). Por outro lado, como o fluxo de dialisato influencia diretamente a taxa de remoção do soluto, sua redução para valores inferiores ao fluxo de alimentação do lúmen, ocasiona com esperado o decaimento do *clearance*, devido a redução do gradiente de pressão e consequentemente da velocidade, que auxiliam o transporte do contaminante no interior do equipamento.

Tabela 3.7: *Clearance* da ureia para diferentes fluxos de alimentação.

Casos	Q_B [ml/min]	Q_D [ml/min]	<i>Clearance</i> [ml/min]	Porcentagem de remoção de ureia [%]
09	300	300	235,18	78,39
10	300	200	222,57	74,19
11	300	400	248,35	82,78
12	400	200	288,18	72,04
13	400	400	313,97	78,49
14	400	500	326,90	81,72

A Tabela 4.8 mostra o comparativo entre os resultados obtidos nas simulações e os disponibilizados na literatura. Ao comparar os resultados provenientes das simulações numéricas com os dados experimentais de Liao et al. (2003), verifica-se que, o caso 09 apresenta o menor erro percentual em relação aos dados experimentais (0,08%), diferentemente do observado para os casos 10 (13,56%) e 12 (35,93%), com erros percentuais superiores a 10%, ambos com fluxo de alimentação do casco de 200 ml/min. As demais simulações apresentaram resultados dentro da faixa de erro percentual esperado. As discrepâncias mostradas pelo erro percentual entre os dados numéricos e experimentais para baixo fluxo de dialisato possivelmente estão relacionadas as simplificações adotadas no modelo.

Tabela 3.8: Comparação entre o *clearance* da ureia (ml/min), obtido nas simulações numérica, com os dados experimentais disponibilizados na literatura.

Casos	Simulações	Experimental (Liao et al. 2003)	Erro
09	235,18	$235 \pm 7,4$	0,08%
10	222,57	$196 \pm 4,0$	13,56%
11	248,35	$267 \pm 6,2$	6,99%
12	288,18	$212 \pm 9,8$	35,93%
13	313,97	$294 \pm 5,0$	6,79%
14	326,90	$306 \pm 8,2$	6,83%

A Figura 4.26 expressa o perfil de fração volumétrica da ureia em função da posição radial, em X igual a 0,2 m, para os casos 9, 10, 11, 12, 13 e 14, em t igual a 6200 s. Observa-se que a fração volumétrica da ureia reduz com a posição radial em X igual a 0,2 m, devido a permeação do dialisato nas proximidades da região de entrada do casco e saída do lúmen. É possível constatar que os perfis de fração volumétrica de ureia para os casos 9 e 13 se sobrepõem, pois nesses dois casos os fluxos de alimentação no lúmen e no casco são iguais (300 ml/min no caso 9 e 400 ml/min no caso 13) produzindo o mesmo comportamento nessa região. Além disso, verifica-se que a fração volumétrica da ureia aumenta com a diminuição do fluxo de alimentação de dialisado nesta região, sendo uma condição local imposta pela retrofiltração.

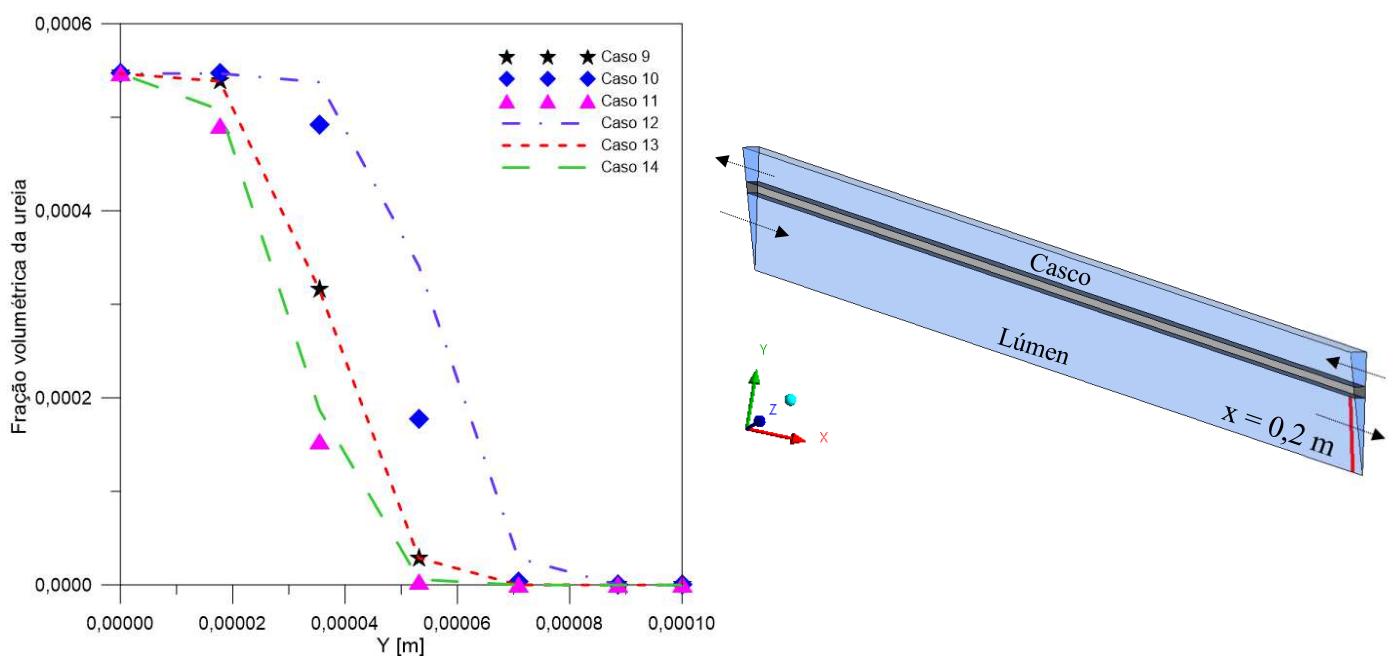


Figura 3.26: Perfil da fração volumétrica da ureia em função da posição radial, em X igual a 0,2 m.

As Figura 4.27 e 4.28 apresentam os campos de velocidade da ureia para diferentes fluxos de alimentação, referentes aos casos 9, 10, 11 (Figura 4.27), 12, 13 e 14 (Figura 4.28), no plano longitudinal XY, em t igual a 6200 s. Observa-se que o aumento do fluxo de dialisato ocasiona maiores velocidades na região de saída do lúmen, possivelmente devido ao aumento da permeação do dialisato nesta região na forma de retrofiltração para o lúmen, justificada pela elevação do fluxo de alimentação no casco, evidenciado especialmente na Figura 4.28.c, referente ao fluxo de alimentação de dialisato de 500 ml/min.

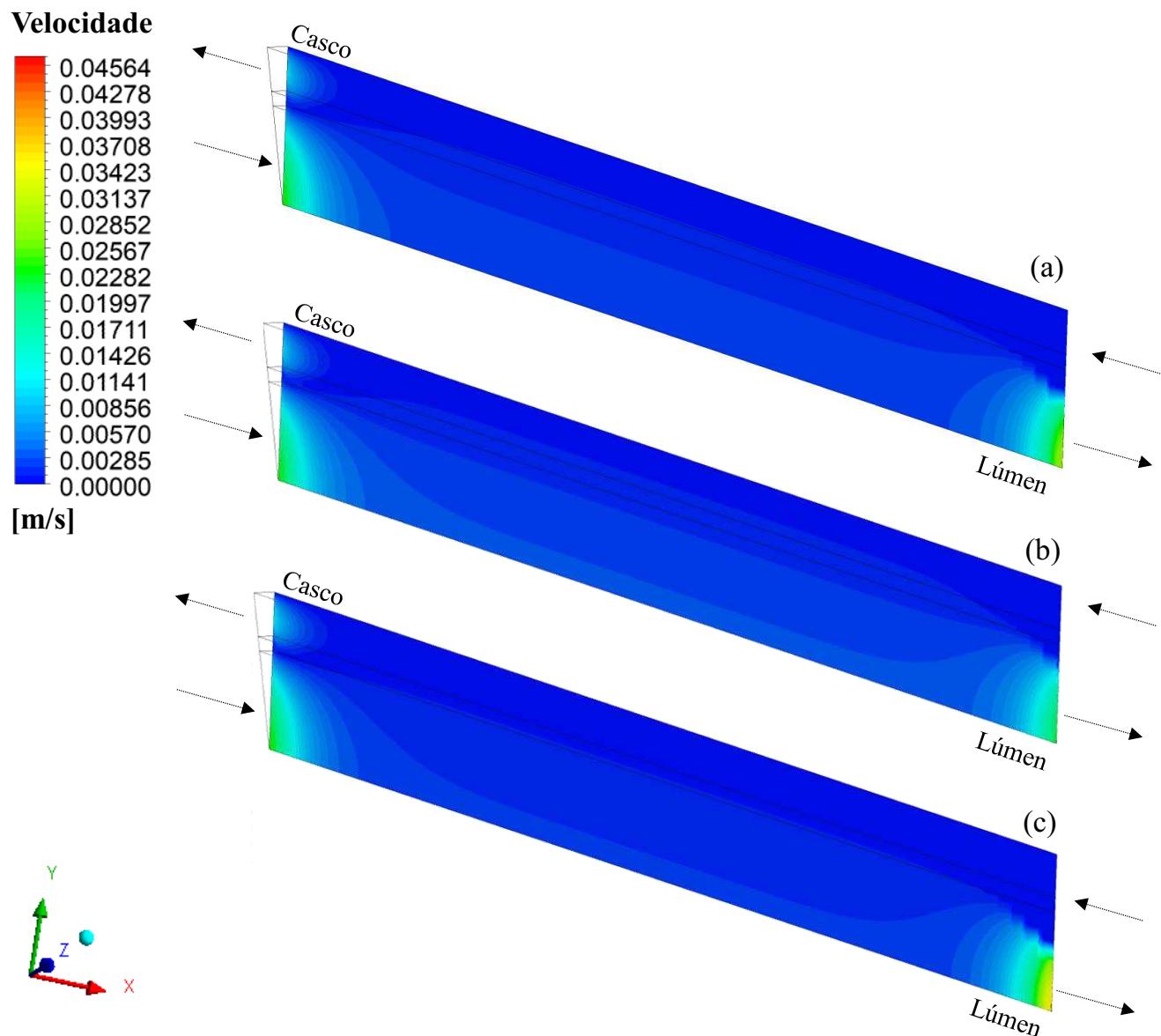


Figura 3.27: Campo de velocidade da ureia no plano XY: (a) caso 9, (b) caso 10, (c) caso 11.

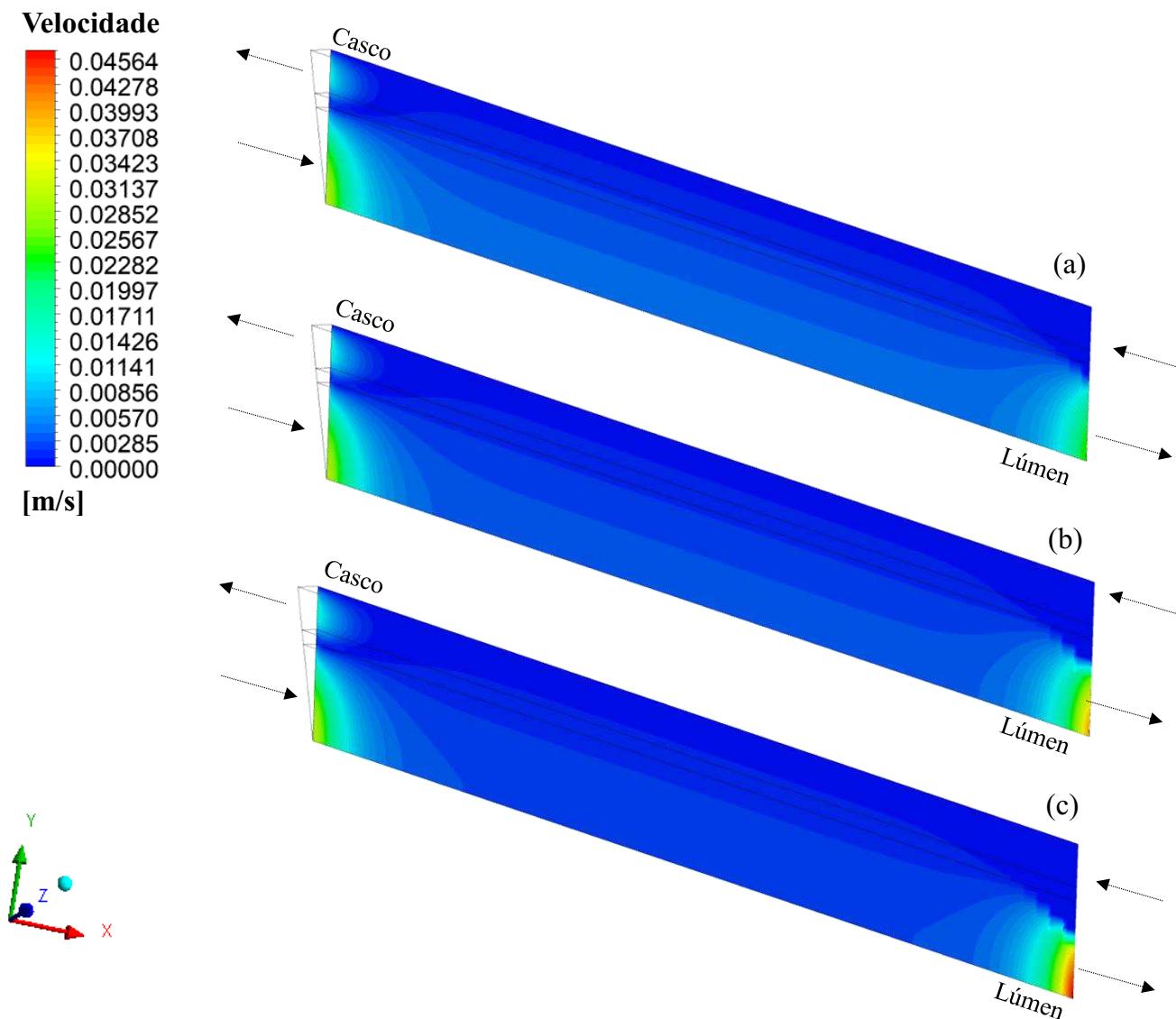


Figura 3.28: Campo de velocidade da ureia no plano XY: (a) caso 12, (b) caso 13, (c) caso 14.

As Figura 4.29 e 4.30 mostram os vetores velocidade normalizados da ureia para diferentes fluxos de alimentação na interface e no interior da membrana porosa, em t igual a 6200 s. O fluxo de alimentação do lúmen foi mantido constante em 300 ml/min nos casos 9, 10, 11 (Figura 4.29), e com 400 ml/min nos casos 12, 13 e 14 (Figura 4.30). Ao observar os vetores velocidade da ureia, o comportamento apresentado na Figura 4.27 é reafirmado, sendo possível visualizar uma pequena variação dos vetores na interface e no interior da membrana, especialmente próximo a região de entrada do dialisato e de saída do lúmen. Entretanto, pela normalização dos vetores não é possível visualizar a magnitude da velocidade.

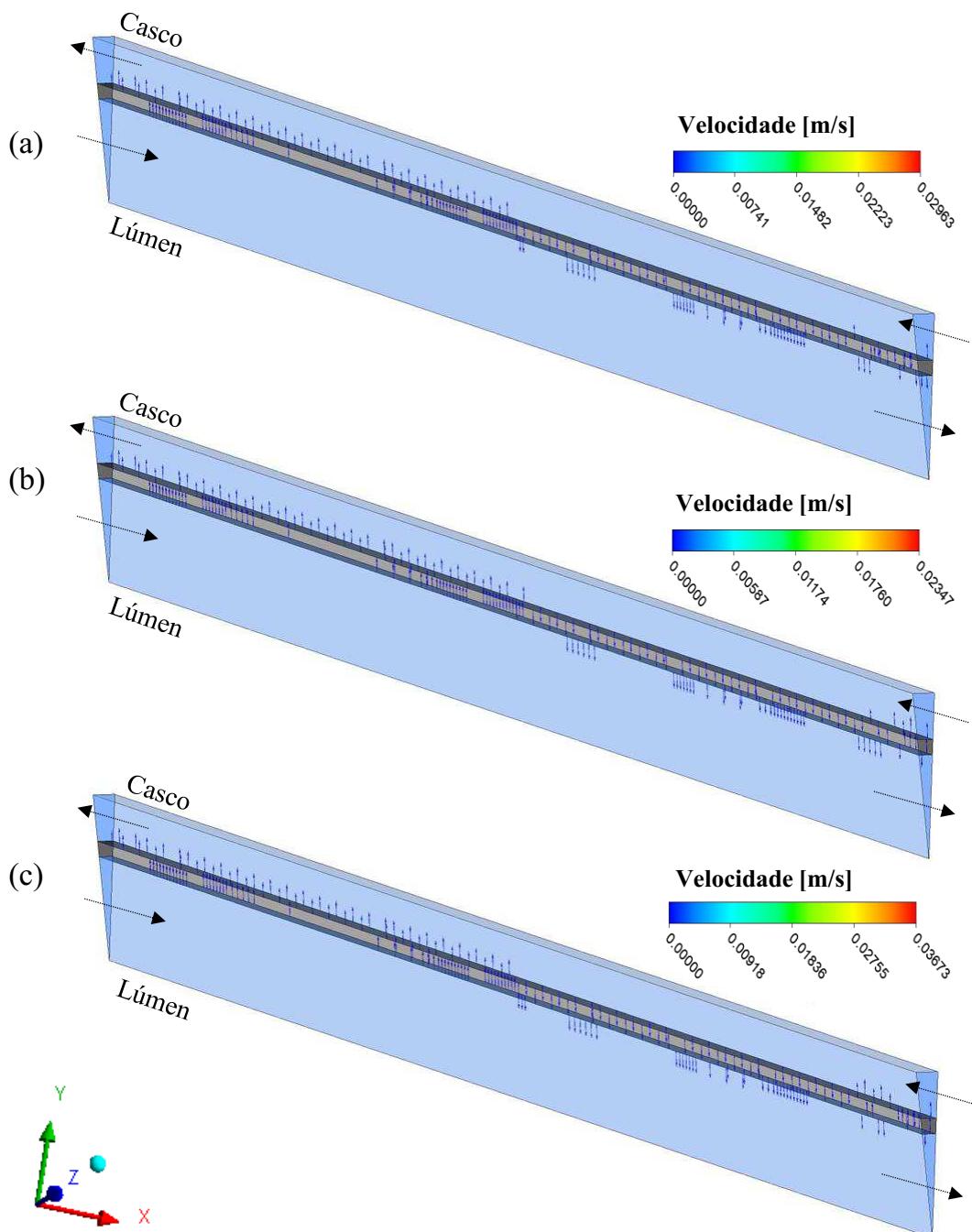


Figura 3.29: Vetores velocidade normalizados da ureia na interface e no interior da membrana: (a) caso 9, (b) caso 10, e (c) caso 11.

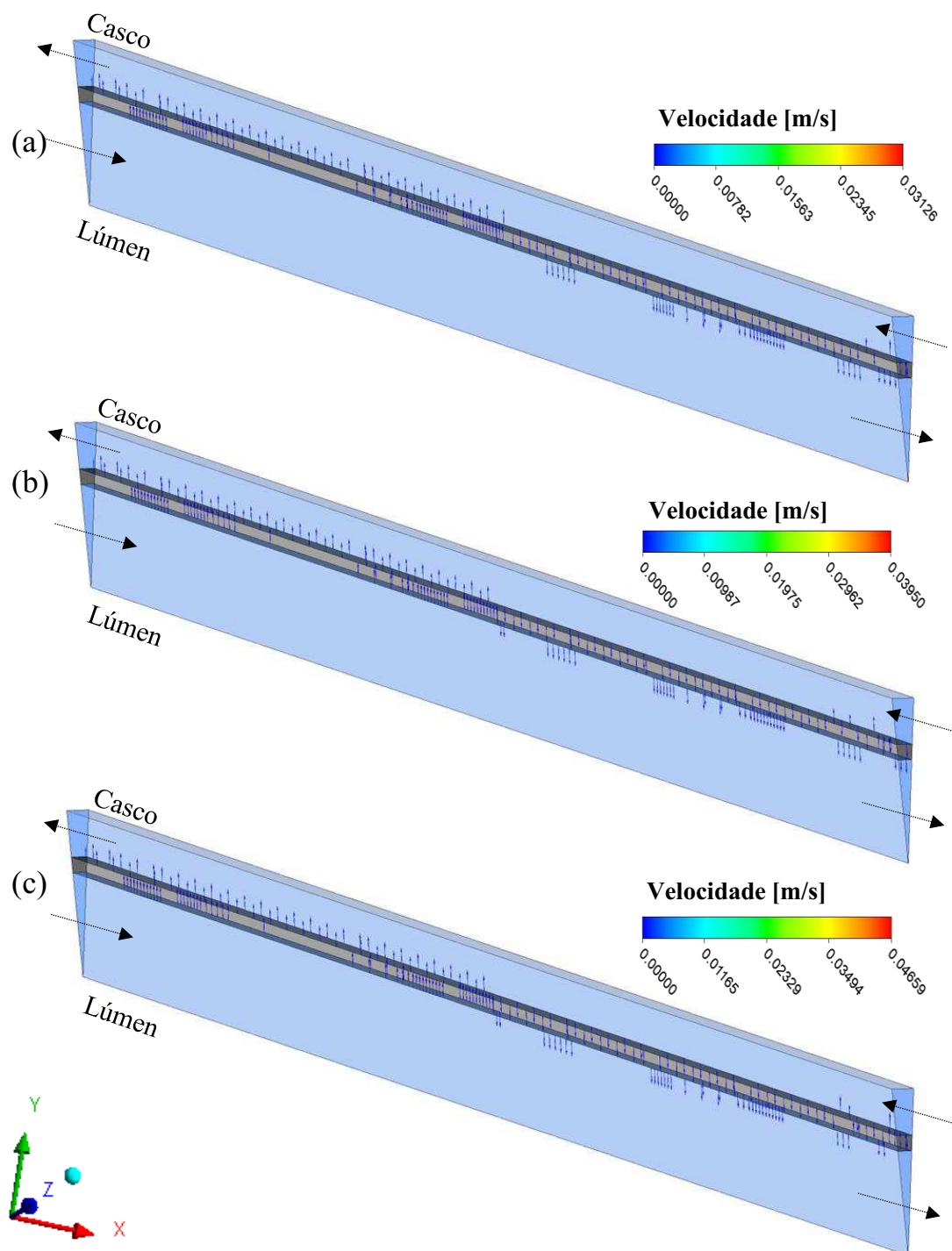


Figura 3.30: Vetores velocidade normalizados da ureia na interface e no interior da membrana: (a) caso 12, (b) caso 13 e (c) caso 14.

As Figuras 4.31 e 4.32 apresenta os campos de pressão para diferentes fluxos de alimentação, casos 9, 10, 11 (Figura 4.31), 12, 13 e 14 (Figura 4.32) no plano XY, em t igual a 6200 s. Observa-se que o aumento do fluxo de alimentação de dialisato, partindo de um fluxo inicial de 200 ml/min até o máximo de 500 ml/min, aumenta a gradiente de pressão

dentro do equipamento como esperado, especialmente na região de entrada de dialisato (casco), esse comportamento é evidenciado especialmente na Figura 4.32c. O aumento da pressão no compartimento está associado com o aumento do fluxo de alimentação do casco, que proporciona a elevação do transporte de quantidade de movimento por convecção através da membrana porosa, melhorando a eficiência de separação.

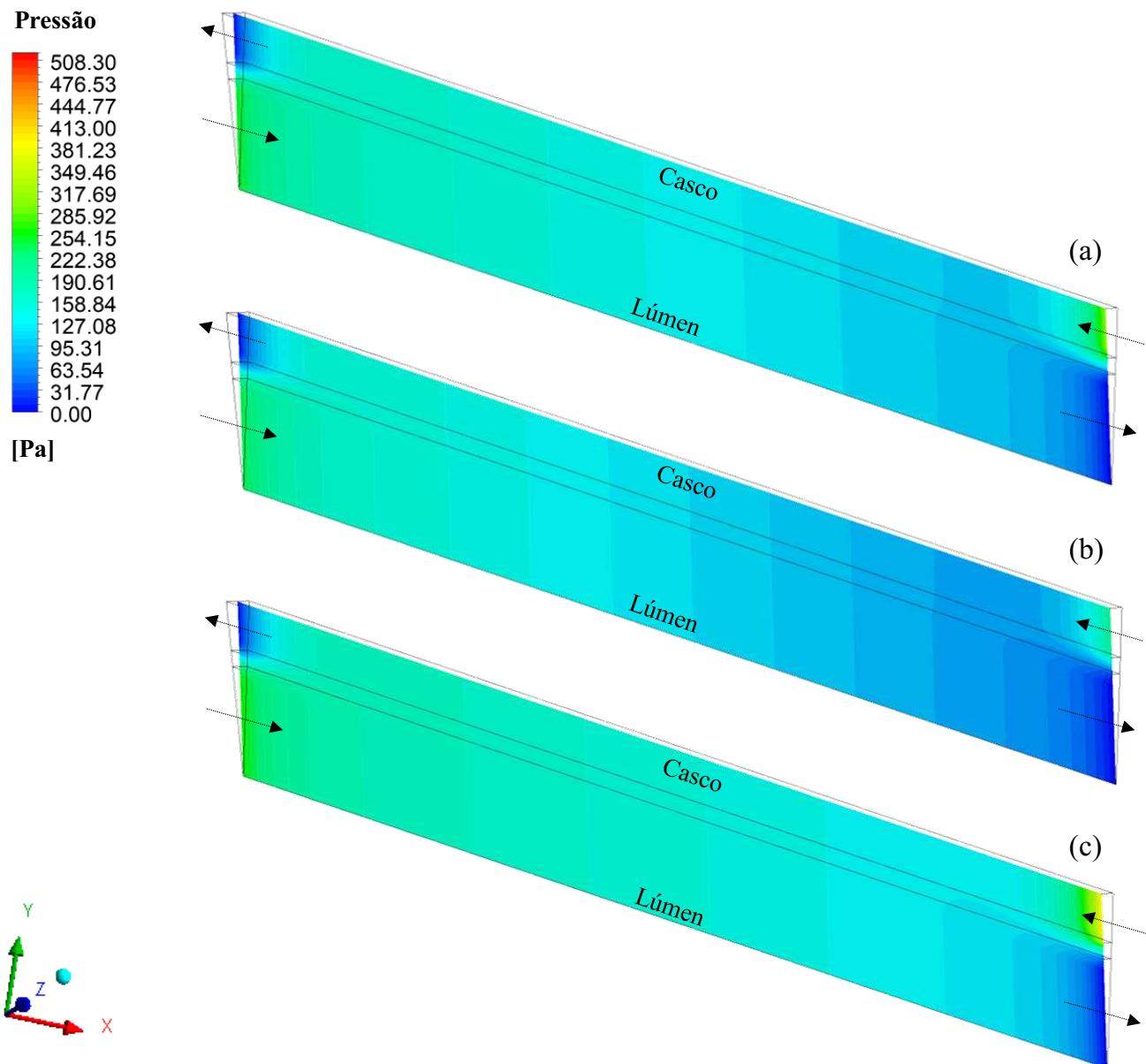


Figura 3.31: Campo de pressão no plano XY, (a) caso 9, (b) caso 10, (c) caso 11.

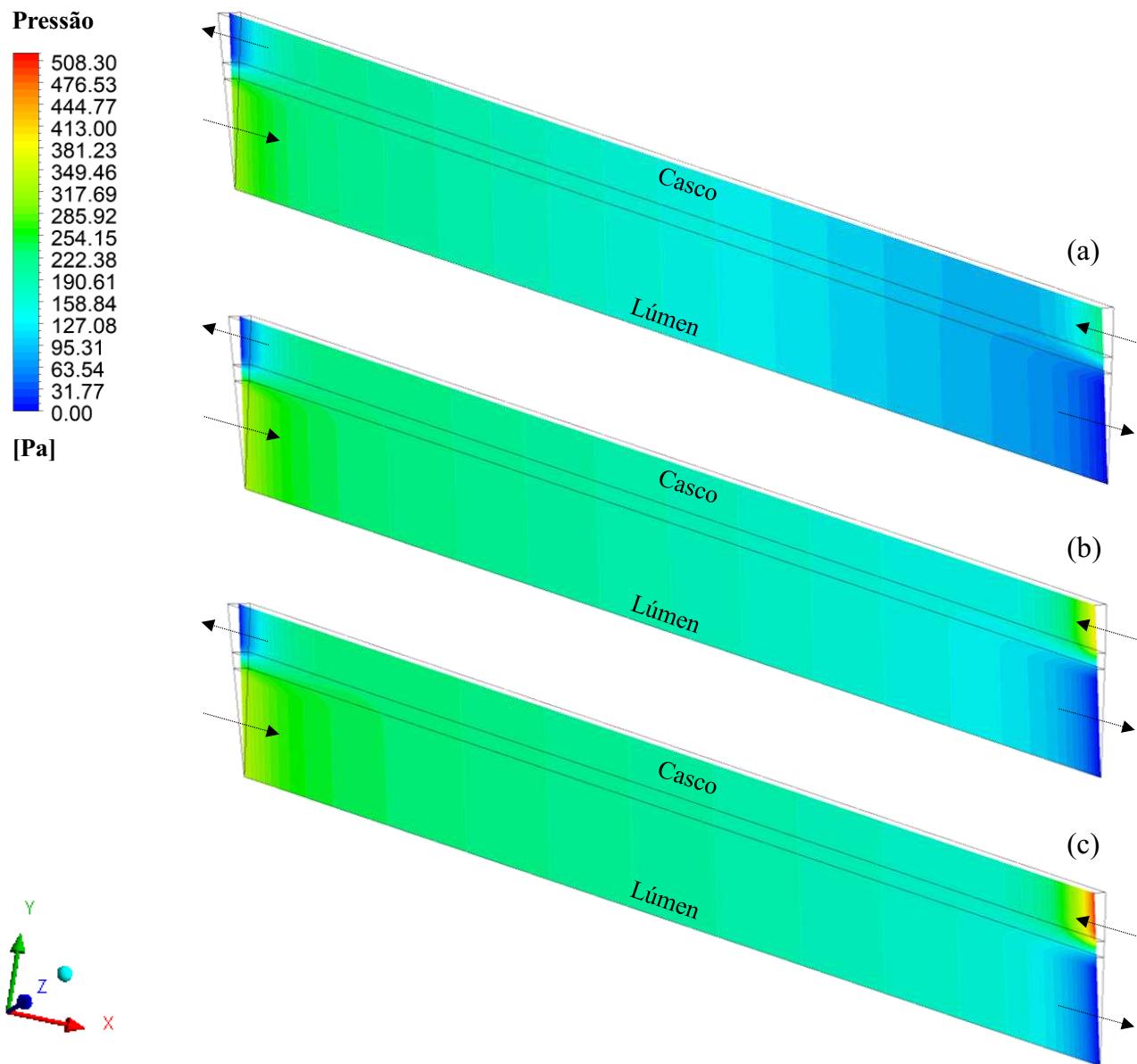


Figura 3.32: Campo de pressão no plano XY, (a) caso 12, (b) caso 13, (c) caso 14.

As Figuras 4.33 e 4.34 apresentam as linhas de fluxo da ureia para diferentes fluxos de alimentação partindo da entrada do lúmen, para os casos 9, 10, 11 (Figuras 4.33), 12, 13 e 14 (Figuras 4.34), em t igual a 6200 s. Observa-se pela análise das linhas de fluxo, maior permeação de ureia nas proximidades da região de entrada do lúmen, devido ao elevado fluxo nessa região. Além disso, é possível verificar pequenas variações no gradiente de pressão ocasionada pela elevação do fluxo de dialisato na distribuição de ureia ao longo do domínio em estudo, especialmente nas Figuras 4.33c e 4.34c. Nesses dois casos (Casos 11 e 14) o fluxo de alimentação no casco é superior ao fluxo de alimentação do lúmen, proporcionando maior remoção de ureia, como pode ser observado na Tabela 4.7.

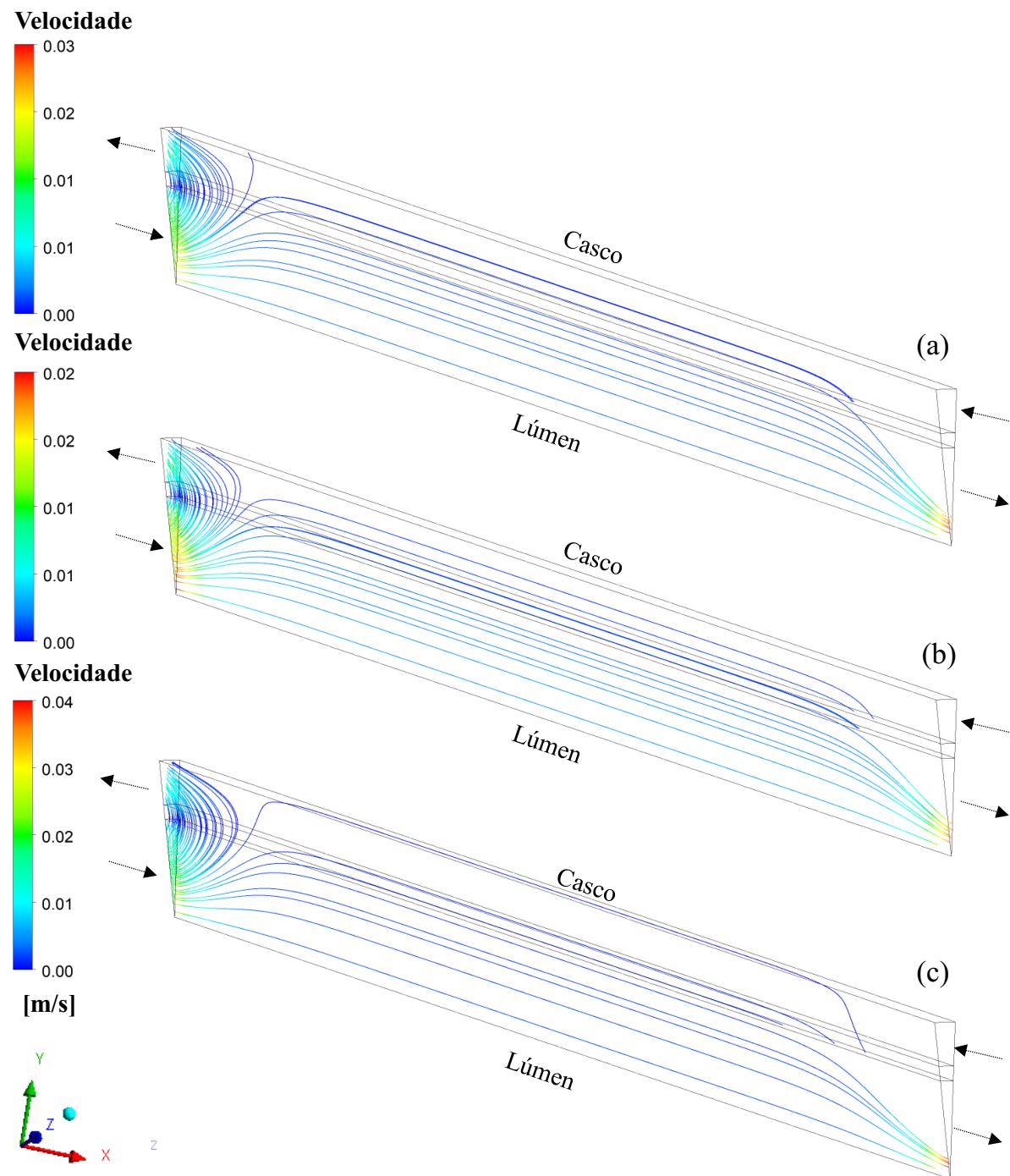


Figura 3.33: Linhas de fluxo da ureia: (a) caso 9, (b) caso 10, e (c) caso 11.

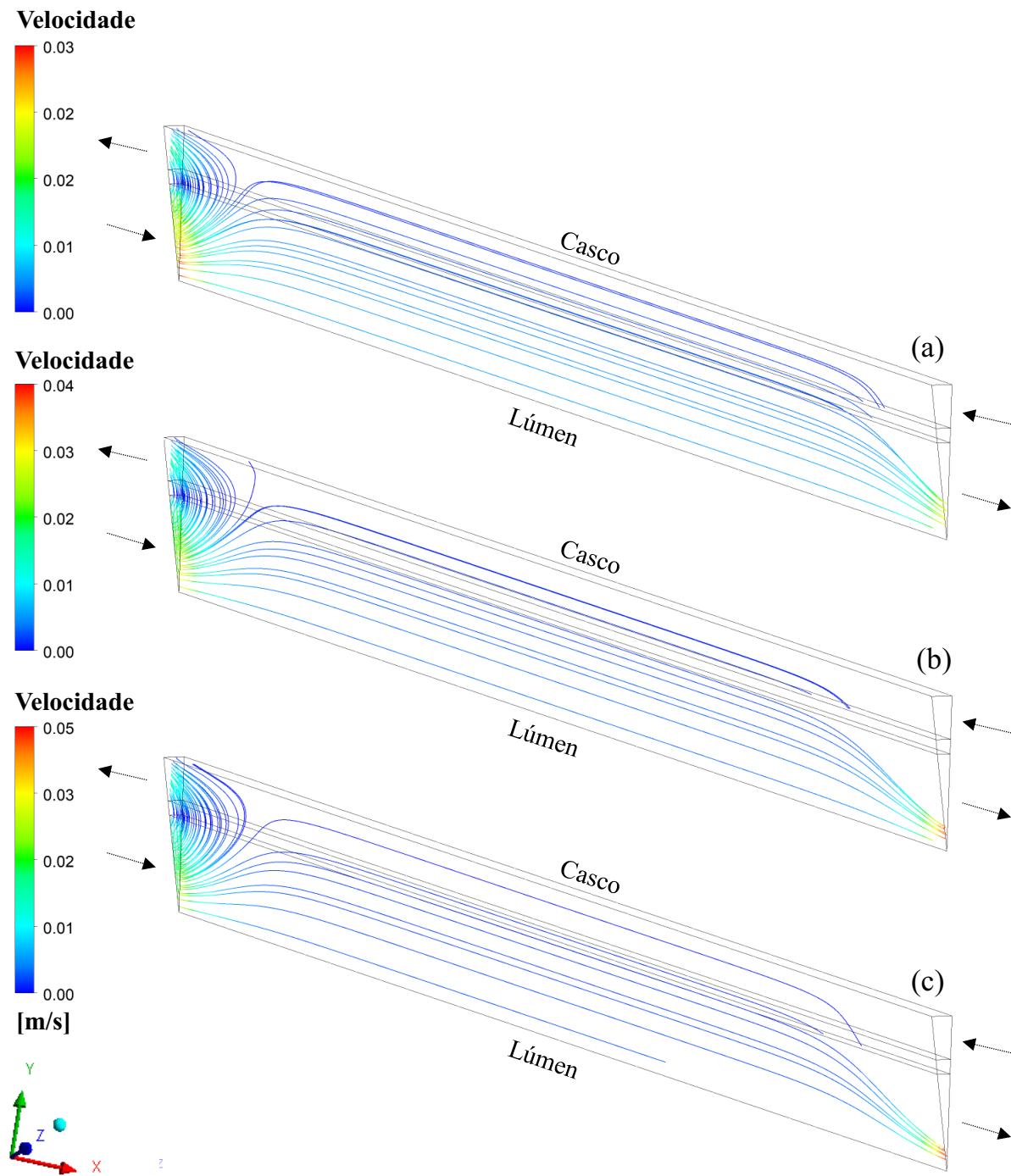


Figura 3.34: Linhas de fluxo da ureia: (a) caso 12, (b) caso 13, e (c) caso 14.

4.4 Análise da membrana de fibra-oca para outros contaminantes

Incialmente o processo de hemodiálise foi avaliado utilizando a ureia como contaminante. Entretanto, existem outros, como β_2 -microglobulina, proteína presente na superfície das células nucleadas, que tem seus níveis aumentados no sangue em indivíduos

com alguns tipos de câncer, processos inflamatórios e síndrome urêmica. Bem como, o contaminante conhecido como creatinina, substância produzida pelos músculos e eliminada pelos rins saudáveis, a elevação dos seus níveis no sangue é o principal indício de insuficiência renal.

Clearance

A Figura 4.35 apresenta os resultados obtidos do *clearance* para diferentes contaminantes, ureia, β 2-microglobulina e creatinina presentes no sangue (Casos 9, 15 e 16). Observa-se que a ureia é o contaminante com menor taxa de remoção, apresentando um *clearance* de aproximadamente 235,2 mL/min, contudo, os três contaminantes apresentam uma taxa de remoção próxima, especialmente a β 2-microglobulina e creatinina. Esse comportamento está associado as diferentes concentrações na entrada do lúmen e as propriedades físico-químicas dos contaminantes, que influenciam diretamente o termo de troca de momento de interface entre as fases.

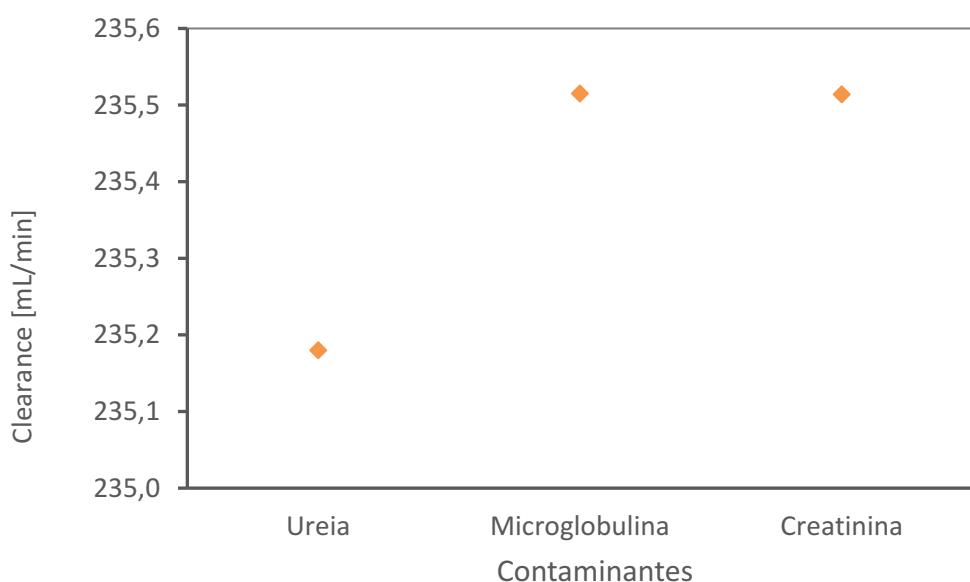


Figura 3.35: *Clearance* para diferentes contaminantes.

A Tabela 4.9 mostra as porcentagens de remoção dos diferentes contaminantes, ureia, β 2-microglobulina e creatinina da corrente sanguínea. Observa-se que a membrana, nas condições propostas é capaz de remover aproximadamente 78% do contaminante presente na

corrente sanguínea, apresentando uma porcentagem de remoção similar para os três contaminantes analisados.

Tabela 3.9: Porcentagem de remoção dos contaminantes da corrente sanguínea.

Caso	Contaminante	Concentração inicial [kg/m ³]	Porcentagem de remoção dos contaminantes [%]
09	Ureia	0,7	78,390
15	$\beta 2$ -microglobulina	0,01	78,505
16	Creatinina	0,02	78,504

Fração volumétrica

A Figura 4.36 mostra o perfil de fração volumétrica para os contaminantes do sangue, $\beta 2$ -microglobulina e creatinina, ao longo da posição axial, em y igual a 0,0001 m, correspondente à interface de entrada da membrana porosa, em tempo t igual a 6200 s. Pode-se observar um comportamento semelhante dos perfis de fração volumétrica para os contaminantes, com frações constantes na interface da membrana porosa, até a posição axial de 0,118 m, aproximadamente. A partir dessa posição o fluxo de dialisato passa ter uma influência mais significativa sobre o escoamento devido à proximidade da entrada do casco, com a atuação da retrofiltração proveniente da elevação da pressão nessa região, induzindo a permeação do dialisato através da membrana para o canal do lúmen.

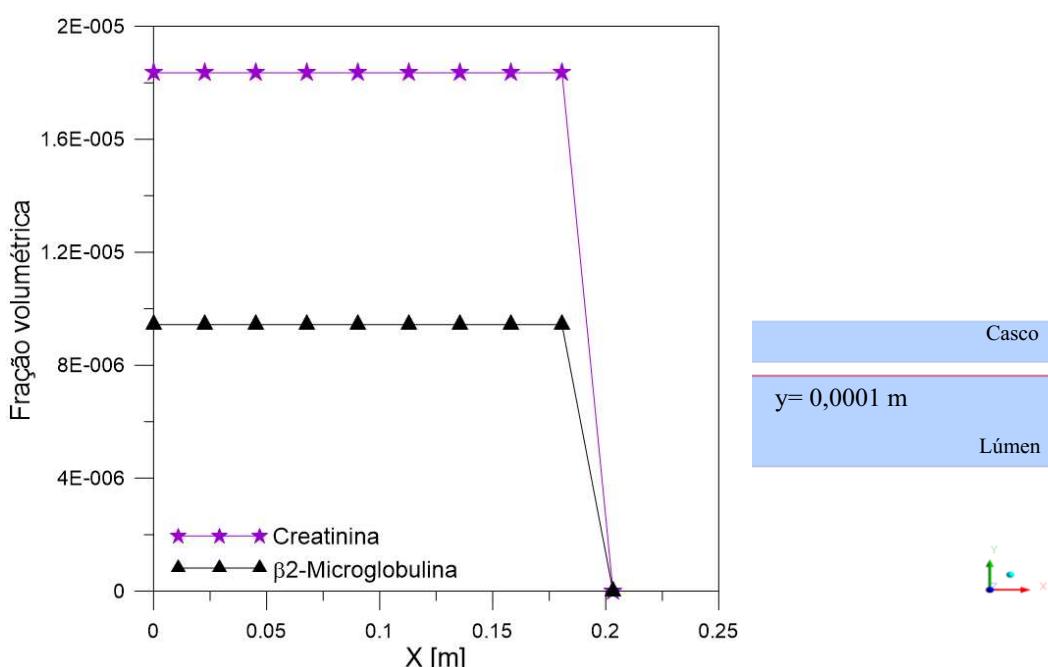


Figura 3.36: Perfil da fração volumétrica da $\beta 2$ -microglobulina e creatinina, em $y = 0,0001\text{m}$.

A Figura 4.37 apresenta o campo de fração volumétrica no interior da membrana de fibra-oca para a β 2-microglobulina e creatinina no plano XY para os domínios do casco e do lúmen, em tempo t igual a 6200 s. Verifica-se um comportamento análogo entre os campos de fração volumétrica da β 2-microglobulina e da creatinina, uma vez que, para t igual a 6200 s a condição de equilíbrio é atingida. Maiores concentrações próximo a entrada do lúmen e saída do dialisato são observadas como esperado, com formação de um gradiente de fração volumétrica na região próxima a saída do lúmen e entrada de dialisato, devido à proximidade com a alimentação do casco em contracorrente.

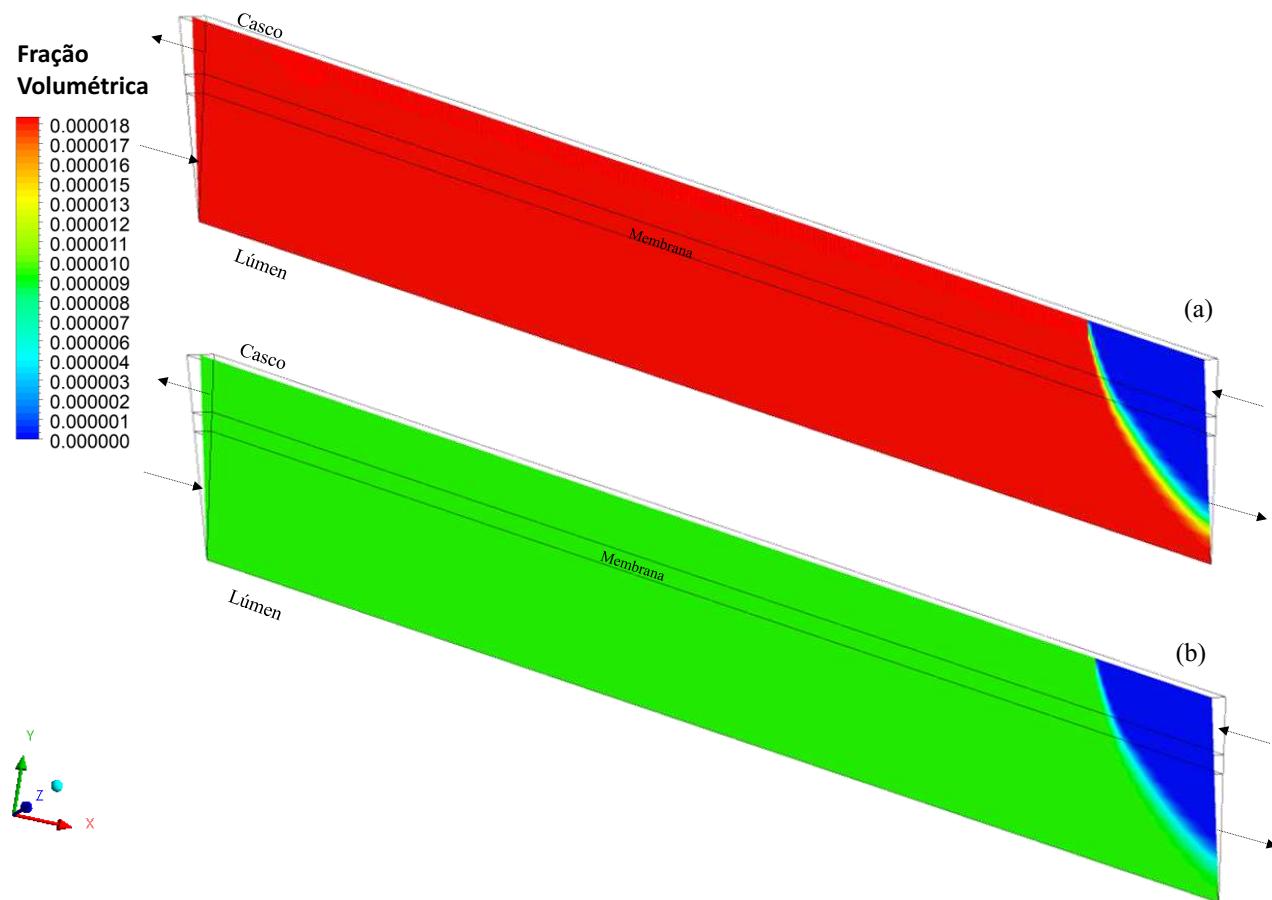


Figura 3.37: Campo de fração volumétrica para: (a) β 2-microglobulina e (b) creatinina.

4.5 Alimentação tangencial

As Figuras 4.38, 4.39, 4.40, e 4.41 apresentam os perfis de fração volumétrica da ureia em função da posição radial, para diferentes ângulos de alimentação do lúmen, 0° (caso 9),

20° (caso 17), 40° (caso 18) e 60° (caso 19), nos tempos t igual a 100 s (Figura 4.38), 200 s (Figura 4.39), 300 s (Figura 4.40) e 400 s (Figura 4.41). Observa-se um comportamento semelhante das frações volumétricas para os diferentes ângulos de alimentação do lúmen, com uma pequena variação para o ângulo de 60° em relação aos demais. Além disso, pode-se verificar que a fração volumétrica da ureia é reduzida com a posição radial, devido ao arraste do contaminante pela corrente de dialisato. Espera-se que o aumento do ângulo de alimentação proporcione uma maior permeação da ureia, entretanto, como o espaço anular de escoamento do sangue é mínimo, correspondente a um capilar de 0,2 mm, o comportamento induzido pela alimentação tangencial não se propaga ao longo do domínio, influenciando minimamente o processo.

A Tabela 4.10 apresenta a fração volumétrica média da ureia no plano XY, localizada no domínio casco em Z igual a 0, para os casos 09, 17, 18 e 19, em diferentes tempos. A análise da fração volumétrica média da ureia corrobora com os resultados ilustrados nos perfis apresentados acima (Figuras 4.38, 4.39, 4.40 e 4.41). Observa-se valores maiores para o ângulo de alimentação de 60° , especialmente em t igual a 100 s. Conforme o fluido se afasta da alimentação do lúmen, a influência da entrada tangencial é reduzida, por cauda do retorno do fluxo ao escoamento perpendicular. Essa informação é reafirmada pelos dados correspondentes aos tempos de 200, 300, 400 s, ao apresentarem uma diferença mínima entre os valores de fração volumétrica média da ureia ao variar o ângulo.

Tabela 3.10: Fração volumétrica média da ureia no plano XY, no domínio casco, em z igual a 0.

Tempo [s]	Fração volumétrica média			
	0° (Caso 09)	20° (Caso 17)	40° (Caso 18)	60° (Caso 19)
100	$9,04406 \times 10^{-6}$	$9,09396 \times 10^{-6}$	$9,04234 \times 10^{-6}$	$9,15354 \times 10^{-6}$
200	$3,35394 \times 10^{-5}$	$3,36189 \times 10^{-5}$	$3,35226 \times 10^{-5}$	$3,37318 \times 10^{-5}$
300	$6,30374 \times 10^{-5}$	$6,31078 \times 10^{-5}$	$6,30221 \times 10^{-5}$	$6,32036 \times 10^{-5}$
400	$8,68704 \times 10^{-5}$	$8,69259 \times 10^{-5}$	$8,68573 \times 10^{-5}$	$8,70039 \times 10^{-5}$

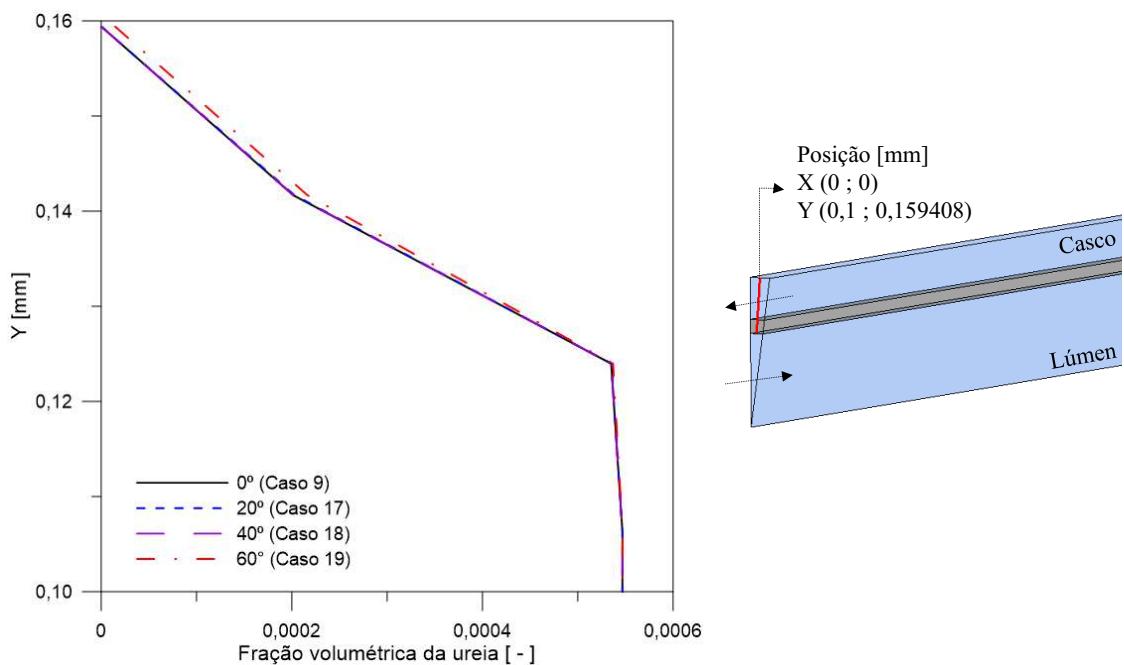


Figura 3.38: Perfil de fração volumétrica da ureia para diferentes ângulos de alimentação, em t igual a 100 s.

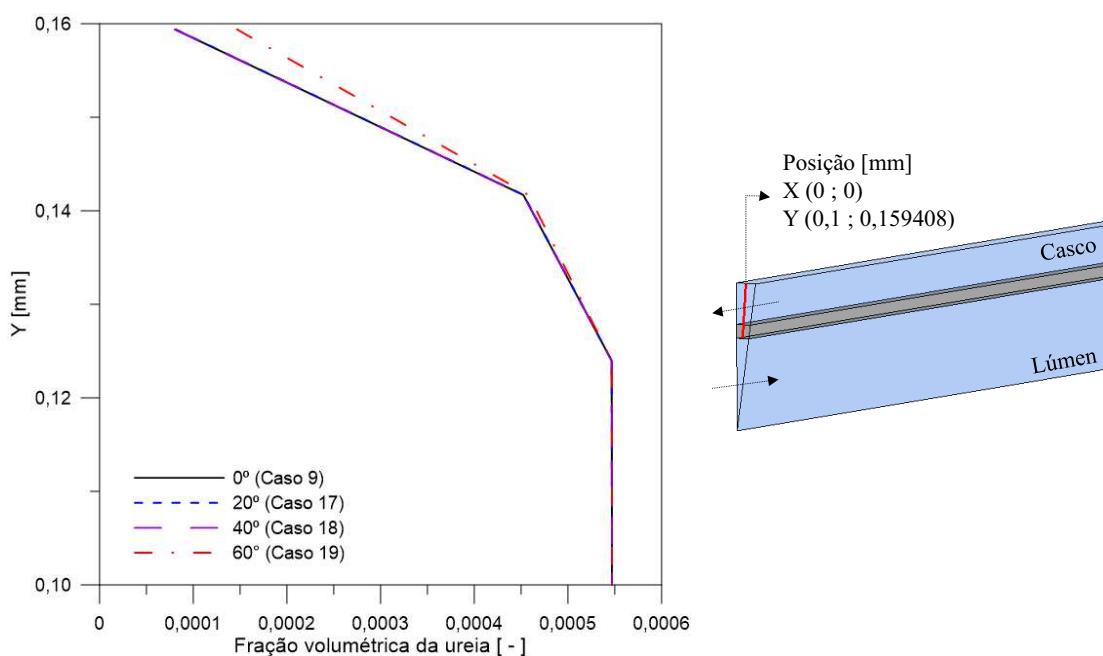


Figura 3.39: Perfil de fração volumétrica da ureia para diferentes ângulos de alimentação, em t igual a 200 s.

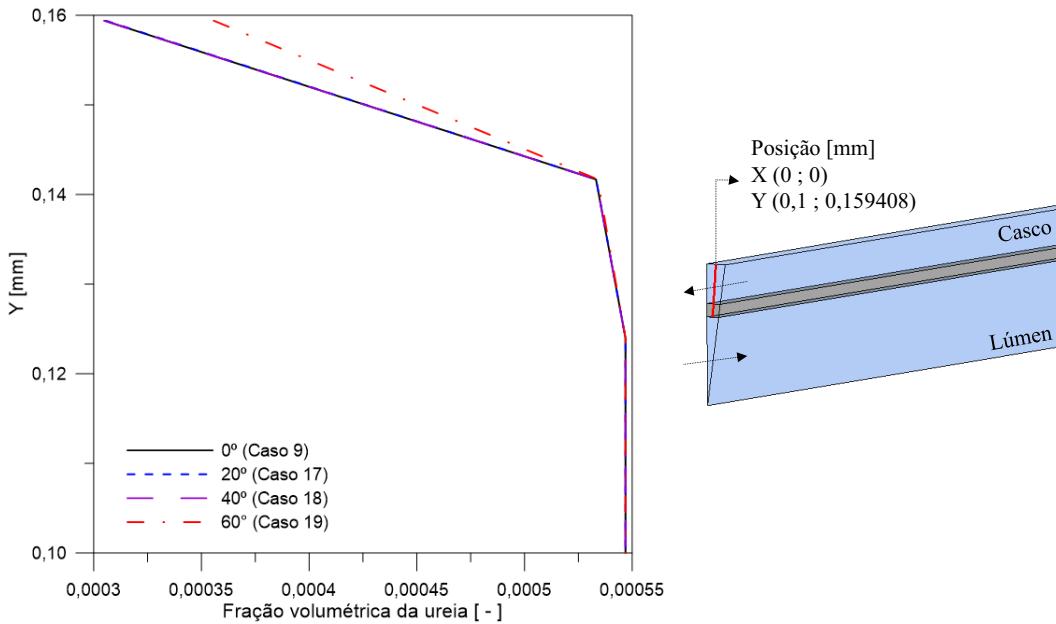


Figura 3.40: Perfil de fração volumétrica da ureia para diferentes ângulos de alimentação, em t igual a 300 s.

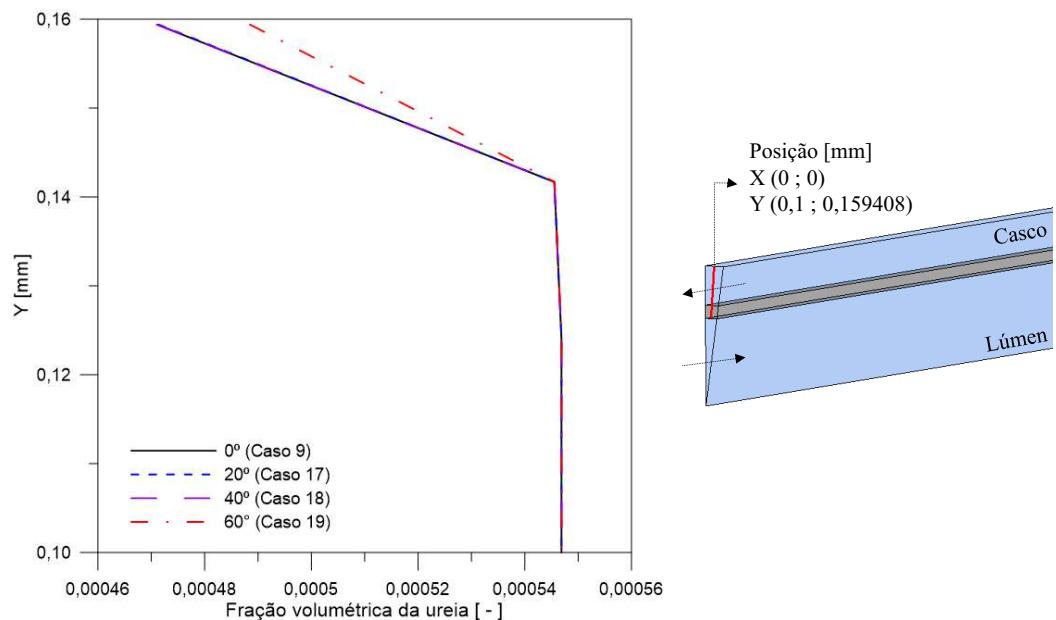


Figura 3.41: Perfil de fração volumétrica da ureia para diferentes ângulos de alimentação, em t igual a 400 s.

Nas Figuras 4.42, 4.43 e 4.44 são apresentados os perfis de velocidade da ureia, para diferentes ângulos de alimentação do lúmen, 0° (caso 9), 20° (caso 17), 40° (caso 18) e 60° (caso 19), nas posições axiais de 0 mm (Figura 4.42), 0,1 mm (Figura 4.43) e 1 mm (Figura 4.44). Observa-se que, ao induzir uma alimentação tangencial, alterando o ângulo de alimentação do lúmen, a velocidade na alimentação aumenta com a variação do ângulo de 0° para 60° . Na posição axial igual a 0 mm (Figura 4.42) verifica-se um comportamento

crescente de velocidade com o aumento do ângulo de alimentação, mas esse comportamento não se mantém nas demais posições axiais. Na posição x_2 (Figura 4.43), afastada 0,1 mm da entrada, ainda é possível verificar uma pequena variação da velocidade da ureia. Entretanto, na posição igual a 1 mm (Figura 4.44) da entrada do lúmen, não há mais variação de velocidade, justamente devido a influência do espaço anular e da tensão de cisalhamento sobre o escoamento.

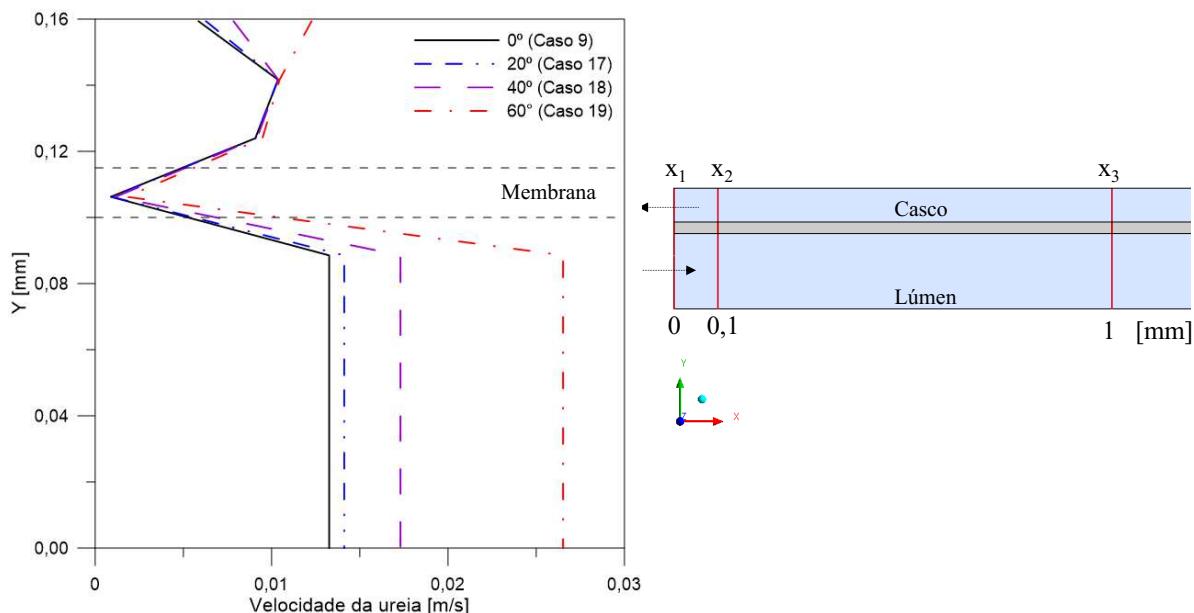


Figura 3.42: Perfil de velocidade da ureia para diferentes ângulos de alimentação na posição axial igual a zero, em t igual a 6200 s.

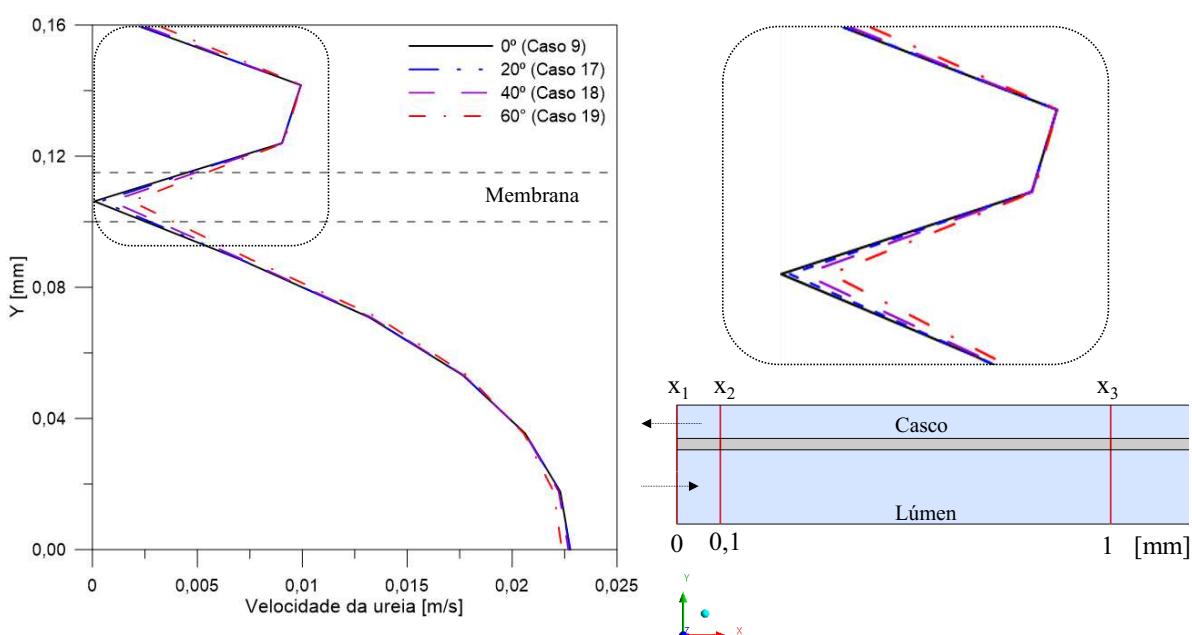


Figura 3.43: Perfil de velocidade da ureia para diferentes ângulos de alimentação na posição axial igual a 0,1 mm, em t igual a 6200 s.

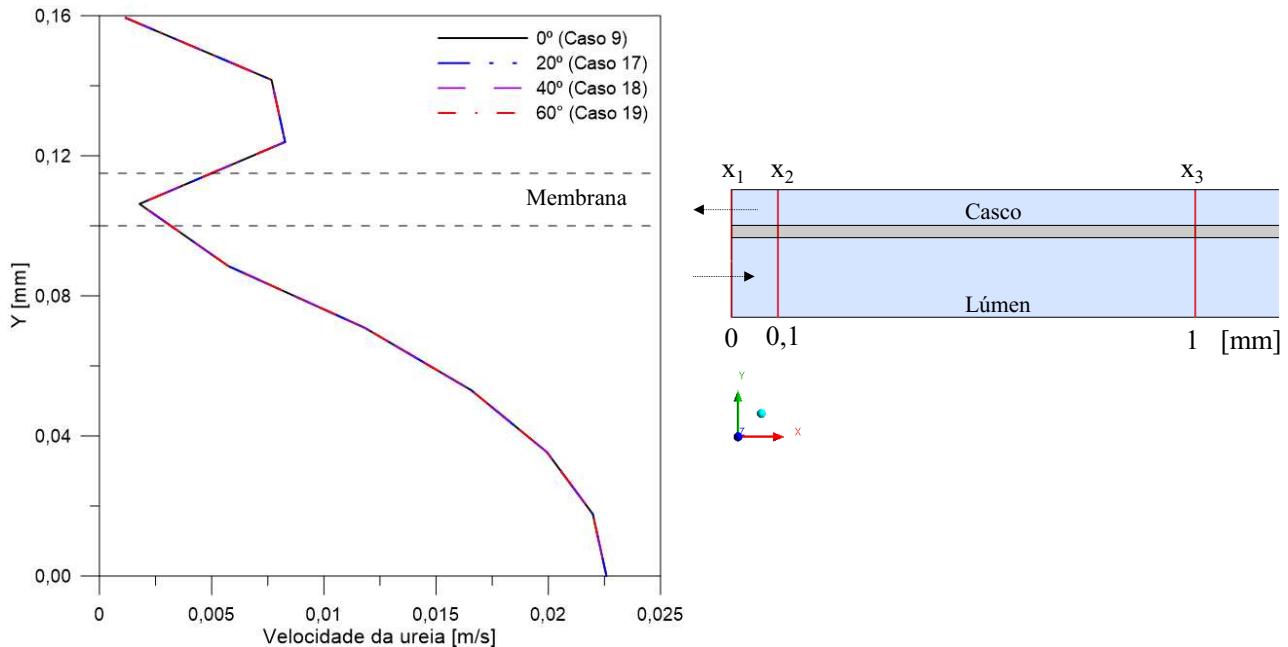


Figura 3.44: Perfil de velocidade da ureia para diferentes ângulos de alimentação na posição axial igual a 1 mm, em t igual a 6200 s.

As Figuras 4.45 e 4.46 apresentam o perfis de velocidade da ureia ao longo do domínio, em y igual a 0,05 mm (Figura 4.45) e 0,1 mm (Figura 4.46), em t igual a 6200 s. Observa-se que a ureia sofre uma redução brusca de velocidade logo após a entrada do domínio, de 0,023 m/s para o caso 19, 0,014 m/s para o caso 18, 0,011 m/s para o caso 17, e de 0,010 m/s para o caso 9, devido a influência do espaço anular do domínio lúmen sobre o escoamento. No intervalo de 0,02 m a 0,18 m a velocidade é mantida relativamente constante. Próximo a região de saída do lúmen, na posição y igual a 0,05 mm (Figura 4.45), ocorre a elevação da velocidade devido a diferença de pressão na região. Comportamento análogo é verificado ao longo da interface da membrana porosa (Figura 4.46), entretanto na região próxima a saída do lúmen ocorre a diminuição da velocidade na interface, ocasionada pela retrofiltração do dialisato.

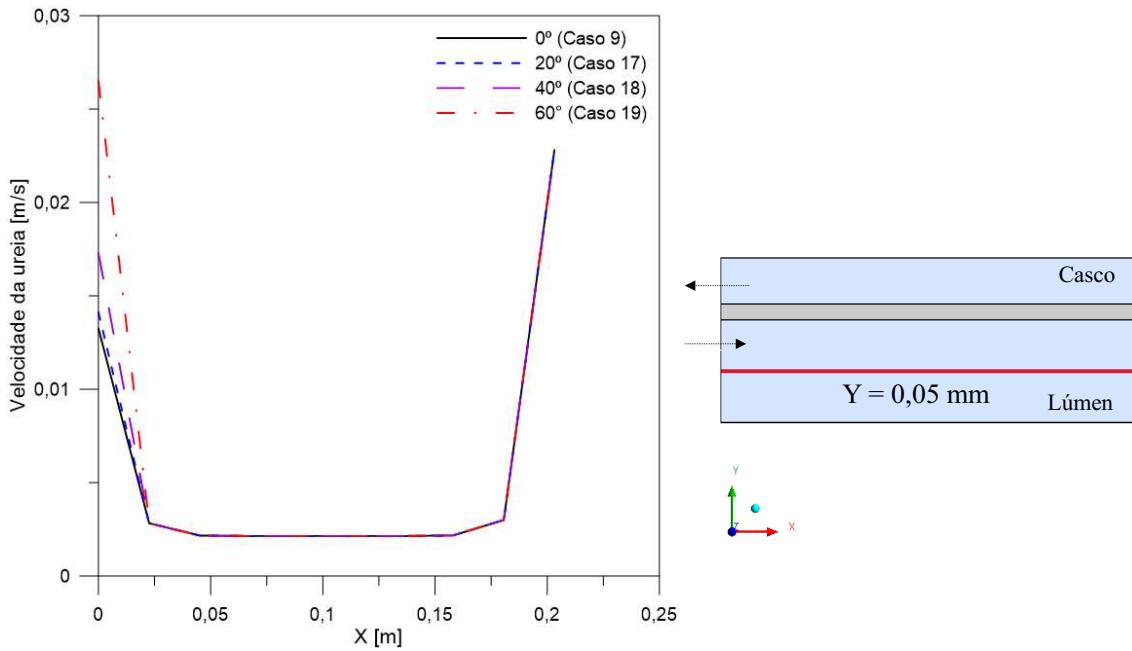


Figura 3.45: Perfil de velocidade da ureia para diferentes ângulos de alimentação na posição radial igual a 0,05 mm, em t igual a 6200 s.

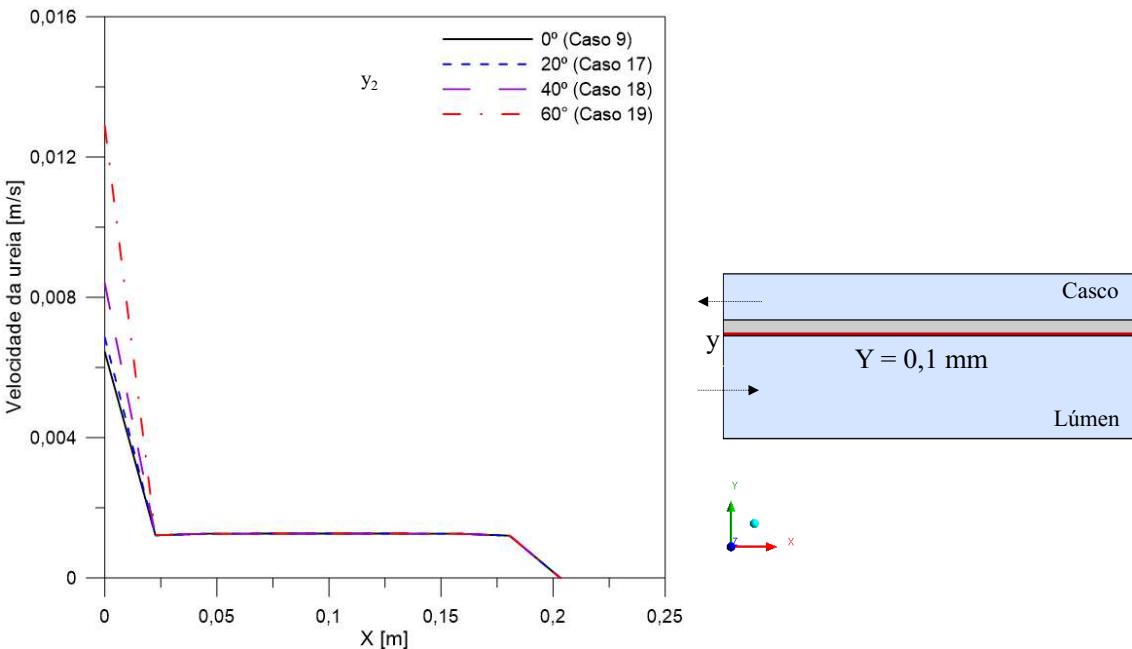


Figura 3.46: Perfil de velocidade da ureia para diferentes ângulos de alimentação na posição radial igual a 0,1 mm, em t igual a 6200 s.

4.6 Alimentação pulsada

As Figuras 4.47, 4.48 e 4.49 evidenciam o comportamento do fluxo mássico de ureia na entrada do lúmen em função do tempo, para diferentes frequências de alimentação, 10

rad/s (Caso 20), 20 rad/s (Caso 21) e 30 rad/s (Caso 22). Observa-se maiores comprimentos de onda na simulação operando com menor frequência (Caso 20), já que a elevação da frequência, mantendo constante a amplitude, ocasiona a redução do comprimento da onda e consequente diminuição da periodicidade do fluxo mássico na entrada do lúmen.

A Tabela 4.11 apresenta a comparação entre o *clearance* obtido nas simulações com alimentação pulsada (Casos 20, 21 e 22) e axial (Caso 9) do lúmen. Observa-se que a alimentação pulsada com frequências de 10 e 20 rad/s apresentam valores inferiores de *clearance* se comparado com a simulação com uma alimentação do lúmen axial. Entretanto, ao elevar a frequência para 30 rad/s (Caso 22), a porcentagem de remoção do contaminante da corrente sanguínea é elevada, sendo superior a observada para a alimentação axial, com uma porcentagem de remoção de 79,15% de ureia. Além disso, foi constatado o comportamento crescente da *clearance* com a frequência de alimentação. Portanto, pressupõe-se que o processo de separação se torna mais eficaz na remoção de contaminantes a partir da frequência de 30 rad/s.

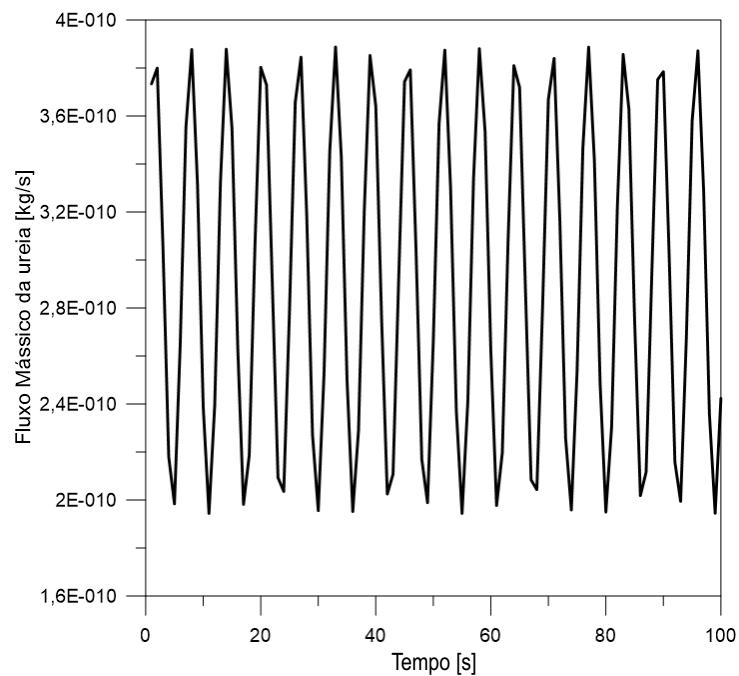


Figura 3.47: Fluxo mássico da ureia na entrada do lúmen em função do tempo, para a frequência de alimentação de 10 rad/s (Caso 20).

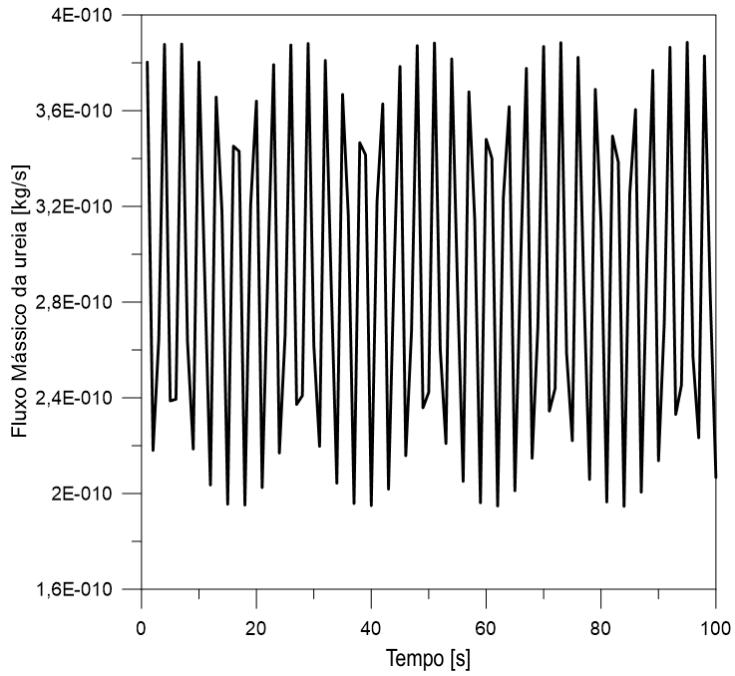


Figura 3.48: Fluxo m  ssico da ureia na entrada do l  men em fun  o do tempo, para a frequ  ncia de alimenta  o de 20 rad/s (Caso 21).

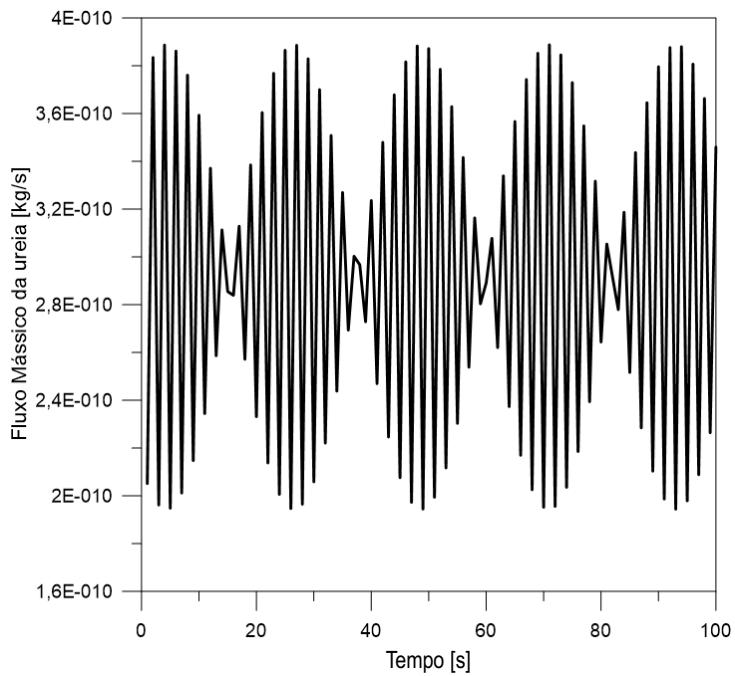
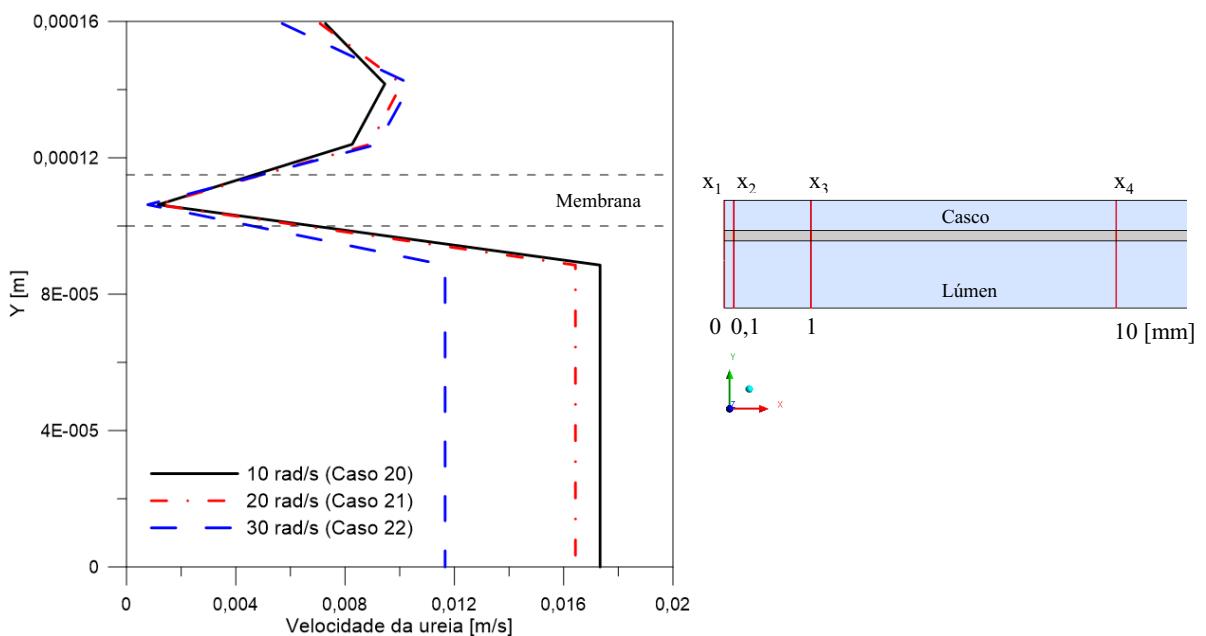


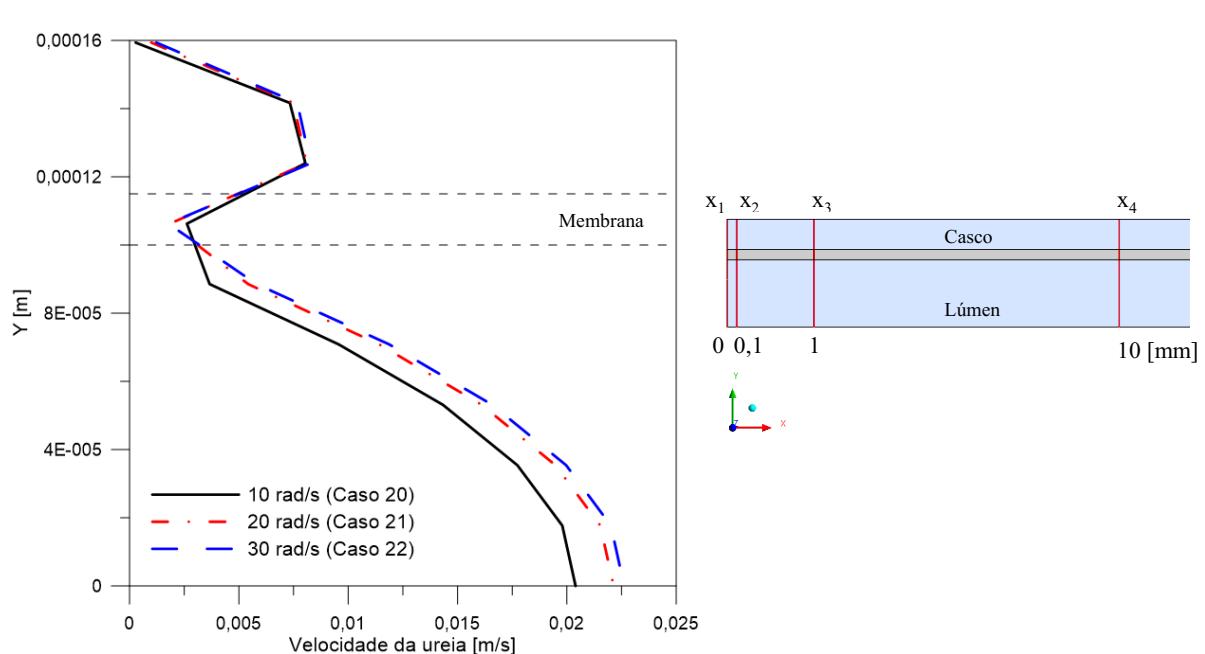
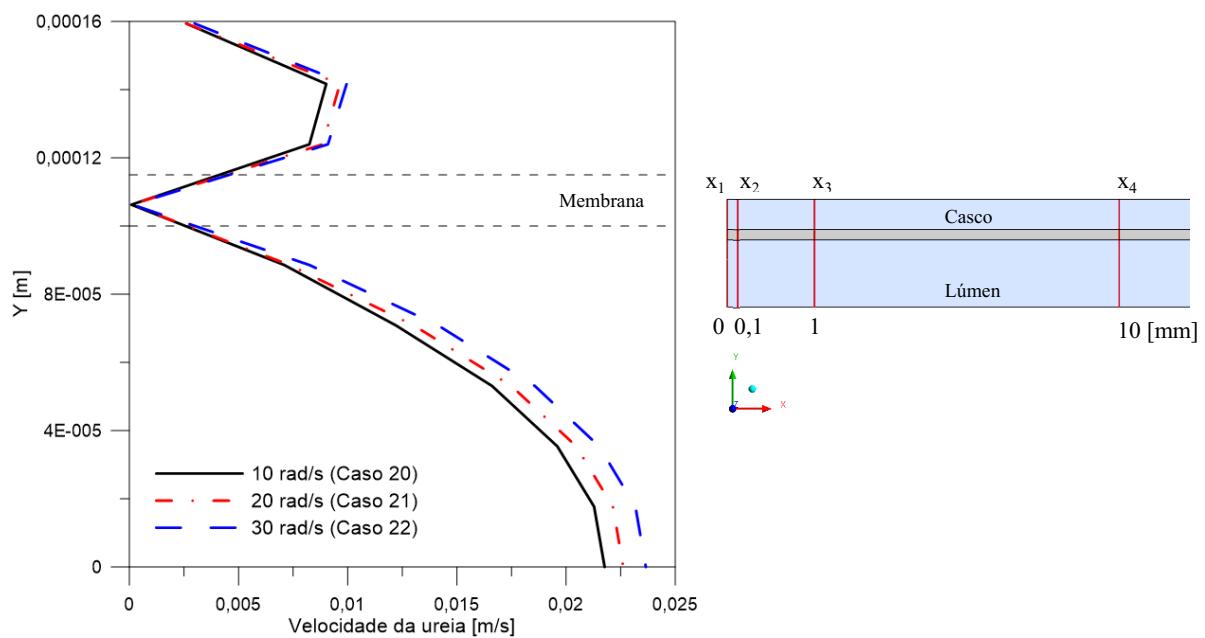
Figura 3.49: Fluxo m  ssico da ureia na entrada do l  men em fun  o do tempo, para a frequ  ncia de alimenta  o de 30 rad/s (Caso 22).

Tabela 3.11: Comparação entre o *clearance* obtido nas simulações com alimentação pulsada e axial.

Casos	Frequência, w [rad/s]	Clearance [ml/min]	Porcentagem de remoção [%]
09	-	235,18	78,39
20	10	214,57	71,52
21	20	229,73	76,58
22	30	237,45	79,15

As Figuras 4.50, 4.51, 4.52 e 4.53 apresentam os perfis de velocidade da ureia, para diferentes frequências de alimentação do lúmen, 10 rad/s (caso 20), 20 rad/s (caso 21), e 30 rad/s (caso 22), nas posições axiais de 0 mm (Figura 4.50), 0,1 mm (Figura 4.51), 1 mm (Figura 4.52) e 10 mm (Figura 4.53). Observa-se, na posição axial igual a 0 mm, uma menor velocidade de alimentação para a simulação operando a frequência de 30 rad/s (Caso 22), comportamento oposto ao ilustrado nas demais posições (x_2 , x_3 e x_4). Além disso, é possível verificar a variação de velocidade da ureia com a frequência nas quatro posições axiais analisadas, indicando que a alimentação pulsado tem maior influência sobre a dinâmica do escoamento no interior da fibra do que a alimentação tangencial, também analisadas nas posições x_1 , x_2 e x_3 (Figuras 4.42, 4.43 e 4.44). Na posição axial igual a 10 mm, por exemplo, ainda é perceptível uma leve influência da variação da frequência sobre o perfil de velocidade, o que já não é observado para a alimentação tangencial. A elevação da velocidade em decorrência da frequência da alimentação pulsada, para valores superiores a 30 rad/s, atuam em conjunto com as formas de arraste, proporcionam uma maior remoção de ureia da corrente sanguínea (Tabela 4.11).

**Figura 3.50:** Perfil de velocidade da ureia para diferentes frequências de alimentação, na posição x_1 .



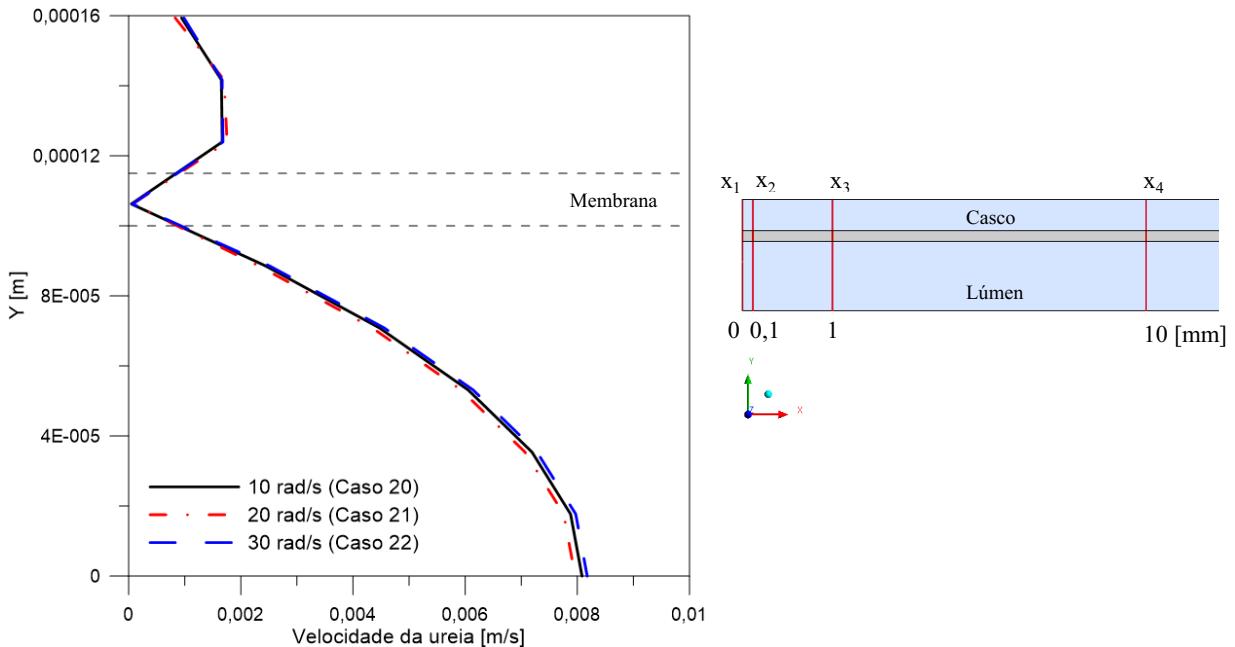


Figura 3.53: Perfil de velocidade da ureia para diferentes frequências de alimentação, na posição x_4 .

A Figura 4.54 ilustra as linhas de fluxo da ureia para diferentes frequências de alimentação do lúmen, 10 rad/s (Caso 20), 20 rad/s (Caso 21) e 30 rad/s (Caso 22), no plano XY. Observa-se que as linhas de fluxo corroboram com os resultados apresentados na forma de perfil de velocidade (Figuras 4.50 a 4.53), evidenciando a influência da alimentação pulsada sobre a fluidodinâmica do equipamento, com maiores velocidades, como esperado, próxima a região de entrada do lúmen e saída de dialisato.

As Figuras 4.55 apresenta os campos de pressão para diferentes frequências de alimentação do lúmen, 10 rad/s (Caso 20), 20 rad/s (Caso 21) e 30 rad/s (Caso 22), no plano XY. Observa-se que o aumento da frequência de alimentação do lúmen de 10 rad/s para 30 rad/s ocasiona um pequeno aumento na pressão local da entrada do lúmen, como pode ser visualizado na Figura 4.55c.

As Figuras 4.56 e 4.57 apresentam o fluxo mássico de ureia na entrada do lúmen em função do tempo, para diferentes amplitudes de alimentação, $Q_B/4$ (Caso 23), $Q_B/5$ (Caso 24). Essas Figuras, juntamente com a Figura 4.47 (Caso 20), simulado com amplitude igual a $Q_B/3$, evidenciam o comportamento da amplitude do fluxo de alimentação do lúmen. Observa-se que o fluxo mássico oscila entre os valores máximos de $3,88 \times 10^{-10}$ (Caso 20) a $3,49 \times 10^{-10}$ (Caso 24), e mínimos de $1,94 \times 10^{-10}$ (Caso 20) a $2,33 \times 10^{-10}$ (Caso 24), na entrada do lúmen, como maiores amplitude para o caso 20 como esperado.

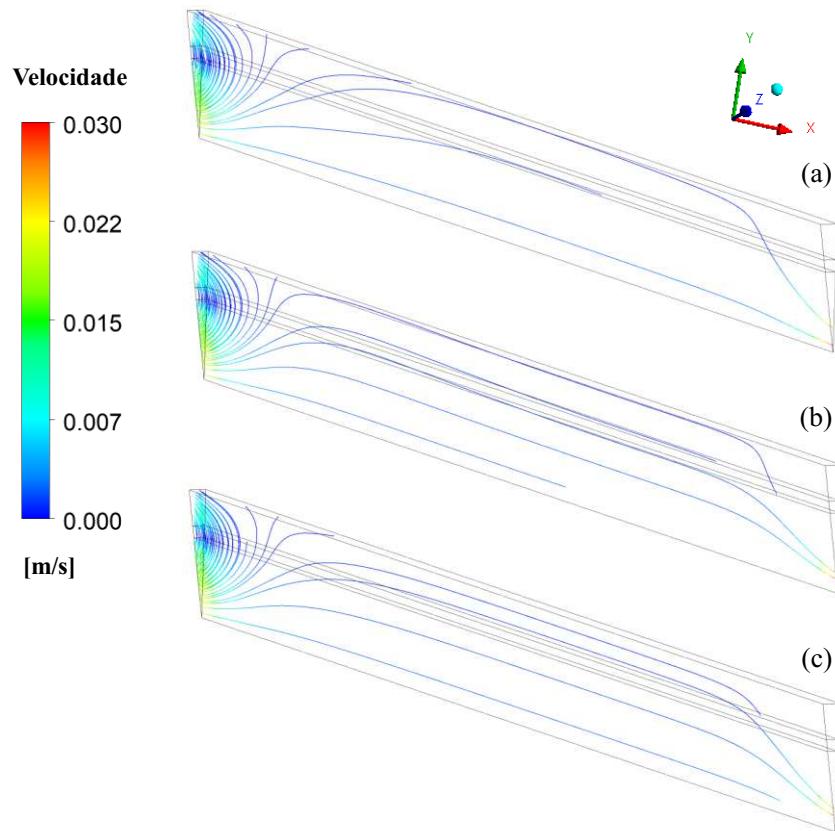


Figura 3.54: Linhas de fluxo da ureia para diferentes frequências de alimentação do lúmen: (a) 10 rad/s (Caso 20), (b) 20 rad/s (Caso 21), e (c) 30 rad/s (Caso 22).

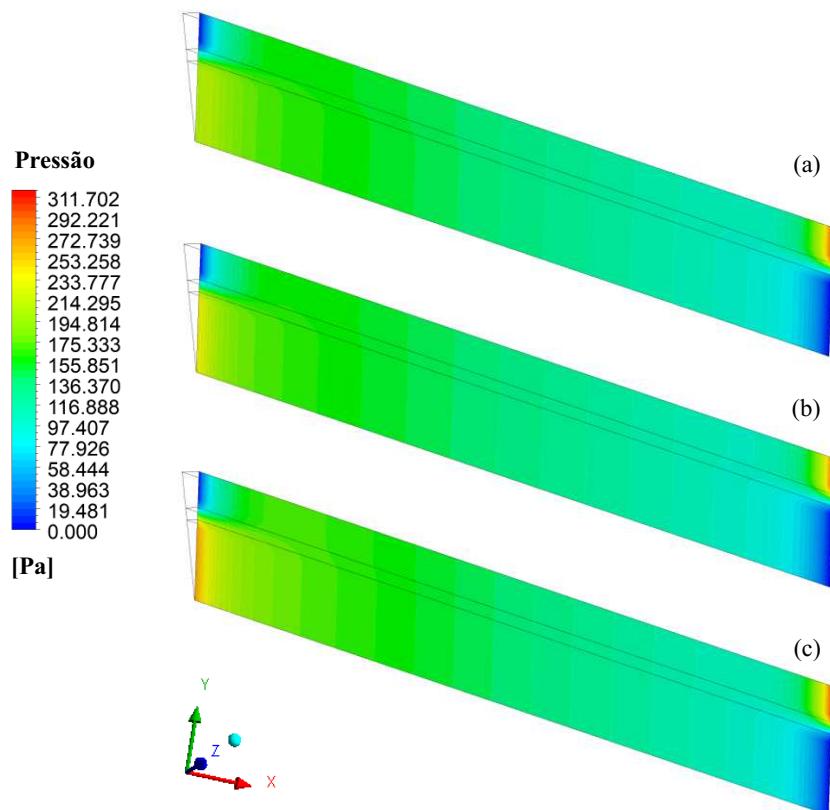


Figura 3.55: Campos de pressão para diferentes frequências de alimentação do lúmen: (a) caso 20, (b) caso 21, e (c) caso 22.

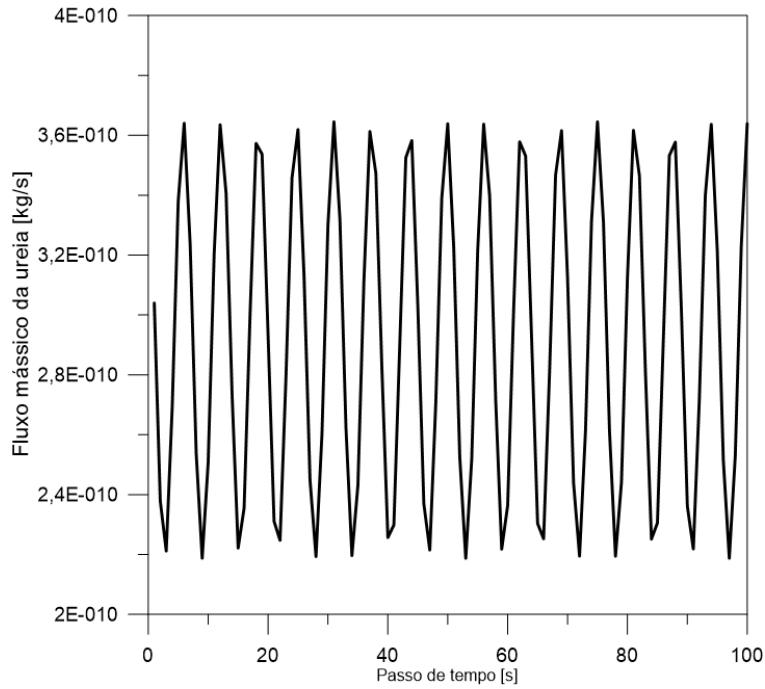


Figura 3.56: Fluxo mássico da ureia na entrada do lúmen em função do tempo, para a amplitude de $Q_B/4$ (Caso 23).

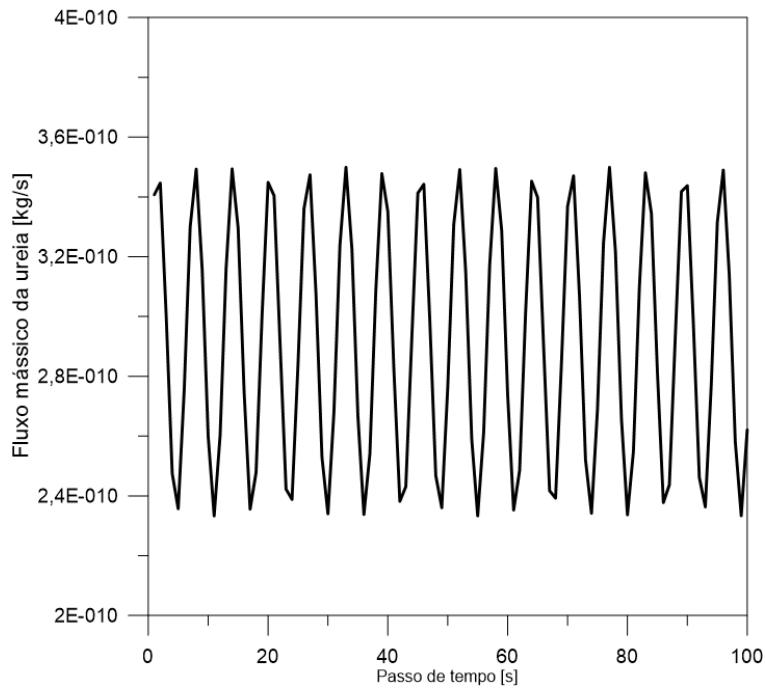


Figura 3.57: Fluxo mássico da ureia na entrada do lúmen em função do tempo, para a amplitude de $Q_B/5$ (Caso 24).

A Tabela 4.12 apresenta o *clearance* obtido nos casos 20, 23 e 24 para diferentes amplitudes de alimentação do lúmen, mantendo a frequência de 10 rad/s constante. Observa-se que, ao reduzir a amplitude da alimentação do lúmen, a remoção de toxinas da corrente sanguínea aumenta, elevando a porcentagem de remoção em aproximadamente 4,8% em relação ao alcançado no caso 20.

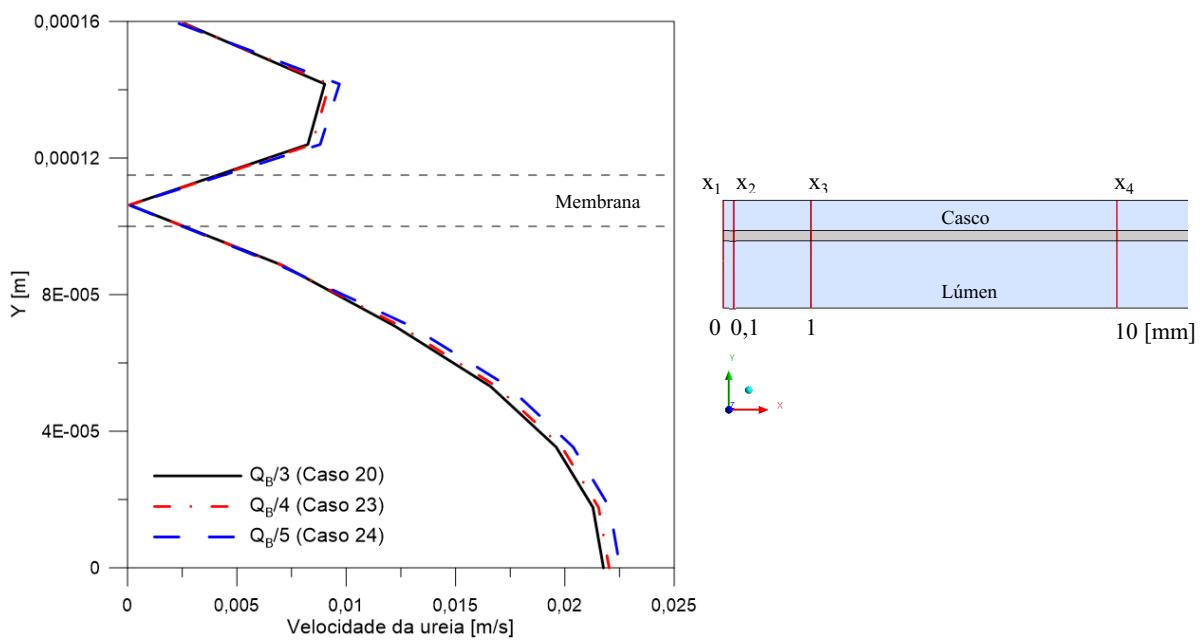
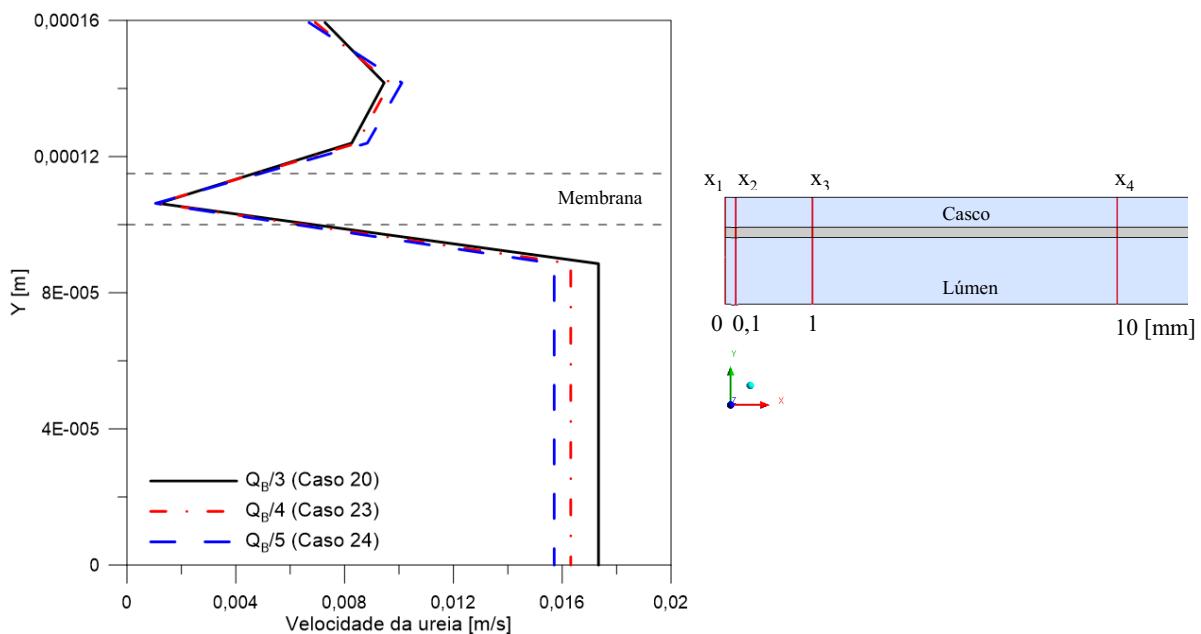
Tabela 3.12: Clearance da ureia obtido para diferentes amplitudes da alimentação do lúmen.

Casos	Amplitude, A	Clearance [ml/min]	Porcentagem de remoção [%]
20	$Q_B/3$	214,57	71,52
23	$Q_B/4$	219,66	73,22
24	$Q_B/5$	228,94	76,31

Nas Figuras 4.58, 4.59, 4.60 e 4.61 estão ilustrados os perfis de velocidade da ureia, para diferentes amplitudes de alimentação do lúmen, $Q_B/3$ (caso 20), $Q_B/4$ (caso 23), e $Q_B/5$ (caso 24), mantendo constante a frequência de 10 rad./s, nas posições axiais de 0 mm (Figura 4.58), 0,1 mm (Figura 4.59), 1 mm (Figura 4.60) e 10 mm (Figura 4.61). Observa-se que, a variação da amplitude afeta os perfis de velocidade da ureia, especialmente na região próxima a entrada do lúmen (x_1 , x_2 e x_3), entretanto, a 10 mm da entrada (posição x_4) esse comportamento não se mantém, e um perfil de velocidade semelhante é visualizado.

Na posição axial igual a 0 mm (Figura 4.58), uma menor velocidade é observada para a amplitude $Q_B/5$ (Caso 24), como esperando, posteriormente elevada nas demais posições. Além disso, verifica-se que a variação da frequência (Figuras 4.50 a 4.53) apresenta maior influência sobre a fluidodinâmica no interior do equipamento do que a variação da amplitude, nas mesmas posições axiais analisadas. Bem como, pode-se constatar que, a velocidade aumenta com a diminuição da amplitude de alimentação do lúmen. Maiores velocidades auxiliam na permeação de soluto através da membrana porosa, promovendo uma melhor remoção de toxinas, corroborando com a Tabela 4.12.

A Figura 4.62 apresenta as linhas de fluxo da ureia para diferentes amplitudes de alimentação do lúmen, $Q_B/3$ (caso 20), $Q_B/4$ (caso 23), e $Q_B/5$ (caso 24), mantendo constante a frequência de 10 rad/s, no plano XY. Observa-se, de forma análoga ao verificado nos perfis de velocidade (Figuras 4.58 a 4.61), a variação da amplitude influenciando a dinâmica no interior da fibra-oca, com maiores velocidades na região de entrada do lúmen como previsto, auxiliando no transporte convectivo dos contaminantes pela membrana.



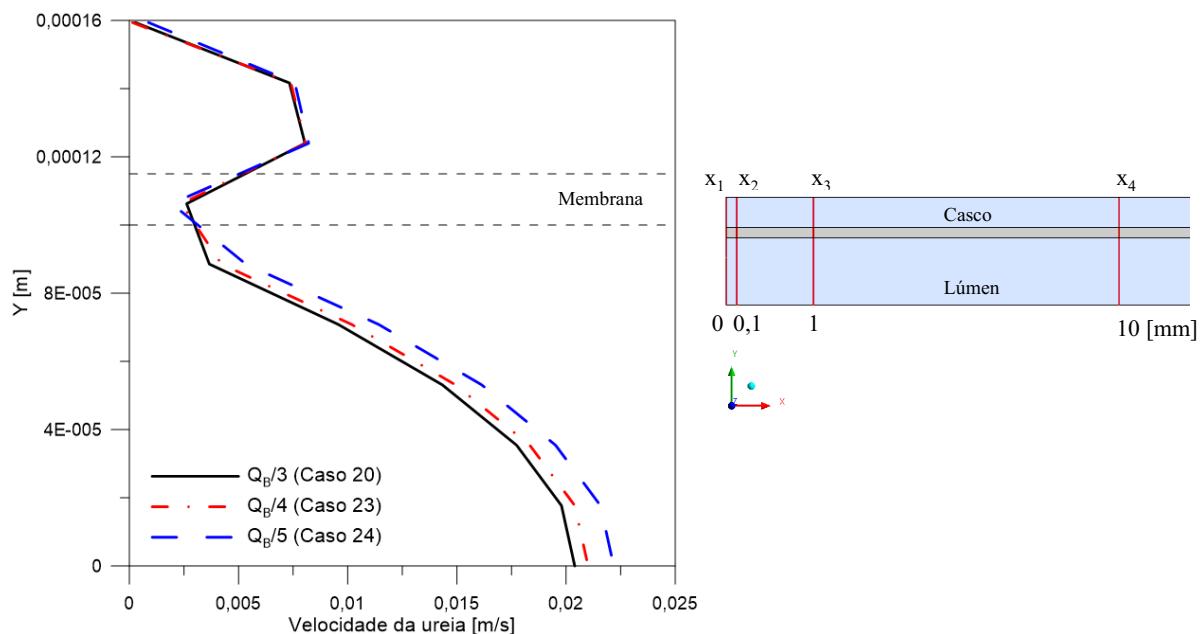


Figura 3.60: Perfil de velocidade da ureia para diferentes amplitudes de alimentação, na posição axial igual a 1 mm, em t igual a 24000 s.

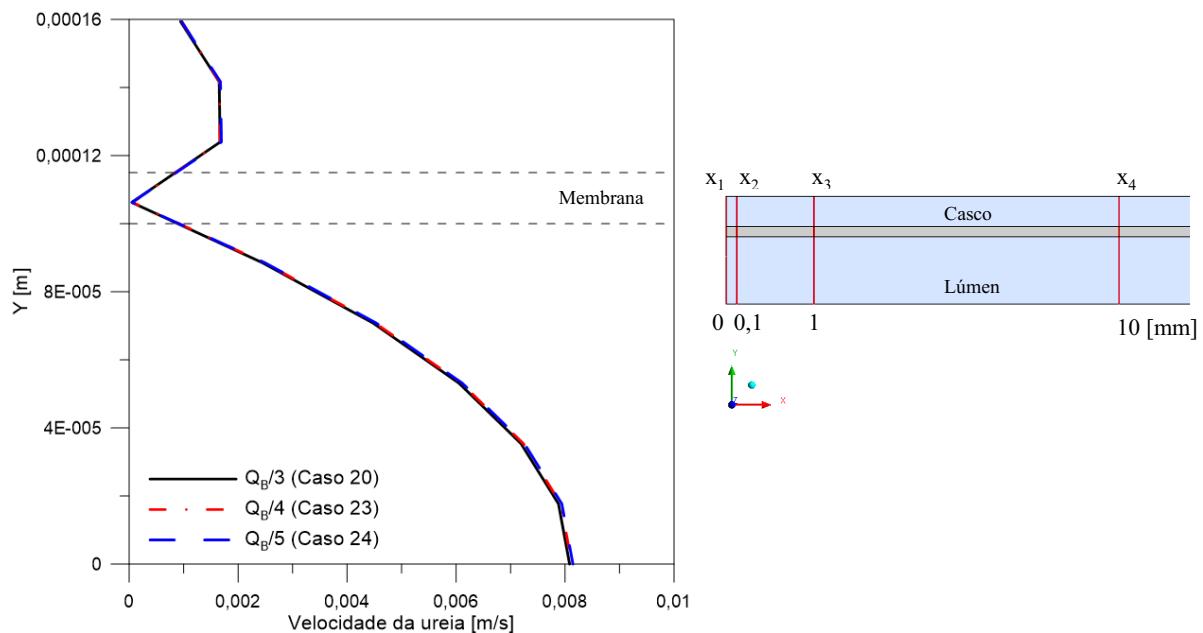


Figura 3.61: Perfil de velocidade da ureia para diferentes amplitudes de alimentação, na posição axial igual a 10 mm, em t igual a 24000 s.

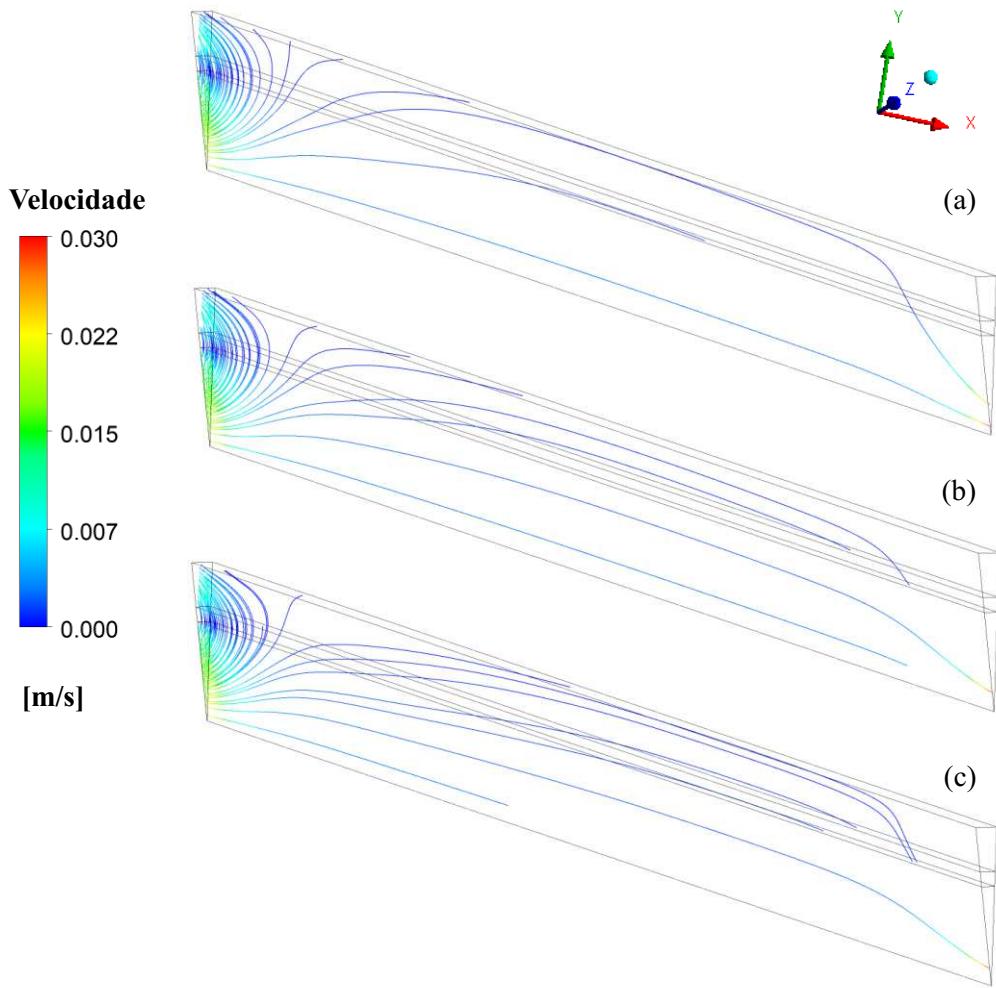


Figura 3.62: Linhas de fluxo da ureia para diferentes amplitudes de alimentação do lúmen: (a) caso 20, (b) caso 23, e (c) caso 24.

A Figura 4.63 mostra os campos de pressão para diferentes amplitudes de alimentação do lúmen, $Q_B/3$ (caso 20), $Q_B/4$ (caso 23), e $Q_B/5$ (caso 24), mantendo constante a frequência de 10 rad/s, no plano XY. De forma semelhante ao observado na Figura 4.55, ao reduzir a amplitude de alimentação do lúmen é possível visualizar uma pequena variação de pressão na região de entrada do lúmen, devido a elevação da velocidade nessa região. Ao reduzir a amplitude, a velocidade é elevada e consequentemente maiores pressões locais são verificadas, facilitando o transporte convectivo de ureia pelo meio poroso.

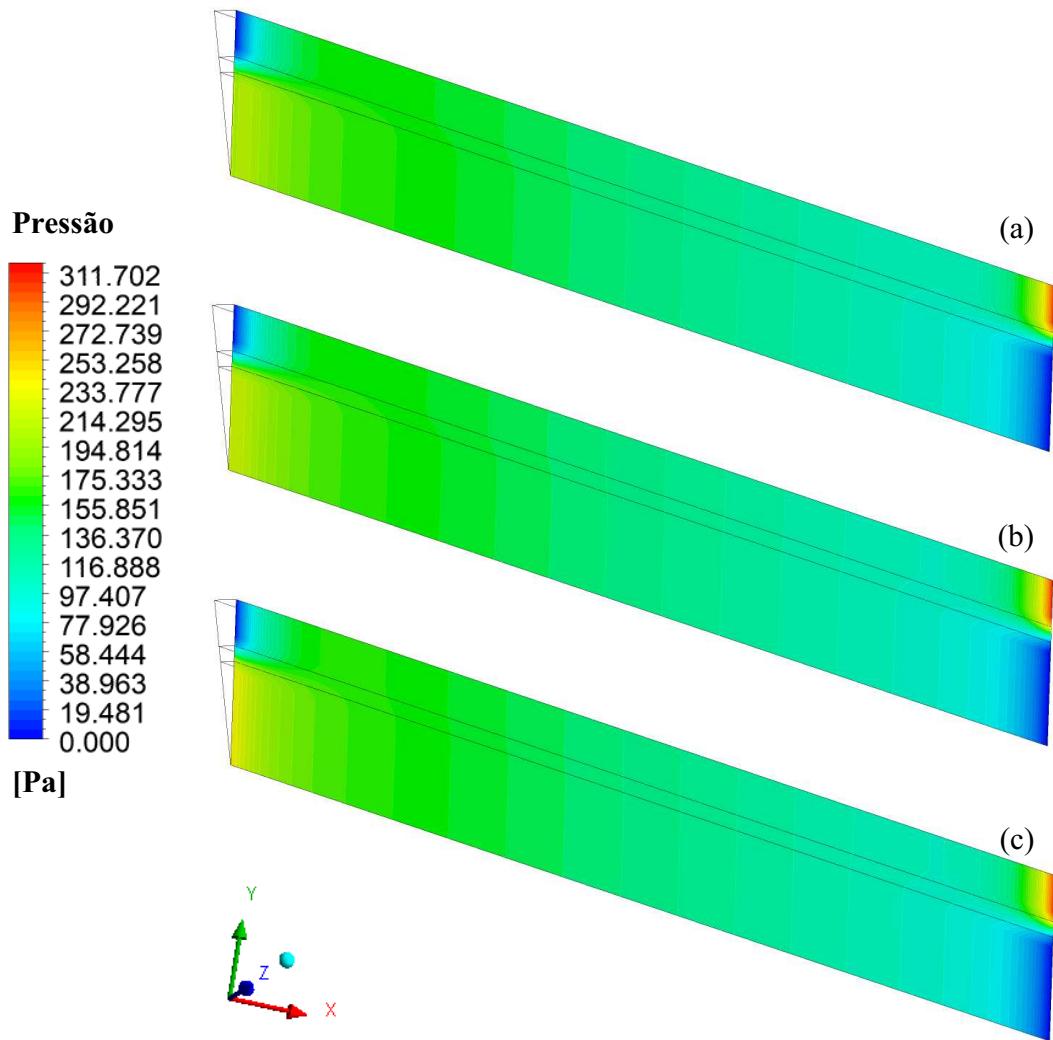


Figura 3.63: Campos de pressão para diferentes amplitudes de alimentação do lúmen: (a) caso 20, (b) caso 23, e (c) caso 24.

4.7 Considerações finais

Com base nas simulações realizados, foi verificado o potencial da introdução de uma alimentação pulsada ao equipamento tradicionalmente utilizado na hemodiálise. Essa contribuição pode, após verificações experimentais, possibilitar a otimização do processo de tratamento dialítico, reduzindo o tempo das seções semanais de diálise e consequentemente, impactar diretamente a qualidade de vida dos pacientes que sofrem dessa comorbidade, além de maximizar o potencial das unidades de diálise ativas, tão escarças em algumas regiões do país, proporcionando a ampliação da oferta desse tratamento essencial para a manutenção da vida de pacientes acometidos pela insuficiência renal.

CAPÍTULO V

Apresenta as principais conclusões obtidas na modelagem do processo de tratamento dialítico em uma seção transversal da membrana de fibra-oca.

5 CONCLUSÕES

Baseado nos resultados numéricos obtidos nas simulações do processo de hemodiálise via membrana de fibra-oca pode-se concluir que:

- ✓ O modelo matemático proporcionou a previsão do comportamento do fluido no interior da membrana de fibra-oca, bem como, o entendimento da fluidodinâmica do equipamento;
- ✓ A comparação dos resultados das simulações com os dados experimentais disponíveis na literatura demonstrou uma boa representatividade do comportamento dos fenômenos do processo;
- ✓ O estudo de convergência de malha pelo método ICM (Índice de Convergência de Malha) assegurou a independência dos resultados obtidos, sendo a malha com 344.267 elementos a mais indicada para desenvolvimento a pesquisa;
- ✓ A análise do campo de fração volumétrica juntamente com as linhas de fluxo da ureia, demonstrou maior permeação nas proximidades da região de entrada do lúmen;
- ✓ A presença de retrofiltração foi constatada, especialmente nas proximidades da região de saída do lúmen, devido a influência da alimentação de dialisato em contracorrente;

- ✓ Na alimentação axial, os resultados numéricos mostram a diminuição do *clearance* com o aumento da resistência viscosa radial, e sua elevação com o aumento do fluxo de alimentação do casco;
- ✓ Maiores fluxos de alimentação, aumentam os gradientes de velocidade e pressão no interior do equipamento, auxiliando no transporte convectivo do contaminante através do meio poroso;
- ✓ Valores de *clearance* semelhantes foram observados para os diferentes contaminantes, com uma porcentagem de remoção de toxinas de aproximadamente 78%;
- ✓ A entrada tangencial com ângulo de alimentação de 60° apresentou uma pequena variação na permeação local do contaminante, entretanto, devido a atuação das forças de arraste em um espaço anular reduzido, a introdução de uma entrada tangencial não teve uma influência significativa sobre o processo de separação.
- ✓ A velocidade de alimentação do lúmen é elevada com o aumento do ângulo de 0° para 60°, entretanto, a influência da entrada tangencial não se propagada pelo domínio;
- ✓ A entrada pulsada com frequência de alimentação do lúmen de 30 rad/s apresentou remoção de contaminante (*Clearance*) superior ao observado para a alimentação axial analisada, demonstrando o potencial da introdução de uma alimentação pulsada no tratamento dialítico;
- ✓ Na alimentação pulsada, o *clearance* aumenta com a elevação da frequência e diminuição da amplitude de alimentação do lúmen.

SUGESTÃO PARA TRABALHOS FUTUROS

- ✓ Avaliar o processo de hemodiálise considerando o sangue como fluido não newtoniano;
- ✓ Estudar tridimensionalmente o processo de hemodiálise;
- ✓ Avaliar a influência das proteínas plasmáticas sobre o tratamento dialítico;
- ✓ Aplicar a metodologia a casos reais.

CAPÍTULO VI

6 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Ahmad, S. (2009). *Manual of clinical dialysis*. Springer Science & Business Media.
- Almohammadi, K. M., Ingham, D. B., Ma, L., & Pourkashan, M. (2013). Computational fluid dynamics (CFD) mesh independency techniques for a straight blade vertical axis wind turbine. *Energy*, 58, 483–493.
- Aronson, J. K. (2016). Meyler's Side Effects of Drugs. In *The International Encyclopedia of Adverse Drug Reactions and Interactions* (pp. 911–912). Elsevier Science.
- Baker, N., Kelly, G., & O'Sullivan, P. D. (2020). A grid convergence index study of mesh style effect on the accuracy of the numerical results for an indoor airflow profile. *International Journal of Ventilation*, 19(4), 300–314.
- Baker, R. W. (2004). Overview of membrane science and technology. *Membrane Technology and Applications*, 3, 1–14.
- Baskurt, O. K., & Meiselman, H. J. (2003). Blood rheology and hemodynamics. *Seminars in Thrombosis and Hemostasis*, 29(5), 435–450.
- Baurmeister, U. (1989). High-Flux Dialysis Membranes; Endotoxin Transfer by Backfiltration Can Be a Problem, *Nephrol. Dial. Transplant*, 4, 89–93.
- Beek, W. J., Muttzall, K. M. K., & Van Heuvel, J. W. (1999). *Transport phenomena*. John Wiley & Sons.
- Casagrande, G., Bianchi, C., Vito, D., Carfagna, F., Minoretti, C., Pontoriero, G., Rombolà, G., Schoenholzer, C., & Costantino, M. L. (2016). Patient-specific modeling of multicompartmental fluid and mass exchange during dialysis. *International Journal of*

Artificial Organs, 39(5), 220–227. <https://doi.org/10.5301/ijao.5000504>

Castro, M. C. M. (2019). Conservative management for patients with chronic kidney disease refusing dialysis. *Brazilian Journal of Nephrology*, 41(1), 95–102.

Celik, I. B., Ghia, U., Roache, P. J., & Freitas, C. J. (2008). Procedure for estimation and reporting of uncertainty due to discretization in CFD applications. *Journal of Fluids Engineering-Transactions of the ASME*, 130(7).

Celik, I. B., & Karatekin, O. (1997). Numerical experiments on application of Richardson extrapolation with nonuniform grids. *ASME Journal of Fluids Engineering*, 119.

Chiesa, M., Mathiesen, V., Melheim, J. A., & Halvorsen, B. (2005). Numerical simulation of particulate flow by the Eulerian–Lagrangian and the Eulerian–Eulerian approach with application to a fluidized bed. *Computers & Chemical Engineering*, 29(2), 291–304.

Choi, Y. K., ju Shin, H., Kim, J. T., & Ryou, H. S. (2015). Investigation on the effect of hematocrit on unsteady hemodynamic characteristics in arteriovenous graft using the multiphase blood model. *Journal of Mechanical Science and Technology*, 29(6), 2565–2571.

Clark, T. W. I., Isu, G., Gallo, D., Verdonck, P., & Morbiducci, U. (2015). Comparison of symmetric hemodialysis catheters using computational fluid dynamics. *Journal of Vascular and Interventional Radiology*, 26(2), 252–259.

Clark, W. R., Gao, D., Neri, M., & Ronco, C. (2017). Solute transport in hemodialysis: advances and limitations of current membrane technology. In *Expanded Hemodialysis* (Vol. 191, pp. 84–99). Karger Publishers.

Cornejo, P., & Farias, O. (2011). Mathematical modeling of coal gasification in a fluidized bed reactor using a Eulerian granular description. *International Journal of Chemical Reactor Engineering*, 9(1).

Cunha, A. de L. (2014). *Tratamento de efluentes da indústria de petróleo via membranas cerâmicas-modelagem e simulação*. Universidade Federal de Campina Grande.

Cunningham, R. (2009). Choosing the best dialysis option in the patient with end-stage kidney disease. *Principles and Practice of Dialysis*. 4th Ed. Philadelphia, PA: Wolters

Kluwer| Lippincott Williams & Wilkins, 297–307.

Costa Pereira, A. B., Magalhães, H. L. F., de Lucena Silva, L. P., Passos, C. A., Gomez, R. S., de Brito Correia, B. R., de Farias Neto, S. R., & de Lima, A. G. B. (2021). Oily Water Treatment by Ceramic Membrane: Modeling and Simulation. *Open Journal of Fluid Dynamics*, 11(01), 1.

Daugirdas, J. T., & Van Stone, J. C. (2001). Physiologic principles and urea kinetic modeling. *Handbook of Dialysis*, 3, 15–45.

Davison, S. N. (2020). Conservative kidney management: caring for patients unlikely to benefit from dialysis. *American Journal of Kidney Diseases*, 75(2), 153–154.

De Rosa, S., Prowle, J. R., Samoni, S., Villa, G., & Ronco, C. (2019). Acute Kidney Injury in Patients With Chronic Kidney Disease. In *Critical Care Nephrology* (3rd ed., pp. 85–89). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-0-323-44942-7.00014-5>

Oliveira, L. N., & Nascimento, E. O. (2014). Determinação semi-empírica do coeficiente de difusão do dosímetro Fricke Xilenol Gel através do Método de Diferenças Finitas. *Scientia Plena*, 10(10).

Ding, W., He, L., Zhao, G., Shu, Z., Cheng, S., & Gao, D. (2003). A novel theoretical model for mass transfer of hollow fiber hemodialyzers. *Chinese Science Bulletin*, 48(21), 2386–2390. <https://doi.org/10.1360/03we0014>

Ding, W., Li, W., Sun, S., Zhou, X., Hardy, P. A., Ahmad, S., & Gao, D. (2015). Three-Dimensional Simulation of Mass Transfer in Artificial Kidneys. *Artificial Organs*, 39(6), E79–E89. <https://doi.org/10.1111/aor.12415>

Dobre, M. A., Meyer, T. W., & Hostetter, T. H. (2015). The Uremic Syndrome. In *Chronic Renal Disease* (pp. 83–91). Academic Press.

Donato, D., Boschetti-de-Fierro, A., Zweigart, C., Kolb, M., Eloot, S., Storr, M., Krause, B., Leypoldt, K., & Segers, P. (2017). Optimization of dialyzer design to maximize solute removal with a two-dimensional transport model. *Journal of Membrane Science*, 541(July), 519–528. <https://doi.org/10.1016/j.memsci.2017.07.018>

- Eloot, S. (2004). *Experimental and numerical modeling of dialysis*. Ghent University.
- Eymard, R., Gallouët, T., & Herbin, R. (2000). Finite volume methods. *Handbook of Numerical Analysis*, 7, 713–1018.
- Field, M. J., Harris, D. C., & Pollock, C. A. (2010). *End-stage kidney disease and replacement of renal function* (pp. 99–107). Churchill Livingstone.
- Finco, D. R. (1997). Kidney function. In *Clinical biochemistry of domestic animals* (pp. 337–400). Academic Press.
- Fluent, A. (2015). Ansys Fluent Tutorial. ESSS.
- Ford, L. L., Ward, R. A., & Cheung, A. K. (2009). *Principles and practice of dialysis* (pp. 1–9). Lippincott Williams & Wilkins.
- Fukuda, M., Yoshimura, K., Namekawa, K., & Sakai, K. (2017). Technical characterization of dialysis fluid flow and mass transfer rate in dialyzers with various filtration coefficients using dimensionless correlation equation. *Journal of Artificial Organs*, 20(2), 145–151. <https://doi.org/10.1007/s10047-016-0942-5>
- Fulker, D., Sayed, Z., Simmons, A., & Barber, T. (2017). Computational fluid dynamic analysis of the hemodialysis plastic cannula. *Artificial Organs*, 41(11), 1035–1042.
- Gartner, L. P., & Hiatt, J. L. (2006). *Color textbook of histology e-book*. Elsevier Health Sciences.
- Garzotto, F., Lorenzin, A., Zaccaria, M., & Clark, W. R. (2019). Solute and water transport in hemodialysis: Dialyzers, flow distribution, and cross-filtration. In *Critical Care Nephrology* (pp. 909–918). Elsevier.
- Geraldes, V., Semião, V., & Pinho, M. N. (2000). Numerical modelling of mass transfer in slits with semi-permeable membrane walls. *Engineering Computations*.
- Glancey, G. (2020). Modeling the transfer of low molecular weight plasma proteins during hemodialysis and online hemodiafiltration. *Artificial Organs*.
- Gostoli, C., & Gatta, A. (1980). Mass transfer in a hollow fiber dialyzer. *Journal of*

Membrane Science, 6, 133–148.

Green, D. (2016). Blood: Vital but Potentially Dangerous. *Linked by Blood: Hemophilia and AIDS*, 27.

Guerrero, E., Muñoz, F., & Ratkovich, N. (2017). Comparison between Eulerian and VOF models for two-phase flow assessment in vertical pipes. *CT&F-Ciencia, Tecnología y Futuro*, 7(1), 73–84.

Guyton, A. C., & Hall, J. E. (2006). *Textbook of medical physiology*. Elsevier Saunders.

Habert, A. C. (2006). *Processos de separação por membranas* (Vol. 3). Editora E-papers.

Huang, S. (2005). Numerical Simulation of Oil-water Hydrocyclone Using Reynolds-Stress Model for Eulerian Multiphase Flows. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 83(5), 829–834.

Ismail, A. F., Abidin, M. N. Z., Mansur, S., Zailani, M. Z., Said, N., Raharjo, Y., Rosid, S. M., Othman, M. H. D., Goh, P. S., & Hasbullah, H. (2019). Hemodialysis Membrane for Blood Purification Process. In *Membrane Separation Principles and Applications* (pp. 283–314). Elsevier.

Jabbar, M. H. A., Shanmugam, A., & Khiew, P. S. (2018). Investigation on Heat and Mass transfer in a Dialyzer Membrane Model for the Development of Dialysate Temperature Controller. *Journal of Artificial Organs*, 1, 22–28.

Junior, J. E. R., Pinto, S. W. L., Canziani, M. E., Praxedes, J. L. S., & Moreira, J. C. M. (2003). Censo SBN 2002: informações epidemiológicas das unidades de diálise do Brasil. *J Bras Nefrol*, 25(4), 188–199.

Kalra, S., McBryde, C. W., & Lawrence, T. (2006). Intracapsular hip fractures in end-stage renal failure. *Injury*, 37(2), 175–184. <https://doi.org/10.1016/j.injury.2005.11.006>

Kanchan, M., & Maniyeri, R. (2019). Computational Study of Fluid Flow in Wavy Channels Using Immersed Boundary Method. In *Soft Computing for Problem Solving* (pp. 283–293). Springer Singapore. <https://doi.org/10.1007/978-981-13-1592-3>

- Keshavarzi, G., Barber, T. J., Yeoh, G. H., & Simmons, A. (2014). Investigation of the 3D flow in hemodialysis venous air traps. *Applied Mechanics and Materials*, 553, 156–161.
- Kim, J. C., Cruz, D., Garzotto, F., Kaushik, M., Teixeria, C., Baldwin, M., Baldwin, I., Nalesto, F., Kim, J. H., & Kang, E. (2013). Effects of dialysate flow configurations in continuous renal replacement therapy on solute removal: computational modeling. *Blood Purification*, 35(1–3), 106–111.
- Kipp, R., & Kellerman, S. P. (2009). Chronic Kidney Disease. In *Pathophysiology of Kidney Disease and Hypertension* (Vol. 157, pp. 145–155). Saunders/Elsevier.
- Klein, E., Holland, F., Lebeouf, A., Donnau, A., & Smith, J. K. (1976). Transport and mechanical properties of hemodialysis hollow fibers. *Journal of Membrane Science*, 1, 371–396. [https://doi.org/10.1016/S0376-7388\(00\)82283-8](https://doi.org/10.1016/S0376-7388(00)82283-8)
- Kleinstreuer, C. (2003). *Two-phase flow: theory and applications*. CRC Press.
- Kotanko, P., Kuhlmann, M. K., & Levin, N. L. (2010). Hemodialysis: Principles and Techniques. In *Comprehensive Clinical Nephrology* (pp. 1053–1059). Mosby.
- Kruczek, B. (2015). Convective transport. *Encyclopedia of Membranes*, 1–3.
- Kwaśniewski, L. (2013). Application of grid convergence index in FE computation. *Bulletin of the Polish Academy of Sciences. Technical Sciences*, 61(1), 123–128.
- Legallais, C., Catapano, G., Von Harten, B., & Baurmeister, U. (2000). A theoretical model to predict the in vitro performance of hemodiafilters. *Journal of Membrane Science*, 168(1–2), 3–15.
- Li, H., Vasquez, S. A., Punekar, H., & Muralikrishnan, R. (2011). Prediction of boiling and critical heat flux using an eulerian multiphase boiling model. *ASME International Mechanical Engineering Congress and Exposition*, 54921, 463–476.
- Liao, Z., Klein, E., Poh, C. K., Huang, Z., Lu, J., Hardy, P. A., & Gao, D. (2005). Measurement of hollow fiber membrane transport properties in hemodialyzers. *Journal of Membrane Science*, 256(1–2), 176–183. <https://doi.org/10.1016/j.memsci.2005.02.032>

Liao, Z., Poh, C. K., Huang, Z., Hardy, P. A., Clark, W. R., & Gao, D. (2003). A numerical and experimental study of mass transfer in the artificial kidney. *J. Biomech. Eng.*, 125(4), 472–480.

Lim, P. S., Lin, Y., Chen, M., Xu, X., Shi, Y., Bowry, S., & Canaud, B. (2018). Precise Quantitative Assessment of the Clinical Performances of Two High-Flux Polysulfone Hemodialyzers in Hemodialysis: Validation of a Blood-Based Simple Kinetic Model Versus Direct Dialysis Quantification. *Artificial Organs*, 42(5), E55–E66. <https://doi.org/10.1111/aor.13011>

Linares, O., Fudin, J., Pham, T., Bettinger, J., Mathew, R., Daly, A., & Schiesser, W. (2015). In silico ordinary differential equation/partial differential equation hemodialysis model estimates methadone removal during dialysis. *Journal of Pain Research*, 8, 417–429. <https://doi.org/10.2147/jpr.s84615>

Lira, D. S. (2018). *Processo de microfiltração de efluente da indústria têxtil utilizando membrana de fibra oca-modelagem e simulação*. Universidade Federal de Campina Grande.

Liu, G.-R., & Quek, S. S. (2003). *The finite element method: a practical course*. Butterworth-Heinemann.

Longest, P. W., & Vinchurkar, S. (2007). Effects of mesh style and grid convergence on particle deposition in bifurcating airway models with comparisons to experimental data. *Medical Engineering & Physics*, 29(3), 350–366.

Lu, Junfeng, & Lu, W.-Q. (2010a). A numerical simulation for mass transfer through the porous membrane of parallel straight channels. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 53(11–12), 2404–2413.

Lu, Junfeng, & Lu, W.-Q. (2010b). Blood flow velocity and ultra-filtration velocity measured by CT imaging system inside a densely bundled hollow fiber dialyzer. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 53(9–10), 1844–1850.

Lu, JunFeng, & Lu, W. (2008). An approximate analytical solution to the ultra-filtration profile in a hemodialysis process between parallel porous plates. *Chinese Science Bulletin*, 53(21), 3402–3408. <https://doi.org/10.1007/s11434-008-0472-5>

Madsen, B. R. (2010). Characterization and Physicochemical Modifications of Polymer Hollow Fiber Membranes for Biomedical and Bioprocessing Applications. *All Graduate Theses and Dissertations*, 577.

Magalhães, H. L. F., de Lima, A. G. B., de Farias Neto, S. R., de Almeida, A. F., de Andrade, T. H. F., & Brandão, V. A. A. (2018). Ceramic Membranes: Theory and Engineering Applications. In *Transport Phenomena in Multiphase Systems* (pp. 111–137). Springer.

Maliska, C. R. (1995). *Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional: Fundamentos e coordenadas generalizadas*. LTC Livros Técnicos e Científicos.

Manninen, M., Taivassalo, V., & Kallio, S. (1996). *On the mixture model for multiphase flow*.

Moaveni, S. (1999). *Finite element analysis theory and application with ANSYS*. Pearson Education India.

Motta, V. T. (2009). Rim e Função Renal. *Bioquímica Clínica: Princípios e Interpretações*, 16, 246–271.

Moukalled, F., Mangani, L., & Darwish, M. (2016). *The finite volume method in computational fluid dynamics* (Vol. 113). Springer.

Nascimento, J. B. da S. do. (2017). *Modelagem e simulação de um vaso separador horizontal bifásico*.

Neves, P. D. M. de M., Sesso, R. de C. C., Thomé, F. S., Lugon, J. R., & Nascimento, M. M. (2020). Censo Brasileiro de Diálise: análise de dados da década 2009-2018. *Brazilian Journal of Nephrology*, 42(2), 191–200.

Nunes, S. A. (2019). *Modelagem e simulação do tratamento de água produzida usando um separador ciclônico filtrante*. Universidade Federal de Campina Grande.

Oliveira Neto, G. L., Oliveira, N. G. N., Delgado, J. M. P. Q., Nascimento, L. P. C., Magalhães, H. L. F., Oliveira, P. L. de, Gomez, R. S., Farias Neto, S. R., & Lima, A. G. B. (2021). Hydrodynamic and Performance Evaluation of a Porous Ceramic Membrane Module Used on the Water–Oil Separation Process: An Investigation by CFD. *Membranes*, 11(2), 121.

- Paudel, S., & Saenger, N. (2017). Grid refinement study for three dimensional CFD model involving incompressible free surface flow and rotating object. *Computers & Fluids*, 143, 134–140.
- Petrila, T., & Trif, D. (2004). *Basics of fluid mechanics and introduction to computational fluid dynamics* (Vol. 3). Springer Science & Business Media.
- Pittard, J. D. (2008). Safety Monitors in Hemodialysis. In *Handbook of Dialysis Therapy* (pp. 188–223). Elsevier .
- Quemada, D. (1983). General features of blood circulation in narrow vessels. In *Arteries and arterial blood flow* (pp. 13–119). Springer-Verlag.
- Ribeiro, R. D. C. H. M., Oliveira, G. A. S. A., Ribeiro, D. F., Bertolin, D. C., Cesarino, C. B., Lima, L. C. E. Q., & Oliveira, S. M. (2008). Caracterização e etiologia da insuficiência renal crônica em unidade de nefrologia do interior do Estado de São Paulo. *ACTA Paulista de Enfermagem*, 21(spe), 207–211. <https://doi.org/10.1590/S0103-21002008000500013>
- Richardson, L. F., & Gaunt, J. A. (1927). VIII. The deferred approach to the limit. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical or Physical Character*, 226(636–646), 299–361.
- Roache, P. J. (1994). *Perspective: a method for uniform reporting of grid refinement studies*.
- Ronco, C., Brendolan, A., Crepaldi, C., Rodighiero, M., & Scabardi, M. (2002). Blood and dialysate flow distributions in hollow-fiber hemodialyzers analyzed by computerized helical scanning technique. *Journal of the American Society of Nephrology*, 13(suppl 1), S53–S61.
- Scopus, B. de dados da. (2021). *Scopus*.
- Serfass, E. J., & Troutner, V. H. (1970). *Portable dialysate supply system*. Google Patents.
- Sesso, R. C., Lopes, A. A., Thomé, F. S., Lugon, J. R., & Martins, C. T. (2017). Brazilian Chronic Dialysis Survey 2016. *Jornal Brasileiro de Nefrologia*, 39(3), 261–266. <https://doi.org/10.5935/0101-2800.20170049>
- Shalhub, S., Dua, A., & Shin, S. (2017). *Hemodialysis Access: Fundamentals and Advanced*

Management. Springer.

Singh, R. (2005). Introduction to membrane technology. In *Hybrid Membrane Systems for Water Purification* (pp. 1–56). Elsevier.

Snisarenko, D., Pavlenko, D., Stamatialis, D., Aimar, P., Causserand, C., & Bacchin, P. (2017). Insight into the transport mechanism of solute removed in dialysis by a membrane with double functionality. *Chemical Engineering Research and Design*, 126, 97–108. <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2017.08.017>

Sokolichin, A., Eigenberger, G., Lapin, A., & Lübert, A. (1997). Dynamic numerical simulation of gas-liquid two-phase flows Euler/Euler versus Euler/Lagrange. *Chemical Engineering Science*, 52(4), 611–626.

Stamatialis, D. F., Papenburg, B. J., Girones, M., Saiful, S., Bettahalli, S. N. M., Schmitmeier, S., & Wessling, M. (2008). Medical applications of membranes: drug delivery, artificial organs and tissue engineering. *Journal of Membrane Science*, 308(1–2), 1–34.

Star, R. A. (1998). Treatment of acute renal failure. *Kidney International*, 54(6), 1817–1831.

Tu, J., Inthavong, K., & Ahmadi, G. (2013). Generation of Computational Mesh for CFPD Simulations. In *Computational Fluid and Particle Dynamics in the Human Respiratory System* (pp. 73–99). Springer.

Tu, J., Yeoh, G.-H., & Liu, C. (2018). CFD Mesh Generation: A Practical Guideline. In *Computational Fluid Dynamics: A Practical Approach* (pp. 125–154). Butterworth-Heinemann.

Van Gelder, M. K., Jong, J. A. W., Folkertsma, L., Guo, Y., Blüchel, C., Verhaar, M. C., Odijk, M., Van Nostrum, C. F., Hennink, W. E., & Gerritsen, K. G. F. (2020). Urea removal strategies for dialysate regeneration in a wearable artificial kidney. *Biomaterials*, 234, 119735.

Vanholder, R., Smet, R., Glorieux, G., Argilés, A., Baurmeister, U., Brunet, P., Clark, W., Cohen, G., Deyn, P. P., Deppisch, R., Descamps-Latscha, B., Henle, T., Jorres, A., Lemke, H. D., Massy, Z. A., Passlick-Deetjen, J., Rodriguez, M., Stegmayr, B., Stenvinkel, P., ... Zidek, W. (2003). Review on uremic toxins: Classification, concentration, and interindividual

variability. *Kidney International*, 63, 1934–1943. <https://doi.org/10.1046/j.1523-1755.2003.00924.x>

Vieira, R. S. T. (2011). *Técnicas para geração de malhas de quadriláteros convexos e sua aplicação em reservatórios naturais*.

Wu, Y.-S. (2016). Flow-Governing Equations and Mathematical Models. In *Multiphase Fluid Flow in Porous and Fractured Reservoirs* (pp. 29–47). Gulf Professional Publishing.

Yahya, M. B., Chiboub, A., Rajhi, A., & Kahloul, A. (2016). Measurement of water transfer changes during hemodialysis cycle. *2nd International Conference on Advanced Technologies for Signal and Image Processing, ATSIP 2016*, 313–318. <https://doi.org/10.1109/ATSIP.2016.7523098>

Yeh, H., Bortecen, K. H., Shaked, A., & Markmann, J. F. (2007). *Renal Transplantation* (pp. 789–804). Elsevier Health Sciences.

Yeoh, G. H., & Tu, J. (2019). Chapter 3-Solution Methods for Multi-Phase Flows. *Computational Techniques for Multiphase Flows*, 85–226.

Zhou, X., Liu, Z., Shu, Z., Ding, W., Du, P., Chung, J., Liu, C., Heimfeld, S., & Gao, D. (2011). A Dilution-Filtration System for Removing Cryoprotective Agents. *Journal of Biomechanical Engineering*, 133(2), 021007. <https://doi.org/10.1115/1.4003317>