

Talita Felipe de Vasconcelos

*Transporte de Partículas em Estruturas
Irregulares: Aplicações em Fisiologia
Pulmonar, Fraturas e Meios Porosos*

Fortaleza – CE

Junho / 2008

Livros Grátis

<http://www.livrosgratis.com.br>

Milhares de livros grátis para download.

Talita Felipe de Vasconcelos

*Transporte de Partículas em Estruturas
Irregulares: Aplicações em Fisiologia
Pulmonar, Fraturas e Meios Porosos*

Tese apresentada ao Departamento de Física
da Universidade Federal do Ceará, como
parte dos requisitos para a obtenção do Tí-
tulo de Doutor em Física.

Orientador:

Prof. Dr. José Soares de Andrade Júnior

DOUTORADO EM FÍSICA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
CENTRO DE CIÊNCIAS
UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ.

Fortaleza – CE

Junho / 2008

Talita Felipe de Vasconcelos

*Transport de Particules dans les Structures
Irregulières: Applications en Physiologie
Pulmonaire, pour les Fractures et en Milieux
Poreux*

Thèse de doctorat présentée à l'Ecole Polytechnique comme élément des conditions pour l'obtention du grade de Docteur en Physique.

Orientador:
M. Marcel Filoche

DOCTORAT EN PHYSIQUE
LABORATOIRE DE PHYSIQUE DE LA MATIÈRE CONDENSÉE
ECOLE POLYTECHNIQUE.

Fortaleza – CE

Juin / 2008

Dedicatória

A você, Mamãe, que pela imensidão de seu amor, tem um pouco de Deus; pela constância de sua dedicação, tem muito de anjo; pela fortaleza de seu espírito, tem um pouco de rocha; pela doçura de seus gestos, tem muito de flor. Todas as conquistas que eu, porventura, vier a somar nesta, e em outras vidas, serão eternamente dedicadas a você.

Agradecimentos

Considero que a elaboração de uma tese de doutorado é um produto coletivo, embora sua redação, responsabilidade e a tensão pré-defesa sejam predominantemente individuais. Sendo assim, várias pessoas contribuíram para que este trabalho chegasse a bom termo. A todas elas registro minha sincera gratidão. Todos vocês são co-autores deste trabalho.

- Ao professor José Soares de Andrade Júnior, pela confiança depositada em mim e pela orientação firme e segura ao longo dos seis anos em que integrei seu grupo de pesquisa, especialmente durante o desenvolvimento deste trabalho. Sua forma exigente, crítica e criativa de conduzir a pesquisa científica, certamente, deram norte a este trabalho, facilitando o alcance de nossos objetivos. Ao Soares, meus sinceros agradecimentos.
- Je remercie Bernard Sapoval et Marcel Filoche pour m'avoir bien guidé et pour l'immense dévouement dépensé au long de la réalisation de ce travail. L'obstination avec laquelle ils se consacrent à la science et à la recherche est, certainement, un grand stimule à moi et auxquels qui possèdent le plaisir de sa convivialité toujours aussi harmonieuse et gratifiante. Avec eux j'ai eu l'occasion d'enrichir ma connaissance et leurs arguments scientifiques ainsi que leurs enseignements marqueront pour toujours ma formation comme chercheuse et être humain.
- Ao professor Josué Mendes Filho, chefe do departamento de Física da Universidade Federal do Ceará, por sua incontestável determinação em favor desta instituição.
- Ao professor Paulo de Tarso Cavalcante Freire, coordenador do curso de pós-graduação em Física da Universidade Federal do Ceará.
- Aos professores Gil de Aquino Farias e James Grotberg, por fazerem parte da banca examinadora durante a defesa desta tese.
- Aos colegas do grupo de pesquisa do qual faço parte, em especial aos professores Ascânio Araújo e André Auto, pela solicitude e atenção que dedicaram a mim durante os momentos em que precisei de auxílio.
- Je remercie Benjamin Mauroy pour sa disponibilité et patience pendant mon stage à l'Ecole Polytechnique.
- Aos professores Hans Herrmann e Murilo Almeida, por seus questionamentos e contribuições na etapa de qualificação deste trabalho.

- Ao professor Valder Nogueira Freire pela orientação durante minha iniciação científica.
- Aos professores do departamento de Física da Universidade Federal do Ceará que contribuíram para a minha formação acadêmica.
- Aux chercheurs et aux collaborateurs du Laboratoire de Physique de la Matière Condensée (PMC) de l'Ecole Polytechnique qui ont beaucoup contribué pour ma formation scientifique.
- Ao colega Samyr Jácome, por ter assumido, na semana precedente à minha defesa de tese, as disciplinas que ministro para os cursos de Engenharia.
- À minha amada mãe, Eloneid. Meu alicerce, meu espelho, minha fortaleza. Agradeço pela glória de nela se ter gerado a minha vida. Por me acolher em seus braços incansáveis e, neste abraço, eu encontrar condição de prolongar seu sangue e coração. Por tudo que ao ouvido me cantou, me ensinou, me mostrou. É impossível expressar com palavras o quanto lhe sou grata por ter me dado a vida, por ser a mulher mais fantástica do meu universo e por ser um exemplo vivo de que sempre é possível ir mais além depois de se pensar que não se pode mais. Devo a ela tudo o que sou e que ainda serei. Foi ela quem tudo fez.
- Ao meu querido pai, Dimas, por todo o amor e candura que vejo em seus olhos quando se dirige a mim. Agradeço pela sua mão forte que foi meu leme, que me deu rumo, que foi meu prumo. Obrigada por conseguir me transmitir palavras de carinho mesmo em silêncio, por vibrar com cada degrau galgado na escada da minha vida, por toda a confiança que deposita em minha pessoa. Seu aplauso me impulsiona a enxergar cada vez mais longe.
- Aos meus irmãos Raquel, Eduardo Augusto e Pedro Henrique, necessários e imprescindíveis ao meu equilíbrio porque somos todos o desdobramento de uma mesma semente. A existência deles me encoraja a seguir em frente pela vida porque tenho a plena certeza de que, independente do que aconteça, eles estarão sempre comigo.
- Ao meu noivo Felipe, pelas horas, pelos sorrisos, pelas cores, pelos sabores... Pela vida que ele deu à minha vida... Pelo meu destino que ele mudou. Pela doçura que nunca abandona o seu olhar no meu, pelas lágrimas que ele não deixa correr, pelo milagre que ele é para mim. Pela magia de uma outra vida que ele me deixa experimentar quando estou ao seu lado, pelo mundo que juntos criamos. Pelo tempo

que sabemos parar. Pela incrível capacidade de deixar o mundo pousado aos meus pés. Obrigada por jamais desacreditar de mim.

- À minha "boadrasta", Socorro Braun, e minha "irmã-torta" Jade, sempre tão preocupadas comigo e com o meu bem-estar. Obrigada por estarem sempre dispostas a me ajudar em qualquer situação e principalmente, pelo apoio que me conforta e me fortalece para superar meus desafios.
- Às amigas Ada Sanders, Alane Rimena e Cecília Cavalcante por terem sido semente durante a confecção deste trabalho, me ajudando a plantar alegria e confiança e estando junto a mim para colher os risos e as lágrimas. Agradeço por me emprestarem o verbo, o ombro e o tempo e por terem imprimido pegadas indestrutíveis em minha história.
- Aos amigos Adriana Correia, Alex Fabiano Cortez, Bernardo Moreira, Izilda Johanson, Françoise Peeters, João Thiago Amaral, Livia Menezes, Lúcia Cervini, Séverine Dautzenberg, Stephanie Bender e Vanessa Bivar. Tanto afeto em tão pouco tempo. Tempo que se confunde na memória, que se estica e alonga, ou se aperta para caber na mala. A cronologia em mais de uma centena de fotos. Registros de uma vida em comum. Encontros ao acaso que me deram amigos de presente. Mais que isso. Vocês foram a minha família postíça em Paris. Sinto falta. Um ciclo se fechou e outro se abre. A vida não é a mesma sem o colorido de vocês.
- Je remercie Amel Slimani, Christine Bathelt, Erwana Riou, Gaela Riou, Hélène Guilbaud, Jacqueline Samson, Lynda Amirouche, Sébastien Nguyen, Teodora Ignat et Vincent Tariel. Avec vous j'ai réussi à tromper ma nostalgie, à faire fuir ma solitude et à m'essuyer les larmes. Merci pour cette année où je suis restée parmi vous, pour m'avoir appris la réelle signification du mot "amitié" et pour m'avoir ouvert les portes de votre monde.
- À amiga Mylene Moura que, mesmo à distância, se fez presente em todos os momentos importantes da minha vida e sempre fez chegar, sob diversas formas, seu incentivo e seu carinho de maneira incondicional.
- À amiga Melilla Cintra por cada gesto de amizade, por cada palavra certa dita na hora certa e por todos os instantes de seu sábio silêncio. Sem sua presença, querida, meu caminho teria sido mais árduo. Obrigada pelo apoio absoluto, pela certeza da mão estendida e pela cumplicidade que não se explica, apenas se vive.

- À doce e querida amiga Milena Fernandes. Metade anjo, metade flor. Uma moça cheia de graça que se tornou quase uma irmã para mim. E das coisas que reconheço nela está uma transparência desmedida e uma crença desenfreada nas coisas que a gente pode fazer com amor, como talvez ela nem perceba direito. Obrigada por ter sido meu anjo da guarda numa terra de gigantes. Que nossa amizade seja eterna, apesar dos desencontros da vida.
- Ao professor Ulisses Castro pela beleza com que me apresentou à Física. Talvez ele não saiba que se tornou o alicerce do meu encanto por esta ciência.
- Aos amigos, por toda a solicitude e atenção que dedicaram a mim durante os momentos em que precisei de auxílio.
- Aos funcionários do Departamento de Física, especialmente às secretárias da pós-graduação Rejane e Ana Cleide, às secretarias do departamento Creuza e Vera e à funcionária Irenilda.
- Je remercie les secrétaires du laboratoire PMC, Eve Brunswic et Annie Stephan, pour être toujours disponibles à m'aider, surtout pendant mon arrivé en France.
- À CAPES - Fundação Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - e ao CNPq - Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico - pelo apoio financeiro, fato este que muito contribuiu para a viabilização desta tese.

"Ontem, eu fiquei horas esquecidas assistindo ao trabalho das formigas, indiferentes a tudo, na sua meta de construir. E aprendi o quanto é importante fazer... Fazer sempre e de tudo para alcançar os galhos mais altos da árvore da vida e melhor se alimentar do fruto ali quase esquecido: a paz. Oh, Deus! Torna-me indiferente a tudo que não seja construir com meu trabalho um mundo novo, onde só pessoas, bichos e coisas existam porque amam e entendem o amor como único sentido da vida."

Djavan

Resumo

Este trabalho é dedicado ao estudo do processo de transporte de fluido e massa através de sistemas irregulares. Na primeira parte desta tese, abordamos a dinâmica do escoamento ocorrendo através de canais rugosos auto-afins. Essencialmente, os aspectos relevantes na compreensão do escoamento em sistemas irregulares são o *estrutural*, intimamente associado à conformação topológica e morfológica do meio, e o *fenomenológico*, que faz referência aos mecanismos de transporte. Portanto, inicialmente descrevemos a topologia e a morfologia do sistema irregular. Consideramos que a geometria das interfaces que constituem o duto apresenta propriedades estatísticas invariantes sob transformações de escala anisotrópicas, ou seja, possuem correlações espaciais de longo alcance e podem, portanto, ser caracterizadas como superfícies fractais auto-afins. Mostramos que o caráter irregular desta geometria adiciona um grau de complexidade ao problema do escoamento, refletindo-se nas propriedades dos campos de velocidade e pressão. Como complementação deste estudo, investigamos o processo do transporte de partículas com massa arrastadas por um fluido escoando no interior das estruturas rugosas anteriormente mencionadas. Investigamos como a rugosidade da estrutura influencia fortemente a natureza deste fenômeno e estudamos o comportamento do tempo médio de trânsito das partículas no interior destes dutos rugosos, em função de parâmetros como o número de Stokes e o coeficiente de restituição. Mostramos que o transporte de partículas em dutos com geometria auto-afim é caracterizado pela existência de quatro regimes bem distintos entre si e determinados pela competição localizada entre dois mecanismos: as interações partícula-estrutura (colisões) e partícula-fluido (escoamento).

Através de simulações numéricas de partículas não-Brownianas transportadas por um fluido em um meio poroso, investigamos a influência da geometria e dos efeitos inerciais sobre a eficiência de captura de uma matriz sólida. No caso de um arranjo periódico de cilindros e sob a ação da gravidade, nossos resultados revelam que $\delta \sim St$, onde δ é a eficiência de captura de partícula, e St é o número de Stokes. Na ausência de gravidade, observamos uma típica transição de segunda ordem entre a captura e a não-captura de partículas, que pode ser expressa como $\delta \sim (St - St_c)^\alpha$, com um expoente $\alpha \approx 0.5$, onde St_c é o número de Stokes crítico. Também realizamos simulações para o escoamento através de um meio poroso aleatório e confirmamos que este comportamento para a captura de partículas é consistente com o modelo periódico simples.

Além disso, abordamos outro aspecto do processo de transporte de fluido e massa através de sistemas irregulares, nomeadamente o transporte e captura de partículas ar-

rastadas por um escoamento hidrodinâmico no interior de uma estrutura arborescente. Uma vez caracterizado o escoamento nestas estruturas complexas, passamos efetivamente à abordagem do processo de transporte de partículas com massa arrastadas por um fluido, integrando-se numericamente a equação do movimento para cada partícula. O objetivo deste estudo é compreender, principalmente, a dinâmica de captura de partículas e poluentes no interior das vias respiratórias. No entanto, a aproximação realizada foi mais abrangente. Examinamos a influência que certos parâmetros físicos e geométricos, tais como os fatores de homotesia, os ângulos de ramificação e o número de Reynolds, exercem sobre o processo citado. Esta abordagem nos permitiu pôr em destaque uma universalidade notável das leis de captura nas estruturas ramificadas.

Abstract

This work is dedicated to the study of the transport process of fluid flow and mass through irregular systems. In the first part of this thesis, we approach the transport of fluids in self-affine fractured channels. Essentially, the important aspects to the comprehension of the fluid flow in an irregular geometry are the *structural* one, associated to the topological and morphologic conformation of the fractured media, and the *phenomenological* one, that refers to the transport mechanisms. Therefore, initially we describe the topology and the morphology of the fracture network. We consider that the geometry of the interfaces that constitutes the channel has statistical properties that are invariant under anisotropic transformations of scale, i.e. they possess long-range correlations in space and, than, can be characterized as self-affine fractals surfaces. We show that the irregular character of this geometry adds a degree of complexity to the problem of the fluid flow that substantially affects the statistical properties of the velocity and pressure fields. As a complement of this study, we investigate the process of the particle transport with mass dragged by a fluid that flows into the rough structures previously mentioned. We investigate how the roughness influences the nature of the transport of particles by studying the behavior of their average transit time, as a function of parameters like the Stokes number and the coefficient of restitution. We show that the particle transport in ducts with self-affine geometry displays a complex behavior that is characterized by the existence of four regimes and determined by the local competition between two mechanisms: the interaction between particle and structure (collisions) and between particle and fluid (flow).

We investigate through numerical calculation of non-Brownian particles transported by a fluid in a porous medium, the influence of geometry and inertial effects on the capture efficiency of the solid matrix. In the case of a periodic array of cylinders and under the action of gravity, our results reveal that $\delta \sim St$, where δ is the particle capture efficiency, and St is the Stokes number. In the absence of gravity, we observe a typical second order transition between non-trapping and trapping of particles that can be expressed as $\delta \sim (St - St_c)^\alpha$, with an exponent $\alpha \approx 0.5$, where St_c is the critical Stokes number. We also perform simulations for flow through a random porous structure and confirm that its capture behavior is consistent with the simple periodic model.

Moreover, we inquire into another aspect of the transport process of fluid and mass through irregular systems, namely the transport and capture of particles dragged by a hydrodynamic flow into a ramified structure. After we solve the fluid flow through

these complex structures, we pass effectively to the investigation of the transport process of massive particle dragged by a fluid, through numerical integration of the movement equation for each particle. The aim of this study is to understand, mainly, the dynamics of particle and pollutants capture into the airways. Nevertheless, the selected approach was broader. We examine the influence that certain physical and geometric parameters, such as the homothety factors, the bifurcation angles and the Reynolds number, exert on the mentioned process. This approach allowed us to clarify a remarkable universality of the laws of capture in the ramified structures.

Résumé

Le travail présenté a porté sur l'étude des processus de transport de fluide et de masse au travers des systèmes irréguliers. Dans la première partie de cette thèse, nous avons abordé la dynamique des écoulements au travers de canaux rugueux auto-affines. La compréhension des écoulements dans les géométries ramifiées comporte un aspect *structural*, intimement associé à la conformation topologique et morphologique de la géométrie, et le *phénoménologique*, qui est lié aux mécanismes de transport.

Ainsi, nous avons tout d'abord décrit la topologie et la morphologie du système ramifié. Nous avons considéré que la géométrie des interfaces qui constituent le tuyau présente des propriétés statistiques invariantes sous des transformations d'échelle anisotropes, autrement dit, des corrélations spatiales à longue portée ("long range correlations"). Ces interfaces peuvent en conséquence être représentées par des surfaces fractales auto-affines. Nous avons montré que l'irrégularité de cette géométrie ajoute un degré de complexité au problème de l'écoulement, et se reflète dans les propriétés de champs de vitesse et pression.

En complément de cette étude, nous avons examiné le processus de transport de particules massiques entraînées par un fluide s'écoulant à l'intérieur des structures rugueuses précédemment mentionnées. Nous avons examiné les raisons pour lesquelles la rugosité de la structure influence fortement la nature de ce phénomène et avons analysé le comportement du temps moyen de transit des particules au travers de ces canaux rugueux, en fonction de quelques paramètres comme le nombre de Stokes et le coefficient de restitution. Nous avons montré que le transport de particules dans des géométrie tubulaires et arborescentes auto-affines se caractérise par l'existence de quatre régimes bien distincts, déterminés par la compétition locale entre deux mécanismes : les interactions particule-structure (les collisions) et particule-fluide (l'écoulement).

En simulant numériquement le comportement de particules non-browniennes transportées par un fluide dans un milieu poreux, nous avons examiné l'influence de la géométrie et des effets inertiels sur l'efficacité de capture d'une matrice solide. Dans le cas d'un arrangement périodique de cylindres et sous l'action de la gravité, nos résultats révèlent que $\delta \sim St$, où δ représente l'efficacité de capture de la particule, et St est le numéro de Stokes. En l'absence de gravité, nous avons observé une transition de deuxième ordre entre la capture et la non-capture de particules, que l'on peut exprimer sous la forme $\delta \sim (St - St_c)^\alpha$, où l'exposant α vaut environ 0,5 et où St représente le nombre de Stokes critique. Nous avons également réalisé des simulations numériques de l'écoulement

au travers d'un milieu poreux aléatoire et avons confirmé que ce comportement pour la capture de particules est cohérent avec le modèle périodique simple.

Nous avons enfin exploré un autre aspect du processus de transport de fluide et masse au travers des systèmes irréguliers, en nous intéressant notamment au transport et à la capture de particules entraînées par un écoulement hydrodynamique dans une structure arborescente. Ayant auparavant caractérisé l'écoulement à l'intérieur de ces structures complexes, nous nous sommes attaqués à l'étude du processus de transport de particules massiques entraînées par un fluide, en intégrant numériquement l'équation de mouvement pour chaque particule. Bien que l'un des objectifs avoués de cette étude fût en outre de comprendre la capture des particules et des polluants dans les voies aériennes pulmonaires, l'approche choisie a cependant été plus large. Nous avons ainsi examiné l'influence de paramètres physiques et géométriques tels que les facteurs d'homothétie, les angles de branchements, le nombre de Reynolds, en explorant des valeurs des paramètres non pertinentes sur le simple plan biologique. Cette approche a ainsi permis de mettre en lumière une universalité remarquable des lois de capture dans les structures branchées, universalité qui simplifie considérablement la compréhension et la modélisation de la capture des particules dans ce type de structures.

Sumário

Lista de Figuras

1	Introdução	p. 27
2	Escoamento Viscoso em Dutos Rugosos	p. 31
2.1	Introdução	p. 31
2.2	Geometria da Rugosidade Auto-Afim	p. 36
2.2.1	Largura Efetiva	p. 39
2.3	Escoamento Viscoso em Dutos Lisos	p. 40
2.4	Escoamento Viscoso em Dutos Rugosos	p. 43
2.5	Resultados e Discussão	p. 52
3	Transporte de Partículas em Dutos Rugosos	p. 58
3.1	Introdução	p. 58
3.2	Transporte de Partículas	p. 60
3.3	Resultados e discussão	p. 63
4	Filtragem de Partículas em Estruturas Irregulares	p. 71
4.1	Introdução	p. 71
4.2	Captura inercial em um meio poroso periódico	p. 76
4.3	Filtragem em um meio desordenado	p. 79
5	O aparelho respiratório	p. 85
5.1	Funções do sistema respiratório	p. 87

5.2	Morfologia do aparelho respiratório	p. 91
5.2.1	A árvore respiratória	p. 92
5.2.2	A estrutura de trocas gasosas	p. 96
5.3	Mecânica da ventilação pulmonar	p. 99
5.3.1	Pressão pleural e pressão alveolar	p. 101
5.3.2	Efeito da caixa torácica sobre a expansibilidade pulmonar . . .	p. 105
5.3.3	Volumes e capacidades pulmonares	p. 106
5.3.4	Transição entre convecção e difusão	p. 108
5.3.5	As trocas gasosas	p. 109
5.3.5.1	Passagem através da membrana	p. 110
5.3.5.2	Captura pela hemoglobina	p. 111
5.4	O problema da mistura de gases no pulmão	p. 112
5.5	Capacidade difusiva pulmonar	p. 116
5.5.1	O modelo morfométrico de Weibel	p. 116
5.5.1.1	O tecido	p. 117
5.5.1.2	O plasma	p. 118
5.5.1.3	Os eritrócitos	p. 119
5.5.2	Capacidade difusiva funcional	p. 119
6	Escoamento Viscoso em Estruturas Ramificadas	p. 121
6.1	Geometria da Estrutura Ramificada	p. 124
6.2	Escoamento Viscoso em Geometrias Ramificadas	p. 127
6.3	Resultados e Discussão	p. 129
7	Transporte de Partículas em Estruturas Ramificadas	p. 134
7.1	Transporte de Partículas	p. 136
7.2	Resultados e Discussão	p. 138

8	Conclusão	p. 161
9	Apêndice A	p. 167
9.1	Parâmetros geométricos dos ramos	p. 167
9.2	Modelização das ramificações	p. 168
9.2.1	Passagem do modelo filiforme para o modelo $3D$	p. 168
9.2.2	Construção geométrica de uma ramificação	p. 170
9.3	Métodos Numéricos	p. 172
	Referências	p. 174

Lista de Figuras

- 1 Célula de Hele-Shaw, que consiste de duas placas transparentes separadas por uma distância b . O fluido é injetado no interior destas placas através do centro da estrutura. p. 32
- 2 Perfil de uma estrutura rugosa auto-afim com comprimento $L/\delta = 256$ e expoente de Hurst $\zeta = 0.8$. O canal auto-afim bidimensional possui simetria de eixos paralelos em relação à direção média de escoamento. . p. 37
- 3 Espessura efetiva do duto para duas configurações distintas: (a) canal com inclinação longa e (b) canal com inclinação curta. p. 39
- 4 Volume de controle de comprimento L e espessura Δy inserido no duto liso de mesmo comprimento e abertura total igual a h p. 40
- 5 Secção do duto rugoso de comprimento $L/\delta = 64$, mostrando a malha computacional utilizada na discretização das equações envolvidas no fenômeno do escoamento de um fluido. p. 46
- 6 Esquema de resolução do sistema de equações algébricas gerado pelo método segregado de discretização. p. 48
- 7 Esquema mostrando volumes de controle quadrangulares e seus centróides, onde os valores discretos das variáveis do sistema são avaliados. Os valores destas variáveis nas faces de cada volume são obtidos por um método de interpolação. p. 49
- 8 Convergência das componentes do vetor velocidade nas direções x e y , bem como da continuidade. p. 52
- 9 Figura mostrando o perfil parabólico de velocidades na saída do duto. . p. 53
- 10 Campos de velocidades no interior de dutos rugosos auto-afins de comprimento $L/\delta = 64$. A magnitude da velocidade varia desde zero (regiões em azul escuro) até $1.83 \cdot 10^{-2} m/s$ (regiões em vermelho). p. 54

11	Efeito da largura efetiva sobre o campo de velocidades no interior de um duto rugoso auto-afim de comprimento $L/\delta = 64$, expoente $\zeta = 0.8$ e abertura $h = 10^{-1}m$	p. 55
12	Linhas de corrente no interior de canais fraturados com abertura $h = 10^{-1}m$, comprimento $L/\delta = 64$ e sem arraste lateral entre as superfícies que constituem tais canais. À medida que o ângulo da superfície se torna mais próximo de $\pi/2$, mais estreita se torna a largura efetiva.	p. 56
13	Campos de pressão no interior de dutos rugosos auto-afins de comprimento $L/\delta = 64$. A magnitude da pressão varia desde $1.95 \cdot 10^1 Pa$ (regiões em vermelho) até zero (regiões em azul escuro).	p. 57
14	Trajetórias de duas partículas traçadoras ($St = 0.05$) lançadas no interior de uma estrutura rugosa auto-afim de comprimento $L/\delta = 256$	p. 64
15	Trajetórias de duas partículas com elevado número de Stokes ($St = 5.0$) lançadas no interior de uma estrutura rugosa auto-afim de comprimento $L/\delta = 256$. A figura ilustra o efeito da variação do coeficiente de restituição sobre as trajetórias das partículas para (a) $\kappa = 0.1$, (b) $\kappa = 0.5$ e (c) $\kappa = 1.0$	p. 64
16	Trajetórias de duas partículas com número de Stokes intermediário ($St = 0.5$) lançadas no interior de uma estrutura rugosa auto-afim de comprimento $L/\delta = 256$. A figura ilustra o efeito da variação do coeficiente de restituição sobre as trajetórias das partículas para (a) $\kappa = 0.1$, (b) $\kappa = 0.5$ e (c) $\kappa = 1.0$	p. 65
17	Comportamento linear do tempo médio de trânsito em função do comprimento do tubo, para partículas caracterizadas por $St = 0.55$ e diferentes coeficientes de restituição.	p. 66
18	Comportamento linear do tempo médio de trânsito em função do comprimento do tubo, para partículas com $St = 5.0$ e diferentes coeficientes de restituição.	p. 66
19	Comportamento do tempo médio de trânsito em função do coeficiente de restituição para diferentes números de Stokes da partícula, transitando no interior de um duto rugoso de comprimento $L/\delta = 1024$	p. 67

20	Comportamento do tempo médio de trânsito em função do número de Stokes, para $L/\delta = 512$ e $\kappa = 0.2$	p. 69
21	Efeito da variação do coeficiente de restituição, κ , sobre o comportamento do tempo médio de trânsito em função do número de Stokes, para $L/\delta = 512$	p. 69
22	Comportamento do tempo médio de trânsito em função do número de Stokes para diferentes tipos de dutos, com comprimento $L/\delta = 512$ e coeficiente de restituição $\kappa = 0.2$	p. 70
23	Espectro de filtração da água.	p. 72
24	Ilustração de meios porosos, segundo o tipo de filtração. Da esquerda para a direita, temos filtração por superfície, filtração por membrana e filtração por profundidade.	p. 74
25	Representação esquemática de um filtro ordenado composto de um arranjo periódico de cilindros.	p. 77
26	Trajetórias de partículas lançadas de diferentes posições a partir da célula que representa o meio poroso periódico. Além disso, são ilustrados os três possíveis mecanismos de captura, dentre os quais somente a impactação inercial é considerada em nosso estudo. As partículas são arrastadas segundo a Eq. (4.1) e o campo de velocidade $\mathbf{u}$ do escoamento é calculado a partir da solução analítica de Marshall <i>et al.</i> [126].	p. 78
27	Trajetórias de partículas com diferentes números de Stokes, nas proximidades de um poro.	p. 79
28	Dependência da eficiência de captura δ em função do número de Stokes reescalonado $St/(\varepsilon - \varepsilon_c)$ para meios porosos periódicos na presença da gravidade. Aqui, usamos $F_g = 16$, um valor compatível com o arranjo experimental descrito em Ref. [124]. O <i>inset</i> inferior mostra que o comportamento do sistema sem gravidade pode ser caracterizado como uma transição de segunda ordem, $\delta \sim (St - St_c)^\alpha$, com $\alpha \approx 0.5$, e 0.2096 ± 0.0001 para $\varepsilon = 0.9$. O <i>inset</i> superior mostra a eficiência de captura normalizada δ em função do número de Stokes St para diferentes valores da gravidade.	p. 80

29	Meio poroso desordenado, mostrando a malha computacional utilizada na discretização das equações envolvidas no fenômeno do escoamento de um fluido.	p. 81
30	(a) Contorno dos campos de velocidade para uma realização de um espaço poroso ($\varepsilon = 0.7$) sujeito à condição de escoamento a baixos Reynolds. O sentido de escoamento do fluido é da esquerda para a direita. As cores variando do cinza escuro ao claro correspondem a baixas e altas magnitudes de velocidade, respectivamente. São mostradas também as trajetórias típicas de partículas no escoamento através do meio poroso, com gravidade no sentido positivo da direção x . De cima para baixo, o número de Stokes assume os valores $St = 3.26 \times 10^{-4}$, 3.26×10^{-3} e 3.26×10^{-2}	p. 83
31	A curva em log-log mostra a dependência do comprimento de penetração reescalado $(1 - \varepsilon)\lambda/D$ sobre o número de Stokes St para três valores diferentes da porosidade. A linha sólida corresponde ao melhor ajuste aos dados da função de escalonamento $(1 - \varepsilon)\lambda/D = \beta St^{-\alpha}$ com o prefator ou $\beta \approx 0.058$ e o expoente $\alpha = 1.00 \pm 0.02$	p. 84
32	Modelo de pulmão humano, segundo E. R. Weibel [1]. Os brônquios estão representados em amarelo; as artérias, em vermelho e as veias estão em azul.	p. 85
33	Hemácias e alvéolos pulmonares [34].	p. 87
34	Representação esquemática das trocas gasosas entre os tecidos do corpo e o ambiente [30].	p. 89
35	Micrografia eletrônica da superfície do epitélio bronquiolar. Na figura, Ci representa os cílios; MV representa as microvilosidades na superfície não-ciliada. As setas indicam uma gota de secreção [37].	p. 90
36	Molde de resina de artérias pulmonares e vias aéreas [38].	p. 92
37	Alvéolos no pulmão [38].	p. 92
38	Figura esquemática mostrando a parte superior da árvore respiratória. Os anéis cartilaginosos impedem o fechamento da traquéia durante a respiração.	p. 93

39	Curva da variação dos diâmetros das vias aéreas, em função da geração [40].	p. 94
40	Modelos de vias aéreas condutoras periféricas de (a) pulmão humano e (b) pulmão de rato. O marcador da escala é de $5mm$ [39].	p. 94
41	Transição da zona de condução para a zona respiratória. (a) No modelo do pulmão humano (detalhe da Fig. 41) (b) e na micrografia eletrônica de um pulmão de coelho, a seqüência de dutos alveolares ramificados seguindo o bronquíolo transicional (tb) é vista de dentro. Notemos que os alvéolos aparecem na superfície dos bronquíolos respiratórios (indicados pelas setas brancas) em (a). No pulmão de coelho, (b) a rede de anéis alveolares é claramente vista (indicada pelas setas pretas).	p. 95
42	Representação esquemática da árvore respiratória humana com dimensões aproximadas. Na tabela, D simboliza o diâmetro dos dutos, L representa o comprimento e N designa o número de vezes que determinada estrutura esta presente no corpo [1].	p. 96
43	Micrografia eletrônica de um septo alveolar contendo um capilar com três eritrócitos. Notemos a barreira de tecido extremamente delgada entre o ar alveolar e os eritrócitos. A escala é de $2mm$ [56].	p. 98
44	Estrutura do septo alveolar em pulmões humanos, vista através de microscopia eletrônica (a) e uma camada delgada (b). É possível perceber a tênue barreira de tecido separando as células sanguíneas do ar [57].	p. 98
45	Contração e expansão da caixa torácica durante a expiração e inspiração, demonstrando especialmente a contração do diafragma e a elevação e depressão da caixa torácica	p. 100
46	Variações do (a) volume pulmonar, (b) da pressão pleural, (c) do volume de ar deslocado e (d) da pressão alveolar durante um ciclo respiratório normal [58].	p. 102
47	Diagrama de complacência em indivíduo sadio. Este diagrama mostra apenas a complacência dos pulmões.	p. 103
48	Comparação dos diagramas de complacência do pulmão cheio de solução salina e do pulmão cheio de ar [59].	p. 104

49	Representação gráfica dos três tipos de trabalho executados durante a inspiração: trabalho da complacência, representado pela área I , trabalho da resistência tecidual, representado pela área II e trabalho da resistência das vias aéreas, representado pela área III . No gráfico acima, a variação de pressão pleural são medidas em cmH_2O e a variação do volume pulmonar é medido em litros [31].	p. 106
50	Volumes pulmonares medidos com um espirômetro durante respiração no repouso com uma respiração máxima. Os valores mostrados acima referem-se a medidas efetuadas em um homem adulto e jovem de estatura mediana. Na figura, RV indica o volume residual; ERV indica o volume de reserva expiratório; IRV refere-se ao volume de reserva inspiratório; TLC indica a capacidade total pulmonar; FRC refere-se à capacidade funcional residual; TV indica o volume total; VC é a capacidade vital.	p. 107
51	Número de Peclet acinar em função da geração z de ramificação na árvore respiratória [33].	p. 110
52	Curva de dissociação da hemoglobina: a porcentagem de hemoglobina ligada é traçada em função da pressão parcial de oxigênio no plasma em $mmHg$ [62].	p. 112
53	Esquema da relação entre ventilação e perfusão no ácino. A ventilação acontece em série, enquanto a perfusão ocorre em paralelo [33].	p. 114
54	Valores das pressões parciais dos gases respiratórios durante um ciclo respiratório [63].	p. 114
55	Comportamento do consumo máximo de oxigênio em função da massa corporal. [71].	p. 120
56	Geometria de uma estrutura ramificada com quatro gerações ($G1$, $G2$, $G3$ e $G4$) e diâmetro de entrada $D = 2cm$	p. 127
57	Secção da estrutura ramificada com diâmetro de entrada $D = 2cm$, mostrando a malha computacional utilizada na discretização das equações envolvidas no fenômeno do escoamento de um fluido.	p. 129

- 58 Perfil parabólico do campo de velocidade para $Re = 1300$, mostrado através de um corte longitudinal nas primeira e segunda gerações $G3$. As regiões em azul correspondem às mais baixas magnitudes da velocidade, enquanto as regiões em vermelho representam as maiores magnitudes de u . p. 130
- 59 Corte transversal na geração $G2$ mostrando o perfil do campo de velocidades no interior de uma estrutura ramificada para $Re = 1300$. A magnitude da velocidade varia desde zero (regiões em azul escuro) até $1.35m/s$ (regiões em vermelho). p. 131
- 60 Contorno do M -shape para $L/D = 3$, onde L é o comprimento do duto e D , o diâmetro. As cores indicam a magnitude da velocidade de escoamento do fluido em uma secção transversal da ramificação B, na geração $G2$. As regiões em azul correspondem às mais baixas magnitudes da velocidade, enquanto as regiões em vermelho representam as maiores magnitudes de u p. 131
- 61 Campos de pressão no interior de uma estrutura ramificada. A magnitude da pressão varia desde $1.18Pa$ (regiões em vermelho), atingindo $6.71 \cdot 10^1 Pa$ (regiões em verde, na entrada do duto) até zero (regiões em azul escuro, nas saídas da estrutura). p. 132
- 62 Dependência do fator de assimetria do fluxo em função do número de Reynolds, para $L/D = 3$ p. 133
- 63 Secção transversal na segunda bifurcação mostrando os perfis do campo de velocidade para diferentes valores do número de Reynolds, para $L/D = 3$. (a) $Re = 165$, (b) $Re = 330$, (c) $Re = 661$ e (d) $Re = 1322$. O crescimento de Re acarreta uma mudança gradual do perfil parabólico para M -shape. As menores magnitudes da velocidade estão representadas em azul escuro e os maiores valores da velocidade estão representados em vermelho. p. 133
- 64 Porcentagem de partículas capturadas em função do número de Stokes da partícula. p. 140
- 65 Porcentagem de partículas capturadas em função do número de Stokes das partículas para diferentes ângulos azimutais, para $Re = 50$ p. 141

66	Variação de $dF(\%)/dd_P$, onde a função $F(\%)$ representa a porcentagem de partículas que saem da estrutura, em relação ao diâmetro da partícula. Neste caso, $Re = 200$ e $\alpha = 90^\circ$	p. 142
67	Diâmetro crítico em função do número de Reynolds para uma estrutura ramificada com quatro gerações e $\alpha = 90^\circ$	p. 143
68	Variação de Δd em função do diâmetro crítico da partícula, para uma estrutura ramificada com quatro gerações e ângulo azimutal $\alpha = 90^\circ$	p. 144
69	Probabilidade de atravessar uma estrutura com três bifurcações e fator de homotesia $h = 0.79$ com $Re = 50$	p. 144
70	Geometria de uma estrutura ramificada com quatro gerações e diferentes valores para o fator de homotesia.	p. 145
71	Porcentagem de partículas que saem da estrutura com quatro gerações em função do número de Stokes da partícula, para $Re = 50$	p. 146
72	Geometria de uma estrutura ramificada com duas gerações. Da esquerda para a direita, o fator de homotesia assume os valores $h = 0.79$, $h = 0.6$ e $h = 0.9$	p. 147
73	Porcentagem de partículas não-capturadas em função do número de Stokes da partícula, para $Re = 50$. Nesta situação, as partículas transitam no interior de três estruturas distintas, compostas por duas gerações e diferentes fatores de homotesia.	p. 147
74	Probabilidade de uma partícula atravessar uma estrutura composta de três bifurcações com diferentes valores do fator de homotesia a cada geração e $Re = 50$	p. 148
75	Comportamento da probabilidade de uma partícula atravessar uma estrutura composta de três bifurcações e diferentes valores do fator de homotesia a cada geração, com respeito à variação do ângulo azimutal e $Re = 50$	p. 149

76	Distribuição de partículas na entrada da estrutura. As partículas representadas em vermelho são capturadas na primeira bifurcação enquanto as partículas representadas em azul são capturadas na segunda bifurcação. As partículas representadas em verde, por sua vez, ficam depositadas na terceira bifurcação. Finalmente, a cor preta representa as partículas que conseguiram escapar da estrutura.	p. 153
77	Distribuição de partículas em uma secção transversal na segunda bifurcação. As partículas representadas em azul são capturadas na segunda bifurcação, ao passo que a cor verde representa as partículas capturadas na terceira bifurcação. Por fim, as partículas representadas em preto conseguem escapar da estrutura ramificada.	p. 154
78	Histograma da porcentagem de partículas que saem por cada uma das oito possíveis saídas da estrutura, para $\alpha = 90^\circ$, $Re = 50$ e $\kappa = 1.0$. . .	p. 155
79	Geometria da estrutura ramificada com 4 gerações, $\alpha = 90^\circ$ e $h = 0.79$	p. 156
80	Distribuição de partículas que saem da estrutura ramificada em função do número de Stokes, para $\alpha = 90^\circ$, $Re = 50$ e $\kappa = 1.0$	p. 156
81	Histograma da porcentagem de partículas que saem por cada uma das oito possíveis saídas da estrutura, para $\alpha = 45^\circ$, $Re = 50$ e $\kappa = 1.0$. . .	p. 157
82	Distribuição de partículas que saem da estrutura ramificada em função do número de Stokes, para diferentes ângulos azimutais, $Re = 50$ e $\kappa = 1.0$.	p. 158
83	Geometria da estrutura ramificada com 4 gerações, $\alpha = 45^\circ$ e $h = 0.79$	p. 158
84	Geometria da estrutura ramificada com 4 gerações, $\alpha = 90^\circ$ e $h = 1.0$	p. 159
85	Distribuição de partículas que saem da estrutura ramificada em função do número de Stokes, para $h = 1$. Neste caso, $\alpha = 90^\circ$, $Re = 50$ e $\kappa = 1.0$.	p. 160
86	Geometria de uma estrutura ramificada com quatro gerações e diferentes valores para o fator de homotesia.	p. 160
87	Ilustração do processo de construção do modelo filiforme para a árvore respiratória. Parte-se de três segmentos, cujos comprimentos são conhecidos e a idéia é "vestir" estes segmentos de retas com cilindros, onde $(l_1, l_2$ e $l_3)$ e $(r_1, r_2$ e $r_3)$ representam, respectivamente, os comprimentos e os raios dos cilindros desejados. Além disso, supomos que a árvore se ramifica de maneira coplanar, o que facilita os cálculos.	p. 169

88	Corte ao longo do eixo axial dos cilindros, no plano da ramificação. Na figura, os cilindros estão ilustrados pelas linhas cheias. Os ramos-filhos são tangentes em C' , enquanto o ramo-pai toca o ramo-filho número 2 em B	p. 170
89	Construção da geometria ramificada ($N = 8$). Os ápices dos polígonos são conectados por segmentos de reta.	p. 171
90	Exemplo do processo de numeração seqüencial dos ramos de uma árvore dicotômica.	p. 173

1 Introdução

Os fenômenos de transporte de fluido e massa através de estruturas irregulares, como meios porosos e rochas fraturadas, estão presentes em diversos campos da ciência, desde a geologia e biomedicina, passando pela construção civil, engenharia química e do petróleo. Podemos citar o estudo do fluxo de água subterrânea e recuperação de aquíferos contaminados por poluentes como uma área de pesquisa atual e de grande relevância, relacionada à ciência dos solos e hidrologia. Além disso, a modelagem do transporte de fluidos e partículas no interior de vias respiratórias é um exemplo típico da relevância do fenômeno do escoamento e transporte em meios irregulares aplicado a sistemas biológicos.

A primeira parte deste trabalho é dedicada ao estudo da dinâmica de fluidos em dutos rugosos com geometria auto-afim, bem como ao transporte de partículas sujeitas à ação do escoamento nestas estruturas. No Capítulo 1, apresentamos uma abordagem macroscópica do processo de escoamento ocorrendo através de canais rugosos, como as fraturas. Descrevemos a topologia da rede fraturada considerando que tal estrutura possui propriedades estatísticas invariantes sob transformações de escala anisotrópicas. Em outras palavras, a superfície das fraturas das rochas possui propriedades *fractais auto-afins*. Mostramos, ainda, que as propriedades do campo de velocidade do escoamento no interior da fratura são fortemente influenciadas pela geometria rugosa.

O Capítulo 3 destina-se ao estudo de outro fenômeno de transporte em canais rugosos, nomeadamente, o transporte de partículas arrastadas por um fluido. Esta investigação requer um conhecimento adequado acerca das propriedades de escoamento bem como das propriedades estatísticas do campo de velocidade, como realizado no Capítulo 2. Estudamos o comportamento do tempo médio de trânsito de partículas com diferentes números de Stokes e coeficientes de restituição no interior de dutos rugosos.

No capítulo subsequente, abordamos outro aspecto do processo de transporte de fluido e massa através de sistemas irregulares. Investigamos o fenômeno de captura inercial de

partículas em um meio poroso periódico bidimensional. Investigamos como a geometria e os efeitos inerciais de um meio poroso influenciam a eficiência de captura de partículas. Para o modelo periódico, na ausência de gravidade, existe um número de Stokes finito abaixo do qual as partículas jamais são capturadas. Além disso, os resultados que obtivemos indicam que esta transição do regime de captura para não-captura é uma transição de segunda ordem.

Investigamos, também, o processo de transporte de partículas com massa conduzidas por um fluido no interior de uma estrutura ramificada tridimensional. Particularmente, o mecanismo de distribuição de fluido é um aspecto essencial no funcionamento dos sistemas circulatório e respiratório. A aproximação mais simples para este problema consiste em modelar canais onde o escoamento ocorre através de um conjunto de elementos com impedância equivalente. Tal aproximação admite uma relação linear entre o escoamento e o gradiente de pressão ao longo dos canais. Estudos baseados em modelos lineares de impedância são numerosos nos ramos da física e fisiologia, não obstante sua limitação em reproduzir alguns detalhes realísticos. Por exemplo, quando aplicado a escoamentos estacionários ou periódicos através de bifurcações simétricas nas vias respiratórias, tal modelo prediz uma distribuição perfeitamente homogênea do escoamento. Contudo, evidências numéricas e experimentais indicam significativa influência da inércia no transporte de momento e nas propriedades do escoamento através de estruturas ramificadas.

A complexidade das ramificações das vias aéreas do pulmão possui importante influência sobre a distribuição do escoamento de ar e, conseqüentemente, afeta uma variedade de processos de transporte através das vias aéreas. Muitos destes processos dependem sensivelmente da geometria das bifurcações bronquiais de forma que, para as simulações computacionais, é importante especificar tão perfeitamente quanto possível as características mais importantes desta geometria, tais como a relação entre os diâmetros e comprimentos entre os ramos pai e filho, a distribuição do fluxo de ar entre os ramos-filhos bem como os ângulos entre as direções dos ramos pai e filhos.

Modelos geométricos de árvore respiratória têm sido bastante idealizados, parcialmente devido à dificuldade em reproduzir estruturas morfométricas reais como também devido às limitações computacionais. Podemos citar o modelo de Weibel [1] para a árvore bronquial humana que consiste em uma estrutura ramificada simétrica de 23 gerações, desde a traquéia até os alvéolos, e incorpora estimativas para os diâmetros e comprimentos (mas não para os ângulos da ramificação) para cada geração.

No quinto capítulo do presente trabalho, conceitos básicos relacionados à geometria e

fisiologia pulmonar são apresentados, com o intuito de introduzir as noções fundamentais para o entendimento do processo respiratório, além de citar algumas questões ainda não solucionadas neste assunto. Abordaremos as funções do sistema respiratório, enfatizando os aspectos da ventilação pulmonar e as trocas gasosas. Introduziremos o conceito de *número de Péclét alveolar* para determinar a localização da zona de transição entre os transportes convectivo e difusivo do oxigênio na árvore respiratória. Discutiremos, ainda, a questão da mistura de gases no pulmão, ressaltando que o gás alveolar é o resultado de fenômenos que incluem convecção, difusão e troca, de forma que a determinação da composição deste gás torna-se bastante complexa.

O Capítulo 6 é dedicado ao estudo da dinâmica de fluidos em estruturas ramificadas. Inicialmente, descrevemos a topologia da geometria ramificada considerando que tal estrutura consiste de uma distribuição de cilindros tridimensionais que se bifurcam em ramificações subseqüentes. Cada bifurcação é coplanar, como encontrado em pulmões reais. As bifurcações são modeladas de modo a minimizar as singularidades geométricas e admitimos que os raios dos cilindros decrescem de um fator de $2^{-1/3}$ a cada bifurcação. Mostramos, ainda, que as propriedades do campo de velocidade do escoamento no interior da estrutura são fortemente influenciadas pela geometria ramificada.

O Capítulo 7 destina-se ao estudo de outro fenômeno de transporte em estruturas ramificadas, nomeadamente, o transporte de partículas arrastadas por um fluido. Esta investigação requer um conhecimento adequado acerca das propriedades de escoamento bem como das propriedades do campo de velocidade, como realizado no Capítulo 4. Estudamos o processo de captura de partículas de aerossol esféricas, sem interação entre si, que aderem à estrutura ramificada ao tocar as paredes da mesma. Além disso, investigamos o comportamento da probabilidade de captura de uma partícula em função do número de Stokes, para diferentes configurações geométricas. Analisamos as trajetórias resultantes, distribuição de partículas e evolução temporal de partículas de aerossol em regimes de baixos e altos valores do número de Reynolds, bem como para números de Stokes representativos. Observamos, também, que a estrutura ramificada estudada neste trabalho apresenta propriedades de filtragem de partículas. Esta peculiaridade do nosso estudo pode ser relevante do ponto de vista aplicado, no que concerne ao *design* de alguns equipamentos de uso tecnológico onde ocorre o transporte por arraste de partículas.

Para finalizar, no Capítulo 8, apresentamos nossas conclusões acerca do trabalho desenvolvido. Sugestões e perspectivas são também delineadas objetivando a realização de trabalhos subseqüentes que venham complementar este estudo ou mesmo expandir de

maneira categórica a linha de pesquisa à qual pertence a presente contribuição.

2 *Escoamento Viscoso em Dutos Rugosos*

2.1 Introdução

O transporte de momento e massa através de meios geológicos fraturados, tais como reservatórios de água e hidrocarbonetos, é um problema de extrema relevância em diversos domínios, com aplicações em processos geotérmicos, sistemas biológicos, engenharia civil e do petróleo bem como dispersão de poluentes. O processo de escoamento em meios fraturados envolve uma combinação de fenômenos em diferentes escalas. À nível microscópico, o transporte do fluido é efetuado através do espaço de poros existentes na rocha [2]. Este problema tem sido investigado pela comunidade científica por meio de modelos que tratam os poros como uma rede aleatória e conceitos de teoria da percolação são utilizados para resolver o transporte de fluidos. Macroscopicamente, o fluido escoa através de canais rugosos tais como as fraturas e esta é, em muitos casos, a escala dominante. Entender o escoamento através de fraturas é um pré-requisito essencial para a investigação e modelagem de casos mais complexos, tais como o escoamento através de redes macroscópicas fraturadas. Outra abordagem do processo de transporte em sistemas geológicos, o transporte de partículas carregadas por um fluido, também requer um conhecimento adequado acerca das propriedades de escoamento bem como das propriedades estatísticas do campo de velocidades no interior de fraturas.

Fraturas têm sido freqüentemente modeladas como células de Hele-Shaw.

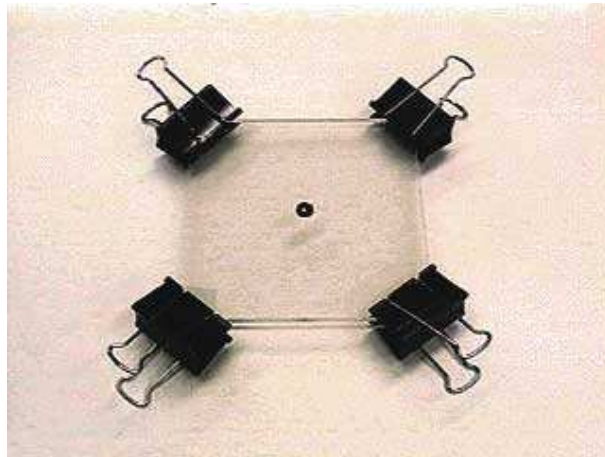


Figura 1: Célula de Hele-Shaw, que consiste de duas placas transparentes separadas por uma distância b . O fluido é injetado no interior destas placas através do centro da estrutura.

A superfície de uma única fratura parece razoavelmente lisa, com exceção de alguma aspereza superficial aleatória, sugerindo que o escoamento de Poiseuille em um canal liso é o modelo apropriado para o fluxo do fluido. No entanto, simulações numéricas [3] indicam que esta visão tradicional da rocha fraturada como um canal liso não é adequada para descrever o escoamento de fluidos mesmo a baixas velocidades. Uma análise mais cuidadosa mostra que fraturas geológicas típicas apresentam-se espacialmente correlacionadas, ou seja, podem ser caracterizadas como superfícies fractais auto-afins. O expoente que caracteriza a rugosidade assume o valor aproximado 0.8 [4], surpreendentemente constante para diferentes tipos de rochas fraturadas naturais ou artificiais. Estudos numéricos e teóricos introduzem esta geometria mais complexa para tais fraturas com o intuito de calcular as propriedades de transporte do sistema [5]. Contudo, a maioria destes estudos restringem que a aproximação de Reynolds (aproximação de lubrificação) é válida desde que o campo de velocidades seja dado por um escoamento de Poiseuille, com perfil de velocidades parabólico através da abertura e na direção de escoamento médio. Esta aproximação apresenta-se útil para o caso de superfícies opostas fraturadas não-correlacionadas. No entanto, é falha quando os efeitos da rugosidade passam a ser preponderantes, tal como o caso que consideraremos aqui. Na aproximação de lubrificação, as fraturas rugosas são equivalentes a canais com uma abertura de entrada constante, sem componentes verticais da velocidade do fluido, que são particularmente importantes no limite de fraturas estreitas onde a amplitude da rugosidade é grande comparada à abertura.

O escoamento através de sistemas fraturados é o mecanismo de transporte de fluidos dominante em diversos reservatórios naturais ou artificiais. A compreensão do processo de escoamento em estruturas rugosas depende da investigação completa do processo de formação dos meios porosos. Com o intuito de entender as propriedades de transporte de fluidos no interior de rochas fraturadas, três aspectos devem ser observados:

- descrição da topologia da rede de fraturas, ou seja, o modo como os poros e/ou fraturas estão conectados uns aos outros,
- observação da geometria do meio poroso, isto é, a descrição das formas e tamanhos dos poros e/ou fraturas bem como da rugosidade da superfície,
- descrição dos campos de velocidade e pressão no interior da fratura.

A topologia da rede de fraturas reflete a história geológica do reservatório. A geometria das conexões entre as fraturas é determinada pelos mecanismos envolvidos nas mesmas. Pesquisas recentes [6, 7] a respeito destes mecanismos têm mostrado que as geometrias comuns resultantes da conexão de fraturas possuem propriedades estatísticas invariantes sob transformações anisotrópicas. Em outras palavras, são superfícies *auto-afins*. As propriedades do escoamento no interior da fratura são fortemente influenciadas pela geometria rugosa bem como pela conexão entre as fraturas e, conseqüentemente, a característica auto-afim reflete-se nas propriedades de escala do escoamento.

A propriedade mais simples de um sistema poroso é sua porosidade Φ , definida como a fração do volume dos poros e/ou fraturas existentes no meio. A porosidade de um sistema pode ser medida a partir de diversos métodos. O mais simples deles é o método direto, em que o volume total do sistema é medido. Então, o sistema é “esmagado” de modo a remover todos os espaços vazios existentes, e o volume do sólido é medido. Por este processo, a porosidade total do sistema é determinada.

Um meio poroso consiste de um espaço de poros e uma matriz sólida, separados entre si pela parede do poro. Partes do espaço do poro podem estar isoladas e inacessíveis a partir da superfície externa do meio, visto que a matriz sólida é conectada e acessível em sua maior parte. Um dos conceitos mais simples empregados para caracterizar a topologia dos meios porosos é o número de coordenação, Z , definido como o número de “gargantas” do poro que se encontram em um dado ponto do meio. Em outras palavras, o número de coordenação de uma rede é dado pelo número de ligações conectadas a um mesmo poro. Para estruturas porosas regulares, tais como arranjos cúbicos de esferas, é relativamente

fácil determinar Z . Para estruturas irregulares, é necessário definir um número de coordenação médio $\langle Z \rangle$, e esta média deve ser realizada sobre uma amostra suficientemente grande. Para meios porosos cuja estrutura é microscopicamente desordenada, porém, macroscopicamente homogênea, $\langle Z \rangle$ é independente do tamanho da amostra. Além disso, propriedades topológicas de meios porosos são invariantes sobre quaisquer deformações do espaço do poro e da matriz sólida.

Outra propriedade de interesse para o estudo dos meios porosos é a área de superfície específica, Ξ , definida como a relação entre a área de superfície dos poros e o volume do meio poroso. Diversos métodos foram desenvolvidos com o intuito de medir Ξ . É possível utilizar fotomicrografia de secções polidas de uma amostra de meio poroso com contraste suficiente entre os poros e a matriz. A partir da relação entre as medidas bidimensionais (superfície) e as propriedades de um sistema em três dimensões, uma estimativa de Ξ pode ser obtida.

A tortuosidade T_P , outra característica dos meios porosos, é definida como uma relação entre o comprimento real do trajeto de uma partícula traçadora e a distância em linha reta entre os pontos inicial e final do movimento da partícula. A tortuosidade T_P possui uma dependência com a porosidade. Para baixos valores de Φ (próximos ao ponto crítico de percolação), o parâmetro T_P assume valores altos. De fato, T_P diverge no ponto crítico de percolação. Em modelos clássicos de escoamento e transporte em meios porosos, T_P é tratado como um parâmetro ajustável [8].

O parâmetro adimensional conhecido como número de Reynolds, Re , é uma estimativa da razão entre as forças viscosas e inerciais presentes no escoamento. Para um fluido movendo-se a uma velocidade característica u no interior de um duto com abertura h , o número de Reynolds é definido como

$$Re \equiv \frac{\rho u h}{\mu}. \quad (2.1)$$

Os regimes de escoamento observados em meios porosos podem ser sintetizados como segue: fenômenos onde os efeitos inerciais são desprezíveis, descritos pela lei de Darcy; fenômenos onde a inércia é fraca, descritos por um termo de correção de terceira ordem e fenômenos onde os efeitos inerciais são bem característicos, descritos pela equação de Forchheimer.

Em nossa investigação do escoamento em meios porosos microscopicamente desordenados e macroscopicamente homogêneos, caracterizamos o sistema em termos da lei de

Darcy, admitindo que um parâmetro global, a permeabilidade K , relaciona a velocidade média do fluido $\langle u \rangle$ através dos poros com a diferença de pressão Δp medida ao longo do sistema,

$$\langle u \rangle = -\frac{K}{\mu} \frac{\Delta p}{L}. \quad (2.2)$$

O parâmetro L é o comprimento da amostra na direção do escoamento e μ é a viscosidade do fluido. Contudo, com o intuito de compreender a conexão entre a estrutura porosa e o escoamento do fluido, é necessário examinar aspectos locais da morfologia do espaço do poro e relacioná-los aos mecanismos relevantes de transferência de momento (forças viscosas e inerciais) [9, 10, 11, 12].

Apesar de sua grande aplicabilidade, o conceito de permeabilidade como um índice global para o escoamento deve ser restrito às condições de escoamento viscoso ou, mais precisamente, a baixos valores do número de Reynolds. Estudos experimentais sobre meios porosos [13] mostraram que a transição do escoamento laminar (comportamento linear) ao turbulento (comportamento não-linear) para valores críticos do número de Reynolds não é abrupta.

A lei de Darcy possui suporte experimental, numérico e teórico, fato não observado nas duas outras equações citadas. A escala de validade da lei de Darcy é expressa em termos do número de Reynolds, assim como vários outros parâmetros no estudo do escoamento de fluidos. O número de Reynolds é, geralmente, definido em termos de um comprimento característico do sistema em que o escoamento ocorre. Tal comprimento característico pode ser dado pela relação $\sqrt{\frac{K}{\Phi}}$, onde K é a permeabilidade do meio poroso. A lei de Darcy é aplicável em regimes de baixos números de Reynolds, ou seja, $Re \leq 10$. Este é o regime de escoamento em que as forças viscosas são predominantes. Para $Re = 10$, existe uma zona de transição em que as forças inerciais começam a sobrepor-se às forças viscosas. Nesta situação, o escoamento é descrito pela equação de inércia fraca. Para regimes de elevados números de Reynolds, $Re > 100$, a zona de transição deixa de existir, observando-se, então, um regime de escoamento turbulento a altas velocidades. Nesta situação, o escoamento necessita ser descrito por outra formulação, visto que a lei de Darcy não é válida nestas condições. Portanto, termos de correção são incorporados à lei de Darcy com o intuito de descrever tais fenômenos. A aproximação clássica para caracterizar macroscopicamente o efeito da inércia sobre escoamentos em meios porosos reais é a equação de Forchheimer,

$$-\frac{\Delta p}{L} = \alpha \mu u + \beta \rho v^2. \quad (2.3)$$

Os coeficientes α e β dependem da porosidade Φ do material. A velocidades suficientemente baixas (escoamento laminar), a Eq. 2.3 reduz-se à lei de Darcy, expressa pela Eq. 2.2. O termo $\beta\rho v^2$ pode ser interpretado como uma correção de segunda ordem relativo à contribuição das forças inerciais no escoamento. A Eq. 2.3 não é uma expressão puramente empírica, visto que pode ser derivada a partir de uma média apropriada da equação de Navier-Stokes unidimensional, para o escoamento laminar, incompressível e estacionário de um fluido Newtoniano no interior de um meio poroso rígido [13]. Esta formulação tem sido aplicada há mais de um século em pesquisas de meios porosos, mas ainda não possui suporte analítico. Tal fato deve-se, provavelmente, à combinação entre a complexidade das equações que governam este fenômeno (equações de Navier-Stokes) e a geometria dos meios porosos naturais. Diversos estudos numéricos [14] sobre escoamento de fluidos a altas velocidades em meios porosos merecem considerável atenção.

2.2 Geometria da Rugosidade Auto-Afim

Esta seção é dedicada à discussão da morfologia e das propriedades fractais de rochas fraturadas. A caracterização de propriedades da fratura das rochas tem sido feita em diferentes escalas: (a) na escala de uma única fratura, devido ao fato de que a fratura não é somente um par de placas lisas paralelas, como foi suposto em muitos estudos de modelagem destes meios [8, 15] (a superfície interna de uma fratura é geralmente áspera, e esta aspereza pode ter forte influência sobre as propriedades de escoamento), (b) considerando-se uma rede de fraturas interconectadas, que pode possuir uma topologia complexa. Em particular, a orientação das fraturas não é completamente aleatória pois, geralmente, há alguma correlação entre as orientações de fraturas próximas em quaisquer conjuntos rochosos, dependendo da história tectônica da rocha.

A rugosidade da superfície fraturada é importante em modelagem de reservatórios devido à influência sobre a variação da abertura, e portanto, da canalização do escoamento entre as paredes da estrutura. A superfície das fraturas de rochas possuem propriedades fractais [16]. Entretanto, as direções ao longo do plano médio da fratura e perpendicular a ele devem ser tratadas diferentemente. Portanto, é razoável esperar que, se uma superfície fraturada possui propriedades fractais, a mesma deve ser auto-afim (anisotrópica) e não auto-similar (isotrópica).

Propriedades fractais de meios porosos e rochas fraturadas têm atraído atenção con-

siderável e diversos estudos teóricos e experimentais, além de simulações numéricas, têm sido empreendidos na tentativa de compreender tais propriedades [?]. Fractais auto-afins são utilizados para descrever sistemas que possuem diferentes propriedades de invariância de escala, paralela e perpendicularmente à superfície.

Consideremos a superfície de uma rocha, cuja altura é dada por uma função $z(x, y)$, onde as coordenadas x e y encontram-se no plano médio da fratura. Como já mencionado anteriormente, o perfil de uma rugosidade auto-afim é estatisticamente invariante sob transformações anisotrópicas, $x \rightarrow \lambda_1 x$, $y \rightarrow \lambda_2 y$, $z \rightarrow \lambda_3 z$, possuindo diferentes fatores de escala em diferentes direções espaciais. Esta característica anisotrópica pode ser observada em sistemas geológicos de grande escala [18, 19]. Dessa forma, a altura da superfície é uma função homogênea, de grau ζ , de modo que,

$$z(x, y) = \lambda^\zeta z(\lambda x, \lambda y), \quad (2.4)$$

onde ζ , denominado *expoente de Hurst*, expressa a medida quantitativa da rugosidade da função $z(x, y)$. Estudos com diversos tipos de rochas fraturadas mostram que o expoente de Hurst assume o valor $\zeta = 0.8$, de maneira aproximadamente *independente do material e do processo de fratura da amostra* [4], desde que a investigação esteja restrita a fraturas do tipo 1, como definiremos logo em seguida. Se o processo de fraturar a rocha não produzir deformações ou interstícios subseqüentes no material e as partes fraturadas da amostra forem simplesmente separadas, este tipo de fratura, descrita pela geometria fractal auto-afim com expoente $\zeta = 0.8$, é classificada como fratura do tipo 1. Existem outros tipos de fraturas que apresentam expoentes distintos para a rugosidade. Tais fraturas são geradas por diferentes processos, como cisalhamento (fraturas do tipo 2) e/ou rotação entre as placas (fraturas do tipo 3) que constituem a superfície. Nosso estudo é restrito a fraturas do tipo 1.



Figura 2: Perfil de uma estrutura rugosa auto-afim com comprimento $L/\delta = 256$ e expoente de Hurst $\zeta = 0.8$. O canal auto-afim bidimensional possui simetria de eixos paralelos em relação à direção média de escoamento.

É importante enfatizar a situação limite em que as duas superfícies fraturadas estão separadas entre si por uma distância h . Consideremos a situação em que uma rocha de tamanho lateral L é fraturada e as duas superfícies são simplesmente deslocadas por uma

distância $h \ll L$, perpendicular ao plano médio da fratura, sem deslocamento relativo entre as superfícies. Pode-se mostrar que as flutuações (a diferença entre os valores máximo e mínimo de z) escalam como $R \sim L^\zeta$ [3]. Designando h como a largura da fratura, a situação limite para o caso de fraturas estreitas corresponde a $R \gg h$. Em fraturas estreitas, a correlação entre os dois lados é uma importante característica no processo de escoamento.

As propriedades geométricas e dinâmicas de sistemas porosos são caracterizadas por correlações de longo alcance no espaço e/ou no tempo. O processo estocástico que utilizamos para gerar superfícies fractais auto-afins é baseado na idéia de que uma série correlacionada espacialmente, como a superfície de uma fratura, pode ser representada por um processo auto-afim através de integração. Conseqüentemente, quantificar a característica auto-afim da superfície pode, indiretamente, informar sobre as propriedades de correlação do sistema. A superfície auto-afim utilizada como modelo para a fratura em estudo é gerada através do método de síntese de Fourier [20]. Tal método consiste, inicialmente, em gerar uma série de números aleatórios no intervalo $[0, 1]$, representada por $\eta_0(\mathbf{x}, t)$. Em seguida, uma transformada de Fourier é aplicada à citada série com o intento de obtermos a representação da série no espaço de Fourier, $\bar{\eta}_0(\mathbf{q}, \omega)$. Definimos

$$\bar{\eta}(\mathbf{q}, \omega) \equiv |\mathbf{q}|^{-\rho} |\omega|^{-\theta} \bar{\eta}_0(\mathbf{q}, \omega) \quad (2.5)$$

como sendo a série *correlacionada* no espaço de Fourier. Observamos que a série exibe correlação visto que a mesma foi modulada por uma lei de potência apropriada. O ruído correlacionado no espaço de x , $\bar{\eta}(\mathbf{x}, t)$, é então obtido a partir da transformada inversa de Fourier sobre $\bar{\eta}(\mathbf{q}, \omega)$. Em nosso caso, nos restringimos à correlação espacial ($\theta = 0$). Para evitar problemas associados à periodicidade dos números gerados a partir da transformada de Fourier, geramos o conjunto de números aleatórios para uma superfície bem maior que o tamanho real e utilizamos a porção central desta distribuição de números [8]. Finalmente, para que a superfície fractal que representará o duto rugoso seja adquirida, é necessário que um somatório seja feito sobre a série correlacionada obtida a partir do método descrito anteriormente.

No presente trabalho, serão estudadas fraturas onde a superfície superior é simplesmente transladada de uma distância h normal ao plano médio. Por conseguinte, a abertura local assume valor constante e igual a h . Como veremos adiante, o nosso estudo será restrito ao caso bidimensional, onde a superfície é invariante na direção y , ou seja, $z(x, y) = z(x)$, e o fluido é forçado a escoar na direção x por um gradiente de pressão constante entre suas extremidades.

2.2.1 Largura Efetiva

Ao trabalhar com as fraturas oriundas de perfis rugosos, a largura efetiva da fratura, que é a constrição medida perpendicularmente ao sentido de fluxo local, não é igual ao deslocamento vertical do perfil da rugosidade. A largura efetiva é um parâmetro que deve ser detalhadamente estudado, em virtude da dependência dos campos de velocidades com a abertura local. Para uma fratura reta, a largura efetiva coincide com o deslocamento vertical, h . Para fraturas cujo ângulo de inclinação vale θ , traçado a partir de uma linha horizontal, a largura efetiva w_e pode ser expressa na forma

$$w_e = h \cos(\theta). \quad (2.6)$$

Entretanto, quando uma parte linear da fratura, de comprimento d , obedecer à desigualdade

$$d < h \sin(\theta), \quad (2.7)$$

a largura efetiva assume um valor maior do que o estimado anteriormente. Observando

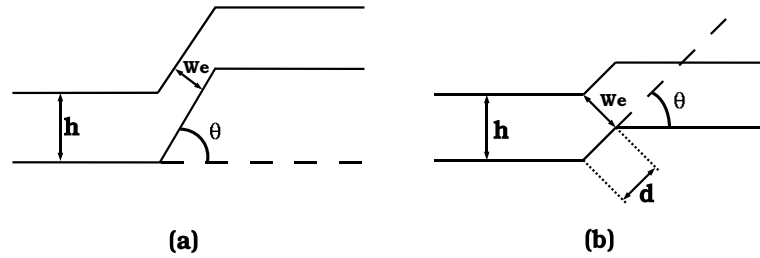


Figura 3: Espessura efetiva do duto para duas configurações distintas: (a) canal com inclinação longa e (b) canal com inclinação curta.

a Fig. 3, pode-se deduzir uma outra medida para a largura efetiva como sendo a menor diagonal do paralelogramo formado pela inclinação da fratura e duas linhas verticais, ou seja,

$$w_e = (h^2 + d^2 - 2hd|\sin(\theta)|)^{\frac{1}{2}} \quad (2.8)$$

para $d < h \sin(\theta)$. A largura efetiva é, por conseguinte, limitada por

$$h \cos(\theta) \leq w_e \leq h. \quad (2.9)$$

Da mesma maneira, a largura efetiva pode ser expressa em termos da maior diagonal, de forma que

$$w_e = (h^2 + d^2 + 2hd|\sin(\theta)|)^{\frac{1}{2}}. \quad (2.10)$$

Esta aproximação pode ser útil para perfis fraturados complexos, embora possa haver algumas dificuldades na definição da inclinação local da rugosidade, sendo preferível substituir este parâmetro por uma inclinação média.

2.3 Escoamento Viscoso em Dutos Lisos

O objetivo desta seção é compreender o método utilizado para obter perfis de velocidade laminar para escoamento de fluidos em determinadas geometrias simples. Para tanto, a definição de viscosidade e conceitos de balanço de momento são utilizados. Usualmente, o conhecimento das distribuições completas de velocidades não é o principal interesse para a solução de problemas de escoamento. É necessário apenas conhecer a velocidade máxima e a velocidade média do fluido no interior de uma estrutura, quantidades facilmente obtidas a partir da determinação do perfil de velocidades.

Nesta análise, será suposto que as condições de escoamento estacionário, incompressível e irrotacional são estabelecidas. As propriedades que caracterizam o fluido, tais como viscosidade cinemática μ e densidade ρ são constantes ao longo do duto e o perfil de velocidades é completamente desenvolvido, ou seja, o perfil de velocidades é o mesmo em todas as secções retas ortogonais ao escoamento. O fluido é Newtoniano, viscoso e não desliza nas paredes. Estão ausentes os efeitos de dissipação viscosa e campos eletromagnéticos e o comprimento do duto é suficientemente grande, de modo a evitar distúrbios nas regiões de entrada e saída do tubo. O objetivo, então, é determinar o perfil do campo de velocidades $\mathbf{u}(x, y)$, onde

$$\mathbf{u} = u\hat{i} + v\hat{j}. \quad (2.11)$$

Na análise clássica do movimento de um fluido, como ilustrado na Fig. 4, é necessário

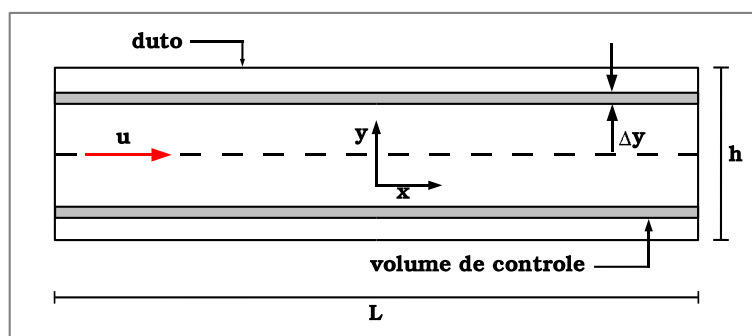


Figura 4: Volume de controle de comprimento L e espessura Δy inserido no duto liso de mesmo comprimento e abertura total igual a h .

fazer um balanço de momento em um volume de controle típico. Em outras palavras, um balanço de momento é aplicado a um elemento do sistema que engloba uma porção finita do fluido, levando-se em conta as correntes de entrada e saída neste elemento. Portanto, a taxa de acumulação de momento no volume de controle deve ser igual ao fluxo de entrada desta grandeza subtraído o fluxo de saída, adicionando-se as forças que atuam no sistema. Logo, para o fluxo estacionário, o balanço do momento é dado por,

$$\begin{array}{c} \boxed{\text{Fluxo de momento}} \\ \boxed{\text{que entra no duto}} \end{array} - \begin{array}{c} \boxed{\text{Fluxo de momento}} \\ \boxed{\text{que sai do duto}} \end{array} + \\ + \begin{array}{c} \boxed{\text{Soma das forças que}} \\ \boxed{\text{atuam sobre o sistema}} \end{array} = 0.$$

A Tabela 1 que se segue relaciona todas as contribuições ao balanço de momento, admitindo-se que não há acúmulo de momento dentro do sistema, na direção (x), sendo τ_{yx} o momento do fluxo.

Tabela 1: Balanço de momento aplicado sobre o volume de controle da Fig. 4.

fluxo de momento que atravessa a parede em y	$L\tau_{yx} _y$
fluxo de momento que atravessa a parede em $y + \Delta y$	$L\tau_{yx} _{y+\Delta y}$
fluxo de momento que atravessa a entrada do retângulo em $x = 0$	$(\Delta y u_x)(\rho u_x _{x=0})$
fluxo de momento que atravessa a entrada do retângulo em $x = L$	$(\Delta y u_x)(\rho u_x _{x=L})$
força de pressão atuando em $x = 0$	$\Delta y(p _{x=0})$
força de pressão atuando em $x = L$	$\Delta y(p _{x=L})$

Desta maneira, as parcelas devem se anular, levando à equação

$$L[\tau_{yx}|_y - \tau_{yx}|_{y+\Delta y}] + \Delta y[\rho u_x^2|_{x=0} - \rho u_x^2|_{x=L}] + \Delta y[p_{x=0} - p_{x=L}] = 0. \quad (2.12)$$

O balanço de momento na Eq. 2.12 é facilmente aplicável apenas quando as linhas de escoamento do sistema são linhas retas (i.e., em fluxos retilíneos).

As velocidades na entrada ($u_x|_{x=0}$) e na saída ($u_x|_{x=L}$) do duto são iguais para cada valor de y , já que o escoamento é incompressível e, por conseguinte, o segundo termo da Eq. 2.12 torna-se nulo. Se os dois membros restantes da equação anterior forem divididos por $L\Delta y$ e aplicarmos o limite quando $\Delta y \rightarrow 0$, obtemos:

$$\lim_{\Delta y \rightarrow 0} \left(\frac{\tau_{yx}|_{y+\Delta y} - \tau_{yx}|_y}{\Delta y} \right) = \frac{p_{x=0} - p_{x=L}}{L}. \quad (2.13)$$

O termo à esquerda da assertiva anterior pode ser interpretado como a definição da derivada primeira de τ_{yx} com respeito à y . Desta maneira, a Eq. 2.13 pode ser reescrita como

$$\frac{d(\tau_{yx})}{dy} = \frac{\Delta p}{L}, \quad (2.14)$$

onde $\Delta p = p_{x=0} - p_{x=L}$. Esta é a equação diferencial para o momento do fluxo τ_{yx} , cuja solução é dada simplesmente por

$$\tau_{yx} = \frac{\Delta p}{L}y + c_1. \quad (2.15)$$

A constante de integração c_1 é determinada posteriormente, com a utilização de condições de contorno adequadas. Uma vez que o fluido é Newtoniano e que, portanto, o fluxo de momento é diretamente proporcional ao gradiente de velocidade, temos

$$\tau_{yx} = -\mu \frac{du}{dy}. \quad (2.16)$$

Substituindo esta expressão para τ_{yx} na Eq. 2.15, é possível escrever que

$$\frac{du}{dy} = - \left(\frac{\Delta p}{\mu L}y + c_1 \right), \quad (2.17)$$

cuja integração resulta em

$$u(y) = - \left(\frac{\Delta p}{2\mu L}y^2 + c_1y + c_2 \right). \quad (2.18)$$

Aplicando condições de contorno apropriadas, as constantes de integração podem ser obtidas. Considerando que o perfil de velocidades deve ser simétrico em relação ao eixo x , temos a primeira condição de contorno,

$$\left. \frac{du}{dy} \right|_{y=0} = 0 \Rightarrow c_1 = 0, \quad (2.19)$$

resultando na equação

$$u(y) = - \left(\frac{\Delta p}{2\mu L}y^2 + c_2 \right). \quad (2.20)$$

Supondo que a velocidade é nula na parede (condição de não-deslizamento), a segunda condição de contorno é obtida,

$$u(\delta) = 0 \Rightarrow c_2 = -\frac{\Delta p}{2\mu L}\delta^2, \quad (2.21)$$

e a Eq. 2.19 pode ser reescrita na forma,

$$u(y) = \frac{(\Delta p)\delta^2}{2\mu L} \left[1 - \left(\frac{y}{\delta} \right)^2 \right]. \quad (2.22)$$

Este resultado demonstra que o perfil de velocidades de um escoamento laminar e incompressível entre duas placas paralelas é parabólico. A velocidade máxima ocorre em $y = 0$ e, partindo da Eq. 2.22, encontra-se

$$u_{max} = u(0) = \frac{(\Delta p)\delta^2}{2\mu L}. \quad (2.23)$$

A velocidade média, por sua vez, pode ser calculada como

$$\langle u(y) \rangle = \frac{\int u dA}{A} = \frac{1}{2\delta} \frac{(\Delta p)\delta^2}{2\mu L} \int \left[1 - \left(\frac{y}{\delta} \right)^2 \right] dy \Rightarrow \langle u(y) \rangle = \frac{(\Delta p)\delta^2}{3\mu L} \quad (2.24)$$

e a Eq. 2.22 pode ser reescrita na forma que se segue,

$$u(y) = \frac{3}{2} \langle u(y) \rangle \left[1 - \left(\frac{y}{\delta} \right)^2 \right]. \quad (2.25)$$

Por fim, a vazão volumétrica, Q , através do sistema é dada por

$$Q = \int u dA = 2\delta \langle u(y) \rangle = \frac{2(\Delta p)\delta^3}{3\mu L}. \quad (2.26)$$

Para um escoamento em um tubo de secção reta circular, a vazão Q pode ser calculada similarmente, resultando na conhecida lei de *Hagen-Poiseuille* [21, 22, 23],

$$Q = \frac{\pi \Delta p R^4}{8\mu L}. \quad (2.27)$$

Vale ressaltar que os resultados analíticos acima são válidos apenas para escoamento laminar em escoamentos retilíneos sem efeitos de borda e sem deslizamento nas paredes (velocidade nula nas paredes do duto) de um fluido de densidade constante (incompressível) e Newtoniano. Para um escoamento lento, ou seja, para baixos Reynolds, estas condições são satisfeitas.

2.4 Escoamento Viscoso em Dutos Rugosos

Na seção anterior, apresentamos soluções encontradas na literatura para o problema clássico do escoamento entre placas lisas e paralelas. No entanto, como já mencionado, nos

meios geológicos naturais ou artificiais onde ocorre o transporte de fluido, as superfícies apresentam, geralmente, alguma rugosidade. Logo, é importante estender o problema de transporte de fluidos para geometrias mais complexas. O objetivo desta seção é, portanto, investigar o efeito da presença da rugosidade nas paredes sobre o transporte de fluidos em dutos com contornos mais irregulares.

A ciência da fluidodinâmica e suas aplicações práticas remontam ao tempo de Newton. As equações que governam a fluidodinâmica Newtoniana, as equações transientes de Navier-Stokes, são conhecidas há mais de 150 anos. No entanto, o desenvolvimento de formas simplificadas destas equações ainda é uma área de pesquisas bastante ativa. O crescente aumento da velocidade de processamento de dados e da capacidade de memória dos computadores desde a década de cinquenta permitiu a emergência da fluidodinâmica computacional (FDC), que se constitui em um complemento importante às áreas da fluidodinâmica experimental e teórica, sendo uma alternativa eficiente para a simulação de escoamentos complexos e em geometrias irregulares.

A modelagem de dutos rugosos implica em um conjunto de equações diferenciais parciais que, em geral, não possuem solução analítica. Em vista disso, simulações numéricas são necessárias para a obtenção de uma compreensão mais profunda do fenômeno do escoamento. No presente trabalho, técnicas de fluidodinâmica computacional [24] são aplicadas.

A simulação numérica origina-se em uma situação real (física). Esta situação real é representada matematicamente, convertendo-se a resolução de um problema físico em um problema matemático. Os resultados obtidos devem ser avaliados aproximando-se, tanto quanto possível, da solução do problema real. Durante este processo, alguns aspectos devem ser cuidadosamente observados. O primeiro é a formulação correta da modelagem matemática, que deve incorporar a física importante do problema. Outro ponto é a resolução matemática, principalmente quando esta envolve ferramentas computacionais que apresentam erros numéricos intrínsecos. Tais erros podem ser reduzidos até o ponto em que não mais afetariam o realismo da solução. A última etapa do processo, que envolve a interpretação dos resultados matemáticos, exige do simulador habilidade em diferenciar artefatos da modelagem numérica do comportamento real, ou seja, determinar se os resultados obtidos são devidos à física do problema ou às limitações numéricas da técnica de simulação.

A fluidodinâmica computacional é um ramo da análise numérica que estuda os fenômenos de transporte e leis de conservação relativas ao escoamento de um fluido. As

equações diferenciais governantes que descrevem a física destes fenômenos são discretizadas em uma malha computacional e transformadas em equações algébricas, usualmente não-lineares, para serem resolvidas numericamente e de forma iterativa. Com as condições de contorno apropriadas, obtém-se a solução e os valores das incógnitas nos nós das malhas, os quais, por sua vez, podem ser apresentados graficamente para então proceder-se a análise do fenômeno em estudo.

O problema do escoamento é governado pelas equações da continuidade e de Navier-Stokes para um fluido incompressível

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (2.28)$$

$$-\nabla p = -\mu \nabla^2 \mathbf{u} + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}, \quad (2.29)$$

onde ρ é a densidade do fluido, $\mathbf{u}$ e p são os campos locais de velocidade e pressão, respectivamente e μ é a viscosidade do fluido. O conjunto de equações de Navier-Stokes é, simplesmente, a equação de Newton, $\mathbf{F} = m(d\mathbf{u}/dt)$, aplicada a um elemento do fluido. Esta descrição detalhada da mecânica de fluidos no interior do duto baseia-se nas suposições de que o escoamento é estacionário e o fluido é contínuo, Newtoniano e incompressível. A condição de não-deslizamento é empregada em toda interface fluido-sólido. As equações de Navier-Stokes são não-lineares, a influência desta não-linearidade depende de uma grandeza adimensional denominada número de Reynolds, definido como

$$Re \equiv \frac{\rho u D}{\mu}. \quad (2.30)$$

onde ρ representa a densidade do fluido, μ , sua viscosidade, u representa a velocidade de escoamento e D é o tamanho característico do domínio no qual o fluido circula. O comportamento das equações anteriormente citadas está ligado a este número, e este parâmetro é utilizado para descrever o comportamento do fenômeno em questão. Como o termo viscoso na Eq. 2.29 é um termo difusivo, o número de Reynolds pode ser interpretado como a razão entre a velocidade de convecção u e a velocidade de difusão $\frac{\mu}{\rho h}$ do próprio campo de velocidades. A constante de difusão para o campo de velocidades é, portanto, μ/ρ . Consideraremos aqui que a velocidade de escoamento do fluido na direção longitudinal x é baixa, o que implica que o sistema encontra-se em um regime laminar viscoso de escoamento (baixos Reynolds, $Re \ll 1$). Na entrada do canal rugoso, o perfil de velocidades é parabólico e completamente desenvolvido.

A solução numérica das equações 2.28 e 2.29 para os campos de velocidade e pressão na estrutura é obtida através da técnica de discretização por diferenças finitas em vo-

lume de controle. Esta técnica consiste na conversão das equações diferenciais parciais que governam o fenômeno em equações algébricas não-lineares, que podem ser resolvidas numericamente [25]. A vantagem de tal técnica e do processo de discretização é a substituição do problema de encontrar soluções exatas e contínuas por soluções discretas no tempo e no espaço. Para a aplicação de tal técnica foi utilizado o software comercial *Fluent*. A seguir, a exposição do processo de discretização por diferenças finitas:

- Divisão do domínio em volumes de controle discretos usando uma malha computacional.
- Integração das equações governantes nos volumes de controle para construir equações algébricas não-lineares para as variáveis dependentes discretas, tais como pressão e velocidade.
- Linearização das equações discretas e solução do sistema de equações lineares resultante para gerar valores atualizados das variáveis dependentes.

A malha computacional é oriunda de pontos onde os valores da variável independente devem ser determinados. A aproximação numérica da equação diferencial procede da especificação de tais pontos. O processo de criação da malha é fundamental para a obtenção de uma solução numérica de uma equação diferencial parcial. A malha mais eficiente é aquela cuja relação entre o erro numérico e tempo computacional seja a menor possível. A Fig. 5 ilustra a malha constituída de elementos quadrangulares e triangulares utilizada no presente trabalho para discretizar o duto rugoso. O espaçamento entre os pontos da malha é fixado em 0.5.

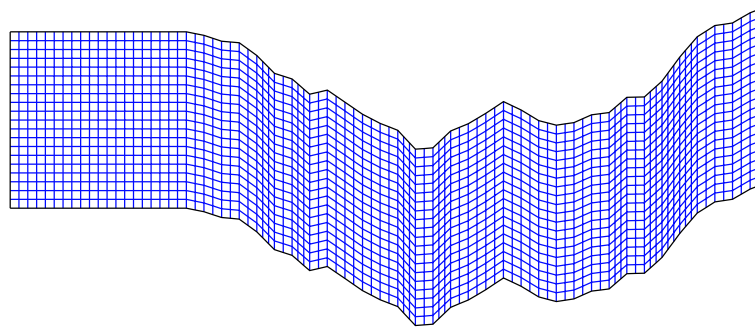


Figura 5: Secção do duto rugoso de comprimento $L/\delta = 64$, mostrando a malha computacional utilizada na discretização das equações envolvidas no fenômeno do escoamento de um fluido.

Há dois métodos numéricos distintos para a linearização e resolução de equações lineares discretas: o método segregado e o acoplado. Na solução segregada, resolve-se sequencialmente as equações governantes¹. Antes da convergência da solução é necessário que várias iterações sejam realizadas, posto que as equações são não-lineares e acopladas. Na solução acoplada, por sua vez, resolve-se simultaneamente as equações governantes para a continuidade, momento, energia e transporte de espécies, quando apropriado. Equações governantes para outras grandezas escalares são resolvidas sequencialmente, a partir do método de resolução segregada.

Para a resolução das equações discretas, utilizamos o método segregado de linearização. A Fig. 6 mostra esquematicamente os passos seguidos pelo método. Cada etapa pode ser avaliada da seguinte forma:

- Atualiza-se as propriedades do fluido, com base na solução obtida a cada iteração. Na primeira iteração, são empregados os valores iniciais das variáveis.
- Resolve-se as equações de momento para as componentes x e y da velocidade $\mathbf{u}$ empregando-se os valores correntes de pressão e fluxos de massas nas faces do volume de controle, atualizando o campo de velocidades.
- Deriva-se uma equação de correção para a pressão a partir da equação da continuidade e das equações de momento linearizadas, uma vez que as velocidades obtidas não necessariamente satisfazem a equação da continuidade localmente. Obtém-se, assim, as correções necessárias para a pressão, os fluxos de massa e os campos de velocidade nas faces do volume de controle após a resolução da equação de correção. A equação da continuidade é, portanto, satisfeita.
- Quando necessário, resolve-se as equações para grandezas escalares empregando os valores previamente atualizados das demais variáveis.
- Finalmente, verifica-se a convergência do sistema de equações.

As etapas do processo são repetidas até que os critérios de convergência das soluções das equações sejam atingidos.

Em ambos os métodos numéricos utilizados para a linearização e resolução de equações lineares discretas - o método segregado e o acoplado - as equações governantes discretas

¹Daí o nome solução segregada: as equações são resolvidas segregadas umas das outras.

não-lineares são linearizadas produzindo um sistema de equações nas variáveis independentes para cada célula computacional. O sistema linear resultante é resolvido de modo a gerar um escoamento atualizado como solução. Existem duas formas de linearização das equações, denominadas explícita e implícita. Na forma explícita, os valores desconhecidos em cada célula são computados usando uma relação que inclui apenas valores conhecidos, para uma dada variável. No método implícito, para uma dada variável, os valores desconhecidos em cada célula são calculados usando uma relação que inclui valores conhecidos e desconhecidos das células vizinhas. No método de solução segregada, cada equação governante é linearizada implicitamente em relação à equação dependente daquela variável, o que resulta em um sistema de equações lineares, com uma equação para cada célula computacional.

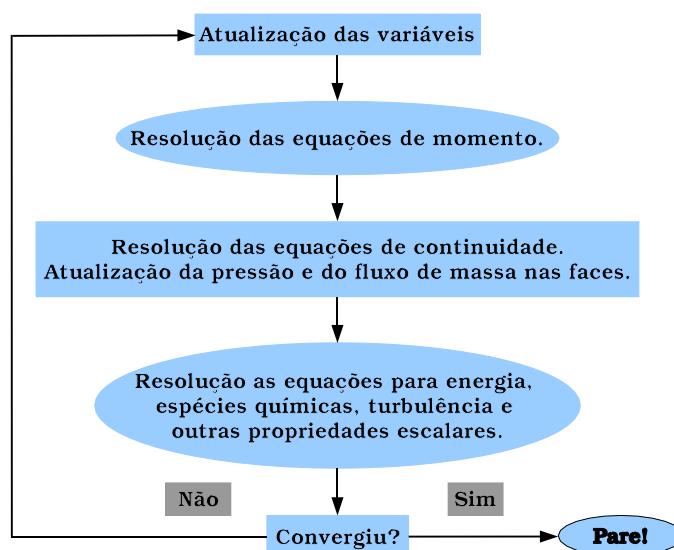


Figura 6: Esquema de resolução do sistema de equações algébricas gerado pelo método segregado de discretização.

Em síntese, o método de solução segregada resolve um campo de uma variável considerando todas as células ao mesmo tempo. Em seguida, resolve o campo de uma outra variável, também considerando todas as células ao mesmo tempo, e assim por diante. Não há linearização explícita no método segregado.

O software *Fluent* emprega uma técnica de conversão das equações governantes em equações algébricas não-lineares, passíveis de serem resolvidas numericamente. Esta técnica consiste em integrar as equações governantes em cada volume de controle, gerando equações discretas que conservam as quantidades de interesse. A discretização das equações governantes pode ser ilustrada através da discretização de uma equação de conservação,

no estado estacionário, para o transporte de uma quantidade escalar Φ , dada por

$$\int \rho \Phi \mathbf{u} \cdot d\mathbf{A} = \int \Gamma_\Phi \nabla \Phi \cdot d\mathbf{A} + \int_V S_\Phi dV \quad (2.31)$$

em um volume de controle V . Na Eq. 2.31, temos que ρ é a densidade do fluido, $\mathbf{u}$ é o vetor velocidade, $\mathbf{A}$ é o vetor área da superfície, Γ_Φ é o “coeficiente de difusão” de Φ , $\nabla \Phi$ é o gradiente de Φ e S_Φ é uma fonte de Φ (por unidade de volume). A Eq. 2.31 é aplicada a cada um dos volumes de controle do domínio computacional. A célula mostrada na Fig. 7 é um exemplo deste volume de controle.

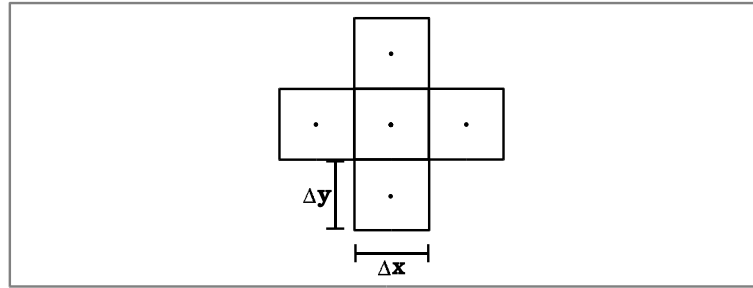


Figura 7: Esquema mostrando volumes de controle quadrangulares e seus centróides, onde os valores discretos das variáveis do sistema são avaliados. Os valores destas variáveis nas faces de cada volume são obtidos por um método de interpolação.

A discretização em determinada célula resulta em uma equação na forma

$$\sum_f^N \rho_f \Phi_f \mathbf{u}_f \cdot \mathbf{A}_f = \sum_f^N \Gamma_\Phi (\nabla \Phi)_n \cdot \mathbf{A}_f + S_\Phi V, \quad (2.32)$$

onde ρ_f é a densidade do fluido na face f , $\mathbf{u}_f$ é o vetor velocidade na face f , $\mathbf{A}_f$ é o vetor área da superfície na face f , N é o número de faces da célula, Φ_f é o valor de Φ na face f , $\rho \Phi \mathbf{u} \cdot \mathbf{A}$ é o fluxo mássico que atravessa a face f , $(\nabla \Phi)_n$ é a magnitude do gradiente normal à face f e V é o volume da célula. Se $\Phi = 1$, temos que a equação acima é a equação da continuidade. Se $\Phi = u$, temos a equação do momento na direção x .

O *software* armazena os valores discretos de Φ no centro das células. No entanto, a Eq. 2.32 necessita dos valores Φ_f nas faces. Tais valores são obtidos por interpolação dos valores centrais utilizando um esquema *upwind* ou “a jusante” em relação à direção da velocidade normal u_n . Optamos por um esquema *upwind* de primeira ordem em que as quantidades nas faces das células são determinadas considerando que os valores centrais de qualquer variável representam um valor médio e são válidos para toda a célula. Assim, ao utilizarmos um esquema *upwind* de primeira ordem, atribui-se o valor central a jusante à face f . É possível utilizar, também, o esquema *upwind* de segunda ordem, no qual

quantidades nas faces das células são calculadas usando um método de maior precisão. Neste processo, os valores nas faces são obtidos através de uma expansão em série de Taylor com relação ao valor central. Desta forma, em um esquema de segunda ordem, o valor da face é calculado através da expressão

$$\Phi_f = \Phi + \nabla\Phi \cdot \Delta\mathbf{s} \quad (2.33)$$

onde Φ e $\nabla\Phi$ são, respectivamente, o valor central e seu gradiente na célula a jusante e $\Delta\mathbf{s}$ é o vetor deslocamento a partir do centróide da célula a jusante. Em nosso caso, optamos pelo esquema de primeira ordem, que se mostrou mais rápido e adequado.

A equação de transporte discretizada, Eq. 2.32, contém a variável Φ no centro da célula, bem como os valores desconhecidos nas células vizinhas. Geralmente, esta equação é não-linear em relação a estas variáveis. Uma forma linearizada da Eq. 2.32 pode ser escrita como

$$A_P\Phi = \sum_j A_j\Phi_j + B, \quad (2.34)$$

onde o subscrito j refere-se às células vizinhas, A_P e A_j são os coeficientes linearizados para Φ e Φ_j e B é o fluxo líquido que atravessa a célula em todas as faces f , dado por

$$B = \sum_f \rho u_f A_f. \quad (2.35)$$

O número de células vizinhas para cada célula depende da topologia da malha mas, em geral, é igual ao número de faces da célula.

A forma integral das equações governantes 2.28 e 2.29 é avaliada para cada volume de controle da malha, produzindo-se um conjunto acoplado de equações algébricas [26]. As equações da continuidade e do momento são, então, resolvidas seqüencialmente, como já mencionado anteriormente.

O erro introduzido em virtude da resolução das equações discretas quando contrastado com as soluções exatas das equações diferenciais parciais é denominado *erro de discretização*. Em malhas finas, o erro de discretização é proporcional ao erro de truncagem, considerando um problema linear por motivos de simplificação. Na prática, um critério de convergência utilizado é a observação de pequenas mudanças em variáveis dependentes importantes durante o curso dos estudos de refinamento da malha. A diferença entre as soluções obtidas a partir de sucessivas iterações é calculada para cada ponto da malha, após a especificação de uma tolerância para o erro. Se a magnitude da diferença é inferior à tolerância estabelecida, admite-se que o esquema numérico convergiu. Existe uma téc-

nica mais confiável para medir a convergência iterativa em problemas de valor de contorno puros (independentes do tempo). Tal técnica consiste em fundamentar o critério no erro residual que resta na solução aproximada da equação diferencial. Computa-se um vetor residual para cada iteração, calculando-se o erro na solução da iteração corrente quando comparada à solução exata das equações diferenciais. Uma norma vetorial apropriada é calculada com o intuito de medir o erro residual sobre todo o domínio. Este valor é, então, comparado à magnitude do erro residual no início da iteração. O erro na norma pode ser calculado para todas as equações no sistema de equações diferenciais parciais.

A progressão dos cálculos pode ser acompanhada até que a convergência seja atingida, uma vez inicializada a simulação do escoamento. A demonstração da convergência e estabilidade características do método numérico é bastante difícil. No entanto, estas propriedades são exaustivamente verificadas durante as nossas simulações computacionais.

O critério de convergência utilizado neste estudo é definido em termos de “resíduos” que fornecem uma medida do grau em que as equações de conservação estão sendo satisfeitas ao longo do campo de escoamento. O cálculo dos resíduos é feito somando-se o desequilíbrio em cada equação para todas as células do domínio. Por exemplo, supondo uma célula i cercada por um conjunto de células j , o resíduo R para uma quantidade Φ é expresso como

$$R(\Phi) = \frac{\sum_i |\sum_j (A_j \Phi_j - A_i \Phi_i + B)|}{\sum_i |A_i \Phi_i|}, \quad (2.36)$$

onde o somatório em i compreende todas as células do domínio e os termos A são coeficientes provenientes da diferença finita, que combinam os termos convectivo e viscoso através dos volumes de controle que envolvem a célula i . Para cada variável do escoamento (pressão, velocidade), os resíduos fornecem uma medida da magnitude do erro na solução de cada iteração. Geralmente, considera-se que a solução atingiu o critério de convergência quando os resíduos atingem valores da ordem de 10^{-3} . Nas simulações realizadas neste trabalho, o critério de convergência foi estabelecido em valores inferiores a 10^{-5} para os resíduos nas equações de continuidade, momento e energia, como demonstra a Fig.8.

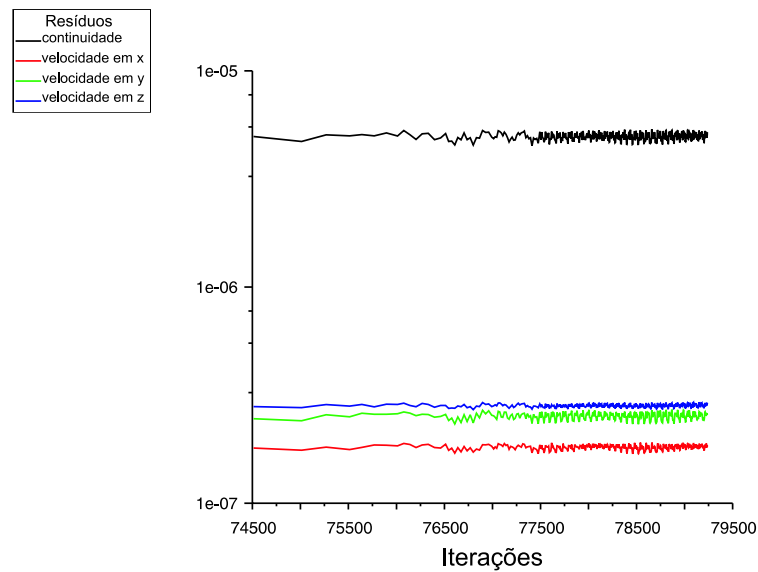


Figura 8: Convergência das componentes do vetor velocidade nas direções x e y , bem como da continuidade.

2.5 Resultados e Discussão

Uma vez obtida a convergência da solução, a simulação do escoamento em um duto rugoso que possui saída lisa mostra o perfil parabólico de velocidades do fluido, como ilustra a Fig. 9. Em todas as simulações realizadas, este perfil parabólico é observado na entrada e na saída de todos os canais rugosos. Ao longo do duto liso, este perfil de velocidades não sofre modificações. Entretanto, alterações são observadas ao longo do duto rugoso, visto que as reentrâncias (fraturas) provocam variações na magnitude da velocidade. Nas regiões próximas às paredes do tubo, a velocidade de escoamento do fluido é bem inferior à velocidade na cavidade central do duto, devido à presença da rugosidade.

Conforme resultados obtidos a partir de simulações computacionais, percebemos que a característica auto-afim, assim como as conexões entre as fraturas exercem importante influência sobre as propriedades do escoamento no interior do duto rugoso. Perfis do campo de velocidades no interior de dutos rugosos auto-afins estão ilustrados na Fig. 10. A magnitude da velocidade do fluido ao longo do duto varia bastante, sendo máxima nas porções centrais do duto. Existe uma assimetria do perfil de velocidades em relação ao plano de simetria da estrutura fractal. Tal assimetria é decorrência do fluxo na porção

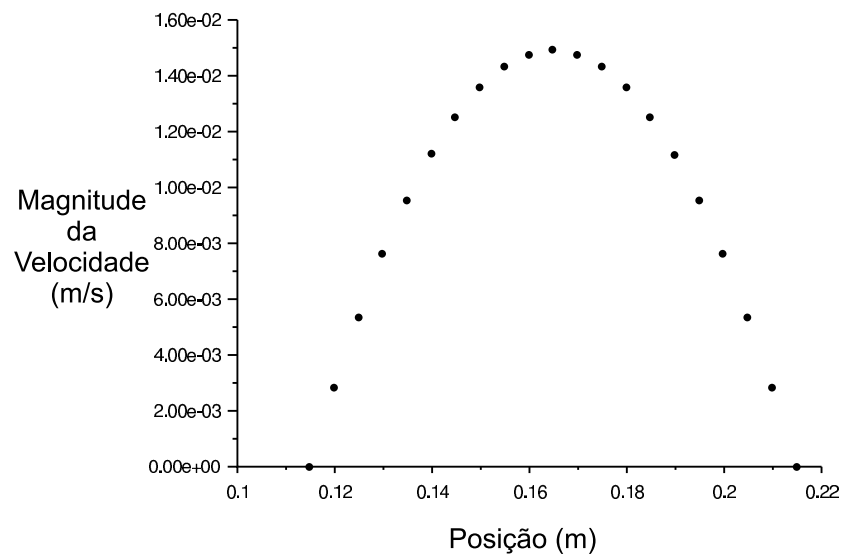


Figura 9: Figura mostrando o perfil parabólico de velocidades na saída do duto.

central do duto, que ocorre na direção longitudinal. As velocidades mais elevadas, situadas no centro do duto (regiões em vermelho na Fig. 10) são cerca de uma ordem de magnitude maiores que as velocidades encontradas próximas às paredes (regiões em azul claro na Fig. 10). Devido à condição de não-deslizamento na superfície da estrutura, a velocidade de escoamento é zero na parede, representada na Fig. 10 pela região em azul escuro.

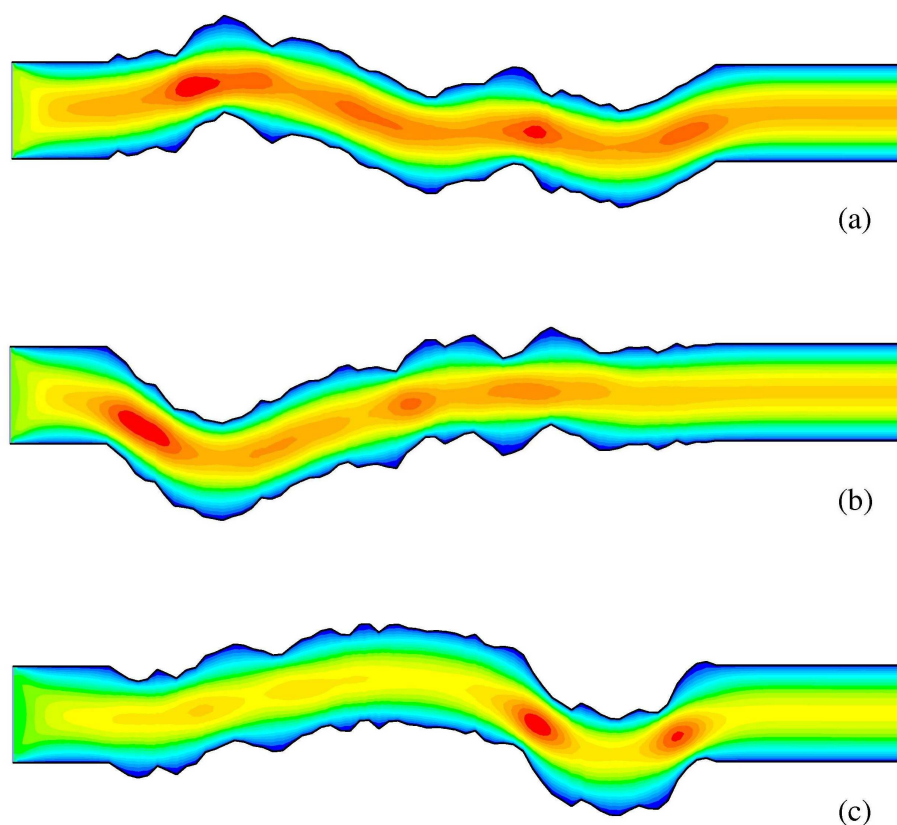


Figura 10: Campos de velocidades no interior de dutos rugosos auto-afins de comprimento $L/\delta = 64$. A magnitude da velocidade varia desde zero (regiões em azul escuro) até $1.83 \cdot 10^{-2} m/s$ (regiões em vermelho).

A Fig. 11 mostra o efeito que a largura efetiva exerce sobre o campo de velocidades. Como já mencionado anteriormente, estamos considerando a situação em que uma rocha é fraturada sem que haja produção de deformações ou interstícios subseqüentes no material e as partes fraturadas da amostra são simplesmente separadas por uma distância $h \ll L$, perpendicularmente ao plano médio da fratura. A abertura vertical do duto é constante. No entanto, a abertura efetiva local para o fluido, isto é, a espessura local do canal normal à direção média do escoamento, depende fortemente do ângulo local entre a superfície e o plano médio. Observando a Fig. 11, é possível perceber que a variação da largura efetiva possibilita o surgimento de regiões de estrangulamento no duto, ocasionando mudanças significativas nos campos de velocidade. Na Fig. 11(a), constata-se um adensamento das linhas de corrente nas regiões mais estreitas do canal, representado pela cor vermelha na Fig. 11(b), onde a magnitude da velocidade é da ordem de $10^{-2} m/s$.

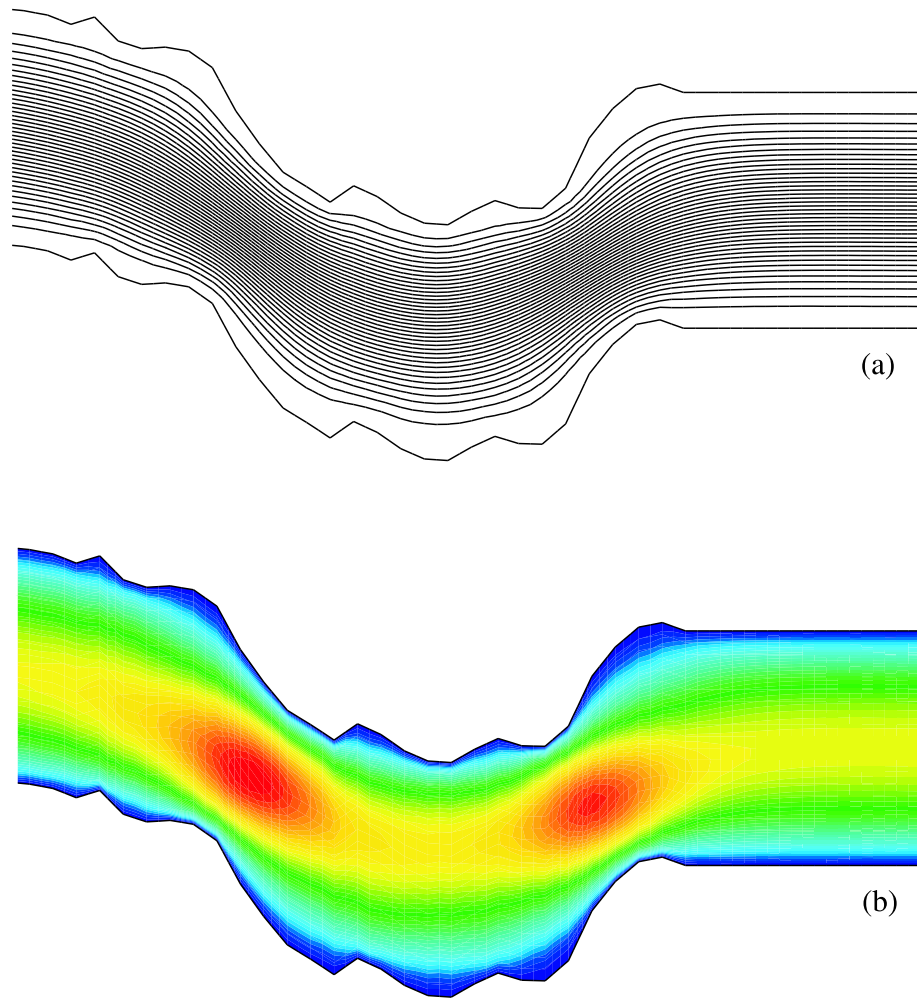


Figura 11: Efeito da largura efetiva sobre o campo de velocidades no interior de um duto rugoso auto-afim de comprimento $L/\delta = 64$, expoente $\zeta = 0.8$ e abertura $h = 10^{-1}m$.

Na Fig. 12 mostramos um conjunto de linhas de corrente para diferentes dutos rugosos, evidenciando o efeito da variação da abertura local sobre as linhas de escoamento.

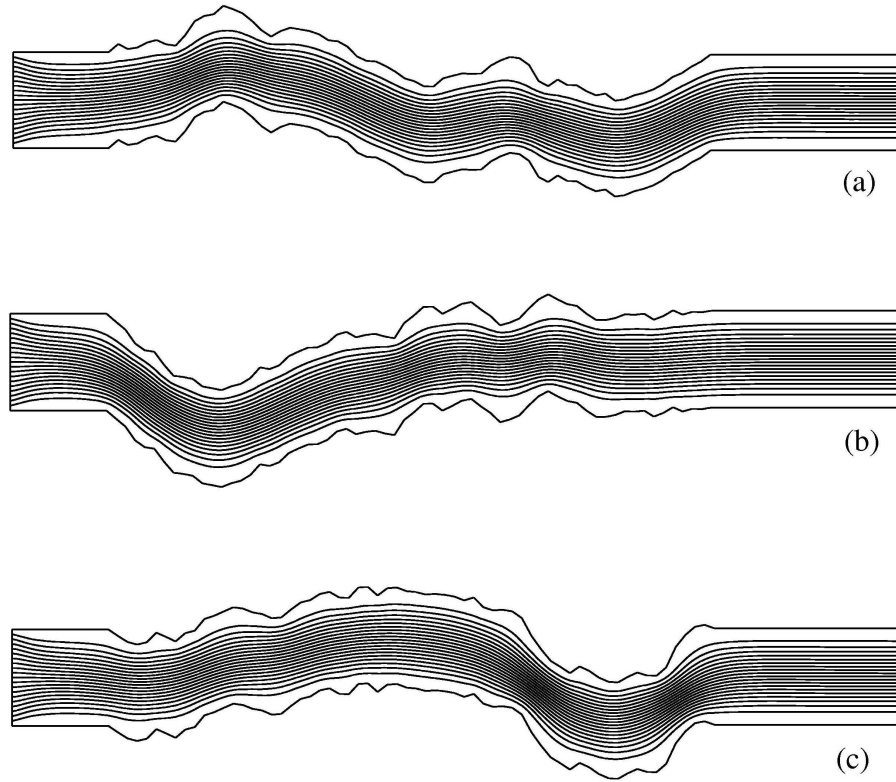


Figura 12: Linhas de corrente no interior de canais fraturados com abertura $h = 10^{-1}m$, comprimento $L/\delta = 64$ e sem arraste lateral entre as superfícies que constituem tais canais. À medida que o ângulo da superfície se torna mais próximo de $\pi/2$, mais estreita se torna a largura efetiva.

Os campos de pressão no interior de diferentes dutos rugosos auto-afins, obtidos a partir de nossas simulações computacionais, estão ilustrados na Fig. 13. Observamos que o escoamento ocorre em direção às regiões de mais baixas pressões, representadas em azul na Fig. 13. As pressões mais elevadas, representadas em vermelho na Fig. 13 na entrada do canal, são cerca de uma ordem de magnitude maiores que as pressões encontradas na saída do duto. Este resultado está em concordância com as previsões da equação de Navier-Stokes, onde o escoamento é regido por um gradiente de pressão negativo.

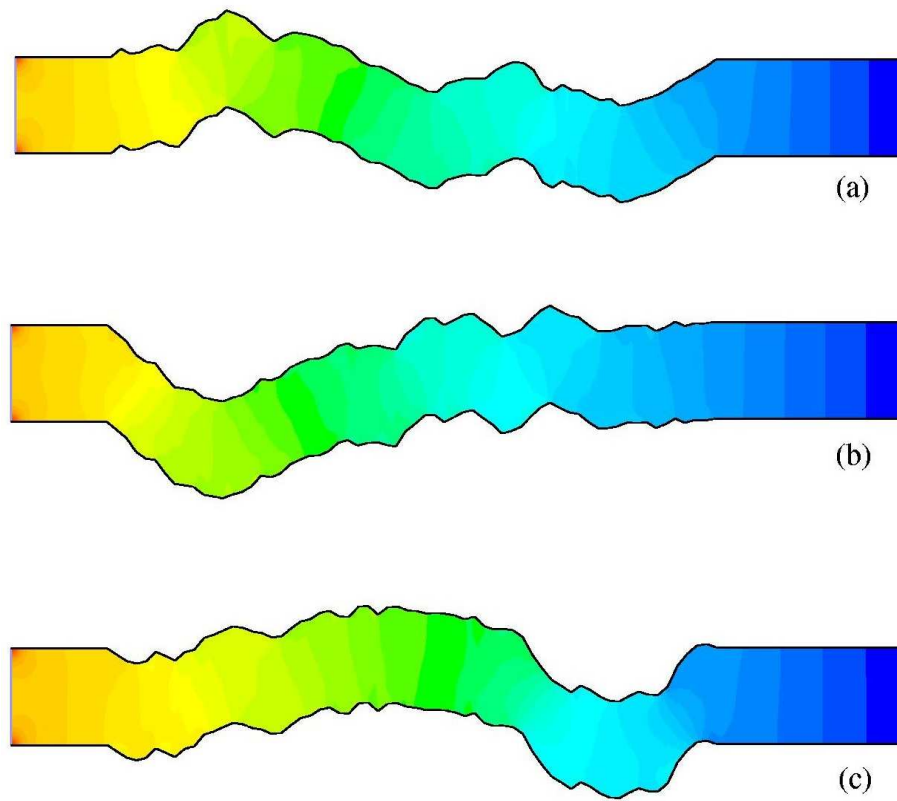


Figura 13: Campos de pressão no interior de dutos rugosos auto-afins de comprimento $L/\delta = 64$. A magnitude da pressão varia desde $1.95 \cdot 10^1 Pa$ (regiões em vermelho) até zero (regiões em azul escuro).

3 *Transporte de Partículas em Dutos Rugosos*

3.1 Introdução

O transporte de partículas carregadas por um fluido escoando através de um meio irregular como os meios porosos ou as rochas fraturadas é um processo com diversas aplicações nas áreas de engenharia química e do petróleo, sistemas biológicos e ambientais [15]. Exemplos de aplicações incluem cromatografia, filtração e contaminação de aquíferos. A eficiência de tais processos depende da dinâmica do transporte de partículas no interior da geometria complexa, bem como da natureza das interações entre estas partículas e a geometria do meio poroso. A investigação acerca dos fenômenos de escoamento e transporte em meios porosos estão presentes, ainda, na biomedicina como uma área de pesquisa de grande relevância. Há vários meios porosos cuja morfologia do espaço intersticial e o fenômeno do escoamento são de grande interesse fisiológico como, por exemplo, o sistema vascular, os rins e os pulmões. Um exemplo da aplicação do problema dos meios porosos consiste na modelagem do transporte de fluidos e partículas no interior das vias respiratórias. Por exemplo, a compreensão e a avaliação quantitativa do escoamento de ar e de concentrações locais de micropartículas nas paredes de vias aéreas traqueobronquiais são importantes na realização de estimativas dos riscos à saúde devido à inalação de poluentes, bem como na determinação das taxas apropriadas de deposição de partículas de aerossol em certos locais do pulmão [27, 28].

Comumente, a dispersão de partículas arrastadas por um fluido em um meio que possui estrutura desordenada envolve uma combinação de fenômenos em diferentes escalas. Microscopicamente, a convecção e a dispersão de partículas acontece através dos espaços vazios presentes na estrutura.

O movimento de partículas em um escoamento com uma larga distribuição de velocidades é um fenômeno interessante que expõe uma rica variedade de comportamentos físicos. O fenômeno da dispersão hidrodinâmica faz referência ao espalhamento, no tempo e no espaço, de uma partícula *sem massa* (traçadora) injetada em um fluido escoando através de um meio poroso [8]. É patente a relevância prática desta propriedade de transporte, notadamente com relação a algumas áreas de pesquisa aplicada como hidrologia e processos químicos em geral. Em termos de significado físico do parâmetro, evidências experimentais comprovam que devido à extrema sensibilidade e flexibilidade da medida, é possível servir-se do coeficiente de dispersão hidrodinâmico para a caracterização mais detalhada da estrutura e geometria do volume de poros. Enquanto medidas padrão de permeabilidade podem fornecer apenas informações médias acerca da topologia e morfologia do meio poroso, a natureza inerentemente dinâmica do processo da dispersão, se convenientemente interpretada, pode permitir a identificação e análise da presença de zonas de estagnação, recirculação, não-homogeneidades e caminhos preferenciais através da estrutura.

No presente capítulo, o principal objetivo é promover um estudo acerca do transporte de partículas *com massa* conduzidas por um fluido no interior de dutos rugosos bidimensionais com geometria auto-afim. O caráter intrinsecamente irregular na microgeometria destas estruturas adiciona um grau de complexidade ao problema, refletindo-se nas propriedades do escoamento bem como nas propriedades estatísticas dos campos de velocidade e pressão e, conseqüentemente, influenciando fortemente a natureza do transporte das citadas partículas. As equações de transporte para as partículas são solucionadas numericamente, a partir do mesmo programa comercial utilizado para solucionar o escoamento em dutos rugosos. A descrição detalhada das técnicas de fluidodinâmica computacional utilizadas pelo *software* para converter as equações que governam o fenômeno em equações algébricas não-lineares já foram expostas no capítulo anterior. Investigamos, portanto, o efeito da morfologia e topologia do meio poroso no tempo de trânsito de partículas, com diferentes números de Stokes quando as mesmas viajam em uma estrutura desordenada interagindo com a geometria através de colisões. O fluido no interior do canal rugoso bidimensional com geometria auto-afim encontra-se regime de Stokes (baixos números de Reynolds). As paredes do duto rugoso possuem propriedades de reflexão, ou seja, quando a partícula entra em contato com esta parede sofre reflexão de acordo com o coeficiente de restituição, que caracteriza a elasticidade das colisões. Não há interação das partículas entre si, apenas entre estas e o fluido. Finalmente, como complementação do nosso estudo, realizamos um confronto entre os resultados obtidos para partículas

injetadas no interior de dutos rugosos e dutos lisos.

3.2 Transporte de Partículas

Esta seção é dedicada ao estudo do processo de transporte de partículas com massa sujeitas à ação de um fluido escoando em um duto rugoso. A solução numérica das equações de Navier-Stokes para a determinação dos campos de velocidade e pressão no interior destes dutos já foi abordada no capítulo anterior.

O movimento de partículas imersas no fluido é governado pela Segunda Lei de Newton:

$$m_P \frac{d\mathbf{u}_P}{dt} = \sum \mathbf{F}_P, \quad (3.1)$$

onde m_P e $\mathbf{u}_P$ representam a massa e a velocidade de uma única partícula esférica de diâmetro d_P , e $\sum \mathbf{F}_P$ são as forças que atuam sobre tal partícula. Vale lembrar que quando uma partícula, ou um conjunto de partículas, é introduzido em um fluxo de fluido, a resposta da partícula ao escoamento depende da velocidade relativa entre a partícula e o fluido. Esta velocidade relativa determina o arraste, que é a única força que determina o movimento da partícula se se supuser que não há nenhuma interação entre as partículas e que a presença destas partículas não altera o escoamento. Assim, sob condições onde a velocidade relativa de arraste é baixa $|\mathbf{u} - \mathbf{u}_P| \ll 1$, a razão entre as densidades $\rho_P/\rho \gg 1$, (onde ρ_P e ρ representam as densidades da partícula e do fluido, respectivamente) e $d_P > 1\mu m$, a maioria das forças que atuam sobre a partícula podem ser desprezadas, à exceção da força de arraste [28]. O primeiro argumento utilizado para corroborar a afirmação anterior é que estas partículas são relativamente grandes, de maneira que o movimento Browniano pode ser negligenciado. Além disso, o material que constitui as partículas é mais denso que o fluido, fazendo com que os termos que dependem desta relação, tal como a força de pressão, sejam pequenos. Para simplificar, consideremos a equação unidimensional do movimento para uma única partícula sujeita apenas à força de arraste,

$$m_P \frac{du_P}{dt} = \frac{1}{2} \rho (u - u_P)^2 C_D A_P, \quad (3.2)$$

onde o parâmetro A_P é a área da secção transversal da partícula perpendicular à velocidade. Para uma partícula esférica, a massa é dada por

$$m_P = \frac{\pi}{6} d_P^3 \rho_P \quad (3.3)$$

e o número de Reynolds, por sua vez, é definido como

$$Re_P \equiv \frac{\rho(u - u_P)d_P}{\mu}. \quad (3.4)$$

Os parâmetros ρ e μ representam a densidade (em $kg \cdot m^{-3}$) e a viscosidade (em $kg/m \cdot s$) do fluido, respectivamente. O coeficiente de arraste, C_D , é expresso através da equação empírica

$$C_D = a_1 + \frac{a_2}{Re_P} + \frac{a_3}{Re_P^2}, \quad (3.5)$$

onde os parâmetros a_i são constantes obtidas experimentalmente para partículas esféricas lisas sobre diversas escalas do número de Reynolds [29], como mostrado na Tabela 2.

Tabela 2: Coeficiente de arraste para diversos intervalos do número de Reynolds [29].

C_D	Re
$24/Re$	< 0.1
$22.73/Re + 0.0903/Re^2 + 3.69$	$0.1 < Re < 1.0$
$29.1667/Re - 3.8889/Re^2 + 1.222$	$1.0 < Re < 10.0$
$46.5/Re - 116.67/Re^2 + 0.6167$	$10.0 < Re < 100.0$
$98.33/Re - 2778/Re^2 + 0.3644$	$100.0 < Re < 1000.0$
$148.62/Re - 4.75 \cdot 10^4/Re^2 + 0.357$	$1000.0 < Re < 5000.0$
$-490.546/Re + 57.87 \cdot 10^4/Re^2 + 0.46$	$5000.0 < Re < 10000.0$
$-1662.5/Re + 5.4167 \cdot 10^6/Re^2 + 0.5191$	$10000.0 < Re < 50000.0$

Para compreendermos melhor o fenômeno, consideremos a condição-limite de escoamento no regime de Stokes ($0 < Re_P \leq 1.0$), onde o coeficiente de arraste expresso pela Eq. 3.5 reduz-se à

$$C_D = \frac{24}{Re_P}. \quad (3.6)$$

Logo, a Eq. 3.2 para o movimento das partículas pode ser reescrita na forma

$$\frac{du_P}{dt} = \frac{18\mu}{d_P^2 \rho_P}(u - u_P). \quad (3.7)$$

Podemos então representar as velocidades da partícula e do fluido em termos grandezas adimensionais, de modo que

$$u_P^* = \frac{u_P}{U}, \quad (3.8)$$

$$u^* = \frac{u}{U}. \quad (3.9)$$

Analogamente, o tempo de trânsito da partícula escrito em termos de adimensionais é dado por

$$t^* = \frac{t}{h/U}, \quad (3.10)$$

onde h é a largura da entrada do duto. Desta maneira, a Eq. 3.7 pode ser reescrita em termos dos parâmetros adimensionais definidos anteriormente,

$$\frac{du_P^*}{dt^*} = \frac{18\mu h}{\rho_P d_P^2 U} (u^* - u_P^*). \quad (3.11)$$

O número de Stokes é definido, portanto, como a razão entre o tempo de resposta da partícula (t_R) e o tempo de escoamento (t_E),

$$St = \frac{t_R}{t_E} = \frac{\rho_P d_P^2 u}{18h\mu}. \quad (3.12)$$

Aqui, o parâmetro St é especificado através do ajuste entre a densidade da partícula para um dado diâmetro da mesma e os parâmetros relativos ao fluido, previamente definidos durante o estudo do escoamento.

Para a entrada do tubo rugoso, um perfil parabólico para a velocidade de escoamento é especificado. O lançamento das partículas é feito a partir de um ponto no centro da abertura do duto. O vetor velocidade de lançamento de cada partícula forma um ângulo θ com a horizontal, de modo que, para o conjunto de partículas que percorrem o duto rugoso, $-\frac{\pi}{2} < \theta < \frac{\pi}{2}$. Os módulos das velocidades nas direções x e y variam, sem alterar, contudo, o módulo da velocidade inicial das partículas, ajustada à velocidade de escoamento do fluido. As condições de contorno para as equações que governam os movimentos das partículas e do fluido incluem a simetria em relação ao eixo horizontal traçado a partir do ponto médio da abertura do duto. Como já mencionado anteriormente, não há deslizamento do fluido nas paredes.

As equações de transporte para as partículas são resolvidas a partir do mesmo *software* utilizado para solucionar o escoamento em dutos rugosos, como discutido no Capítulo 4. A solução consiste, basicamente, em prever a trajetória de uma partícula, integrando-se a sua equação de movimento, como expresso na Eq. 3.1. Após cada iteração para cada partícula, as informações sobre a posição e a velocidade, bem como o tempo de trânsito no interior da estrutura rugosa são computadas.

No presente trabalho, são realizadas simulações para 10 amostras de cada comprimento do duto rugoso e 1000 partículas são lançadas em cada uma destas realizações. Parâmetros como a densidade (ρ_P) e o coeficiente de restituição (κ) são variados, para

que o comportamento das partículas no interior do duto seja observado. Vale mencionar que as partículas não interagem entre si, apenas com o fluido, através do arraste, e com a superfície do duto rugoso, através de colisões. O fluxo de partículas, assim como seus diâmetros são suficientemente pequenos de modo a não perturbar o escoamento. O coeficiente de restituição, κ , é definido como

$$\kappa \equiv \frac{u_P^1}{u_P^2}, \quad (3.13)$$

onde u_P^1 e u_P^2 são as velocidades das partículas imediatamente após e antes da colisão, respectivamente. O parâmetro κ caracteriza a elasticidade das colisões, classificadas em elásticas ($\kappa = 1$) e inelásticas ($0 \leq \kappa < 1$). Uma colisão elástica é aquela na qual não há perda de energia durante o choque e, portanto, a velocidade de aproximação (antes da colisão) dos corpos é igual à velocidade de afastamento (após a colisão). Uma colisão inelástica, por sua vez, é caracterizada por perda de energia durante o choque. No caso de um choque perfeitamente inelástico, o coeficiente de restituição assume valor nulo.

3.3 Resultados e discussão

A Fig. 14 ilustra a trajetória de duas partículas com $St = 0.05$ movimentando-se no interior de um duto rugoso auto-afim. Estas partículas são tipicamente traçadoras, pois se adaptam quase instantaneamente ao campo de velocidades do escoamento ($t_R \ll t_E$). Como mencionado, tais partículas são lançadas no interior da estrutura rugosa com velocidade relativa nula ($|\mathbf{u} - \mathbf{u}_P| = 0$). Observa-se que suas trajetórias coincidem com as linhas de corrente do escoamento e, portanto, nenhuma colisão com as paredes do tubo é observada.

Por sua vez, partículas com elevados números de Stokes ($St = 5.0$) apresentam trajetórias notadamente balísticas. Isto ocorre porque o tempo de resposta das partículas à ação do escoamento é excessivamente elevado ($t_R \gg t_E$), de modo que a acomodação daquelas ao campo de velocidades é lenta. Nesta situação, o transporte é essencialmente controlado pelas colisões entre as partículas e as paredes do duto. Mais precisamente, as partículas conseguem se mover entre as linhas de corrente e colidir com as paredes da estrutura ainda na porção lisa inicial, retornando às regiões centrais do duto rugoso, onde as velocidades de escoamento são mais elevadas. O número de choques entre as paredes e as partículas é extremamente alto sob estas condições. A Fig. 15 ilustra o efeito da variação de κ nas trajetórias de duas partículas com $St = 5.0$ arrastadas por um fluido

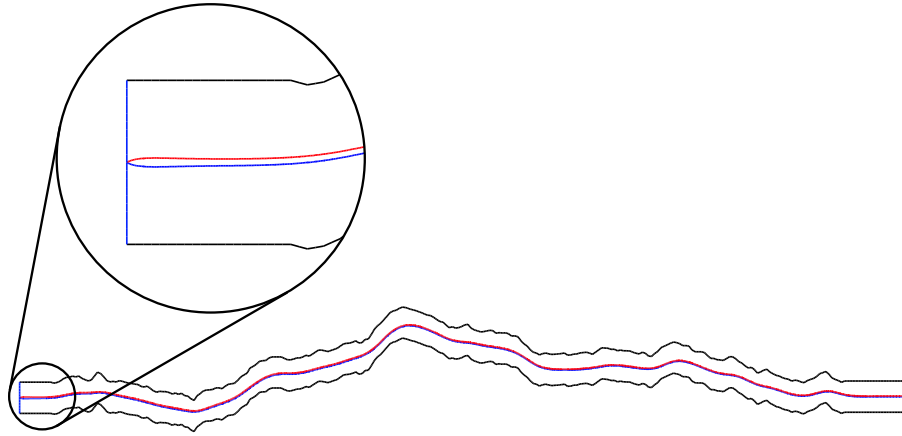


Figura 14: Trajetórias de duas partículas traçadoras ($St = 0.05$) lançadas no interior de uma estrutura rugosa auto-afim de comprimento $L/\delta = 256$.

no interior de uma estrutura rugosa auto-afim.

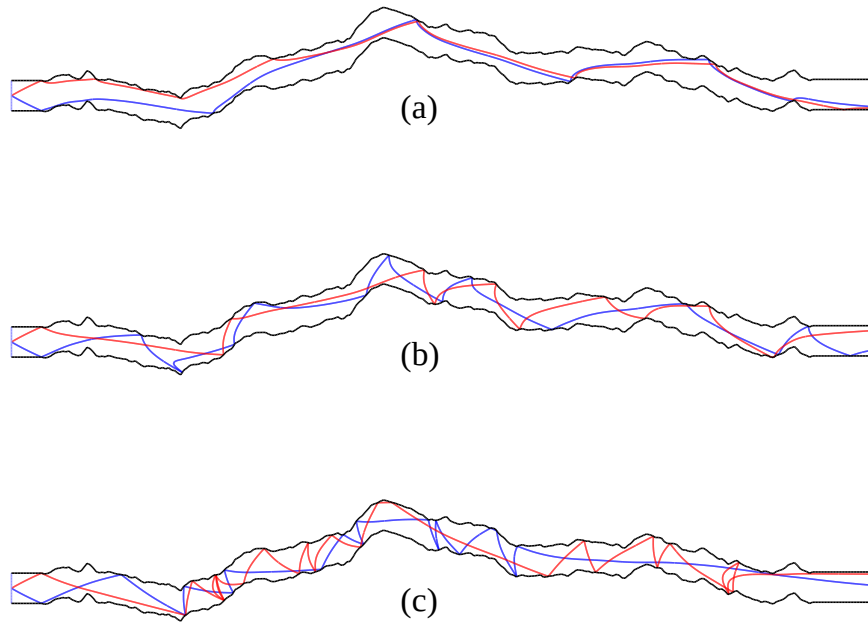


Figura 15: Trajetórias de duas partículas com elevado número de Stokes ($St = 5.0$) lançadas no interior de uma estrutura rugosa auto-afim de comprimento $L/\delta = 256$. A figura ilustra o efeito da variação do coeficiente de restituição sobre as trajetórias das partículas para (a) $\kappa = 0.1$, (b) $\kappa = 0.5$ e (c) $\kappa = 1.0$.

Na situação em que as partículas possuem número de Stokes intermediário ($St = 0.5$), o tempo de resposta à ação do fluido é da ordem do tempo de escoamento, $t_R \approx t_E$. Deste modo, o transporte das partículas é controlado pela competição localizada entre os dois

mecanismos: as colisões das partículas com as paredes do duto rugoso e a interação do fluido com estas partículas. Nesta circunstância, o coeficiente de restituição torna-se o parâmetro preponderante sobre o comportamento das partículas, de modo que suas trajetórias são sensivelmente afetadas pela variação de κ , como ilustra a Fig. 16.

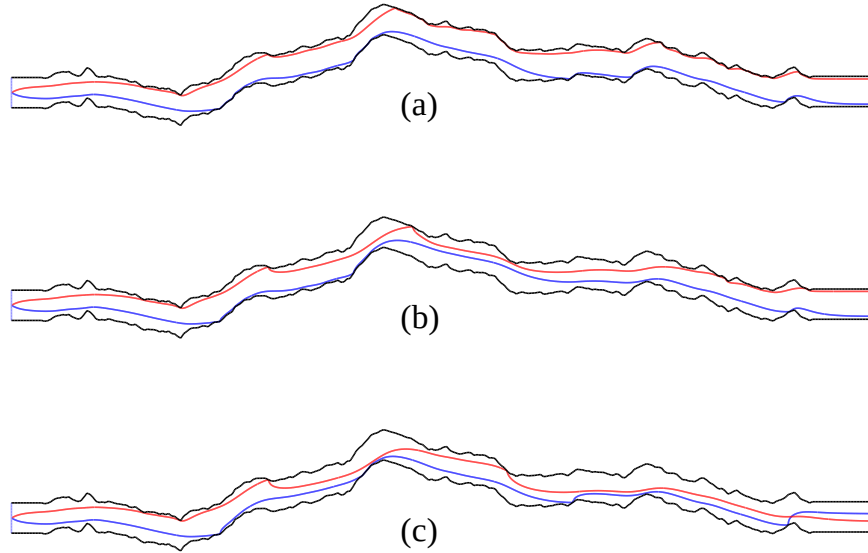


Figura 16: Trajetórias de duas partículas com número de Stokes intermediário ($St = 0.5$) lançadas no interior de uma estrutura rugosa auto-afim de comprimento $L/\delta = 256$. A figura ilustra o efeito da variação do coeficiente de restituição sobre as trajetórias das partículas para (a) $\kappa = 0.1$, (b) $\kappa = 0.5$ e (c) $\kappa = 1.0$.

Como resultado das simulações, as Figs. 17 e 18 ilustram gráficos em escala logarítmica do comportamento do tempo médio de trânsito de partículas com $St = 0.5$ e $St = 5.0$, respectivamente, em função do comprimento do duto rugoso. Observando a figura, nota-se que, apesar da complexidade das trajetórias, o tempo de trânsito varia linearmente com o comprimento do duto. Isto mostra que, pelo menos em nossas condições de simulação, o efeito das correlações de longo alcance e, por conseguinte, da característica auto-afim das paredes do duto rugoso, não são suficientes para induzir não-linearidades no tempo médio de trânsito.

A Fig. 19 ilustra o comportamento do tempo médio de trânsito das partículas em função do coeficiente de restituição, para diferentes números de Stokes. Para baixos valores de Stokes ($St = 0.05$), $\langle t \rangle$ permanece praticamente inalterado com a variação de κ . Como já mencionado anteriormente, este comportamento deve-se ao fato de que a adaptação das partículas ao campo de velocidades do escoamento é praticamente instantânea, de modo que não há colisões entre tais partículas e as paredes da estrutura rugosa. Assim, o coeficiente de restituição não possui efeito algum sobre o tempo de trânsito nesta

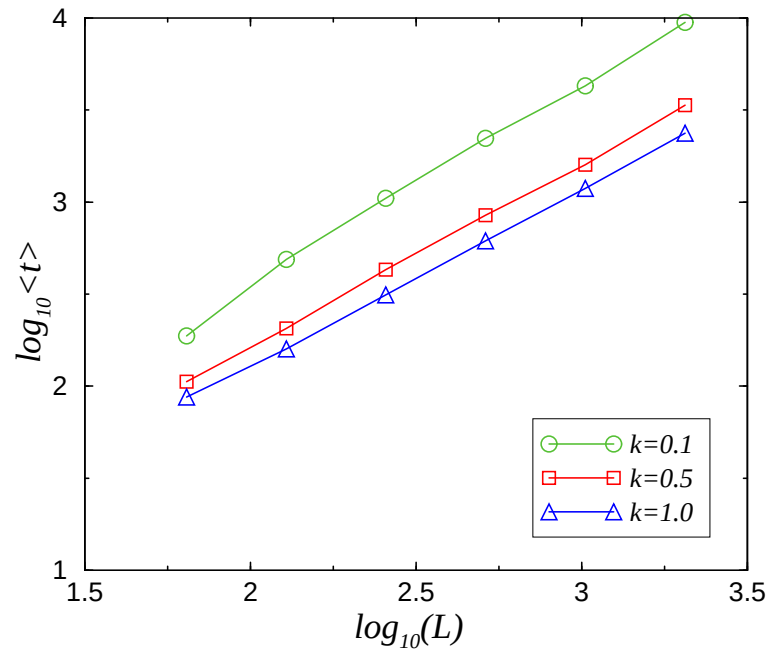


Figura 17: Comportamento linear do tempo médio de trânsito em função do comprimento do tubo, para partículas caracterizadas por $St = 0.55$ e diferentes coeficientes de restituição.

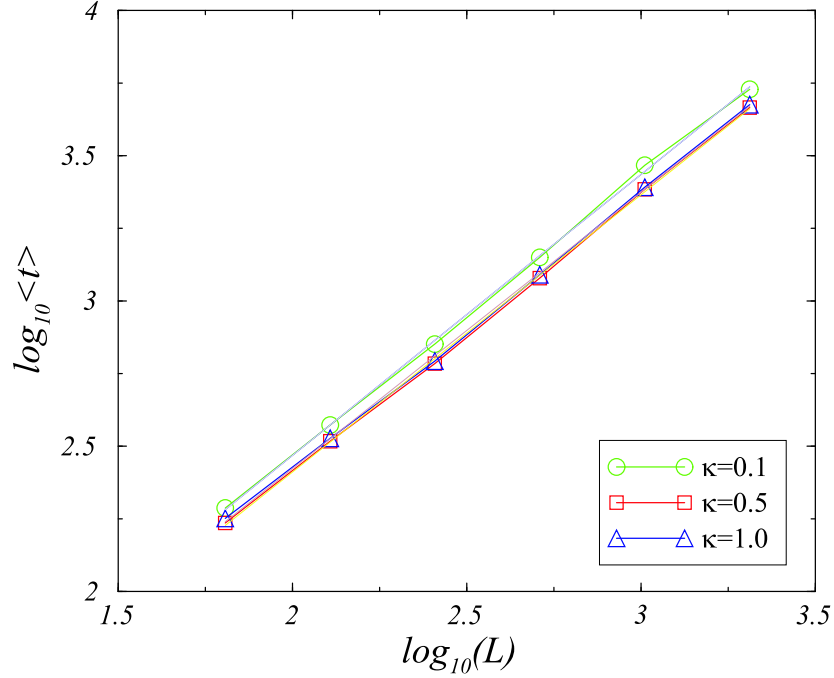


Figura 18: Comportamento linear do tempo médio de trânsito em função do comprimento do tubo, para partículas com $St = 5.0$ e diferentes coeficientes de restituição.

circunstância. Para partículas com $St = 0.5$, percebemos um decaimento substancial no tempo médio de trânsito quando as colisões tornam-se cada vez mais elásticas. Este fato é

facilmente explicado, pois, para baixos valores de κ , as partículas sofrem colisões inelásticas e, devido à perda de energia durante o choque, não possuem velocidade suficiente para retornar às regiões centrais do duto, permanecendo próximas às paredes rugosas. Portanto, o tempo médio para que as partículas percorram o duto rugoso torna-se elevado. O aumento do coeficiente de restituição acarreta uma menor perda de energia da partícula durante a colisão contra a parede, permitindo que a mesma seja lançada novamente nas porções centrais do duto rugoso, fato que provoca um decaimento no tempo médio de trânsito. Portanto, para $St = 0.5$, o coeficiente de restituição torna-se o parâmetro preponderante sobre o comportamento das partículas, de modo que alterações em κ implicam em consequências significativas sobre a dinâmica de deslocamento das partículas. Para elevados valores do número de Stokes ($St = 5.0$), o comportamento predominantemente balístico das partículas leva à ocorrência de múltiplas colisões durante o percurso no interior dos dutos rugosos. Como mostra a Fig. 19, o tempo de trânsito é praticamente insensível ao coeficiente de restituição, pelo menos para $\kappa \geq 0.3$.

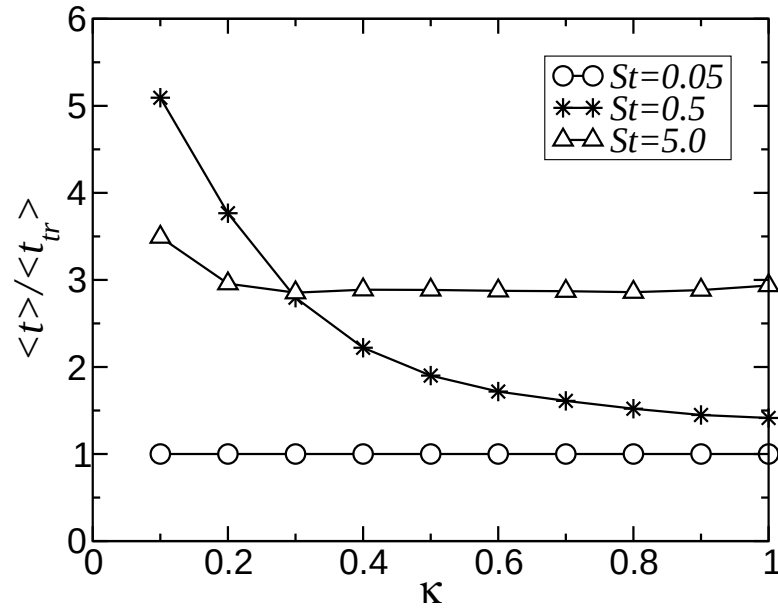


Figura 19: Comportamento do tempo médio de trânsito em função do coeficiente de restituição para diferentes números de Stokes da partícula, transitando no interior de um duto rugoso de comprimento $L/\delta = 1024$.

A Fig. 20 ilustra a variação do tempo médio de trânsito das partículas no interior de um tubo rugoso em função do número de Stokes, St , parâmetro adimensional que, como já mencionado, mensura o tempo de resposta da partícula à ação do fluido (t_R) em relação ao tempo de escoamento (t_E).

Quando St assume valores muito baixos ($0.05 < St < 0.2$), as partículas comportam-se como traçadoras, seguindo as linhas de corrente da velocidade e transitando no interior da estrutura sem sofrer qualquer colisão com suas paredes fraturadas. Nesta situação, $\langle t \rangle$ em função de St é mínimo, visto que o deslocamento das partículas ocorre nas regiões mais centrais do duto rugoso, onde as velocidades de escoamento são mais elevadas. Este regime está representado no primeiro trecho da Fig. 20. Partículas com números de Stokes entre $0.2 \leq St < 0.4$ possuem o comportamento ditado pela competição entre as colisões (interação partícula-estrutura) e o escoamento (interação partícula-fluido). Nesta situação, o tempo de resposta da partícula à ação do fluido (t_R) é da ordem do tempo de escoamento (t_E). Assim, ao serem lançadas no interior do duto rugoso, tais partículas sofrem algumas colisões com a parede da estrutura e, devido à ação do escoamento, acomodam-se, logo após o choque, ao campo de velocidades, transitando nas zonas estagnadas (próximas à parede). Tal fato acarreta uma elevação em $\langle t \rangle$, representado no segundo trecho da Fig. 20.

A elevação do número de Stokes no intervalo $0.4 \leq St < 1.8$ provoca uma diminuição significativa do tempo médio de trânsito, como mostra o terceiro trecho da Fig. 20. Isto ocorre porque após as colisões, as partículas possuem energia suficiente para cruzar as linhas de corrente e transitar na parte mais central do tubo, onde as velocidades são maiores. Para números de Stokes excessivamente elevados ($1.8 \leq St < 5.0$), a ação do escoamento passa a ser irrelevante frente à enorme quantidade de colisões com a parede do duto. O tempo médio de trânsito, portanto, sofre um aumento, como ilustra o último trecho da Fig. 20. O efeito da variação do coeficiente de restituição, κ , sobre o tempo médio de trânsito das partículas em função do número de Stokes é observado na Fig. 21. Na prática, não há mudança qualitativa no comportamento de $\langle t \rangle$ com St , exceto pelo fato de que os valores de $\langle t \rangle$ nas duas regiões de Stokes intermediários tornam-se sistematicamente menores com a redução de κ .

É importante comparar o comportamento do transporte de partículas em dutos lisos e rugosos. A Fig. 22 ilustra o efeito da rugosidade sobre o tempo médio de trânsito em função do número de Stokes. A ausência de rugosidade permite que as partículas comportem-se como traçadoras, seguindo as linhas de corrente da velocidade, mesmo a elevados valores de St . Somente para $St > 2$, observamos colisões entre as partículas e as paredes da estrutura lisa. O número de Stokes que maximiza o tempo de trânsito das partículas no interior do duto liso é bem mais elevado do que este mesmo parâmetro para o duto rugoso.

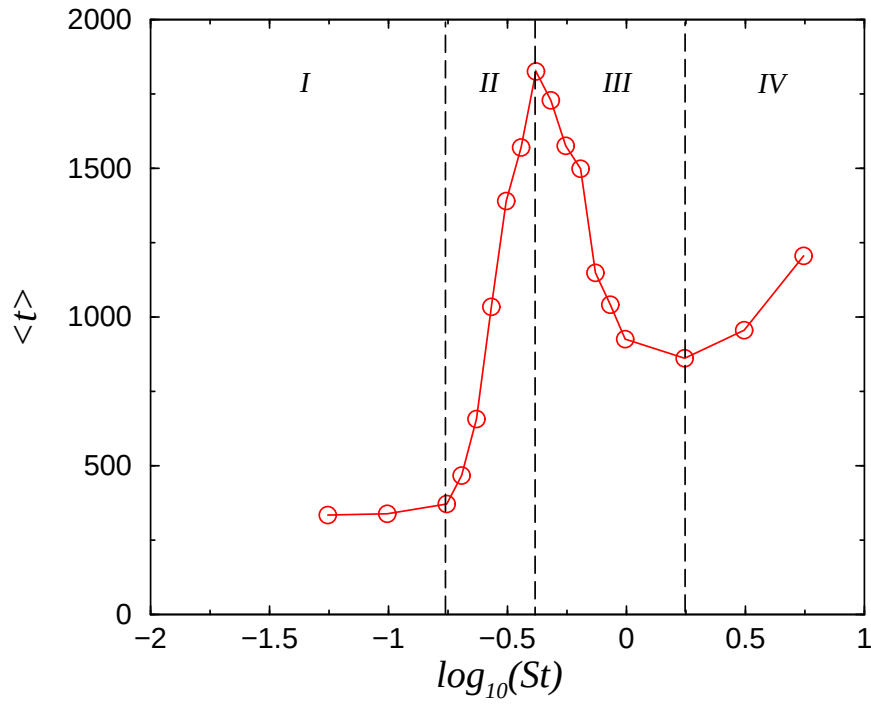


Figura 20: Comportamento do tempo médio de trânsito em função do número de Stokes, para L/δ

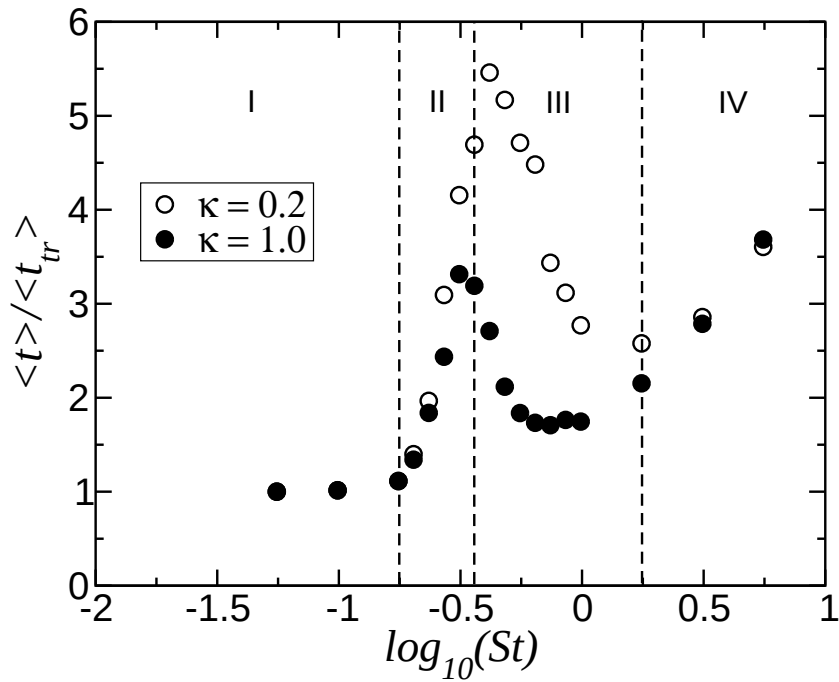


Figura 21: Efeito da variação do coeficiente de restituição, κ , sobre o comportamento do tempo médio de trânsito em função do número de Stokes, para $L/\delta = 512$.

Para finalizar este capítulo, enfatizamos a natureza complexa do processo de trânsito de partículas no interior de dutos rugosos, ilustrada nas Figs. 20 e 21. O transporte de

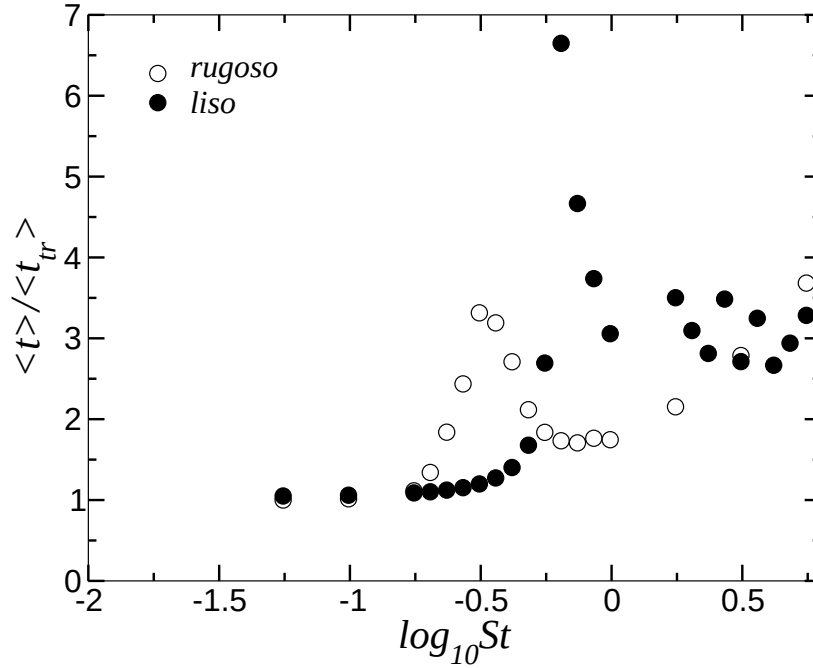


Figura 22: Comportamento do tempo médio de trânsito em função do número de Stokes para diferentes tipos de dutos, com comprimento $L/\delta = 512$ e coeficiente de restituição $\kappa = 0.2$.

massa em estruturas com geometria auto-afim é, portanto, caracterizado pela existência de quatro regimes bem distintos entre si, limitados pela competição localizada entre as interações partícula-estrutura (através de colisões) e partícula-fluido (através do escoamento). Observemos que a ausência de rugosidade (Fig. 22) implica no desaparecimento do quarto regime de transporte e, como consequência, na inexistência do tempo mínimo que caracteriza a transição entre o terceiro e o quarto regimes, como ilustrado nas Figs. 20 e 21. Esta peculiaridade do nosso estudo pode ser relevante do ponto de vista aplicado, no que concerne ao *design* de alguns equipamentos de uso tecnológico onde ocorre o transporte por arraste de partículas, como também na caracterização do citado fenômeno em rochas fraturadas reais. Conforme citado anteriormente, outra abordagem de considerável importância no âmbito da biomedicina e sistemas biológicos é a aplicação deste estudo na modelagem do transporte de partículas no interior das vias respiratórias, por exemplo, na avaliação quantitativa do processo de deposição e das concentrações locais de partículas de aerossol nas paredes dos brônquios e bronquíolos.

4 *Filtragem de Partículas em Estruturas Irregulares*

4.1 Introdução

Essencialmente, os aspectos relevantes para a compreensão do escoamento e o transporte de partículas em uma geometria irregular são o estrutural, associado à conformação topológica e morfológica do meio poroso, e o fenomenológico, que se refere aos mecanismos de transporte e captura de partículas. Por exemplo, o fenômeno da dispersão hidrodinâmica faz referência ao espalhamento, no tempo e no espaço, de uma partícula *sem massa* (traçadora) injetada em um fluido escoando através de um meio poroso sob a ação de convecção e difusão molecular [8]. Neste caso, o efeito da inércia no movimento das moléculas traçadoras é sempre considerado desprezível. Contudo, a inércia no transporte de partículas não-Brownianas através do escoamento em meios porosos certamente constitui um importante mecanismo que ainda não é quantitativamente bem compreendido [122]. Usualmente, o parâmetro adimensional conhecido como *número de Stokes* é usado para quantificar a dinâmica do transporte de partículas. O número de Stokes é expresso como $St \equiv V d_p^2 \rho_p / 18 \ell \mu$, onde d_p e ρ_p são o diâmetro e a densidade da partícula, respectivamente, ℓ é o comprimento característico dos poros, μ é a viscosidade e V é a velocidade do fluido.

A remoção de partículas submicrométricas tem-se constituído numa operação cada vez mais importante, tanto em aplicações industriais (nanotecnologia) quanto ocupacionais (inalação de material particulado). Além disso, não podemos deixar de citar a filtração

como um eficiente processo de remoção de agentes poluentes de fluidos como o ar e a água, que contém sais, sólidos em suspensão, microorganismos que podem ser nocivos para o ambiente. A água, particularmente, deve ser analisada periodicamente, visto que sua qualidade pode variar constantemente no tempo conforme diversos fatores externos. Os filtros removem partículas e melhoram cor, odor e sabor. Na filtração física, a simples retrolavagem deixa o filtro novo, pronto para mais uma etapa de filtração; já na filtração química, normalmente o meio filtrante deve ser regenerado ou trocado. A Organização Mundial de Saúde (OMS) define água potável como:

Tabela 3: Características da água potável, segundo a OMS.

apresenta aspecto límpido e transparente
não apresenta cheiro ou gosto objetável
não contém microorganismos que possam causar doenças ao ser humano
não contém substâncias em concentrações que possam causar prejuízo à saúde

A Fig.23 ilustra os principais processos de filtração ao qual a água é submetida antes de ser considerada potável e liberada para o consumo humano.

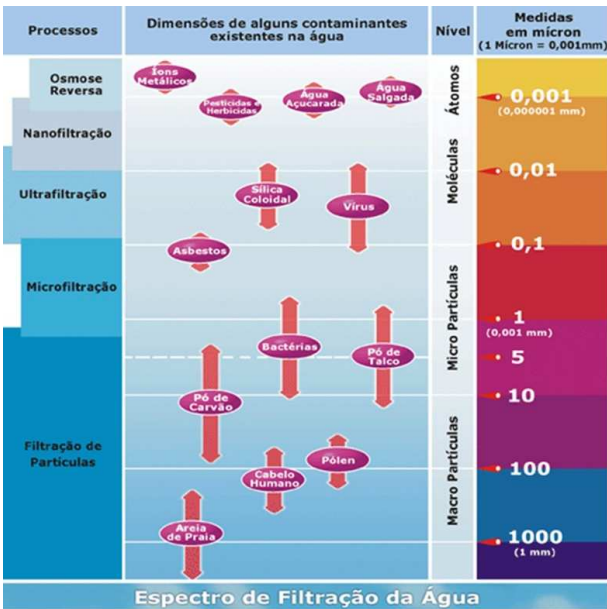


Figura 23: Espectro de filtração da água.

Dependendo do uso, a qualidade da água pode ser incrementada combinando outros tratamentos como a desinfecção por radiação ultravioleta, redução de dureza ou abrandamento.

mento com a retirada de cálcio e magnésio. Na filtração, é importante saber o tamanho das partículas a retirar, pois isso determina o tipo de filtro a ser usado. Um filtro de areia é adequado para reter partículas de 5 a $25\mu m$, sendo ineficiente para remover bactérias e vírus, cujo tamanho varia entre 0.1 e $10\mu m$. Tais agentes são removidos através de nanofiltração ou osmose reversa, por exemplo. A Tabela 4 abaixo ilustra o tamanho médio de diversos sólidos particulados.

Tabela 4: Tamanho médio de alguns sólidos particulados.

Partícula	Dimensão (μm)
Açúcar	0.001
Clorofila	0.005
Asbestos	0.05 – 1
Fuligem	0.01 – 0.3
Vírus	0.1
Bactérias	0.2 – 10
Pó Fino	0.4 – 100
Talco	0.5 – 55
Carvão pulverizado	4 – 500
Glóbulo vermelho	4 – 500
Algas unicelulares	10.0
Cabelo humano	30 – 175
Areia de praia	95

A filtração é o processo de separação de partículas sólidas em suspensão e consiste, essencialmente, em fazer passar um fluido (líquido ou gás) por um dispositivo (filtro) formado por uma ou mais camadas de materiais diversos, conhecidos conjuntamente como o "meio filtrante". O filtro retém parte ou todas as partículas sólidas em suspensão e, portanto, essa operação visa obter o fluido introduzido em estado de maior "pureza", ou seja, mais livre de eventuais agentes "poluentes" (físicos, químicos e biológicos). Além disso, como mencionado anteriormente, o processo de filtração também possui papel crucial para a indústria química e, por esta razão, este fenômeno tem sido extensivamente estudado [123]. No entanto, apesar de ter sido objeto de estudo da comunidade científica e das aplicações na indústria moderna do tratamento de água e refinamento de alumínio, por exemplo, os fenômenos complexos envolvidos no processo de filtração ainda não são com-

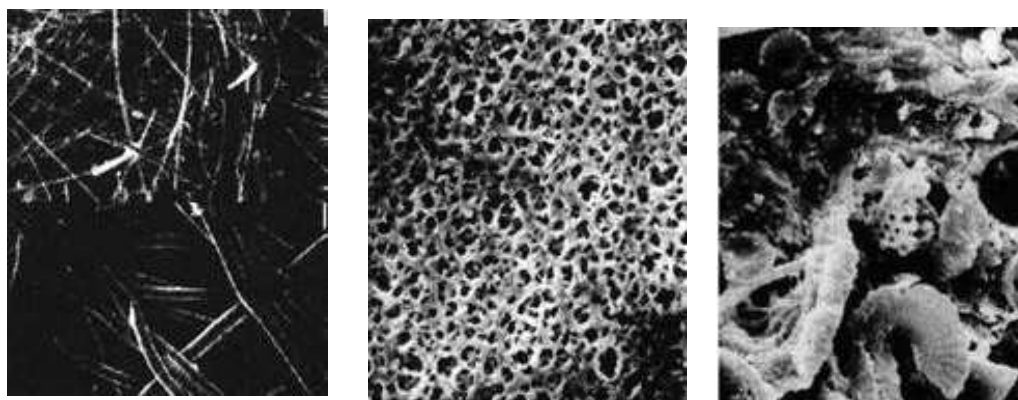


Figura 24: Ilustração de meios porosos, segundo o tipo de filtração. Da esquerda para a direita, temos filtração por superfície, filtração por membrana e filtração por profundidade.

pletamente compreendidos. Os diversos tipos de filtração podem ser classificados como filtração por superfície, filtração por membrana e filtração por profundidade, ilustrados na Fig.24.

Em linhas gerais, na filtração por superfície as partículas devem atravessar uma fina camada de material poroso. Este método tem baixa capacidade de retenção de sólidos e o filtro do café é um exemplo disto. A filtração por membrana é uma forma especial de filtração de superfície. Tem uma capacidade baixa de retenção de sólidos, mas é bastante precisa e, por isso, estes sistemas são preferidos para filtrações seguras e para uso farmacêutico. A filtração por profundidade é um sistema de filtração em que as partículas devem atravessar um meio espesso e acabam sendo retidas durante a tentativa de ultrapassar o meio de filtração. Este método eficaz tem grande capacidade de retenção de partículas de diferentes naturezas e tamanhos que se encontram em fluidos como a água, por exemplo.

O transporte e captura de partículas sólidas no meio filtrante ocorre devido à presença de forças hidrodinâmicas, gravitacionais, moleculares, Brownianas ou elétricas, agindo individual ou conjuntamente. Em particular, focaremos nosso estudo em filtração por profundidade. A remoção de partículas através da filtração por profundidade envolve mecanismos complexos. A retenção de partículas é considerada como o resultado de dois mecanismos distintos, porém, complementares: transporte e aderência. Primeiramente, as partículas em suspensão são transportadas para as regiões próximas aos grãos do filtro e, posteriormente, devem permanecer aderidas a estes de modo a resistir às forças de cisalhamento resultantes das características hidrodinâmicas do escoamento ao longo do meio filtrante. Os mecanismos de transporte são influenciados, principalmente, pelas características físicas e químicas do fluido, do meio filtrante e das características das partículas

sólidas. Dentre os mecanismos de transporte considerados para explicar a aproximação das partículas aos grãos do meio filtrante (coletores), tem-se: impactação inercial, interceptação, sedimentação, difusão, ação hidrodinâmica e efeitos inerciais. É provável que os mecanismos ajam simultaneamente durante o processo de filtração, embora o grau de importância de cada um dependa das características da suspensão e do meio filtrante. Os mecanismos de sedimentação, interceptação e difusão têm sido considerados os mais importantes e responsáveis pela eficiência do processo de filtração. A difusão é o transporte resultante do movimento Browniano das partículas pelo intenso bombardeio das moléculas do fluido. O movimento das partículas por este mecanismo tem natureza estocástica e é altamente relevante para partículas menores que $1\mu m$. O mecanismo de sedimentação ocorre devido à força da gravidade e a respectiva velocidade de sedimentação da partícula, que faz com que a partícula cruze as linhas de corrente e alcance o coletor. Neste mecanismo, a densidade da partícula e a temperatura do sistema são parâmetros importantes. Este mecanismo pode ser entendido pela visualização dos vazios como pequenas células de sedimentação ou o caminho dos poros como pequenos sedimentadores. A combinação destes dois mecanismos resulta em uma eficiência líquida de transporte mínima para partículas com tamanho por volta de $1\mu m$.

Quando próximas à superfície dos grãos do meio filtrante, as partículas são capturadas e aderidas a estes por meio dos mecanismos de aderência. A remoção eficiente destas partículas depende do mecanismo de fixação das partículas, que depende das forças que atuam entre as partículas e os grãos do filtro quando a distância de separação entre eles se torna da ordem de nanômetros. Os fatores, que eventualmente afetam estas forças, afetam o desempenho da filtração por profundidade. A importância relativa destas forças é determinada pelo tamanho da partícula. Quando o diâmetro das partículas em suspensão é maior do que $10\mu m$, as forças dominantes são as forças gravitacionais e hidrodinâmicas, i.e., a força de arraste, a força de lubrificação, a força gravitacional e as forças inerciais.

Quando as partículas são menores, as forças atuantes são as eletroquímicas, tais como Van der Waals ou difusão Browniana. Um dos mecanismos mais comuns para a captura de partículas com diâmetro superior a $1\mu m$ e na ausência de forças externas é a impactação inercial. As partículas maiores têm massas mais elevadas e, portanto, são mais difíceis de seguir as linhas de corrente do escoamento. Por causa desse efeito da inércia, as partículas continuam a se movimentar em linha reta embora a direção do fluxo varie quando o fluido passa ao lado de um poro. Uma vez que as partículas entram em contato com os poros, elas aderem a ele e são, assim, "filtradas". Para que ocorra a deposição por interceptação, a partícula deve estar distante do poro o equivalente a um raio de si mesma. Desta maneira,

a partícula entra em contato com o poro e adere a ele. O mecanismo de intercepção pode ser contrastado com o mecanismo inercial na medida em que uma partícula que é interceptada é menor e sua inércia não é forte o suficiente para fazê-la continuar em linha reta. Logo, a partícula segue o fluxo de fluido até entrar em contato com um poro do meio. A deposição por sedimentação ocorre quando a densidade da partícula é diferente daquela do fluido. Forças eletrostáticas e difusão Browniana também podem ser fatores importantes para partículas cujo diâmetro é reduzido. No caso estudado aqui, as partículas em suspensão são muito menores do que os poros do filtro o qual as partículas penetram até serem capturadas, a uma certa profundidade. Para partículas não-Brownianas, ao menos quatro mecanismos de captura podem ser enumerados, nomeadamente, o geométrico, o químico, o gravitacional e o processo hidrodinâmico [123].

No passado, experimentos laboratoriais cuidadosamente controlados foram conduzidos por Ghidaglia *et al.* [124], evidenciando uma transição abrupta na captura de partículas, em função da razão adimensional entre os diâmetros da partícula e do poro, caracterizada pela divergência da profundidade de penetração. Usando uma rede capilar para modelar a morfologia do espaço de poros, eles mostraram que esta transição não pertence à mesma classe de universalidade da percolação, contrário ao que as considerações geométricas simples sugeririam. Subseqüentemente, Lee e Koplik [125] encontraram uma transição de um estado aberto a um estado obstruído do meio poroso que é uma função do tamanho médio da partícula. Contudo, pouco esforço vem sendo dedicado a quantificar o efeito da impactação inercial na eficiência do filtro de profundidade. Por exemplo, Ghidaglia *et al.* [124] incluíram este efeito apenas heurísticamente no modelo através de um parâmetro *ad hoc* de captura de partículas. Neste trabalho, investigamos semi-analiticamente e numericamente a captura inercial de partículas não-Brownianas em um meio poroso. Para este problema, que é intimamente relacionado com a filtração de profundidade, revelamos novas relações tanto para estruturas porosas ordenadas como aleatórias.

4.2 Captura inercial em um meio poroso periódico

Inicialmente, temos um meio poroso infinito e ordenado que pode ser completamente representado em termos de uma única célula quadrada de tamanho unitário e porosidade dada por $\varepsilon \equiv (1 - \pi D^2/4)$, onde D é o diâmetro do obstáculo, como ilustra a Fig. 25. Admitindo que temos um escoamento no regime de Stokes, a função para o fluxo ψ é

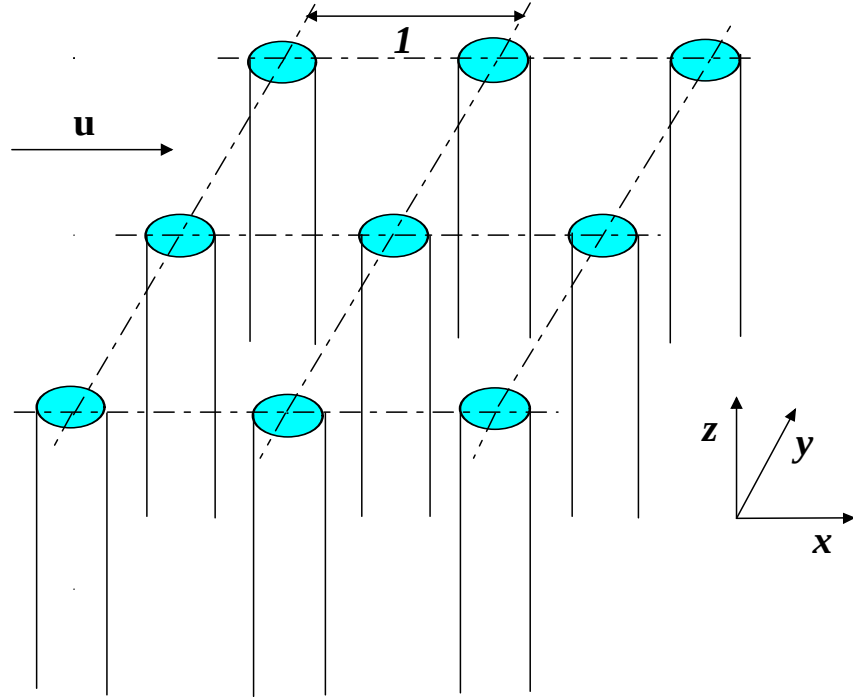


Figura 25: Representação esquemática de um filtro ordenado composto de um arranjo periódico de cilindros.

dada pela equação biarmônica linear, $\nabla^4\psi = 0$. Neste caso, usamos a solução proposta por Marshall *et al.* [126] para obter o campo de velocidades do escoamento, $\mathbf{u}$, e estudar numericamente o transporte de partículas. Por questões de simplicidade, admitimos que (i) as partículas são pontuais; (ii) o fluxo de entrada da suspensão de partículas é tão pequeno que o fluido não é afetado pelas variações na fração do volume de partículas, e (iii) as interações partícula-partícula não desprezíveis. Finalmente, se considerarmos que a força de arraste e a força gravitacional são as únicas forças relevantes agindo sobre o sistema, as trajetórias destas partículas podem ser calculadas através da integração da seguinte equação do movimento:

$$\frac{d\mathbf{u}_p^*}{dt^*} = \frac{(\mathbf{u}^* - \mathbf{u}_p^*)}{St} + F_g \frac{\mathbf{g}}{|\mathbf{g}|}, \quad (4.1)$$

onde $F_g \equiv (\rho_p - \rho)\ell|\mathbf{g}|/(V^2\rho_p)$ é um parâmetro adimensional, $\mathbf{g}$ é a gravidade, t^* é um tempo adimensional, e $\mathbf{u}_p^*$ e $\mathbf{u}^*$ são as velocidades adimensionais da partícula e do fluido, respectivamente.

Na Fig. 26, mostramos as trajetórias calculadas para partículas lançadas no fluido para $St = 0.25$. Uma vez que a partícula toca o contorno do obstáculo, ela é capturada.

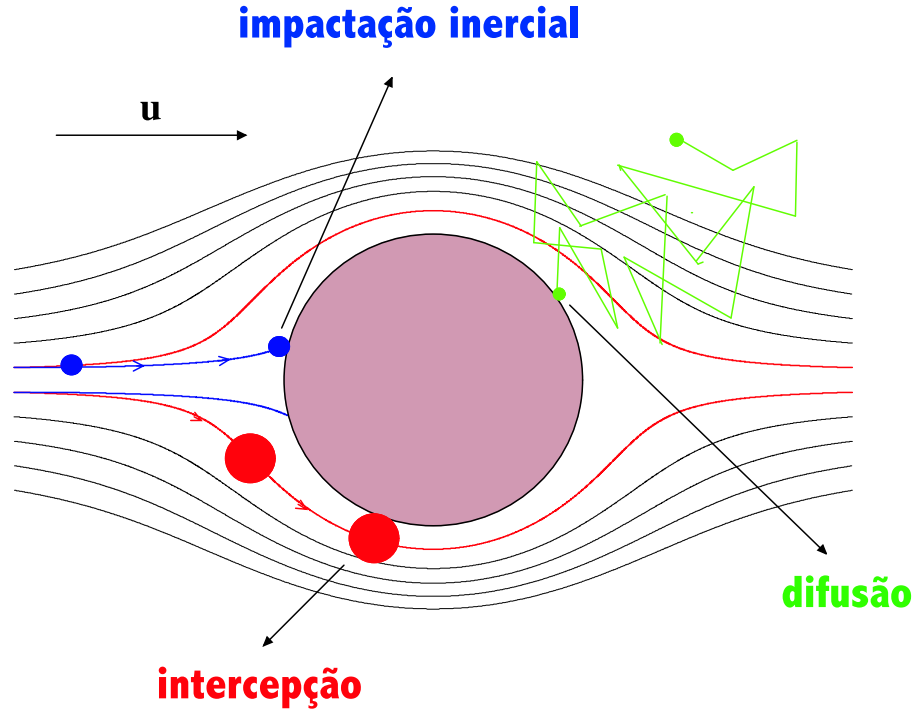


Figura 26: Trajetórias de partículas lançadas de diferentes posições a partir da célula que representa o meio poroso periódico. Além disso, são ilustrados os três possíveis mecanismos de captura, dentre os quais somente a impactação inercial é considerada em nosso estudo. As partículas são arrastadas segundo a Eq. (4.1) e o campo de velocidade $\mathbf{u}$ do escoamento é calculado a partir da solução analítica de Marshall *et al.* [126].

Nosso objetivo aqui é encontrar a posição y_0 de lançamento na entrada da célula unitária ($x_0 = 0$) e acima do eixo horizontal, abaixo do qual a partícula é sempre capturada e acima do qual a partícula sempre escapa do sistema. A eficiência de captura das partículas pode ser diretamente definida como $\delta \equiv 2y_0$. No caso limite onde $St \rightarrow \infty$, como as partículas se movem balisticamente em direção ao obstáculo, a eficiência de captura atinge seu valor máximo, $\delta = D$. Em contrapartida, para $St \rightarrow 0$, a eficiência assume seu menor valor, $\delta = 0$. Nesta última situação, as partículas podem ser consideradas como traçadoras, seguindo exatamente as linhas de corrente do escoamento, evitando serem capturadas pela matriz sólida do meio poroso. Isto pode ser visualizado na Fig. 27

Na Fig. 28, mostramos o gráfico log-log da variação de δ/D em função do número de Stokes reescalado na presença da gravidade para três diferentes valores da porosidade. Em todos os casos, a variável δ cresce linearmente com St até alcançar, subsequente, um *crossover* em St_x , e finalmente aproximar-se do seu valor limite ($\delta = D$). Os resultados das nossas simulações mostram que $St_x \sim (\varepsilon - \varepsilon_c)$, onde ε_c corresponde à mínima porosidade abaixo da qual a distância entre a entrada e o obstáculo é pequena demais

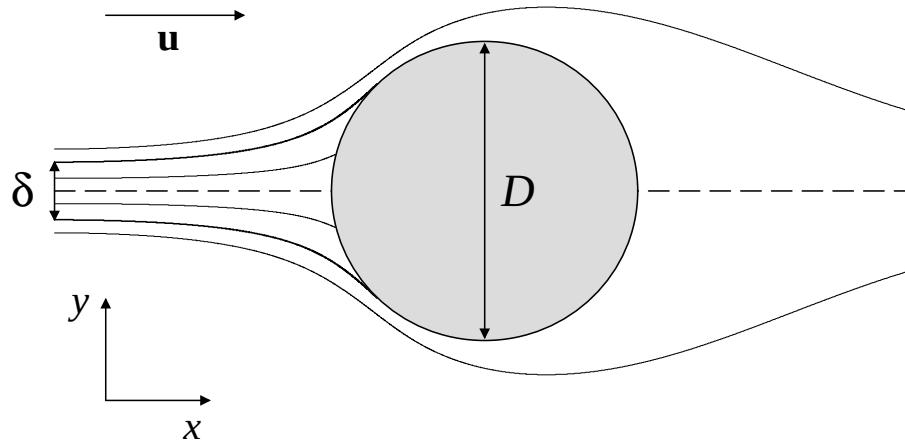


Figura 27: Trajetórias de partículas com diferentes números de Stokes, nas proximidades de um poro.

para uma partícula massiva desviar do obstáculo. O colapso de todos os dados confirma a validade desta aproximação de reescalonamento. O *inset* no topo da Fig. 28 mostra que o comportamento do sistema em termos da captura de partículas torna-se significativamente diferente na ausência de gravidade. A eficiência δ permanece igual a zero até um certo valor crítico do número de Stokes, St_c , que corresponde ao valor máximo de St abaixo do qual as partículas não podem ser capturadas, não obstante a posição y_0 da qual elas foram lançadas. Algumas evidências para tal ponto crítico finito têm sido apresentadas em estudos analíticos e numéricos precedentes [127]. Imediatamente acima de St_c , a variação de δ pode ser descrita em termos de uma lei de potência, $\delta \sim (St - St_c)^\alpha$, com um expoente $\alpha \approx 0.5$. No *inset* no topo, mostramos a variação de δ/D com o número de Stokes para diferentes valores da gravidade. Para qualquer valor finito de g , encontramos uma eficiência finita para valores positivos do número de Stokes. Somente para o caso onde a gravidade assume valor nulo, a eficiência de captura desaparece para um valor finito do número de Stokes St_c .

4.3 Filtragem em um meio desordenado

Um modelo mais realístico para a estrutura porosa deve incluir desordem [?]. Aqui, adotamos uma geometria aleatória dos espaços porosos que é freqüentemente usada para descrever meios porosos [129]. O modelo consiste de obstáculos circulares não-sobrepostos de diâmetro D , separados por uma distância maior que $D/10$. Os obstáculos são alocados aleatoriamente em um canal bidimensional de largura h , até que uma fração de vazios

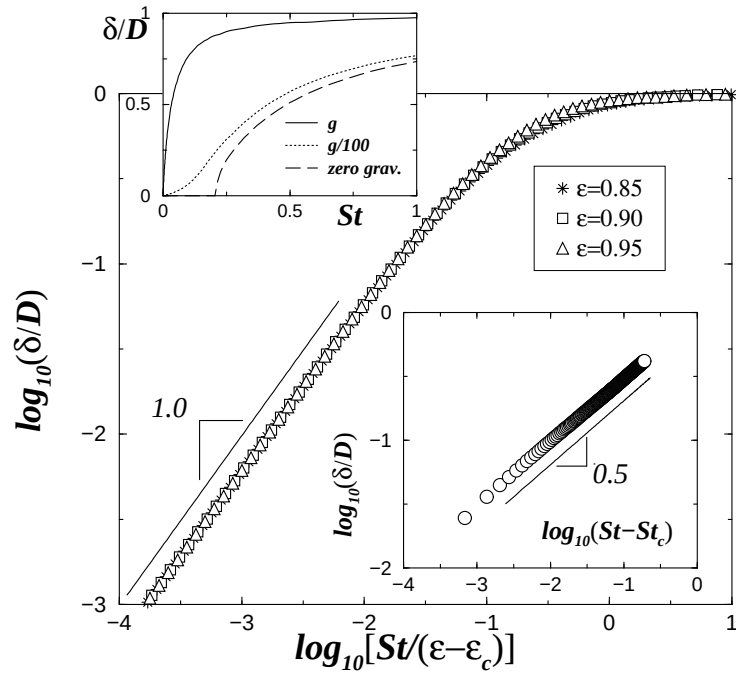


Figura 28: Dependência da eficiência de captura δ em função do número de Stokes reescalado $St/(\epsilon - \epsilon_c)$ para meios porosos periódicos na presença da gravidade. Aqui, usamos $F_g = 16$, um valor compatível com o arranjo experimental descrito em Ref. [124]. O *inset* inferior mostra que o comportamento do sistema sem gravidade pode ser caracterizado como uma transição de segunda ordem, $\delta \sim (St - St_c)^\alpha$, com $\alpha \approx 0.5$, e 0.2096 ± 0.0001 para $\epsilon = 0.9$. O *inset* superior mostra a eficiência de captura normalizada δ em função do número de Stokes St para diferentes valores da gravidade.

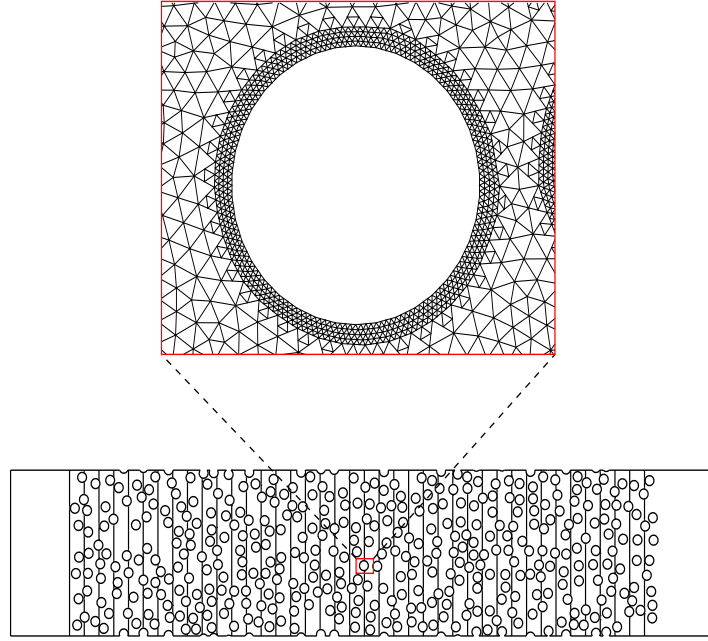


Figura 29: Meio poroso desordenado, mostrando a malha computacional utilizada na discretização das equações envolvidas no fenômeno do escoamento de um fluido.

previamente determinada ε seja alcançada. Para a compatibilidade entre as descrições periódica e desordenada, definimos o tamanho característico do poro como $\ell \equiv D/20$ (i.e., metade da distância mínima entre quaisquer dois obstáculos do sistema desordenado). Para reduzir os efeitos de tamanho finito, condições de contorno periódicas são aplicadas na direção y . Finalmente, os efeitos de saída do campo de escoamento são reduzidos se anexarmos uma região de lançamento (na entrada) e um recuperador (na saída) a cada uma das faces opostas do canal.

A descrição matemática para a mecânica dos fluidos no espaço intersticial dos poros é baseada nas equações da continuidade e de Navier-Stokes [130]. Em nossas simulações, consideramos a condição de não-deslizamento ao longo de toda a interface sólido-fluido, e um perfil uniforme de velocidades, $u_x(0, y) = V$ e $u_y(0, y) = 0$ é imposto à entrada do canal. O número de Reynolds é definido como $Re \equiv \rho V h / \mu$. Por questões de simplificação, restringimos nosso estudo ao caso onde o número de Reynolds é suficientemente baixo ($Re < 1$) afim de assegurar um regime laminar viscoso de escoamento. A solução numérica para os campos de velocidade e pressão no espaço dos poros é obtida através da discretização, utilizando a técnica de diferenças finitas em um volume de controle [131]. A Fig. 29 ilustra a malha computacional utilizada neste processo para a resolução das equações que governam este fenômeno.

Uma vez que os campos de velocidade e pressão são obtidos para o escoamento no

espaço poroso, procedemos com o cálculo do transporte de partículas. Quando a velocidade relativa é baixa $|\mathbf{u} - \mathbf{u}_p| \ll 1$, a relação entre as densidades da partícula e do fluido é alta, $\rho_p/\rho \gg 1$, e $d_p > 1\mu m$, a maioria das forças que agem sobre as partículas podem ser desprezadas, exceto a força de arraste e a força gravitacional [27]. Analogamente ao que foi feito anteriormente, as trajetórias das partículas são calculadas através da integração numérica das equações de movimento, mas agora, considerando um coeficiente de arraste baseado na relação empírica proposta por Morsi e Alexander,

$$C_D = a_1 + \frac{a_2}{Re_P} + \frac{a_3}{Re_P^2}, \quad (4.2)$$

onde os parâmetros a_i são constantes obtidas experimentalmente para partículas esféricas lisas sobre diversas escalas do número de Reynolds [29].

Nas Fig. 30, mostramos trajetórias típicas de partículas que foram lançadas na entrada do sistema poroso com $St = 3.26 \times 10^{-4}$, 3.26×10^{-3} e 3.26×10^{-2} . Par um valor fixo do número de Stokes, consideramos até 1000 partículas para determinar (i) se as partículas são ou não capturadas e (ii) a posição precisa na superfície da matriz porosa onde a captura de tais partículas acontece. A partir destas posições, obtemos os perfis para a fração de partículas não-capturadas ϕ contra a distância longitudinal x ao longo do canal. No caso limite de sistemas muito diluídos ($\varepsilon \approx 1$) com partículas sendo transportadas no regime balístico ($St \rightarrow \infty$), é fácil mostrar que $\phi(x) = \exp(-x/\lambda)$, com o comprimento de penetração dado por $\lambda = \pi D/4(1 - \varepsilon)$. Para baixos e moderados valores do número de Stokes, o comportamento de $\phi(x)$ ainda é exponencial, mas λ agora sendo uma função do número de Stokes. Assim, postulamos que o resultado precedente pode ser generalizado para qualquer combinação de ε e St como, $\lambda = \pi D^2/4(1 - \varepsilon)\delta$, onde o comprimento δ é a eficiência de captura analogamente definida como para o meio poroso periódico.

Como ilustrado na Fig. 31, o comprimento de penetração segue uma lei de potência $\lambda \sim (St)^{-\alpha}$, com expoente de escalonamento $\alpha \approx 1$ que é, dentro das barras de erro numérico, o mesmo para os três valores de porosidade investigados. As simulações efetuadas para uma realização diferente do meio poroso desordenado resultaram no mesmo expoente. Este valor é também consistente com o expoente encontrado para o caso periódico com gravidade. Como também mostrado na Fig. 31, o comprimento de penetração das partículas no espaço aleatório dos poros pode ser, de maneira geral, expresso como $\lambda/D = \beta/St(1 - \varepsilon)$, onde ε é a porosidade, D é o tamanho do grão, e o pré-fator β é uma constante característica para o processo de captura. Esta relação pode ser uma nova maneira de reescalonar as variáveis relevantes no sistema de filtragem que pode ser útil

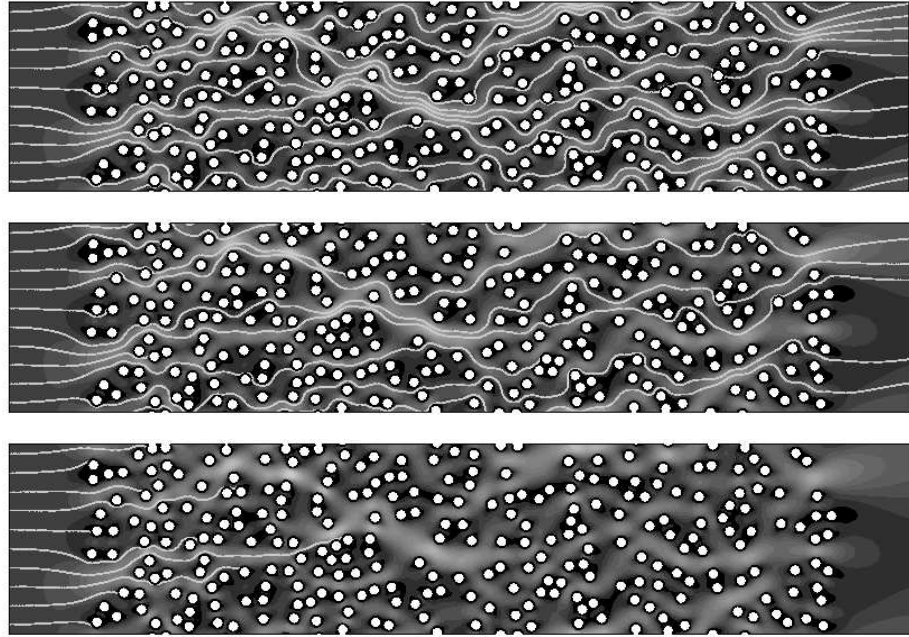


Figura 30: (a) Contorno dos campos de velocidade para uma realização de um espaço poroso ($\varepsilon = 0.7$) sujeito à condição de escoamento a baixos Reynolds. O sentido de escoamento do fluido é da esquerda para a direita. As cores variando do cinza escuro ao claro correspondem a baixas e altas magnitudes de velocidade, respectivamente. São mostradas também as trajetórias típicas de partículas no escoamento através do meio poroso, com gravidade no sentido positivo da direção x . De cima para baixo, o número de Stokes assume os valores $St = 3.26 \times 10^{-4}$, 3.26×10^{-3} e 3.26×10^{-2} .

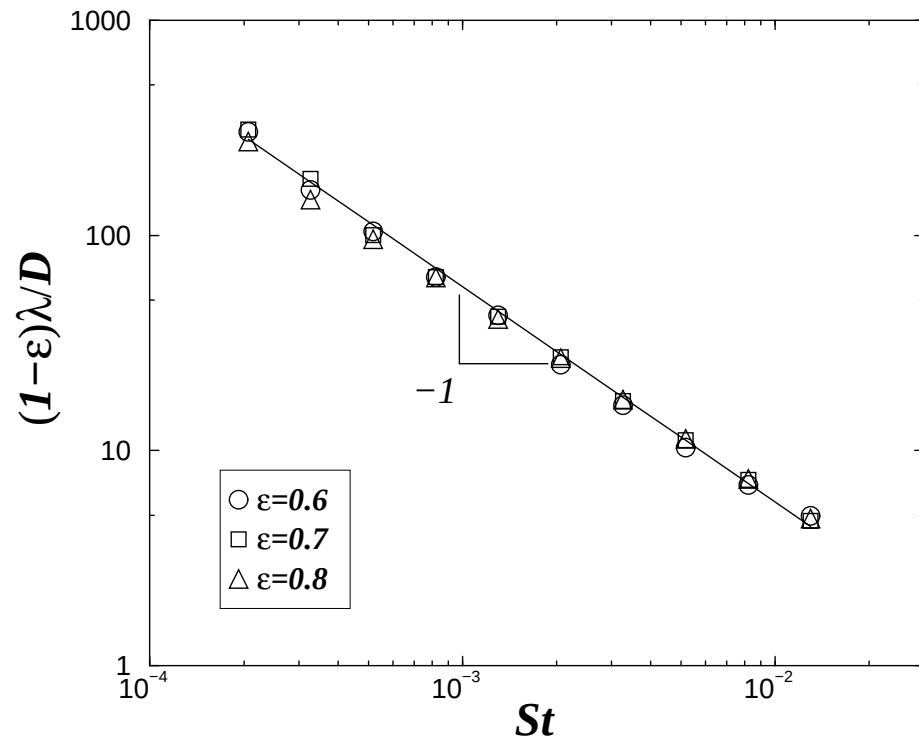


Figura 31: A curva em log-log mostra a dependência do comprimento de penetração reescalado $(1 - \varepsilon)\lambda/D$ sobre o número de Stokes St para três valores diferentes da porosidade. A linha sólida corresponde ao melhor ajuste aos dados da função de escalonamento $(1 - \varepsilon)\lambda/D = \beta St^{-\alpha}$ com o prefator ou $\beta \approx 0.058$ e o expoente $\alpha = 1.00 \pm 0.02$.

em aplicações práticas.

5 O aparelho respiratório

Base do metabolismo para a grande maioria dos seres vivos conhecidos, o oxigênio deve ser distribuído em todo o organismo, onde será “queimado” pelas mitocôndrias e convertido em energia. Esta combustão libera dióxido de carbono (CO_2), que deve ser evacuado. Assim, é necessária a existência de mecanismos de distribuição complexos e bastante eficazes. Restringindo a análise à classe dos mamíferos, o oxigênio é levado às células e o dióxido de carbono é eliminado através de um conjunto de estruturas complementares e interligadas: a rede sanguínea e a árvore respiratória. Estas estruturas estão parcialmente representadas na Fig. 32.

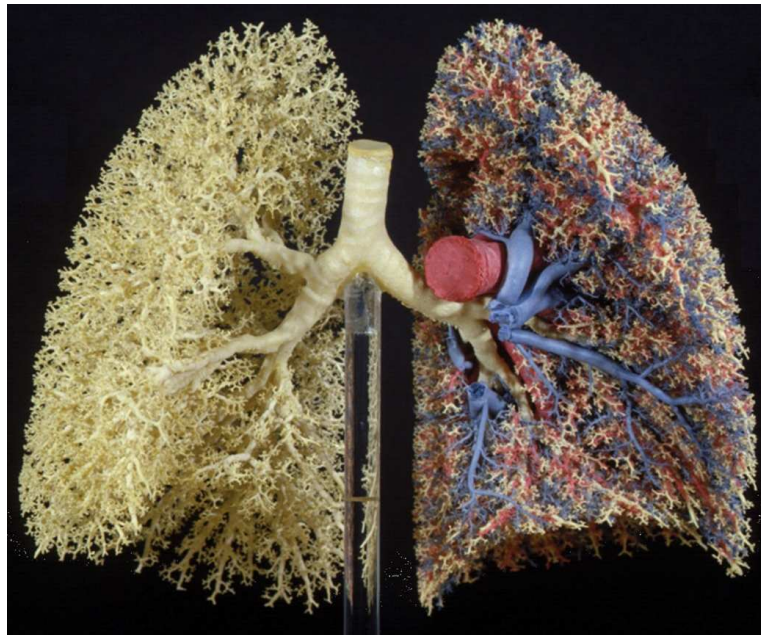


Figura 32: Modelo de pulmão humano, segundo E. R. Weibel [1]. Os brônquios estão representados em amarelo; as artérias, em vermelho e as veias estão em azul.

A rede sangüínea religa cada célula aos pulmões, que são, por sua vez, reserva de

oxigênio e depurificador de dióxido de carbono. O oxigênio circula na rede sangüínea acoplado às hemácias (glóbulos vermelhos) e é liberado pouco a pouco de acordo com a necessidade das células. Ao contrário, o dióxido de carbono é dissolvido no líquido sanguíneo que engloba as hemácias. Ao entrar no pulmão, o sangue é pobre em oxigênio e rico em dióxido de carbono, apresentando, portanto, cor azul e denominado sangue venoso. Ao sair do pulmão, o sangue é saturado em oxigênio e pobre em dióxido de carbono, sua cor é vermelha e é conhecido como sangue arterial. A circulação do sangue, ritmada pelo coração, passa, portanto, por um evento cíclico importante: a travessia do pulmão.

O aparelho respiratório tem por objetivo fornecer oxigênio (O_2) ao sangue e retirar dele o dióxido de carbono (CO_2) produzido pelo organismo. Para o desempenho destas funções, a respiração pode ser dividida em quatro grandes eventos funcionais: (1) a *ventilação pulmonar*, que se refere à troca de ar entre a atmosfera e os alvéolos pulmonares; (2) a *difusão do oxigênio e do dióxido de carbono entre os alvéolos e o sangue*; (3) o *transporte de oxigênio e dióxido de carbono no sangue e líquidos corporais*, para as células (oxigênio) e a partir delas (dióxido de carbono); e (4) a *regulação da ventilação* e de outros aspectos da respiração. A resposta da natureza para atender a estes requisitos é um sistema de morfologia bastante complexa que, através de um entrelaçamento das vias respiratórias e vasos sanguíneos, permite distribuir 5L de ar em um espaço limitado por uma superfície de troca de mais de $100m^2$.

Este capítulo é dedicado a uma breve apresentação da morfologia e fisiologia pulmonar, com o intuito de introduzir as noções básicas da fisiologia respiratória [30, 31] e algumas das principais questões que ainda permanecem em aberto neste campo de estudo. A primeira seção deste capítulo abrange as principais funções do sistema respiratório. Em seguida, é apresentada uma descrição detalhada a respeito da morfologia da árvore respiratória. Na terceira seção, abordamos noções fundamentais de fisiologia respiratória no que concerne aos aspectos da ventilação pulmonar e das trocas gasosas. O transporte de oxigênio através da árvore respiratória ocorre por meio de convecção até o nível dos alvéolos. Neste ponto, observamos o transporte difusivo de oxigênio. É importante determinar a localização desta zona de transição entre os transportes convectivo e difusivo e, para tanto, é introduzido o conceito de *número de Péclét alveolar* [32, 33].

As trocas gasosas com o sangue são realizadas através da membrana alveolar, uma superfície única composta por muitos dobramentos e extremamente delgada (a espessura desta membrana é da ordem de alguns microns). No sangue, o oxigênio é armazenado nos glóbulos vermelhos (ou eritrócitos), quimicamente ligado à hemoglobina. Em pequenas

quantidades, é possível encontrar moléculas de oxigênio diluídas no plasma sanguíneo. A Fig. 33 mostra glóbulos vermelhos no interior de estruturas respiratórias.

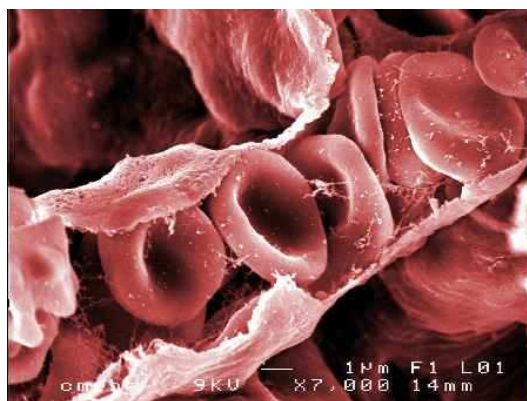


Figura 33: Hemácias e alvéolos pulmonares [34].

A composição do gás alveolar é o resultado do conjunto de fenômenos que incluem convecção, difusão e troca. Conseqüentemente, torna-se bastante difícil prever a composição deste gás sem que sejam realizadas medidas experimentais diretas. Na quarta seção deste capítulo, o problema da mistura de gases no pulmão será abordado. Finalmente, na última seção deste capítulo definimos uma grandeza fisiológica que representa a condutância global do pulmão, a capacidade difusiva pulmonar, quantificada pela razão entre o fluxo de oxigênio e a diferença de pressões parciais médias do gás alveolar e do sangue. Ewald Weibel propôs um modelo que nos permite calcular a capacidade difusiva pulmonar partindo de grandezas morfométricas, tais como a área da superfície alveolar e a espessura da membrana [35, 36]. Este modelo é apresentado na última seção deste capítulo e será necessário para a definição da permeabilidade da membrana alveolar.

5.1 Funções do sistema respiratório

As funções do sistema respiratório incluem trocas gasosas, balanço ácido-base, fonação e defesa pulmonar. Comentaremos aqui apenas as funções de troca gasosa e defesa pulmonar.

As trocas gasosas entre dióxido de carbono e oxigênio acontecem sobre uma extensa superfície de contato entre o ar e o sangue, estabelecida pelo parênquima pulmonar, através do complexo de alvéolos e capilares. Estas trocas gasosas dependem crucialmente da ventilação desta superfície pelo ar rico em oxigênio, bem como de um reabastecimento adequado do ar alveolar com oxigênio enquanto é absorvido pelo sangue capilar que flui

abundantemente sobre a superfície, carregando o oxigênio aos tecidos. A taxa com que o oxigênio é absorvido depende do fluxo capilar no sangue, da permeabilidade da interface ar-sangue e da diferença parcial da pressão do oxigênio entre o sangue capilar e o ar alveolar na camada próxima à superfície. As condições para remoção de CO_2 são basicamente as mesmas, apenas em ordem invertida.

A ventilação dos alvéolos ocorre em duas etapas:

- inicialmente, ar contendo oxigênio é inspirado para o interior dos pulmões através das vias condutoras. As forças responsáveis pelo escoamento do ar são geradas pelos músculos respiratórios, cuja atuação é comandada pelo sistema nervoso central. Simultaneamente, ocorre o retorno do sangue venoso proveniente dos tecidos. Este sangue, com alta concentração de dióxido de carbono e pouca quantidade de oxigênio, é bombeado para o interior dos pulmões pelo ventrículo direito do coração. Nos capilares pulmonares, dióxido de carbono é trocado por oxigênio. O sangue que deixa os pulmões, agora contendo alta concentração de oxigênio e relativamente pouca quantidade de dióxido de carbono, é distribuído aos tecidos do corpo pelo lado esquerdo do coração. Durante a expiração, gás com alta concentração de dióxido de carbono é expelido do corpo.
- A segunda etapa da ventilação dos alvéolos acontece quando o ar atinge as vias aéreas periféricas e a convecção dá lugar à difusão do O_2 . Para que isto aconteça de forma adequada, um sistema ramificado de vias aéreas faz-se necessário, de modo a conectar todos os 300 milhões de alvéolos que constituem a região de trocas gasosas. Além disso, as unidades de troca gasosa devem ser ventiladas equitativamente. Isto requer uma árvore respiratória projetada de maneira a otimizar os processos físicos que governam a ventilação. Com este intuito, diferentes estruturas foram criadas, com morfologia para favorecer a convecção, na porção central da árvore respiratória; e de modo a favorecer a difusão nas vias aéreas periféricas. Este sistema é particularmente complexo na porção final da árvore respiratória onde a difusão nas vias aéreas periféricas combina-se com a permeabilidade difusiva do O_2 através da barreira entre o tecido e o sangue, que constitui o processo efetivo das trocas gasosas.

A Fig. 34 mostra um diagrama esquemático das trocas gasosas no sistema respiratório.

Diariamente, cerca de $10.000L$ de ar são inspirados para o interior das vias aéreas e pulmões, entrando em contato com aproximadamente 50 a $100m^2$ de um dos mais

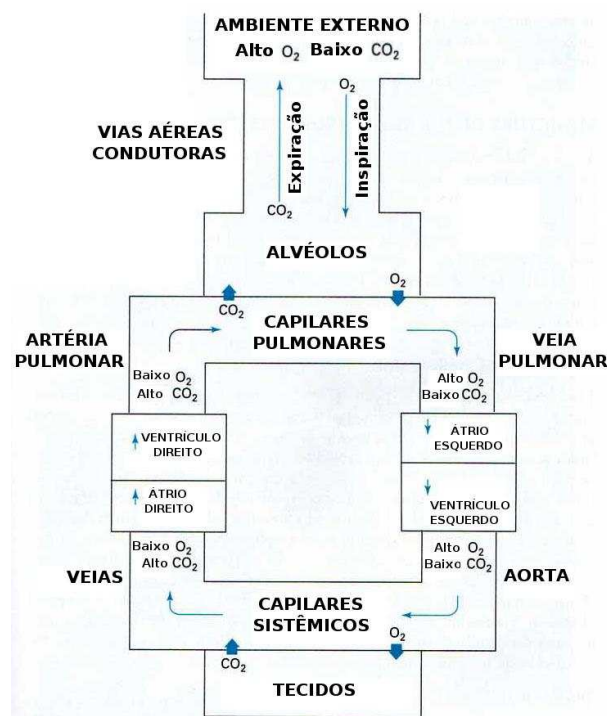


Figura 34: Representação esquemática das trocas gasosas entre os tecidos do corpo e o ambiente [30].

delicados tecidos do corpo. Este ar inspirado contém, em geral, partículas de poeira, pólen, fungos, cinzas, diversos produtos provenientes da combustão e microorganismos como bactérias e gases tóxicos. Em outras palavras, diariamente, uma superfície tão grande quanto uma área de tênis é exposta a um volume de ar e contaminantes que poderiam preencher uma pequena piscina. Portanto, a existência de mecanismos de defesa contra tais agentes nocivos é extremamente importante. O *condicionamento do ar* é um exemplo de mecanismo de defesa do sistema respiratório contra a ação de contaminantes e este processo será detalhado a seguir. O trajeto do ar inspirado compreende a passagem pelas narinas, chegando às cavidades nasais, onde, primeiramente, haverá uma adequação do ar, sendo aquecido à temperatura do corpo pelas extensas superfícies das conchas e do septo nasal, com área total de cerca de 160cm^2 . Após o aquecimento, o ar é quase completamente umidificado, antes mesmo de deixar o nariz. Por fim, o ar é parcialmente filtrado. Normalmente, a temperatura do ar inspirado eleva-se em 0.6°C em relação à temperatura corporal e em 2 a 3% de saturação total com vapor de água antes de chegar à traquéia [31].

Para que o condicionamento do ar seja realizado adequadamente, o trato respiratório possui um elaborado sistema de filtragem do ar inspirado, bem como de remoção de partículas das vias aéreas. Este sistema de filtragem possui uma maior eficiência quando

a respiração acontece através do nariz. Partículas inaladas podem ser depositadas no trato respiratório como resultado de sedimentação, movimento Browniano, bem como por meio de outros mecanismos de transporte. Para a filtragem do ar, as narinas e o início da cavidade nasal apresentam pêlos, como ilustra a Fig. 35. Esta região é chamada de vestíbulo nasal. Estes pêlos formam uma rede que agrega as partículas maiores de poeira, cujo diâmetro varia entre 10 e $15\mu m$. No assoalho desse vestíbulo nasal, encontramos um orifício, chamado óstio nasal do duto naso-lacrimal. As lágrimas produzidas drenam o vestíbulo nasal e com isso, todo ar inspirado promove a pulverização desta gota de lágrima. Assim, inicia-se a umidificação do ar. Esta umidade serve de cola para pequenas partículas, bactérias, vírus que cheguem a ser inalados. A remoção destas partículas acontece através de *precipitação turbulenta*. Isto é, o ar que passa pelas vias nasais choca-se contra diversos obstáculos: as conchas (também denominadas “turbinados”, pelo fato de produzirem turbulência do ar), o septo nasal e a parede da faringe. Ao chocar-se com um destes obstáculos, o ar deve mudar de direção. Desta maneira, as partículas suspensas no ar, que possuem muito mais massa e inércia do que o ar, não podem mudar a direção de seu percurso tão rapidamente quanto o ar. Por isso, seguem em frente, colidindo com as superfícies dos obstáculos, e são aprisionadas na camada de muco que reveste as vias aéreas. Como toda a superfície das vias aéreas (desde o nariz até os bronquíolos terminais) é revestida por epitélio ciliado, o muco e as partículas aprisionadas no mesmo são transportados pelos cílios em direção à faringe para serem deglutidos ou expelidos, através da tosse. O mecanismo de turbulência no nariz para a remoção de partículas existentes no ar é tão eficiente que praticamente nenhuma partícula com diâmetro superior a $6\mu m$ chega aos pulmões através do nariz. Este tamanho é menor do que o tamanho do eritrócito.

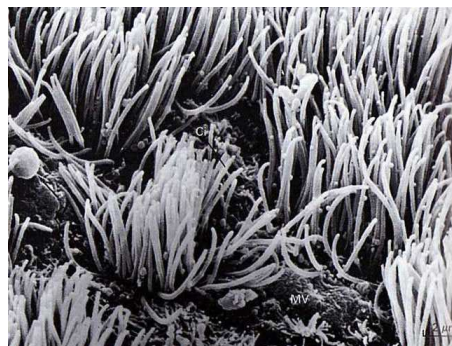


Figura 35: Micrografia eletrônica da superfície do epitélio bronquiolar. Na figura, *Ci* representa os cílios; *MV* representa as microvilosidades na superfície não-ciliada. As setas indicam uma gota de secreção [37].

Das partículas remanescentes, muitas daqueles cujo diâmetro varia entre 1 e $5\mu m$ *depositam-se* nos bronquíolos menores, em consequência de sua *precipitação gravitacional*. Algumas partículas ainda menores (com diâmetro inferior a $1\mu m$) *difundem-se* contra as paredes dos alvéolos e aderem ao líquido alveolar. Entretanto, muitas partículas com diâmetro inferior a $0.5\mu m$ permanecem em suspensão no ar alveolar, sendo posteriormente expelidas com a expiração. Partículas de fumaça e cigarro, por exemplo, possuem diâmetro de cerca de $0.3\mu m$. Quase nenhuma destas partículas passa por precipitação nas vias aéreas antes de alcançar os alvéolos. Cerca de um terço destas partículas se precipita nos alvéolos, pelo processo de difusão, enquanto as restantes permanecem em suspensão e são expelidas com o ar expirado.

5.2 Morfologia do aparelho respiratório

O sistema respiratório é composto pelos pulmões, as vias aéreas condutoras, as partes do sistema nervoso central responsáveis pelo controle dos músculos respiratórios e a cavidade torácica. Esta última, por sua vez, é composta pelos músculos da respiração, tais como diafragma, músculos intercostais, músculos abdominais, e as costelas.

O pulmão propriamente dito é constituído pela árvore bronquial, ilustrada na Fig. 36 e o conjunto de alvéolos, estruturas que aparecem nas últimas ramificações da árvore bronquial, ilustrados na Fig. 37. Os alvéolos pulmonares são pequenos sacos de forma octaédrica que se abrem sobre as paredes dos canais condutores. Estas estruturas são delimitadas por uma membrana, dita *membrana alveolar*, através da qual ocorre a difusão do oxigênio e dióxido de carbono entre o ar e o sangue. Podemos, então, classificar os ramos da árvore bronquial como *ramos alveolados* e *ramos não-alveolados*. Estes últimos possuem unicamente a função de *transporte* do ar para o interior do pulmão. Em contrapartida, as *trocas gasosas* acontecem nos ramos alveolados. Os sistemas de artérias e veias, que conduzem sangue com altas e baixas taxas de concentração de oxigênio, são entrelaçados às vias aéreas do pulmão. As ramificações da artéria pulmonar estão dispostas paralelamente às vias aéreas, de forma que a cada via aérea está associado um ramo da artéria pulmonar. Esta relação é mantida até a periferia da árvore respiratória. Em contrapartida, as veias pulmonares são situadas à meia distância entre dois pares de artérias e vias aéreas. As artérias e veias são conectadas por uma rede de microvasos formando uma camada de sangue quase contínua na membrana alveolar.

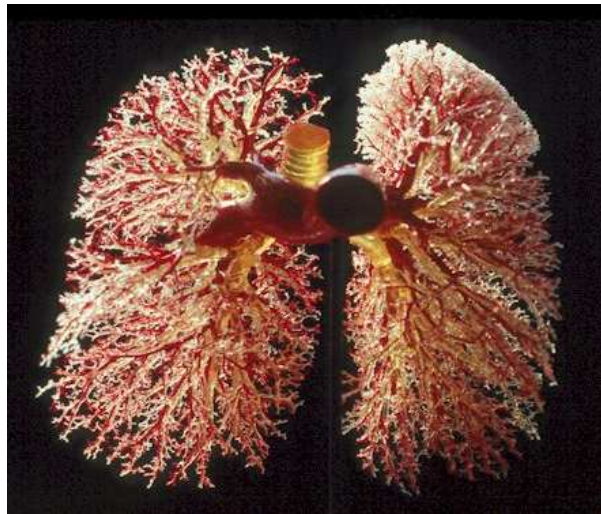


Figura 36: Molde de resina de artérias pulmonares e vias aéreas [38].

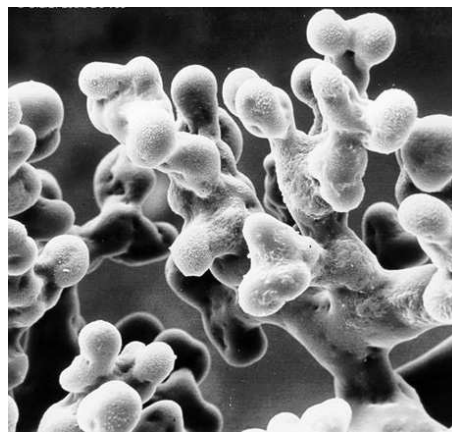


Figura 37: Alvéolos no pulmão [38].

5.2.1 A árvore respiratória

Após escoar através das *vias aéreas superiores* (nariz ou boca, faringe e laringe), o ar entra na *árvore traqueobrônquica*. O “tronco” desta árvore, ou ramo de geração zero, é a traquéia, um tubo formado por, aproximadamente, vinte anéis cartilagosos que a mantém sempre aberta. As ramificações que se sucedem à traquéia são bifurcadas e situam-se num mesmo plano (o ramo pai e os dois ramos filhos são coplanares), como ilustra a Fig. 38. Tal plano, nomeadamente *plano de ramificação*, é rotacionado de aproximadamente 90° em relação ao plano de ramificação das bifurcações seguintes. Existem, em média, 23 *gerações de ramos*, de forma que o número de ramos terminais é da ordem de 2^{23} [1].

A árvore respiratória não é perfeitamente simétrica. Contudo, medidas morfológicas

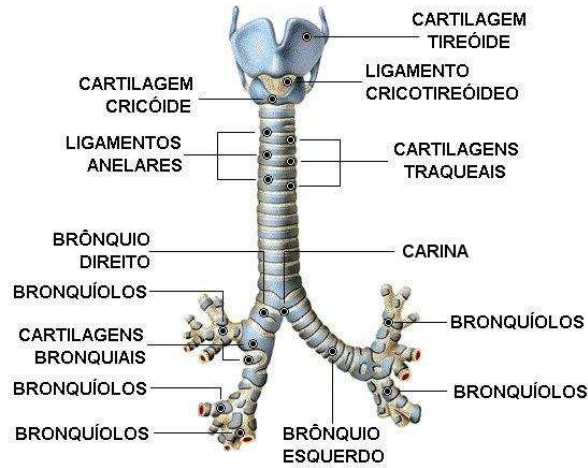


Figura 38: Figura esquemática mostrando a parte superior da árvore respiratória. Os anéis cartilaginosos impedem o fechamento da traquéia durante a respiração.

mostraram que existe regularidade neste sistema, de forma que as bifurcações são sempre preservadas. Existem leis gerais que descrevem a progressão das dimensões dos ramos em função da sua geração, ao longo da árvore respiratória [40, 41]. A progressão dos diâmetros das vias aéreas segue a lei de Hess e Murray [42, 43], onde os diâmetros dos ramos filhos, d_1 e d_2 , são relacionados com o diâmetro do ramo pai através da relação:

$$d_0^3 = d_1^3 + d_2^3. \quad (5.1)$$

Para uma árvore simétrica,

$$d_1 = d_2 = d_0 \cdot 2^{-1/3} \quad (5.2)$$

sendo d_0 o diâmetro do ramo pai [44]. Portanto, a cada geração, os ramos têm seu diâmetro reduzido de um fator igual à raiz cúbica de 2. Esta lei prediz uma otimização dos diâmetros das vias aéreas para o escoamento convectivo de ar, fornecendo baixa resistência para o menor volume do espaço anatomicamente morto [1, 45, 46, 47]. Esta lei é obedecida com boa precisão até a décima quarta geração, como ilustra a Fig. 39. No entanto, o decrescimento do diâmetro dos ramos acontece mais lentamente nas últimas gerações. O comprimento dos ramos varia em torno de um valor igual a três vezes o diâmetro em todas as gerações. Em muitos modelos físicos, estas leis foram interpretadas como resultados de uma otimização de fluxo de ar nas vias condutoras [48, 49, 50, 51, 52, 53, 54, 55].

A Fig. 40 mostra porções de dois moldes de árvores respiratórias: (a) a partir de um pulmão humano e (b) de um pulmão de um rato. É evidente que, em ambos os exemplos, as vias aéreas se bifurcam e os comprimentos e diâmetros dos tubos tornam-se gradualmente reduzidos a cada geração. Há, entretanto, uma diferença em termos do

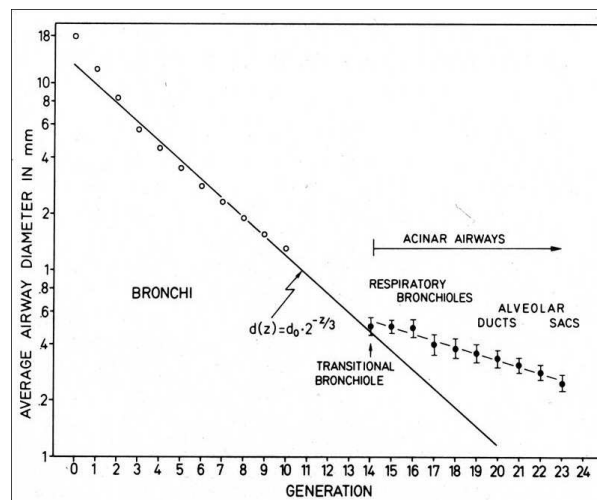


Figura 39: Curva da variação dos diâmetros das vias aéreas, em função da geração [40].

grau de irregularidade do padrão de ramificação: no pulmão humano (Fig. 40) as vias aéreas bifurcadas são relativamente simétricas, ao passo que no pulmão de rato existem grandes diferenças no diâmetro e comprimento na região de conexão entre os ramos pai e filhos, de modo que o padrão de bifurcação é completamente assimétrico. Esta diferença na assimetria pode ser explicada pelo fato de que o espaço a ser preenchido pelas ramificações no pulmão humano é aproximadamente “esférico”, ao passo que a maioria dos animais quadrúpedes possui pulmão longo e estreito.

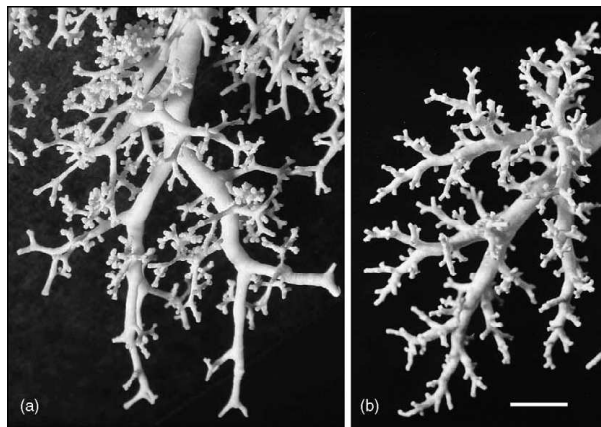


Figura 40: Modelos de vias aéreas condutoras periféricas de (a) pulmão humano e (b) pulmão de rato. O marcador da escala é de 5mm [39].

Apesar de existir um grau distinto na irregularidade do sistema respiratório, algumas regras gerais governam a progressão das dimensões ao longo da árvore respiratória [40, 41]. O diâmetro dos ramos filhos é menor do que o diâmetro do ramo pai no sentido de que o diâmetro reflete o volume da região a ser suprida de ar: vias aéreas mais largas servem a

unidades maiores do pulmão, ao passo que vias aéreas estreitas servem a unidades menores. Estas são as principais características que descrevem as vias aéreas centrais, projetadas como tubos lisos para distribuir fluxo convectivo de ar para o interior dos pulmões. Esta estrutura, no entanto, varia abruptamente quando as vias aéreas aproximam-se do parênquima pulmonar, o complexo de alvéolos arranjados como uma bolha na superfície das vias aéreas periféricas, como ilustra a Fig. 41. Resumidamente falando, esta é a região da árvore respiratória onde a difusão de O_2 na fase gasosa adquire um papel importante no suprimento de O_2 para a superfície de trocas gasosas. É nesta região, denominada *vias aérea periférica*, em que observamos a competição entre os mecanismos de convecção e difusão para a distribuição do oxigênio.

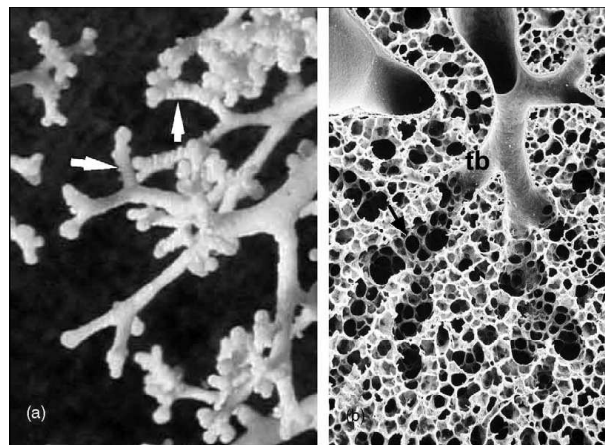


Figura 41: Transição da zona de condução para a zona respiratória. (a) No modelo do pulmão humano (detalhe da Fig. 41) (b) e na micrografia eletrônica de um pulmão de coelho, a seqüência de dutos alveolares ramificados seguindo o bronquíolo transicional (tb) é vista de dentro. Notemos que os alvéolos aparecem na superfície dos bronquíolos respiratórios (indicados pelas setas brancas) em (a). No pulmão de coelho, (b) a rede de anéis alveolares é claramente vista (indicada pelas setas pretas).

A estrutura hierárquica da árvore respiratória nos permite classificar seus ramos em diferentes categorias, correspondendo às diferentes zonas funcionais. Os primeiros ramos que se sucedem à traquéia são denominados *brônquios* cartilagosos que, por sua vez, são seguidos dos *bronquíolos*, da geração 4 à geração 16. A partir da geração 16, surgem os primeiros alvéolos. As três primeiras gerações de ramos alveolados são designadas *bronquíolos respiratórios*, estruturas que apresentam projeções saculiformes, que são os alvéolos primitivos. Com as sucessivas ramificações (ou gerações) de bronquíolos respiratórios, o número e o tamanho dos alvéolos anatômicos aumentam até que as paredes dos bronquíolos sejam quase que completamente substituídas pelas “aberturas” dos alvéolos. Estes ramos finais das vias aéreas são denominados *dutos alveolares*.

É possível classificar a árvore respiratória do ponto de vista funcional, como ilustra a Fig. 42. Desta forma, existem três zonas: a *zona de condução*, que compreende as 16 primeiras gerações da árvore e é desprovida de alvéolos, portanto incapaz de efetuar trocas gasosas com o sangue venoso. Esta região é denominada *espaço anatomicamente morto*. É na zona de condução que o oxigênio é transportado por convecção no ar. Em seguida, temos a *zona de transição*, que abrange da décima sétima à décima nona gerações, onde encontramos os bronquíolos respiratórios e onde convecção e difusão aparecem simultaneamente no sistema, enquanto as trocas gasosas acontecem parcialmente. Por fim, temos a *zona respiratória*, que compreende os dutos alveolares e os sacos alveolares, onde o oxigênio é principalmente transportado por difusão e sofre a troca entre o ar e o sangue. A porção do pulmão que contém um bronquíolo respiratório primário é denominado *ácino*. Todas as vias aéreas de um ácino participam das trocas gasosas. As numerosas ramificações das vias aéreas resultam em uma enorme área de secção transversal total das porções distais da árvore traqueobrônquica, apesar dos diâmetros individuais das vias aéreas serem extremamente reduzidos.

ZONA DE CONDUÇÃO	GERAÇÃO		D	L	N	ÁREA	
	TRAQUÉIA	0	1.80	12.0	1	2.54	
	BRÔNQUIOS	1	1.22	4.8	2	2.33	
		2	0.83	1.9	4	2.13	
		3	0.56	0.8	8	2.00	
		4	0.45	1.3	16	2.48	
	BRONQUIÓLOS	5	0.35	1.07	32	3.11	
	BRONQUIÓLOS TERMINAIS	16	0.06	0.17	6×10^4	180.0	
		17	↓	↓	↓	↓	
	ZONA RESPIRATÓRIA	BRONQUIÓLOS RESPIRATÓRIOS	18	↓	↓	↓	↓
19			0.05	0.10	5×10^5	10^3	
20			↓	↓	↓	↓	
DUTOS ALVEOLARES		T_3	21	↓	↓	↓	↓
		T_2	22	↓	↓	↓	↓
		T_1	23	0.04	0.05	8×10^6	10^4
SACOS ALVEOLARES		T	23	0.04	0.05	8×10^6	10^4

Figura 42: Representação esquemática da árvore respiratória humana com dimensões aproximadas. Na tabela, D simboliza o diâmetro dos dutos, L representa o comprimento e N designa o número de vezes que determinada estrutura esta presente no corpo [1].

5.2.2 A estrutura de trocas gasosas

Podemos identificar a unidade de ventilação como sendo o conjunto de dutos de um mesmo bronquíolo respiratório. Este conjunto é denominado *ácino pulmonar*. Por conseguinte, a unidade de ventilação é uma estrutura arborescente constituída de 8 a 9

gerações de dutos alveolares originados de um mesmo bronquíolo respiratório. No ácino propriamente dito não há trocas gasosas. Em contrapartida, todos os ramos do ácino participam das trocas e são ventilados por uma mesma entrada.

As trocas gasosas são efetuadas nos alvéolos, através da membrana alveolar. Os alvéolos, como já mencionado, possuem uma configuração aproximadamente octaédrica e uma dimensão em torno de 0.25mm . Cada alvéolo possui uma parede em comum com seus vizinhos, denominada *septo alveolar*. A Fig. 43 ilustra o septo alveolar contendo um capilar com eritrócitos em seu interior. Os septos alveolares são constituídos de fibras associadas ao sistema de fibras axiais, que formam as paredes do duto alveolar, e ao sistema de fibras periféricas que se estendem até a pleura visceral. O conjunto compreendido pela superfície alveolar é sustentado pela força exercida sobre a pleura pelos músculos do tórax e o diafragma. Além disso, os alvéolos são impedidos de colapsar, devido à tensão superficial existente na interface ar-líquido. Com a formação desta interface, as moléculas de água situadas na superfície têm atração especialmente forte umas pelas outras. Como consequência, a superfície da água está sempre tentando contrair-se. Em outras palavras, existe uma forte membrana contrátil, formada por moléculas de água, que tende a forçar o ar para fora dos alvéolos, através dos brônquios e, desta maneira, fazer com que os alvéolos entrem em colapso. O efeito final consiste na geração de força contrátil elástica de todo o pulmão, denominada *força elástica da tensão superficial*. O efeito da tensão superficial da água é acentuadamente reduzido com a presença de *surfactante*, um agente tensoativo, na água. O surfactante, que é uma mistura complexa de vários fosfolípidios, proteínas e íons, é secretado por células epiteliais especializadas, denominadas *células epiteliais alveolares tipo II*, que constituem cerca de 10% da área da superfície dos alvéolos. O surfactante não se dissolve uniformemente na água que reveste a superfície alveolar. Isto ocorre porque uma porção de cada molécula de fosfolípido é hidrofílica e se dissolve na água, enquanto a porção lipídica é hidrofóbica e, portanto, orienta-se em direção ao ar, formando uma superfície hidrofóbica exposta ao ar. Esta superfície tem entre 1/12 e metade da tensão superficial de uma superfície de água pura. A manutenção da estabilidade mecânica desta estrutura é conseguida pela secreção do surfactante pulmonar bem como pelo arranjo especial das fibras da matriz extracelular dos alvéolos que apresentam conexões com as fibras provenientes da pleura e com fibras que acompanham os brônquios e vasos.

A membrana alveolar forma uma única superfície com muitos dobramentos, denominada *parênquima pulmonar*. Esta membrana é extremamente fina, com espessura de $5\mu\text{m}$ em média [36] e constituída de tecido e sangue. O parênquima pulmonar contém uma rede complexa de microvasos, habitualmente denominados capilares pulmonares. A interface

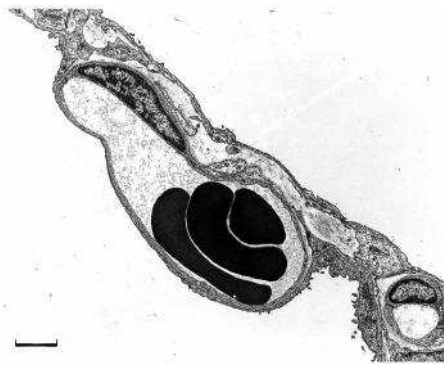


Figura 43: Micrografia eletrônica de um septo alveolar contendo um capilar com três eritrócitos. Notemos a barreira de tecido extremamente delgada entre o ar alveolar e os eritrócitos. A escala é de $2\mu m$ [56].

ar-sangue é constituída de tecido endotelial dos capilares e de tecido epitelial dos alvéolos, separados por uma fina camada de interstício. A espessura desta interface varia entre 0.1 e $0.2\mu m$ [36]. A espessura das paredes alveolares é, portanto, praticamente a espessura dos capilares. A partir de imagens obtidas por microscopia eletrônica da membrana, como ilustra a Fig. 44, pode-se perceber a forma dos glóbulos vermelhos.

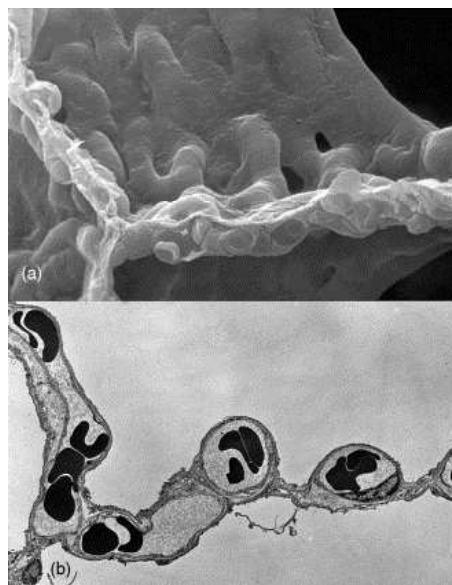


Figura 44: Estrutura do septo alveolar em pulmões humanos, vista através de microscopia eletrônica (a) e uma camada delgada (b). É possível perceber a tênue barreira de tecido separando as células sanguíneas do ar [57].

As arteríolas irrigam a rede de capilares a intervalos relativamente regulares, e as vênulas recebem o sangue oxigenado da mesma maneira. A distância entre arteríolas e vênulas é da ordem de $0.5-1mm$. Por conseguinte, os capilares estendem-se sobre vários

alvéolos. Assim, não é simples definir uma unidade de troca gasosa ao nível microvascular. Por esta razão, consideramos geralmente o ácino pulmonar, que é a unidade de ventilação, como a unidade de trocas gasosas no pulmão dos mamíferos.

A estrutura pulmonar onde ocorrem as trocas gasosas é formada nas paredes dos alvéolos que contém uma densa rede capilar. Nesta região, O_2 e CO_2 são trocados entre o ar e o sangue com grande eficiência devido ao intenso contato destes dois meios com uma superfície de grande área e através de uma membrana de tecido extremamente fina [45, 46]. A força motriz para as trocas gasosas é a diferença de pressão parcial para O_2 entre o ar alveolar e o sangue capilar. Tal diferença de pressão é mantida somente se os capilares estiverem em contato com os fluidos da respiração a altas taxas e se o ar alveolar é continuamente reabastecido com O_2 .

Com o intuito de permitir uma ventilação eficiente para a superfície de trocas gasosas, os alvéolos são localizados em volta dos dutos, as últimas ramificações da árvore respiratória, formando uma camada compacta de câmaras que se abrem para o interior do duto. Alvéolos adjacentes são separados por septos que contém redes de capilares. Através deste arranjo, a área disponível para as trocas gasosas na superfície alveolar é aproximadamente cinco vezes maior do que a superfície do duto, embora a distância de difusão para moléculas de O_2 do duto à superfície de trocas gasosas permaneça reduzida, da ordem de $0.2mm$ no pulmão humano.

5.3 Mecânica da ventilação pulmonar

A ventilação é o processo que permite a renovação de ar nos pulmões. Este processo envolve vários músculos, permitindo a variação da pressão no interior dos pulmões de maneira que um fluxo de ar é gerado. Este fluxo está sujeito às leis da dinâmica de fluidos, com a complexidade mecânica de uma estrutura particularmente complicada.

Os pulmões podem ser expandidos e contraídos de duas maneiras: (1) através do movimento do diafragma para baixo e para cima, alongando ou encurtando a cavidade torácica, e (2) pela elevação e depressão das costelas, aumentando e diminuindo o diâmetro ântero-posterior da cavidade torácica.

Em repouso, a respiração normal ocorre quase totalmente através do primeiro destes dois mecanismos, isto é, pela movimentação do diafragma. Durante a inspiração, a contração do diafragma traciona para baixo a superfície inferior dos pulmões. Em seguida, durante a expiração, o diafragma simplesmente se relaxa, e a *retração elástica* dos pul-

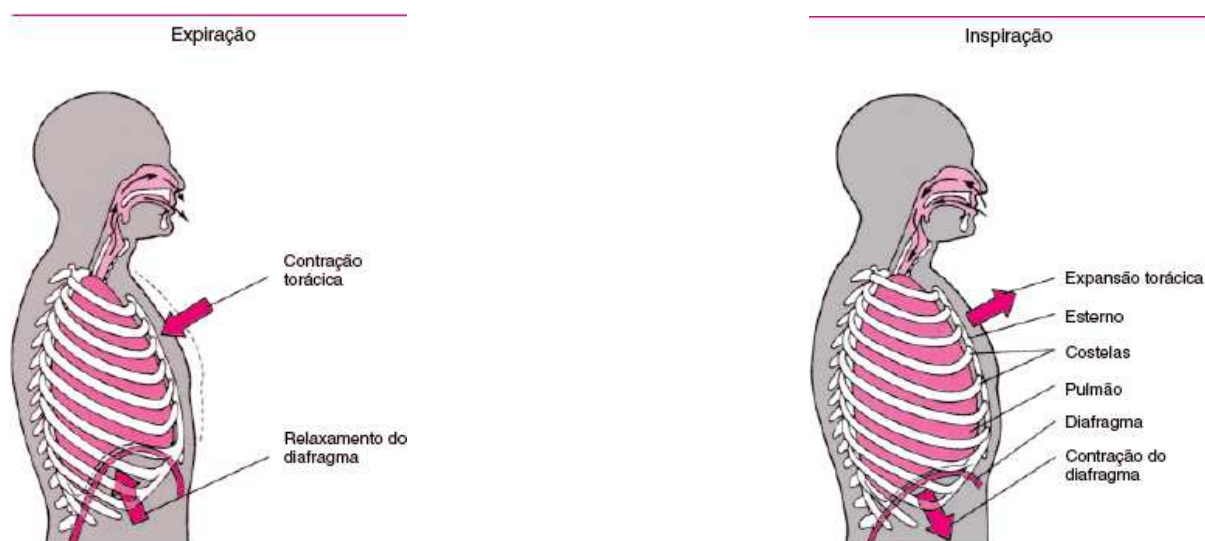


Figura 45: Contração e expansão da caixa torácica durante a expiração e inspiração, demonstrando especialmente a contração do diafragma e a elevação e depressão da caixa torácica

mões, da parede torácica e das estruturas abdominais comprime os pulmões. Entretanto, durante a respiração intensa, as forças elásticas não são potentes o suficiente para produzir a expiração rápida necessária e uma força adicional é obtida, principalmente, pela contração dos *músculos abdominais*, que empurra o conteúdo abdominal para cima, contra a base do diafragma.

O segundo mecanismo de expansão dos pulmões consiste na elevação da caixa torácica. Isto expande os pulmões, visto que, em sua posição natural de repouso, as costelas inclinam-se para baixo, conforme pode ser observado à esquerda da Fig. 5.3, permitindo assim que o esterno seja levado para trás, em direção à coluna vertebral. Entretanto, quando a caixa torácica é elevada, as costelas projetam-se quase diretamente para a frente, de forma que o esterno também se desloca para frente, afastando-se da coluna vertebral, fazendo com que a espessura ântero-posterior do tórax seja cerca de 20% maior durante a inspiração máxima em relação à expiração. Por conseguinte, todos os músculos que elevam a caixa torácica são classificados como *músculos inspiratórios*, enquanto os músculos que deprimem a caixa torácica são classificados como *músculos expiratórios*. Os principais músculos que elevam a caixa torácica são os *intercostais externos*; entretanto, outros músculos também participam deste processo, incluindo o músculo *esternocleidomastóideo*, que eleva o esterno; o músculo *serrátil anterior*, que eleva algumas costelas e o *escaleno*, que eleva as duas primeiras costelas.

Os músculos que tracionam a caixa torácica para baixo durante a expiração são: os *retos abdominais*, que exercem o efeito potente de puxar para baixo as costelas inferi-

ores, ao mesmo tempo que, juntamente com os outros músculos abdominais, empurram o conteúdo abdominal para cima, em direção ao diafragma e os *intercostais internos*.

5.3.1 Pressão pleural e pressão alveolar

O pulmão é uma estrutura elástica que colapsa como um balão e expelle todo o seu ar pela traquéia sempre que não houver qualquer força para mantê-lo inflado. Além disso, não há qualquer ponto de fixação entre os pulmões e as paredes da caixa torácica, exceto no ponto em que cada pulmão se prende ao mediastino, por meio de seu hilo. Com efeito, o pulmão, literalmente, flutua dentro da cavidade torácica, circundado por uma fina película de *líquido pleural* que lubrifica os movimentos dos pulmões dentro da cavidade. Além disso, a contínua sucção do excesso de líquido pelos canais linfáticos mantém ligeiro grau de sucção entre a superfície visceral pleural do pulmão e a superfície pleural parietal da cavidade torácica. Por conseguinte, os pulmões aderem à parede torácica, como se estivessem colados à ela, mas podem deslizar livremente, bem lubrificados, quando a caixa torácica se expande e se contrai.

A *pressão pleural* é a pressão do líquido existente no estreito espaço entre a pleura pulmonar e a pleura da parede torácica. Conforme assinalado antes, existe normalmente uma leve sucção, o que significa pressão ligeiramente negativa. A pressão pleural normal, no início da inspiração, é de cerca de -5cm de água, que é a quantidade de sucção necessária para manter os pulmões abertos em seu nível de repouso. A seguir, durante a inspiração normal, a expansão da caixa torácica puxa os pulmões para fora com força ainda maior e cria pressão ainda mais negativa que, em média, é de cerca de -7.5cm de água.

Essas relações entre a pressão pleural e a variação do volume pulmonar estão ilustradas na Fig. 46 (a) e (b), mostrando, na segunda curva, a crescente negatividade da pressão pleural de -5 para -7.5cm de água durante a inspiração, e, na parte superior, o aumento de 0.5 litro do volume pulmonar. A seguir, durante a expiração, os eventos são, necessariamente, invertidos.

A *pressão alveolar* é a pressão do ar no interior dos alvéolos pulmonares. Quando a glote está aberta e não há entrada nem saída de ar dos pulmões, as pressões em todas as partes da árvore respiratória, até os alvéolos, são iguais à pressão atmosférica, que é considerada a pressão de referência zero para as vias aéreas - isto é, 0cm de água de

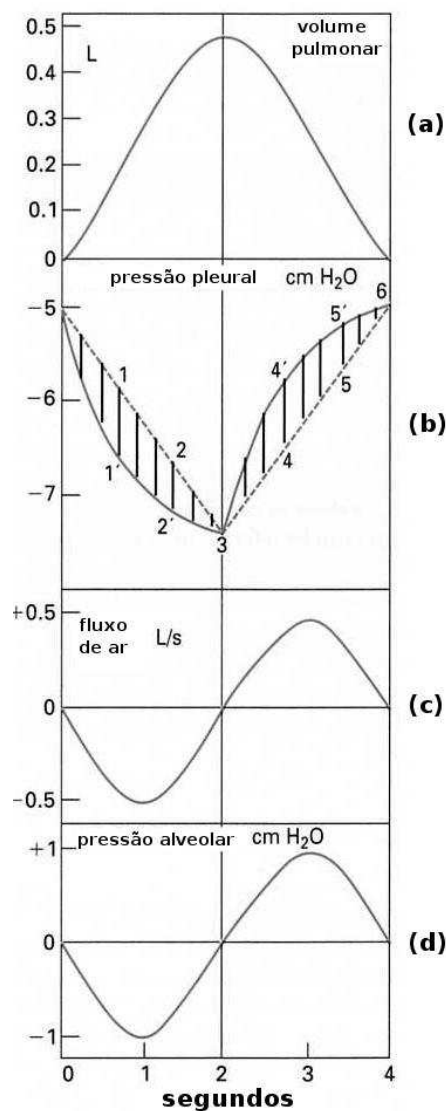


Figura 46: Variações do (a) volume pulmonar, (b) da pressão pleural, (c) do volume de ar deslocado e (d) da pressão alveolar durante um ciclo respiratório normal [58].

pressão. Para que ocorra o fluxo de ar para o interior dos alvéolos durante a inspiração, a pressão dentro dos alvéolos deve cair para um valor ligeiramente inferior à pressão atmosférica (abaixo de 0). A Fig. 46 (d) demonstra que, durante a inspiração normal, a pressão alveolar diminui para cerca de -1 cm de água. Essa ligeira pressão negativa é suficiente para determinar a entrada de 0.5 litro de ar nos pulmões nos dois segundos necessários para a inspiração normal em repouso.

Durante a expiração, ocorrem alterações opostas: a pressão alveolar aumenta para cerca de $+1\text{ cm}$ de água, o que determina a saída de 0.5 litro de ar inspirado dos pulmões durante os dois a três segundos de expiração.

A diferença entre a pressão alveolar e a pressão pleural é denominada *pressão transpul-*

monar. Trata-se da diferença de pressão entre a pressão nos alvéolos e nas superfícies externas dos pulmões e fornece uma medida das forças elásticas nestes últimos que tendem a produzir colapso dos pulmões a cada momento da respiração.

Uma característica importante do sistema pulmonar é a *complacência dos pulmões*. A complacência refere-se ao grau de expansão dos pulmões que ocorre para cada unidade de aumento da pressão transpulmonar. No homem adulto normal, a complacência total de ambos os pulmões é, em média, cerca de 200 mililitros de ar por centímetro de água de pressão transpulmonar. Isto é, toda vez que a pressão transpulmonar aumenta em 1 centímetro de água, o volume pulmonar tem expansão de 200 mililitros.

A Fig. 47 é um diagrama que relaciona as mudanças do volume pulmonar em relação às variações da pressão transpulmonar. Observemos que a relação é diferente para a inspiração e a expiração. Cada curva é registrada ao se variar, em pequenos graus, a pressão transpulmonar e ao se permitir que o volume pulmonar alcance seu nível de equilíbrio dinâmico entre as etapas sucessivas. As duas curvas são denominadas *curva de complacência inspiratória* e *curva de complacência expiratória*, enquanto todo o diagrama é denominado *diagrama de complacência dos pulmões*.

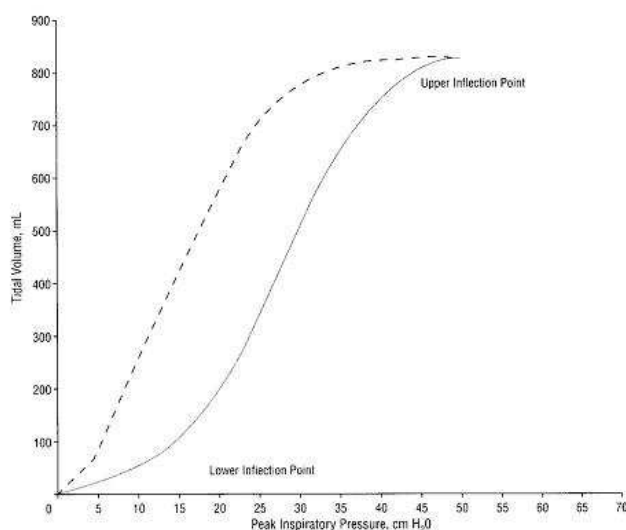


Figura 47: Diagrama de complacência em indivíduo sadio. Este diagrama mostra apenas a complacência dos pulmões.

As características do diagrama de complacência são determinadas pelas forças elásticas dos pulmões. Estas forças elásticas podem ser divididas em dois grupos: (1) as *forças elásticas do próprio tecido pulmonar* e (2) as *forças elásticas causadas pela tensão superficial do líquido que reveste as paredes internas dos alvéolos* e outros espaços aéreos

dos pulmões.

As forças elásticas do tecido pulmonar são determinadas, principalmente, pelas fibras de elastina e colágeno entrelaçadas no parênquima pulmonar. Nos pulmões esvaziados, estas fibras encontram-se elasticamente contraídas e dobradas. A seguir, quando os pulmões estão expandidos, as fibras são estiradas e ficam desdobradas e, portanto, alongadas, embora ainda exerçam força elástica para retornar ao seu estado natural.

As forças elásticas causadas pela tensão superficial são muito mais complexas. Todavia, a tensão superficial é responsável por cerca de dois terços das forças elásticas totais nos pulmões normais. A importância da tensão superficial é mostrada na Fig. 48, que compara a complacência dos pulmões quando preenchidos por uma solução salina e preenchidos por ar. Nesta última situação, existe uma interface entre o líquido de revestimento alveolar e o ar contido nos alvéolos. Nos casos dos pulmões preenchidos com solução salina, não há interface ar-líquido e, portanto, não existe qualquer efeito da tensão superficial - apenas as forças elásticas teciduais atuam no pulmão cheio de solução salina.

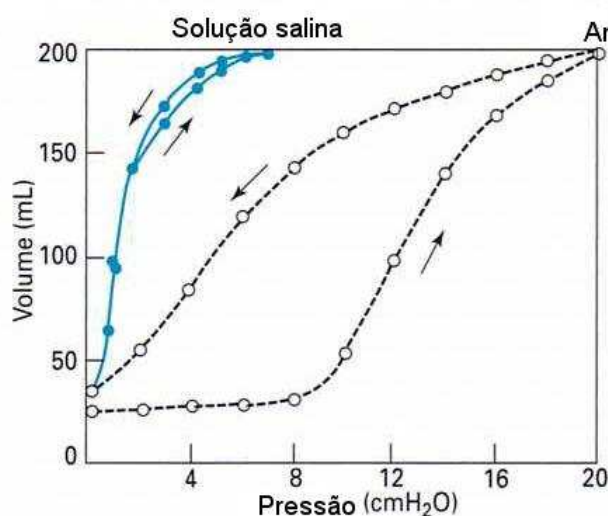


Figura 48: Comparação dos diagramas de complacência do pulmão cheio de solução salina e do pulmão cheio de ar [59].

Observemos que as pressões pleurais necessárias para expandir os pulmões cheios de ar são cerca de três vezes maiores do que as pressões necessárias para expandir os pulmões cheios de solução salina. Por conseguinte, pode-se concluir que as forças elásticas teciduais que tendem a causar colapso dos pulmões cheios de ar representam, apenas, cerca de um terço da elasticidade pulmonar total, enquanto as forças de tensão superficial nos alvéolos e em outros espaços aéreos representam cerca de dois terços. As forças elásticas da tensão

superficial dos pulmões também aumentam acentuadamente quando o surfactante não está presente no líquido alveolar.

5.3.2 Efeito da caixa torácica sobre a expansibilidade pulmonar

A caixa torácica possui suas propriedades características elásticas e viscosas, semelhantes às dos pulmões; mesmo que não houvesse pulmões no tórax, ainda assim haveria necessidade de esforço muscular para expandir a caixa torácica.

A complacência de todo o sistema respiratório (os pulmões e a caixa torácica, em conjunto) é medida quando ocorre expansão dos pulmões de uma pessoa totalmente relaxada ou paralisada. Para isso, o ar é forçado para dentro dos pulmões aos poucos, enquanto são registrados os volumes e as pressões pulmonares. Para inflar todo este sistema pulmonar, a pressão necessária é quase o dobro da exigida para inflar apenas os pulmões, se removidos da caixa torácica. Por conseguinte, a complacência do sistema pulmão-tórax combinado é quase exatamente a metade da complacência dos pulmões isolados - 110 milímetros de volume por centímetro de água, para o sistema combinado, em comparação com 200 mL/cm apenas para os pulmões. Além disso, quando os pulmões são expandidos até grandes volumes, ou comprimidos até volumes reduzidos, as limitações impostas pelo tórax tornam-se extremas; próximos a estes limites, a complacência do sistema pulmão-tórax combinado pode ser inferior a um quinto da complacência dos pulmões isolados.

Como já mencionamos anteriormente, durante a respiração normal em repouso, quase toda a contração dos músculos respiratórios ocorre apenas durante a inspiração, enquanto a expiração é um processo quase inteiramente passivo, produzido pela retração da caixa torácica. Por conseguinte, em condições de repouso, os músculos respiratórios, normalmente, só executam “trabalho” para produzir a inspiração, e não para causar a expiração.

O trabalho da inspiração pode ser dividido em três partes: (1) o necessário para expandir os pulmões contra as forças elásticas dos pulmões e do tórax, denominado *trabalho da complacência* ou *trabalho elástico*; (2) o exigido para superar a viscosidade do pulmão e das estruturas da parede torácica, denominado *trabalho da resistência tecidual*; e (3) o necessário para vencer a resistência das vias aéreas durante a movimentação do ar para o interior dos pulmões, denominado *trabalho da resistência das vias aéreas*. Estes três tipos de trabalho são representados graficamente pelas áreas *I*, *II* e *III* na Fig. 49. Neste diagrama, a curva *III* mostra a *variação* progressiva da *pressão pleural e do volume pulmonar* durante a inspiração. Além disso, toda a área sombreada da figura representa o trabalho total executado pelos músculos sobre os pulmões durante o ato da inspiração.

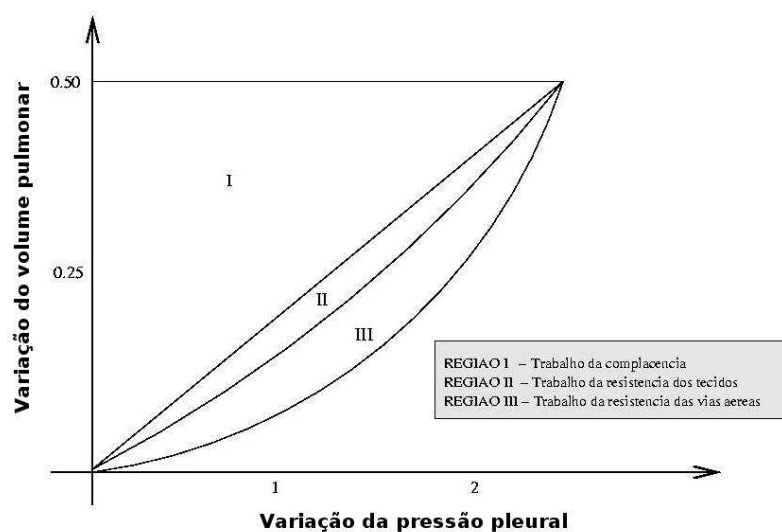


Figura 49: Representação gráfica dos três tipos de trabalho executados durante a inspiração: trabalho da complacência, representado pela área *I*, trabalho da resistência tecidual, representado pela área *II* e trabalho da resistência das vias aéreas, representado pela área *III*. No gráfico acima, a variação de pressão pleural são medidas em cmH_2O e a variação do volume pulmonar é medido em litros [31].

Por sua vez, a área sombreada é dividida em três segmentos, representando os três tipos de trabalho realizados durante a inspiração. A área mais intensamente sombreada representa o trabalho da complacência, necessário para vencer as forças elásticas dos pulmões. Este trabalho pode ser calculado através do produto entre o volume da expansão pela pressão média necessária para produzir a expansão. O valor é igual à área mais intensamente sombreada, ou seja,

$$\tau = \frac{\Delta V \cdot \Delta P}{2}, \quad (5.3)$$

onde τ é o trabalho da complacência, ΔV é a variação do volume e ΔP é o aumento da pressão intrapleural. A área mais clara é proporcional ao trabalho necessário despendido para superar a viscosidade dos pulmões. Por fim, a área moderadamente sombreada representa o trabalho necessário para vencer a resistência do ar pelas vias respiratórias.

5.3.3 Volumes e capacidades pulmonares

Ao respirar normalmente, o ser humano mobiliza um volume de ar de cerca de $0.6L$, nomeadamente o *volume corrente*. No entanto, é possível respirar mais profundamente preenchendo um volume correspondente à *reserva inspiratória* até que a *capacidade inspiratória* seja atingida, que corresponde à quantidade de ar (cerca de $3.5L$) possível de ser inspirada por um ser humano, começando do nível expiratório normal e distendendo-se

ao máximo dos pulmões. O volume da reserva inspiratória é aproximadamente $3L$. De maneira análoga, pode-se expirar um volume maior do que aquele expirado em condições normais, nomeadamente o *volume de reserva expiratório*, com uma expiração forçada que permite esvaziar a *reserva expiratória*. Em condições normais, o volume de reserva expiratório é de cerca de $1.1L$. Após esta expiração forçada, permanece um volume de ar nos pulmões que não é expirado, nomeadamente *volume residual*. Em média, este volume é de cerca de $1.2L$. A soma do volume residual com o volume de reserva expiratório é designado de *capacidade funcional residual*. Esta capacidade refere-se à quantidade de ar que permanece nos pulmões ao final da expiração normal (cerca de $2.3L$). Definimos, ainda, a *capacidade vital* como sendo a quantidade máxima de ar que um ser humano pode expelir dos pulmões após enchê-los ao máximo e, em seguida, expirar completamente. Este volume é, aproximadamente, $4.6L$ e a capacidade vital é igual à soma do volume de reserva inspiratório com o volume corrente e o volume de reserva expiratório. O volume máximo que os pulmões podem alcançar com o maior esforço possível (cerca de $5.8L$) é definido como a *capacidade pulmonar total*, que é dada pela soma da capacidade vital com o volume residual.

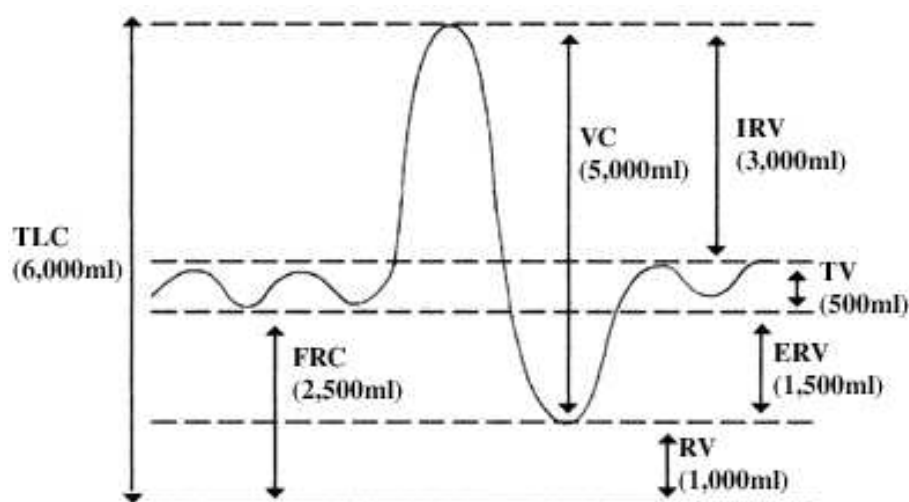


Figura 50: Volumes pulmonares medidos com um espirômetro durante respiração no repouso com uma respiração máxima. Os valores mostrados acima referem-se a medidas efetuadas em um homem adulto e jovem de estatura mediana. Na figura, *RV* indica o volume residual; *ERV* indica o volume de reserva expiratório; *IRV* refere-se ao volume de reserva inspiratório; *TLC* indica a capacidade total pulmonar; *FRC* refere-se à capacidade funcional residual; *TV* indica o volume total; *VC* é a capacidade vital.

A ventilação total $\dot{V}$, ou seja, o volume de ar deslocado no tempo, é o produto do

volume corrente pela frequência respiratória f :

$$\dot{V} = f \cdot V_T \quad (5.4)$$

No entanto, apenas uma parte deste volume atinge a zona respiratória. Com efeito, o ar que preenche a zona de condução não participa das trocas gasosas, e por conseguinte é perdido do ponto de vista da respiração. Por esta razão, o volume correspondente à esta zona é, então, denominado *volume morto* V_D . No pulmão humano, o volume morto é aproximadamente 170mL , em média. A ventilação da zona respiratória, denominada ventilação alveolar $\dot{V}_A$, é, portanto, inferior à ventilação total:

$$\dot{V}_A = f \cdot (V_T - V_D) \quad (5.5)$$

5.3.4 Transição entre convecção e difusão

Após sua passagem pelas fossas nasais e pela faringe, onde é aquecido e umidificado, o ar inspirado percorre a traquéia e, através das vias aéreas, chega aos alvéolos. No repouso, a velocidade do ar inspirado na traquéia é aproximadamente igual a 1m/s . Devido à estrutura ramificada do pulmão, que determina um aumento exponencial da secção total das vias aéreas, a velocidade do ar decresce rapidamente ao longo da árvore respiratória. Com efeito, a secção total passa de 2.5cm^2 na traquéia (geração 0) para 300cm^2 na geração 16 [35]. Por conseguinte, a um certo nível da árvore respiratória suficientemente longe da traquéia, a magnitude da velocidade do ar torna-se comparável à magnitude da velocidade de difusão do oxigênio no ar. A partir deste nível, podemos considerar que o transporte de oxigênio se faz, em grande parte, por difusão. Com o intuito de avaliar a geração da árvore respiratória onde ocorre a transição entre o transporte convectivo e difusivo, pode-se definir o *número de Peclet* Pe . Esta grandeza é definida pela relação entre a velocidade do fluxo convectivo e a velocidade de difusão. Um número de Peclet superior a 1 indica, portanto, que o transporte é efetuado principalmente por convecção; em contrapartida, se $P < 1$, o transporte é efetuado principalmente, por difusão.

O número de Peclet, para o caso do pulmão, é denominado número de Peclet acinar Pe^a e foi introduzido e calculado por [32, 33]. A velocidade do fluxo de ar na geração z , denominada $u(z)$, pode ser avaliada a partir de dados morfológicos [35]. Considerando uma velocidade média na direção axial dos dutos e supondo que esta velocidade só depende da geração z da árvore, a conservação do fluxo impõe uma relação entre as velocidades na geração z e na traquéia inversamente proporcional à relação entre as secções totais.

Para $z = 16$, esta relação vale 120; assim, a velocidade do ar cai de $1m/s$ para menos de $1cm/s$ ao longo da árvore respiratória.

A velocidade de difusão v_d do oxigênio no ar depende do coeficiente de difusão $D_{O_2,ar}$ e do caminho que o oxigênio deve percorrer. Uma escolha possível é utilizar a velocidade média do oxigênio transportado por difusão de uma geração z até uma geração terminal z_{max} . O caminho que o oxigênio deve percorrer é, portanto, o comprimento $\lambda(z_{max} - z)$, onde λ é o comprimento médio de um ramo ¹. Sendo t o tempo necessário para percorrer a distância l por difusão igual a l^2/D , onde D é o coeficiente de difusão, é possível obter a velocidade média v ao longo do percurso da seguinte maneira:

$$v = \frac{l}{t} = \frac{D}{l}. \quad (5.6)$$

Portanto, temos:

$$v_d = \frac{D_{O_2,ar}}{(z_{max} - z)\lambda}, \quad (5.7)$$

e o número de Peclet acinar P_a é igual a [33]:

$$P_a = \frac{u(z)(z_{max} - z)\lambda}{D_{O_2,ar}}. \quad (5.8)$$

Os valores de $P_a(z)$ durante o repouso e durante o exercício para o pulmão humano estão representados na Fig. 51.

Pode-se inferir que a transição entre convecção e difusão acontece em $(z_{max} - z) = 5$ no repouso e $(z_{max} - z) = 2$ no exercício. Estas duas posições correspondem à entrada e ao centro do ácino.

5.3.5 As trocas gasosas

O oxigênio é trocado entre o ar e o sangue através da membrana alveolar graças à diferença de pressões parciais entre estes dois meios. Com efeito, as trocas gasosas no interior do pulmão não recorrem a nenhum mecanismo de transporte ativo, acontecendo unicamente por difusão passiva. Este processo realiza-se em duas etapas: o oxigênio sofre difusão na barreira ar-sangue e, em seguida, é dissolvido no plasma ou reage com a hemoglobina, presente em grande concentração nas hemácias (ou glóbulos vermelhos). A hemoglobina é uma macromolécula que pode se ligar com até quatro moléculas de O_2 . A hemoglobina pode-se ligar também ao anidrido carbônico e é, em partes, responsável

¹Como o interesse neste estudo é a região onde P é próximo de 1, e esta região situa-se nas últimas gerações da árvore, podemos considerar que o comprimento dos ramos é aproximadamente constante. Como já mencionado, este comprimento é praticamente invariante a partir da geração 12.

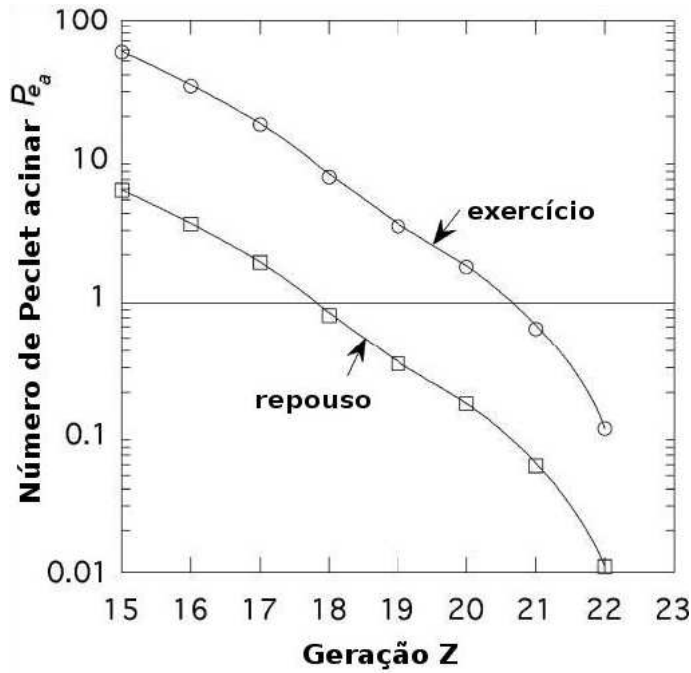


Figura 51: Número de Peclet acinar em função da geração z de ramificação na árvore respiratória [33].

pelo transporte do CO_2 produzido pela respiração tecidual.

5.3.5.1 Passagem através da membrana

Consideremos, agora, a primeira etapa anteriormente mencionada: a passagem através da membrana alveolar. Quando um gás e um líquido estão em contato, semelhantemente ao oxigênio e ao tecido membranar, o equilíbrio é atingido quando a concentração do gás no líquido, C_{lq} , é igual à pressão parcial do gás, P_{gs} multiplicada pela solubilidade σ do gás neste líquido,

$$C_{lq} = \sigma \cdot P_{gs}. \quad (5.9)$$

Se a concentração no líquido é inferior ao valor de equilíbrio, existe um fluxo do gás no líquido dado por,

$$Q = K \left(P_{gs} - \frac{C_{lq}}{\sigma} \right), \quad (5.10)$$

onde, K é uma constante denominada *constante de difusão de superfície* e Q é o fluxo por unidade de superfície de contato [60]. Definimos a pressão parcial do gás no líquido como sendo $\frac{C_{lq}}{\sigma}$. Assim, de acordo com a Eq.5.10, o fluxo é proporcional à diferença de pressões parciais. O oxigênio passa, assim, pela membrana e se difunde no sangue, onde entra em solução através do mesmo processo e pode se ligar quimicamente com a hemoglobina.

5.3.5.2 Captura pela hemoglobina

O processo de captura do oxigênio pela hemoglobina depende também, embora indiretamente, da pressão parcial do oxigênio no ar. Com efeito, a quantidade de oxigênio ligado à hemoglobina depende de maneira não-linear da concentração de oxigênio no plasma.

A relação quantitativa entre estas variáveis foi determinada experimentalmente. Uma amostra de sangue é colocada no interior de um frasco e exposta a um volume de oxigênio em fase gasosa a uma pressão parcial dada, durante um intervalo de tempo suficiente até que o equilíbrio seja atingido. No equilíbrio, a pressão parcial do oxigênio no plasma é igual àquela na fase gasosa, dada pelo valor inicial, se o volume for suficientemente grande. É possível, assim, medir a fração de hemoglobina combinada com oxigênio na amostra em função da pressão parcial de oxigênio. Desta forma é possível obter a *curva de dissociação da oxiemoglobina* ou *curva de equilíbrio do oxigênio*, que representa a porcentagem de hemoglobina ligada ao oxigênio (oxiemoglobina) até o equilíbrio em função da pressão parcial do oxigênio no plasma, como ilustra a Fig. 52. Notemos que esta curva cresce de forma aproximadamente linear com uma forte inclinação para valores de pressão parcial de oxigênio inferiores à 50mmHg (onde a porcentagem de saturação é de 75%), aproximando-se lentamente, em seguida, do valor de saturação [61]. A afinidade da hemoglobina pelo oxigênio pode ser afetada por muitos fatores: temperatura, pressão parcial de CO_2 e o pH (efeito de Bohr). Por exemplo, um aumento na temperatura, ou da pressão parcial de CO_2 , bem como a diminuição do pH, acarretam redução da afinidade da hemoglobina pelo O_2 , de modo que a curva de dissociação se desloca para a direita (a hemoglobina é completamente saturada para valores mais elevados de pressão parcial de O_2).

Normalmente, a pressão parcial do oxigênio no sangue venoso é de 40mmHg , que corresponde a uma porcentagem de oxiemoglobina de cerca de 70%. Durante a realização de exercício físico, esta porcentagem pode se reduzir até 25%. A pressão parcial de oxigênio no sangue arterial é quase perfeitamente equilibrada, tanto durante o exercício físico como no repouso, com a pressão parcial no ar alveolar.

Vale ressaltar que a curva de dissociação da oxiemoglobina é obtida por meio de experiências *in vitro* no equilíbrio, sendo a dinâmica da captura do oxigênio pela hemoglobina nos capilares pulmonares um processo extremamente complexo.

Podemos concluir que o oxigênio está presente no sangue sob duas formas: dissolvido no plasma e ligado à hemoglobina. A solubilidade do oxigênio no plasma não é muito

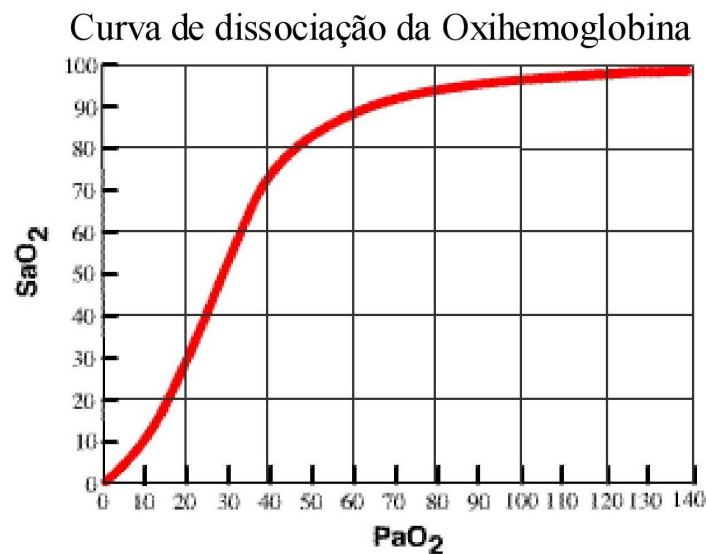


Figura 52: Curva de dissociação da hemoglobina: a porcentagem de hemoglobina ligada é traçada em função da pressão parcial de oxigênio no plasma em *mmHg* [62].

elevada, já que 99% do oxigênio transportado pelo sangue é ligado à hemoglobina. Por exemplo, em 100mL de sangue humano, existe 20mL de oxigênio ligado à hemoglobina e menos de 0.2mL dissolvido no plasma [35]. Contudo, a partir de valores de pressão parcial do oxigênio superiores à 100mmHg , a hemoglobina é saturada e o transporte de oxigênio ulterior faz-se exclusivamente por dissolução no plasma. Quando respiramos oxigênio puro, por exemplo, a porcentagem de oxigênio dissolvido no plasma eleva-se para 10%. No entanto, é essencial ressaltar que o oxigênio ligado à hemoglobina não contribui para a pressão parcial de oxigênio no sangue. Por conseguinte, a difusão do oxigênio do ar no sangue só pode ser diretamente determinada através da diferença entre a pressão parcial no gás alveolar e o plasma sangüíneo. A presença da hemoglobina intervém de maneira indireta, visto que ela age como um poço que drena o oxigênio dissolvido no plasma, mantendo a pressão parcial do oxigênio no sangue a valores baixos, permitindo, assim, que a difusão ocorra.

5.4 O problema da mistura de gases no pulmão

A pressão parcial do oxigênio nos dutos alveolares é habitualmente estimada em 105mmHg . Este valor é obtido por meio de um raciocínio simples. O ar atmosférico contém oxigênio com porcentagem de 20%. Sabendo que no trajeto entre o nariz e a

traquéia, o ar é saturado ² com vapor de água, a pressão parcial do oxigênio na origem da árvore respiratória assume o seguinte valor:

$$P_{O_2}^I = (P_{atm} - P_{H_2O}) \cdot 0.20 = (760 - 47)mmHg \cdot 0.20 = 150mmHg, \quad (5.11)$$

onde P_{atm} é a pressão do ar atmosférico e P_{H_2O} é a pressão saturante do vapor de água. A cada respiração, renova-se, na zona respiratória, um volume de ar igual à diferença entre o volume corrente e o volume morto, ou seja, aproximadamente $350mL$. Este ar “fresco” mistura-se com um volume de ar residual correspondente à capacidade funcional residual, aproximadamente $3L$. Medindo-se a pressão parcial do oxigênio no ar expirado ao fim de uma expiração profunda, obtém-se um valor igual a $100mmHg$. Logo, supondo que este valor corresponde à pressão parcial do oxigênio no ar residual, os $350mL$ de ar à $150mmHg$ misturam-se com $3L$ de ar à $100mmHg$. Obtém-se, assim, uma pressão parcial resultante de $105mmHg$. Este cálculo leva a uma pressão parcial de oxigênio média na zona respiratória, nomeadamente a *pressão alveolar* $P_{A_{O_2}}$, que oscila entre $105mmHg$ e $100mmHg$ durante o ciclo respiratório. Notemos aqui, além disso, que discorrer acerca de “ar alveolar” não é completamente correto, uma vez que trata-se de uma mistura de gases de composição diferente do ar.

O raciocínio desenvolvido anteriormente para obter o valor da pressão parcial de oxigênio no gás alveolar conduz, contudo, a um valor médio, $P_{A_{O_2}}$, obtido a partir da suposição que esta é uniforme. Vale ressaltar que tal hipótese implica em uma mistura perfeita de gases, inspirados e residuais, e na ausência de efeitos que mascarem a difusão. No entanto, veremos posteriormente que esta afirmação não é verdadeira e não é possível tratar a pressão parcial no gás alveolar como sendo constante. Com efeito, os alvéolos são atravessados pelo sangue de maneira independente e em paralelo, enquanto são ventilados em série. Por conseguinte, durante a difusão para o interior do ácino, o oxigênio é progressivamente absorvido e, se o *comprimento de exploração* ³, é suficientemente reduzido, os gradientes de pressão parciais de oxigênio estão permanentemente presentes. A Fig. 53 ilustra a relação entre a ventilação e a perfusão no ácino.

A determinação da distribuição de gases respiratórios no ar alveolar permanece um problema em aberto no campo da fisiologia. Na literatura, este problema é freqüentemente

²Diz-se do ar que não comporta quantidade adicional de vapor de água, a uma determinada temperatura e pressão

³Comprimento de exploração é o comprimento definido pelo quociente do parâmetro de transporte e do parâmetro de transferência em um processo de transporte difusivo de uma espécie para uma conversão onde a transferência acontece. O comprimento de exploração representa o perímetro explorado pela espécie sobre a conversão antes de ser transferido.

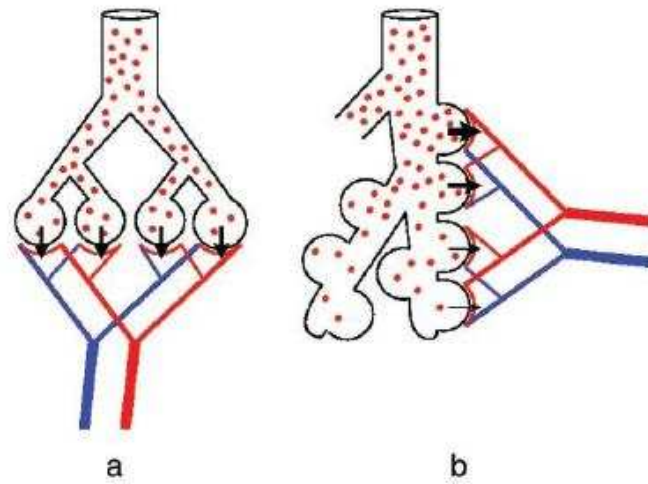


Figura 53: Esquema da relação entre ventilação e perfusão no ácino. A ventilação acontece em série, enquanto a perfusão ocorre em paralelo [33].

nomeado como “gas mixing problem”. Não há técnicas experimentais que permitam a medida da pressão parcial do oxigênio na escala alveolar. A Fig. 54 ilustra um esquema com valores habitualmente relatados na literatura para as pressões parciais dos gases respiratórios em diferentes fases da respiração durante o repouso.

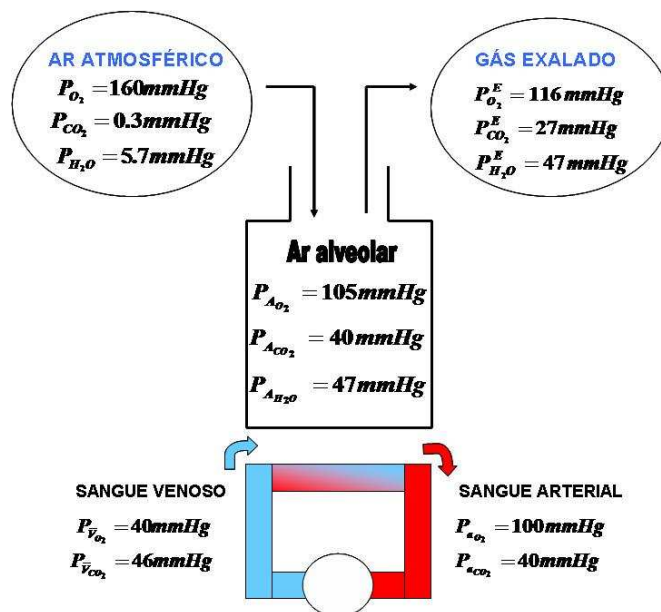


Figura 54: Valores das pressões parciais dos gases respiratórios durante um ciclo respiratório [63].

A mistura incompleta de gases nos pulmões é observada por meio de experiências de “single breath washout” (lavagem por respiração única) onde faz-se um paciente inspirar

um gás traçador insolúvel, estudando, em seguida, a composição da mistura gasosa na boca deste paciente durante a expiração. Com efeito, a concentração do gás expirado é uma combinação das concentrações presentes nas diferentes regiões dos pulmões. Normalmente, considera-se que a concentração na expiração varia se diferentes regiões possuem diferentes concentrações e, ao além disso, se os fluxos provenientes de tais regiões possuem atrasos relativos (de maneira que a mistura não possa se efetuar durante o retorno do ar nos brônquios). Quando medimos a concentração fracionária do gás traçador durante a expiração, observamos diferentes fases no repouso, durante o teste. Na primeira fase, medimos uma concentração igual à concentração no gás inspirado: o primeiro gás a ser exalado é aquele que preenche as zonas mais altas da árvore respiratória onde não há gás residual. Na segunda fase, a concentração do gás traçador diminui rapidamente: é o gás que provém da zona onde há uma quantidade cada vez maior de gás residual. Enfim, na terceira fase observa-se um platô com uma fraca inclinação crescente. Como trata-se de um gás que provém da zona respiratória, esta inclinação é interpretada como a prova de uma mistura ineficaz de gases na região alveolar.

Diversos modelos matemáticos foram desenvolvidos com o objetivo de explicar a evolução do platô na fase *III* das experiências de lavagem [64, 65, 66, 67]. Diferentes mecanismos foram propostos como sendo responsáveis pela mistura incompleta: a dilatação não uniforme das vias aéreas, os efeitos de convecção-difusão nas ramificações, a assimetria da árvore respiratória. Todavia, nenhum modelo até hoje foi capaz de reproduzir fielmente a forma da curva de “washout”.

Além disso, tais experiências concentram-se na eficácia da mistura entre o ar inspirado e o ar residual mas se o interesse recair sobre a distribuição de gases respiratórios (e não sobre gases “neutros”, ou seja, gases que não são absorvidos), deve-se levar em conta o fato que o ar residual não possui, necessariamente, uma composição uniforme devido aos gradientes de concentração. Este fenômeno é, geralmente, negligenciado na literatura e raramente é estudado quantitativamente. A palavra *estratificação*, que é, algumas vezes utilizada neste assunto, indica que a não-homogeneidade deve-se ao fato que o oxigênio não possui tempo suficiente para se difundir até as regiões finais do pulmão durante um ciclo respiratório.

5.5 Capacidade difusiva pulmonar

Para descrever globalmente o comportamento do pulmão como uma região de trocas gasosas, consideramos a equação de Bohr,

$$\dot{V}_{O_2} = D_{L_{O_2}} (P_{A_{O_2}} - \bar{P}_{b_{O_2}}). \quad (5.12)$$

De acordo com esta equação, o fluxo total de oxigênio absorvido no sangue, $\dot{V}_{O_2}$, é proporcional à diferença entre a pressão parcial do oxigênio no ar alveolar, $P_{A_{O_2}}$, e a pressão parcial média nos capilares, $\bar{P}_{b_{O_2}}$. O fator de proporcionalidade, que determina a qualidade do sistema em efetuar as trocas gasosas, é denominado *capacidade difusiva pulmonar* $D_{L_{O_2}}$. O inverso desta quantidade representa, assim, a resistência global do pulmão à difusão do oxigênio.

Esta descrição anterior é bastante simplificada, visto que o pulmão é tratado como uma única unidade de troca gasosa, contrariamente ao que descrevemos anteriormente, onde até mesmo o ácino não é estritamente uma estrutura única. De acordo com a equação de Bohr, há um valor uniforme e bem definido para a pressão parcial alveolar. Mas, como veremos a seguir, este não é o caso. Contudo, a Eq. 5.12 permite-nos estudar, em primeira aproximação, as características do sistema face às trocas gasosas. E. R. Weibel propôs um modelo para calcular o valor da capacidade difusiva pulmonar a partir de propriedades morfológicas do pulmão [35, 36]. Este modelo é descrito na subseção seguinte.

5.5.1 O modelo morfométrico de Weibel

O percurso do oxigênio, do ar ao sangue, é dividido em três etapas:

1. a passagem através da barreira tecidual que separa o ar do sangue capilar;
2. a passagem no plasma sangüíneo que envolve os eritrócitos (glóbulos vermelhos);
3. a captura pela hemoglobina nos glóbulos vermelhos.

Cada umas destas três etapas admite uma resistência específica à passagem de oxigênio. Weibel definiu três condutâncias: a condutância D_t do tecido (etapa 1), a condutância D_p do plasma (etapa 2) e a condutância D_e dos eritrócitos (etapa 3) ⁴. Como

⁴As condutâncias pulmonares são indicadas pela letra D segundo a notação corrente; para evitar mal entendido com os coeficientes de difusão, também indicados pela letra D segundo a notação habitual em física, utilizamos o caracter itálico para as condutâncias pulmonares.

as três etapas acontecem em série, a condutância total é dada pela seguinte expressão:

$$\frac{1}{D_{LO_2}} = \frac{1}{D_t} + \frac{1}{D_p} \frac{1}{D_e}. \quad (5.13)$$

5.5.1.1 O tecido

A condutância relativa à barreira ar/sangue é proporcional a sua área S e inversamente proporcional a sua espessura τ :

$$D_t \propto \frac{S}{\tau}. \quad (5.14)$$

A constante de proporcionalidade é dada pelo coeficiente de Krogh K_t , igual ao produto do coeficiente de difusão pela solubilidade do oxigênio no tecido membranar. Com efeito, a barreira ar/sangue pode ser considerada como um líquido composto essencialmente de água e, para atravessá-la, o oxigênio deve passar, primeiramente, em solução e, em seguida, sofrer difusão em direção ao sangue. O valor de K_t é dado por:

$$K_t = D_{O_2, H_2O} \cdot \sigma_{O_2, H_2O}, \quad (5.15)$$

onde σ_{O_2, H_2O} é a solubilidade do oxigênio na água e D_{O_2, H_2O} é o coeficiente de difusão do oxigênio. Para obter D_t , é necessário conhecer a área total da membrana alveolar e sua espessura. Estas duas quantidades morfológicas são extremamente difíceis de serem medidas devido à irregularidade da estrutura.

Para calcular a área S , deve-se considerar que a superfície alveolar S_a e a superfície capilar S_c não se recobrem perfeitamente ($S_c/S_a \approx 0.8/0.9$) e só é possível haver passagem de oxigênio do ar para o sangue onde há correspondência entre S_c e S_a . Weibel propôs como valor de área de cobertura a média entre as duas superfícies,

$$S = \frac{S_a + S_c}{2}. \quad (5.16)$$

A dificuldade principal desta estimativa de τ deve-se ao fato que a espessura da membrana é variável em toda sua extensão. A estimativa deste valor é efetuada medindo-se um conjunto de seções aleatórias da membrana. No modelo de Weibel, τ é calculada através da média harmônica τ_{ht} destes valores⁵. A razão pela qual a média harmônica é escolhida é a seguinte: se associarmos uma resistência local $R_{loc} \sim \tau_{loc}$ a uma porção de membrana de espessura τ_{loc} , as diferentes porções agem como um conjunto de resistências em paralelo,

⁵Multiplicado por um fator de correção igual a 2/3 ligado ao método de medida [68].

opostas à passagem de oxigênio. A resistência total R_{tot} é, portanto, dada por,

$$R_{tot} = \left(\sum \frac{1}{R_{loc}} \right)^{-1}. \quad (5.17)$$

Se estivermos interessados em um valor médio $\bar{\tau}$ de espessura tal que $R_{tot} \sim \bar{\tau}$, obtemos, assim,

$$\bar{\tau} = \left(\sum \frac{1}{\tau_{loc}} \right)^{-1} \equiv \tau_{ht}. \quad (5.18)$$

5.5.1.2 O plasma

A condutância D_p relativa à camada de plasma é calculada de maneira análoga àquela do tecido, visto que temos os mesmos processos agindo: passagem de oxigênio de um meio para outro (ar/tecido por D_t , tecido/plasma por D_p) e difusão no segundo meio para a zona de mais baixa concentração. Assim:

$$D_p = \frac{K_p S}{\tau}, \quad (5.19)$$

onde K_p é o coeficiente de Krogh para o plasma, S , a superfície de separação plasma/eritrócitos e τ é a espessura da camada de plasma. Dado que o plasma é constituído principalmente de água, temos que $K_p \simeq K_t$.

Os eritrócitos, que possuem uma forma de disco, possuem dimensões lineares comparáveis ao diâmetro dos capilares ⁶ e estão dispostos um ao lado do outro envolvendo o plasma. A superfície S corresponde à superfície “acessível” às moléculas de oxigênio. Visto que a superfície “lateral” dos eritrócitos é encoberta pelos seus vizinhos, S pode ser considerado igual à S_c .

A espessura da camada de plasma é muito variável e o mesmo raciocínio seguido para calcular a espessura do tecido membranar se aplica a este caso. Assim, consideremos a média harmônica τ_{hp} dos valores medidos experimentalmente. A soma das condutâncias do tecido e do plasma é dita *condutância membranar* D_M . Como $K_p \simeq K_t$ e $S_a \simeq S_c$, podemos determinar D_M por,

$$D_M = \frac{K_t S_c}{\tau}, \quad (5.20)$$

com $\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_{ht}} + \frac{1}{\tau_{hp}}$.

É interessante definir o *coeficiente de permeabilidade* W_M da membrana como o fluxo de oxigênio que a atravessa por unidade de superfície por uma diferença unitária de pressão

⁶Os glóbulos vermelhos possuem forma de disco bicôncavo de $7\mu m$ de diâmetro e espessura entre $2\mu m$ na borda e $1\mu m$ no centro

parcial dos dois lados. O coeficiente de permeabilidade é, então, ligado ao coeficiente de Krogh pela seguinte relação:

$$W_M = \frac{K_t}{\tau}. \quad (5.21)$$

5.5.1.3 Os eritrócitos

A condutância dos eritrócitos é mais difícil de ser estimada, pois ela não depende unicamente da difusão, mas também de propriedades químicas do sangue. Segundo o modelo de Weibel, D_e é aproximadamente dado por:

$$D_e = \theta_{O_2} \cdot V_c, \quad (5.22)$$

onde θ_{O_2} é a taxa de reação da hemoglobina com o oxigênio e V_c é o volume capilar.

A taxa de reação θ_{O_2} é uma quantidade que depende de muitos parâmetros, como a quantidade de hemoglobina no sangue e seu nível de saturação assim como o tamanho dos eritrócitos. Conseqüentemente, θ_{O_2} não é constante no sangue. Além disso, as medidas da velocidade de reação do oxigênio na presença de eritrócitos são efetuadas “in vitro” sobre sangue insaturado, enquanto nos capilares pulmonares o sangue é saturado além de 70%. Por todas estas razões, há uma grande divergência entre os valores apresentados na literatura.

Afim de obter uma estimativa de trabalho para θ_{O_2} , Weibel leva em consideração os dados experimentais mais recentes relativos ao sangue insaturado e efetua uma média entre este valor e o valor mínimo de θ_{O_2} correspondente ao nível de saturação do sangue venoso.

5.5.2 Capacidade difusiva funcional

A capacidade difusiva pode ser estimada por métodos fisiológicos através da medida do fluxo de gás absorvido e das diferenças de pressão parcial (por meio da equação de Bohr, Eq. 5.12). É interessante comparar o valor medido através deste método e o valor obtido a partir de dados morfométricos. As medidas fisiológicas encontradas na literatura são $30mL_{O_2}mmHg^{-1}min^{-1}$ no repouso e $100mL_{O_2}mmHg^{-1}min^{-1}$ no exercício.

O cálculo morfométrico avalia, em certa medida, a capacidade máxima do sistema visto que supomos que a totalidade das superfícies trabalha uniformemente. Na realidade, é bem conhecido que a superfície alveolar pode não ser completamente des-

dobrada e que diferenças entre ventilação e perfusão são possíveis [69]. É apropriado comparar o valor obtido por este modelo com o valor medido no exercício, onde o pulmão é explorado de maneira máxima. O valor obtido com o modelo de Weibel é de $D_{L_{O_2}} \approx 200 mL_{O_2} mmHg^{-1} min^{-1}$ ⁷. Vê-se, por conseguinte, que o modelo permite encontrar o valor com uma boa aproximação mas super-estima $D_{L_{O_2}}$ de um fator próximo de 2. Isto pode ser explicado pelas aproximações inerentes ao modelo. No entanto, é conhecido que os valores encontrados na literatura para as medidas fisiológicas não são necessariamente exatos, visto que os sistemas fisiológicos apresentam uma certa adaptabilidade a eventuais condições desfavoráveis, como por exemplo o ambiente do alto de uma montanha, o que pode acarretar em variações na capacidade difusiva funcional. Aliás, comparando a capacidade difusiva de dois mamíferos de dimensões semelhantes mas com exigências de oxigênio diferentes, como o cavalo e a vaca (o primeiro sendo bem mais “atletico”), vemos que $D_{L_{O_2}}$ é proporcional ao consumo de oxigênio. Experiências com diversos animais também mostraram que forçar um indivíduo a um maior consumo de oxigênio acarreta um aumento em sua capacidade difusiva pulmonar.

Um método para estudar, de maneira indireta, se a capacidade difusiva é efetivamente adaptada às necessidades de oxigênio é a *alometria* [70], que consiste em comparar as performances de animais com massas corporais diferentes. Vemos, assim, que nos mamíferos o consumo máximo de oxigênio cresce com a massa corporal segundo uma lei de potência $\dot{V}_{O_2}^{max} \sim M^b$ com expoente $b \simeq 0.9$, que implica que o consumo de oxigênio é maior em mamíferos de pequeno porte do que naqueles de grande porte. Conseqüentemente, os pulmões dos animais de pequeno porte parecem ser mais eficazes.

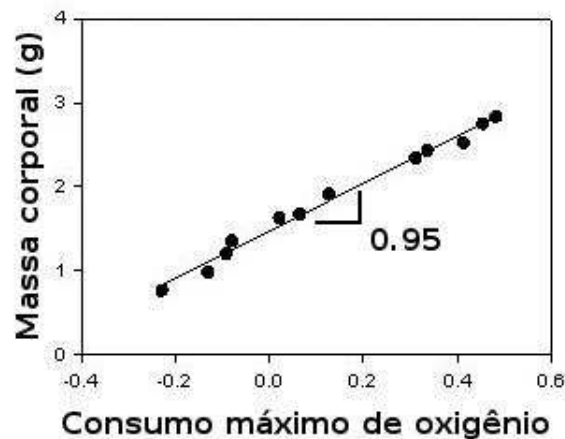


Figura 55: Comportamento do consumo máximo de oxigênio em função da massa corporal. [71].

⁷O valor varia segundo o valor de θ_{O_2} utilizado no cálculo

6 *Escoamento Viscoso em Estruturas Ramificadas*

O transporte de momento e massa através de estruturas ramificadas é um problema de extrema relevância em diversos domínios, com aplicações em sistemas físicos, geológicos, biológicos e químicos. Exemplos da importância deste assunto incluem catálise, escoamento através de meios porosos, circulação sanguínea e respiração. O estudo do processo de transporte nos sistemas anteriormente citados apresenta como um objetivo importante a compreensão dos mecanismos que governam a partição do fluxo ao nível das interconexões.

A abordagem usual para a descrição do escoamento através de estruturas ramificadas faz uso da clássica lei de Darcy. Tal relação corresponde a uma dependência linear entre o fluxo e a variação de pressão, $Q \propto \Delta P$, que é uma relação estritamente *válida para pequenos valores do número de Reynolds*. Não obstante esta limitação, um grande número de estudos foi realizado com base nesta aproximação. No contexto dos meios porosos, por exemplo, um simples paradigma para representar o escoamento através do espaço do poro consiste numa rede de canais bifurcados onde o transporte de fluido é análogo à distribuição de correntes elétricas em uma rede de resistores. Entretanto, tais modelos podem prever somente uma distribuição perfeitamente uniforme e sincrônica do fluxo através das bifurcações das vias aéreas [72]. Um importante problema a ser considerado quando se realiza a modelagem de fluidos através de estruturas ramificadas origina-se do fato que, devido aos efeitos inerciais, a lei de Darcy não pode ser utilizada como uma descrição fenomenológica para o escoamento a grandes número de Reynolds. Mesmo para valores moderados do número de Reynolds, as não-linearidades inerciais tornam-se relevantes quando comparadas aos efeitos viscosos. Evidências experimentais e numéricas de efeitos inerciais têm sido observadas em diversos estudos sobre escoamento através de

estruturas ramificadas, com ênfase especial na árvore respiratória [51, 52, 73, 74, 75, 76, 77, 78, 79, 80, 81, 82, 83, 27, 84]. Tais fenômenos são observados em pulmões reais, sendo mais simples estudá-los em geometrias simétricas [85, 86].

As velocidades do ar no interior dos pulmões são bastante diferentes, comparando a entrada da estrutura (alguns centímetros quadrados, considerando a secção da traquéia) com suas extremidades (uma centena de metros quadrados, considerando os 2^{17} ácinos). Desta forma, as velocidades variam desde magnitudes quase nulas ao nível dos ácinos, onde o transporte de oxigênio e do dióxido de carbono é efetuado por difusão, até alguns metros por segundo na entrada dos pulmões. A amplitude deste intervalo depende do regime respiratório: durante a prática de exercícios físicos, situação que não será estudada neste trabalho, entram em jogo os efeitos da turbulência devido aos elevados valores do número de Reynolds (até 13000) que aparecem na traquéia e nos primeiros brônquios. No repouso, a velocidade do ar na traquéia é da ordem de $1m/s$ e a partir da décima oitava geração, a velocidade global do ar pode ser desprezada frente à velocidade de difusão [35]. Nestas condições, o número de Reynolds (parâmetro adimensional que corresponde à relação entre as forças inerciais e viscosas do fluido) alcança valores da ordem de 1300 nos primeiros brônquios e efeitos inerciais consideráveis podem ser observados. Assim, ao investigar o processo de repartição do fluxo de ar nos ramos-filho, deve-se levar em conta a influência da inércia, que poderá acarretar o surgimento de direções preferenciais.

Para a melhor compreensão dos fenômenos em jogo, é mais simples trabalhar com geometrias simétricas [85, 86]. Na aproximação de Poiseuille, a única maneira de ter uma simetria perfeita é trabalhar com uma rede de resistores equivalentes, que é simétrica. Em outras palavras, em cada bifurcação, os ramos filhos devem ser exatamente idênticos com respeito ao seu arranjo geométrico. Esta aproximação não é válida se efeitos inerciais estão presentes. Lembremos que, como o pulmão é uma sucessão de ramos bifurcados, a distribuição final de fluxos pode ser representada por um processo multiplicativo. Conseqüentemente, mesmo uma pequena assimetria pode levar a uma grande não-homogeneidade na distribuição de fluxos [87]. Como o arranjo geométrico da árvore respiratória dos mamíferos está sempre sujeito a variações fisiológicas [88], é natural questionar se uma pequena modificação da estrutura perturba a distribuição de fluxos do escoamento.

Simulações computacionais no domínio da dinâmica dos fluidos, bem como de deposição de partículas no trato respiratório, são assuntos de grande interesse e um extenso número de pesquisadores têm se dedicado a estes temas. Ao passo que simulações de

dinâmica dos fluidos em estruturas tais como nasofaringe e orofaringe têm sido bem sucedidas [89, 90], a complexidade que envolve a árvore humana traqueobrônquica representa um desafio para a simulação do fluxo de ar nesta estrutura. Como consequência, grande parte dos trabalhos sobre escoamento de ar e deposição de partículas na árvore respiratória utiliza cálculos aproximativos para o transporte, tais como os modelos de Martonen *et al.* [91], e, mais recentemente, as teorias de Edwards *et al.* [92]. Simulações computacionais sobre fluidodinâmica na estrutura da árvore traqueobrônquica são limitadas ao estudo de estruturas com bifurcações simples. Martonen *et al.* [93] investigaram, realisticamente, o efeito fisiológico dos anéis cartilaginosos nas paredes dos tubos que compõem tais bifurcações. Balashazy *et al.* [94] simularam bifurcações simétricas e assimétricas, examinando o padrão de deposição local sob fluxos inspiratório e expiratório constantes. Balashazy *et al.* [95] propuseram, também, um “fator de amplificação da bifurcação” que indicaria a maior probabilidade de deposição na vizinhança de uma bifurcação sobre a parede da estrutura. Comer [27, 28] e Zhang [96, 97, 98] calcularam este fator de amplificação em modelos de dinâmica dos fluidos para o pulmão, embora estes trabalhos tenham sido limitados às gerações 3-6 do modelo de Weibel [1]. (A turbulência não está presente nas citadas gerações, visto que o número de Reynolds é reduzido nestes casos. Contudo, pode haver alguma turbulência devido às primeiras gerações.) Um trabalho recente realizado por Caro [99] mostrou que perfis da velocidade em gerações filhas após uma bifurcação são fortemente afetados pelo ângulo de rotação (o ângulo “azimutal”) entre as bifurcações consecutivas. Assim, simulações que desconsideram o ângulo azimutal apresentam limitações. Os trabalhos de Comer [27, 28] e Zhang [96, 97, 98], incluem primeiramente modelos de bifurcações coplanares, com simulações limitadas de bifurcações azimutalmente rotacionadas.

Os principais focos no campo da fluidodinâmica computacional aplicada a geometrias ramificadas são:

- Simulação da deposição de partículas através de métodos computacionais de dinâmica dos fluidos aplicados a toda a geometria do pulmão baseada no modelo de Weibel ou em modelos fisiológicos similares para o pulmão. Tais cálculos exploram uma correlação entre outras predições e medidas e as aproximações numéricas dos métodos computacionais. Tais cálculos também pretendem obter informações detalhadas sobre o padrão de deposição local (intrageracional), atualmente não disponível em modelos analíticos.
- Simulação de deposição de partículas através de métodos numéricos em geometrias

pulmonares realísticas. Comparações dos resultados da literatura com aqueles obtidos a partir de simulações numéricas (tais como o modelo de Weibel) podem determinar a adequação de tais geometrias simuladas para estudos detalhados de simulações pulmonares. Tais trabalhos também demonstram a possibilidade de execução de simulações associadas a pacientes, com probabilidade de otimização terapêutica àqueles acometidos por doenças e disfunções pulmonares, em estado avançado.

- Simulação de deposição de partículas em geometrias pulmonares extensivas e detalhadas (isto é, mais do que simples bifurcações) sob escoamento não-estacionário de ar, representando ciclos de inspiração-expiração.

O fluxo de ar em um modelo de pulmão teórico com quatro gerações é, então, estudado por meio de simulações numéricas. Os primeiros resultados, em regime estacionário, confirmam que a distribuição homogênea dos fluxos só acontece para uma geometria perfeitamente simétrica. No entanto, esta partição é extremamente sensível a variações: uma ligeira assimetria ocasiona um grande desequilíbrio, devido ao perfil de velocidades bem característico (peculiar) na segunda geração, a distribuição do tipo *M-shape* [100]. A redução do número de Reynolds leva, progressivamente, a uma homogeneidade no fluxo em toda a estrutura, de modo que um limite é determinado: para Reynolds inferiores a 100, os efeitos inerciais podem ser negligenciados. Assim, durante o processo respiratório no repouso, estes efeitos podem ser desprezados a partir da sexta geração. Graças a este valor-limite, as gerações seguintes podem ser estudadas analiticamente.

6.1 Geometria da Estrutura Ramificada

Esta seção é dedicada à discussão da morfologia e das propriedades estruturais das vias aéreas. Neste trabalho, as simulações computacionais foram realizadas a partir do *software* comercial *Fluent* [25]. Este código, como será detalhado a seguir, utiliza o método de discretização por diferenças finitas em um volume de controle para a solução numérica das equações da continuidade e de Navier-Stokes, aplicadas para um fluxo arbitrário com condições de contorno apropriadas. Associado ao *software* *Fluent* existe um pacote computacional, denominado *Gambit*, responsável pela geração da geometria, importação de dados que geram a geometria e pela criação de uma malha computacional, necessária para a discretização das equações diferenciais governantes que descrevem a física dos fenômenos de transporte a serem estudados. De acordo com dados encontrados na literatura, para que obtenhamos resultados satisfatórios a partir das simulações

computacionais, faz-se necessário uma quantidade mínima de elementos variando entre 10.000 e 15.000 para cada porção tubular e uma bifurcação associada a ela. Simulações bem sucedidas de pulmões devem, portanto, requerer uma quantidade equivalente de elementos em cada um dos 10^7 ramos que compõem o pulmão. Estudos realizados neste âmbito estimam que a exigência de memória RAM para efetuar os cálculos numéricos e o armazenamento dos dados ultrapasse 200Gb. Portanto, devido às dificuldades computacionais, é conveniente simular porções limitadas da árvore respiratória, e em seguida, reconstruir, se este for o objetivo do trabalho, os padrões de deposição para todo o pulmão por meio da combinação de cada porção simulada.

Os pulmões não se ramificam sempre de maneira simétrica, principalmente nas primeiras gerações, devido ao ajuste necessário da árvore à geometria da caixa torácica e ao espaço destinado ao coração. Entretanto, compreender a complexidade de um fluxo no interior de uma estrutura assimétrica é extremamente difícil, visto que não se pode, *a priori*, precisar facilmente um padrão para o fluxo entre a entrada e a saída. Portanto, é interessante trabalhar, inicialmente com uma árvore que apresente propriedades de simetria e estudar seus efeitos sobre o fluxo. Mais precisamente, é necessário responder a questão: o fluxo apresenta a assinatura da simetria da geometria? Assim, a maioria dos modelos utilizados apresentam-se simétricos, de forma que os ramos de uma mesma geração são idênticos. A árvore possui um eixo de simetria correspondente ao eixo do cilindro da primeira geração. Certas propriedades dos pulmões são, no entanto, conservados: o tamanho dos brônquios é realista e as ramificações se fazem no mesmo plano do ramo-pai que lhes deu origem. Este tipo de geometria corresponde a um modelo de *pulmão* cujo papel é preencher de maneira homogênea volumes idênticos situados a cada uma de suas extremidades. O número de gerações deste modelo é limitado a quatro, o que, do ponto de vista da discretização, permite a utilização de uma malha computacional de tamanho médio constante em toda a geometria, conservando-se um número razoável de elementos, da ordem de 800000.

Com o intuito de construir um modelo tridimensional para as vias respiratórias a partir do modelo de Weibel [1] é necessário que dois ângulos sejam determinados: (1) os ângulos de ramificação para cada bifurcação e (2) o ângulo de rotação do plano da bifurcação que origina cada ramo filho, denominado *ângulo azimutal*.

A estrutura utilizada neste trabalho é composta por quatro gerações, cujas paredes são rígidas e lisas. Apesar da estrutura da árvore respiratória ser composta por anéis cartilagosos, acarretando o aparecimento de ondulações na superfície desta estrutura, o

efeito sobre o fluxo é desprezível, visto que as velocidades são extremamente reduzidas ao longo das paredes, o que é coerente com a condição de não-deslizamento. É interessante incluir mais de uma bifurcação nas simulações, pois, como mostrado por Caro [99], o pulmão não consiste apenas de ramos coplanares. Logo, o escoamento nas vias aéreas filhas possui um componente rotacional além da contribuição existente devido à bifurcação simples. Caro [99] investigou um ângulo azimutal de 90° , que é anatomicamente realístico, como também concluíram Hunter [101] e Sauret [102]. Com o intuito de representar este efeito nas simulações, utilizamos uma estrutura que contém mais de uma bifurcação, considerando o ângulo azimutal de 90° e, em seguida, verificando o efeito da variação deste parâmetro sobre a dinâmica de transporte de partículas.

Certas suposições foram necessárias, afim de se criar bifurcações lisas. Como o modelo de Weibel define apenas um diâmetro para cada geração das vias aéreas, seria natural supor que cada ramo filho de uma dada geração possui diâmetro uniforme. Entretanto, isto levaria a grandes descontinuidades nas bifurcações. Com o intuito de eliminar tais descontinuidades, supõem-se que a separação de cada ramo filho tenha início no ponto da bifurcação, como o tronco de um cone. O maior diâmetro do tronco do cone que une os tubos será determinado como sendo igual ao diâmetro do ramo pai e o menor diâmetro do tronco de cone é igual ao diâmetro do ramo filho. O comprimento do tronco de cone foi ajustado como sendo igual a um décimo do comprimento do ramo filho. Assim, cada bifurcação foi construída como sendo a união entre um ramo pai, dois ramos filhos e dois troncos de cone fazendo a conexão. A forma resultante é uma estrutura com um ângulo maior do que aquele esperado devido à união de dois cilindros. Ver Apêndice A. A Fig. 56 ilustra a estrutura ramificada utilizada neste trabalho, com quatro gerações (G_0 , G_1 , G_2 e G_3) tridimensionais, lisas e rígidas. Comer *et al.* [27] investigaram o efeito do arredondamento desta região de união entre os tubos (para bifurcações presentes entre a terceira e sexta gerações do pulmão) e concluíram que o fluxo de ar fora da vizinhança imediata da bifurcação não foi afetado pelo arredondamento. Conseqüentemente, neste trabalho realizamos arredondamentos nas bifurcações.

Após gerada a estrutura geométrica, uma malha computacional é construída, a fim de que as equações diferenciais que governam os fenômenos a serem estudados sejam resolvidas numericamente. Utilizamos uma malha computacional não-estruturada, com elementos quadrangulares e triangulares. Malhas estruturadas (malhas que possuem estruturas regulares) de elementos quadrangulares não são adequadas para modelagem de certas geometrias complexas. Malhas não-estruturadas (malhas onde não há imposição de nenhum padrão na distribuição dos pontos) possuem a vantagem da falta de restrições

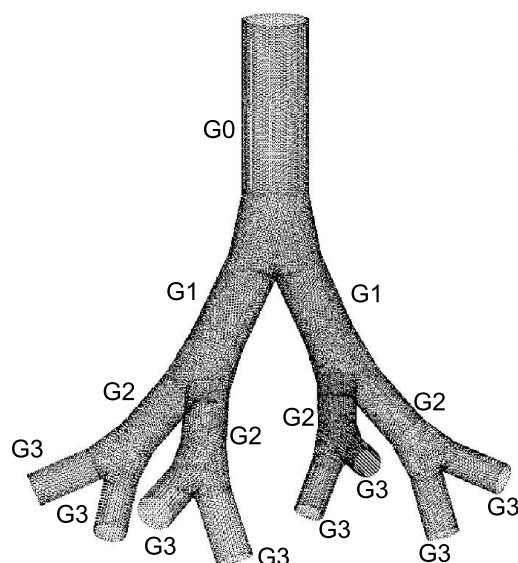


Figura 56: Geometria de uma estrutura ramificada com quatro gerações (G_1 , G_2 , G_3 e G_4) e diâmetro de entrada $D = 2\text{cm}$.

onde os pontos podem ser alocados. A possibilidade de refinamento das citadas malhas quando uma maior precisão nos resultados faz-se necessária é outra vantagem da utilização de malhas não-estruturadas. Além disso, a falta de restrições em malhas não-estruturadas permite, também, uma subdivisão das células locais onde o refinamento é efetuado, fato que não ocorre em malhas estruturadas, visto que a distância entre os pontos que formam a rede é regular. Portanto, para realizar um refinamento em uma malha estruturada é necessário diminuir a distância entre todos os pontos que constituem o domínio, incluindo áreas onde não há necessidade de refinamento, aumentando o número de nós e, conseqüentemente, o tempo computacional. Em contrapartida, malhas não-estruturadas têm problemas onde um alto grau de anisotropia se faz necessário, como nas camadas-limite. Este problema é contornado com a utilização de malhas estruturadas nestas regiões. Em termos computacionais, a ausência de estrutura implica em maior quantidade de dados armazenados, estruturas de dados mais complicadas e problemas adicionais para os algoritmos numéricos.

6.2 Escoamento Viscoso em Geometrias Ramificadas

Nosso interesse aqui é estudar o transporte de fluidos em superfícies lisas que apresentem ramificações, investigando a influência das bifurcações sobre o transporte de fluidos

em dutos irregulares.

A árvore respiratória é, como descrito, um conjunto de ramos que conectam o ácino ao meio externo. Tal estrutura apresenta uma resistência hidrodinâmica de forma que a respiração é o mecanismo responsável pela existência de um fluxo de ar. Aumentar o volume pulmonar significa criar uma diferença de pressão entre os ácinos e o ar externo. Logo, existirá um fluxo de ar do exterior em direção ao interior da árvore respiratória, alimentando os ácinos de ar rico em oxigênio. Em seguida, o pulmão se esvazia comprimindo seu volume, criando um aumento de pressão na estrutura em relação ao exterior e o gás pulmonar é, portanto, evacuado. Ao longo deste ciclo, o sangue e o gás alveolar realizam uma troca de oxigênio e dióxido de carbono. A respiração serve para regular as concentrações destas duas moléculas ou seja, aumentar a concentração de oxigênio e reduzir a concentração de dióxido de carbono. Como a estrutura pulmonar é arborescente, as velocidades de escoamento do ar são bastante diferentes entre a entrada, ao nível da traquéia, e os ácinos. Assim, no repouso, as velocidades na traquéia são da ordem de $1m/s$, ao passo que, na entrada do ácino este valor decresce para uma fração de centímetro por segundo. O processo de partição da velocidade é uma propriedade que será bastante útil no momento da modelização, havendo diferentes regimes de circulação do ar na árvore respiratória (regime com inércia de Navier-Stokes ou regime lento de Stokes).

O problema do escoamento, como mencionado anteriormente, é governado pelas equações da continuidade e de Navier-Stokes para um fluido incompressível

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (6.1)$$

$$-\nabla p = -\mu \nabla^2 \mathbf{u} + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}, \quad (6.2)$$

onde ρ é a densidade do fluido, $\mathbf{u}$ e p são os campos locais de velocidade e pressão, respectivamente e μ é a viscosidade do fluido. Esta descrição detalhada da mecânica de fluidos no interior do duto baseia-se nas suposições de que o escoamento é estacionário e o fluido é contínuo, Newtoniano e incompressível. A condição de não-deslizamento é empregada em toda interface fluido-sólido.

A solução numérica das equações 6.1 e 6.2 para os campos de velocidade e pressão na estrutura ramificada é obtida através da técnica de discretização por diferenças finitas em volume de controle. Esta técnica consiste na conversão das equações diferenciais parciais que governam o fenômeno em equações algébricas não-lineares, que podem ser resolvidas numericamente [25]. A vantagem de tal técnica e do processo de discretização é a substituição do problema de encontrar soluções exatas e contínuas por soluções discretas

no tempo e no espaço. A Fig. 57 ilustra a malha computacional construída para a aplicação da técnica citada anteriormente. Esta malha é constituída de elementos quadrangulares e triangulares utilizada no presente trabalho para discretizar a geometria ramificada. O espaçamento entre os pontos da malha é fixado em 0.001.

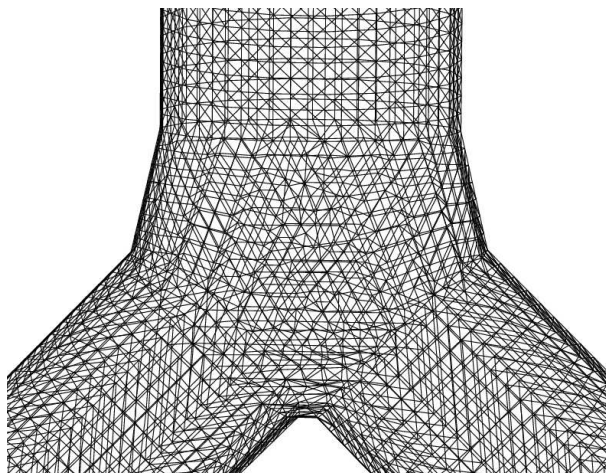


Figura 57: Secção da estrutura ramificada com diâmetro de entrada $D = 2cm$, mostrando a malha computacional utilizada na discretização das equações envolvidas no fenômeno do escoamento de um fluido.

6.3 Resultados e Discussão

Uma vez obtida a convergência da solução, a simulação do escoamento em uma geometria ramificada que possui paredes lisas revela o perfil parabólico do campo de velocidades do fluido para a primeira geração $G0$, como ilustra a Fig. 58. Em todas as simulações realizadas, este perfil parabólico é observado na geração $G3$ da árvore respiratória. As velocidades mais elevadas, situadas no centro do duto (regiões em vermelho na Fig. 58) são cerca de uma ordem de magnitude maiores que as velocidades encontradas próximas às paredes (regiões em azul claro na Fig. 58). Devido à condição de não-deslizamento na superfície da estrutura, a velocidade de escoamento do fluido é zero na parede, representada na Fig. 58 pela região em azul escuro.

Conforme resultados obtidos a partir de simulações computacionais, percebemos que as bifurcações, assim como as conexões entre os dutos, exercem importante influência sobre as propriedades do escoamento no interior da árvore respiratória. Perfis do campo de velocidades no interior destas estruturas estão ilustrados na Fig. 59. Observando

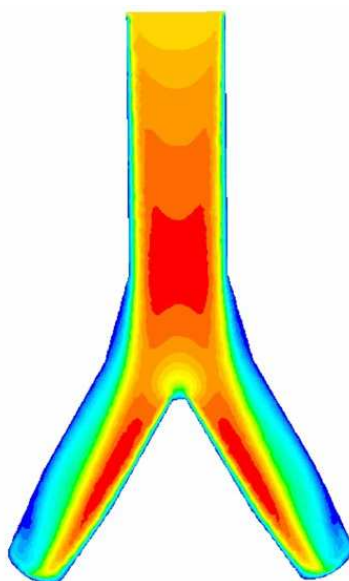


Figura 58: Perfil parabólico do campo de velocidade para $Re = 1300$, mostrado através de um corte longitudinal nas primeira e segunda gerações $G3$. As regiões em azul correspondem às mais baixas magnitudes da velocidade, enquanto as regiões em vermelho representam as maiores magnitudes de u .

a distribuição das velocidades em um corte transversal do ramo secundário da geração $G2$, notamos o aparecimento de uma assimetria no perfil de velocidades. Tal assimetria é decorrência da inércia, que provoca um deslocamento vertical das regiões de maiores magnitudes de velocidades, de modo que uma distribuição de velocidades do tipo *M-shape* é observada [81]. Como ilustra a Fig. 60, esta configuração governa a partição do fluido na segunda bifurcação. Notemos que, se o ramos que compõem a geração $G2$ (Fig. 60) fossem suficientemente longos, para pequenos Re , o perfil do campo de velocidades tenderia ao perfil parabólico. Como o comprimento do ramo é suficientemente pequeno, o ramo filho pode capturar a assimetria vista na Fig. 60. A posição da interseção relativa ao *M-shape* é, portanto, a chave para a assimetria. Como vemos na Fig. 60, o ramo da direita, claramente, recebe mais fluido do que o ramo à esquerda.

Os campos de pressão no interior de estruturas ramificadas, obtidos a partir de nossas simulações computacionais, estão ilustrados na Fig. 6.3. Observamos que o escoamento ocorre em direção às regiões de mais baixas pressões, representadas em azul na Fig. 6.3. As pressões intermediárias, representadas em verde na Fig. 6.3 na entrada do canal, são cerca de uma ordem de magnitude maiores que as pressões encontradas na saída do duto.

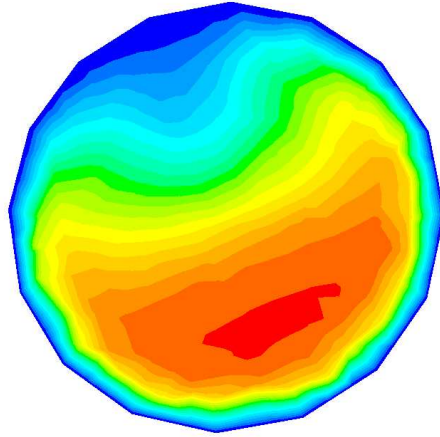


Figura 59: Corte transversal na geração $G2$ mostrando o perfil do campo de velocidades no interior de uma estrutura ramificada para $Re = 1300$. A magnitude da velocidade varia desde zero (regiões em azul escuro) até $1.35m/s$ (regiões em vermelho).

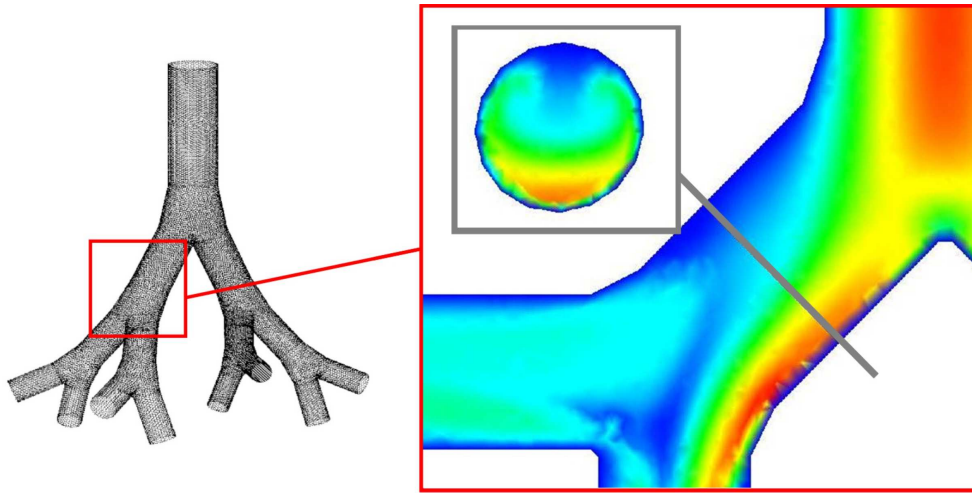


Figura 60: Contorno do M -shape para $L/D = 3$, onde L é o comprimento do duto e D , o diâmetro. As cores indicam a magnitude da velocidade de escoamento do fluido em uma secção transversal da ramificação B, na geração $G2$. As regiões em azul correspondem às mais baixas magnitudes da velocidade, enquanto as regiões em vermelho representam as maiores magnitudes de u .

O fator de assimetria do fluxo, $\Sigma(\alpha, L/D)$ é definido como

$$\Sigma(\alpha, L/D) = \left| \frac{q_1 - q_2}{q_1 + q_2} \right| \quad (6.3)$$

onde q_1 e q_2 são os fluxos de saída nos ramos (D,G) e (E,F) , respectivamente (Fig. 56). Nossas simulações foram realizadas para diversos valores do número de Reynolds e $L/D = 3$, sendo L e D , respectivamente, o comprimento e o diâmetro do primeiro ramo da estrutura, com o intuito de avaliar a influência destes parâmetros sobre a distribuição

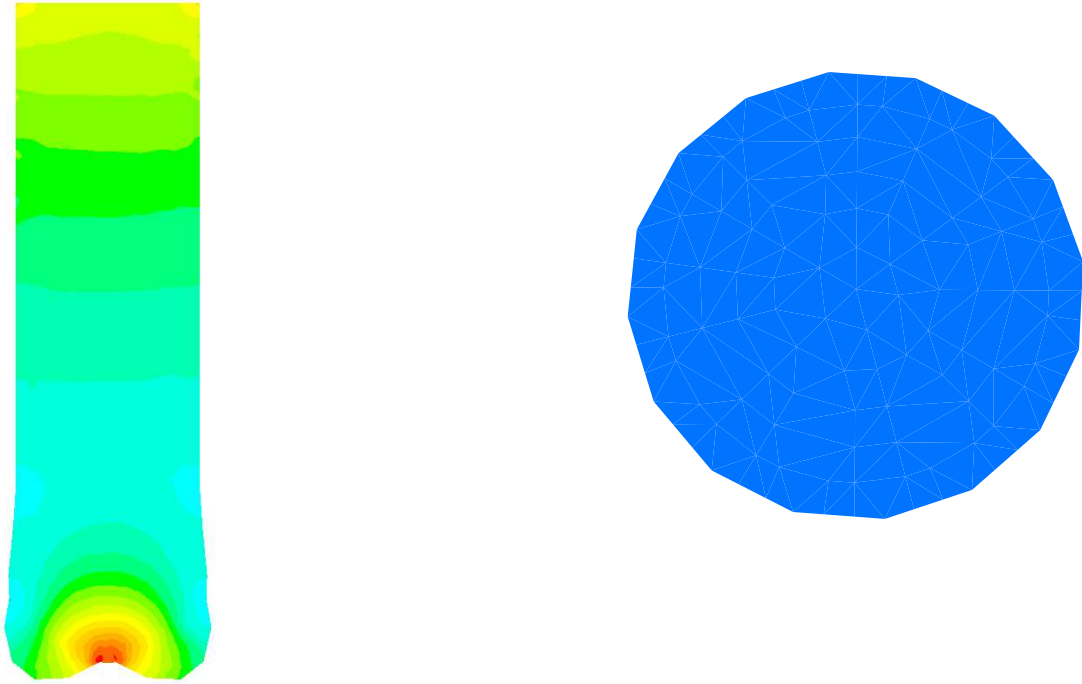


Figura 61: Campos de pressão no interior de uma estrutura ramificada. A magnitude da pressão varia desde $1.18Pa$ (regiões em vermelho), atingindo $6.71 \cdot 10^1 Pa$ (regiões em verde, na entrada do duto) até zero (regiões em azul escuro, nas saídas da estrutura).

do fluxo. Notemos que a velocidade do ar na entrada das vias aéreas humanas varia entre $1m/s$, que corresponde a $Re \approx 1300$ e $10m/s$, correspondendo a $Re \approx 13000$ [35]. Devido ao grande número de parâmetros que governam o escoamento e ao elevado tempo computacional despendido para a obtenção do fator de assimetria do fluxo em função de cada conjunto de parâmetros, nos restringimos à análise da dependência de $\Sigma(\alpha, L/D)$ como função do número de Reynolds, mostrada na Fig. 62. Observamos um forte crescimento de $\Sigma(\alpha, L/D)$ em função de Re , até $Re \approx 250$, seguido por uma região de saturação. Este tipo de comportamento foi descrito previamente para escoamento em estruturas bidimensionais compostas por mais de duas gerações [51, 52, 81]. A assimetria final da distribuição de fluxo é um resultado dos efeitos inerciais originados na primeira bifurcação. Os argumentos acima citados estão ilustrados na Fig. 63, onde observamos os perfis de velocidade na entrada da segunda bifurcação, para diferentes valores do número de Reynolds. Para altos valores de Re , notamos a formação do perfil *M-shape*, ao passo que, à medida que os valores de Re tornam-se mais baixos, o perfil aproxima-se daquele encontrado em escoamento parabólico.

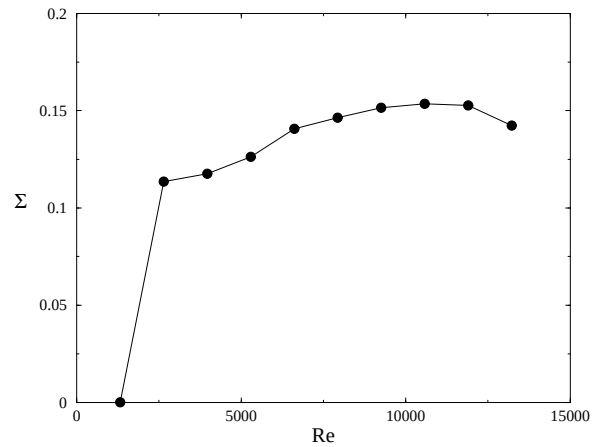


Figura 62: Dependência do fator de assimetria do fluxo em função do número de Reynolds, para $L/D = 3$.

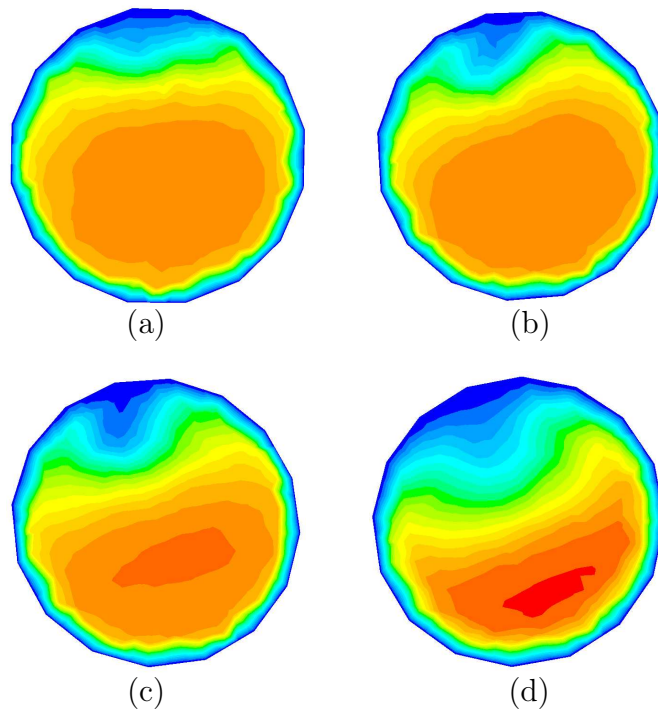


Figura 63: Secção transversal na segunda bifurcação mostrando os perfis do campo de velocidade para diferentes valores do número de Reynolds, para $L/D = 3$. (a) $Re = 165$, (b) $Re = 330$, (c) $Re = 661$ e (d) $Re = 1322$. O crescimento de Re acarreta uma mudança gradual do perfil parabólico para *M-shape*. As menores magnitudes da velocidade estão representadas em azul escuro e os maiores valores da velocidade estão representados em vermelho.

7 *Transporte de Partículas em Estruturas Ramificadas*

Por dia, um homem adulto pode inalar cerca de 100 milhões de partículas durante o processo respiratório, desde substâncias particuladas tóxicas até drogas de aerosol. A deposição destas partículas no trato respiratório pode ter caráter prejudicial ou terapêutico para o organismo humano e isto depende essencialmente do tipo de material particulado, dos locais de deposição e das concentrações locais destas partículas no sistema respiratório. Estes aspectos e parâmetros são determinados, principalmente, através do estudo dos campos de velocidade do fluxo de ar, das propriedades das partículas, dos padrões de respiração e das características geométricas das vias respiratórias.

De um ponto de vista microdosimétrico, padrões de deposição não-uniformes de partículas de aerosol inaladas no interior das vias aéreas humanas exercem importante papel na avaliação dos riscos à saúde, devido à inalação de partículas. De fato, diversos experimentos e simulações computacionais acerca da deposição de partículas mostraram que este processo é intensificado nas zonas de bifurcação das vias aéreas, particularmente na *carina*, relativa a segmentos tubulares adjacentes das vias aéreas [103, 104, 105]. A ocorrência de reações de saúde adversas devido à inalação de partículas pode estar relacionada a doses de deposição, de maneira que o conhecimento da distribuição da deposição de partículas pode permitir a realização de análises mais realistas dos riscos a saúde.

Ademais, a constrição ou mesmo o bloqueio das vias aéreas devido a doenças que afetam o sistema respiratório podem resultar em assimetrias significativas na partição do escoamento ao nível das bifurcações. Conseqüentemente, os níveis dos padrões de deposição local de partículas em casos de doenças que afetam o sistema respiratório são diferentes daqueles para pulmões saudáveis, e isto pode acarretar importantes implicações para terapias envolvendo aerosóis e avaliação dos riscos à saúde.

Um grande número de métodos analíticos e numéricos, além de estudos experimentais, têm sido utilizados para caracterizar o movimento de partículas de aerosol em tubos lisos e curvos. Entretanto, apesar da grande importância deste assunto, não há um modelo apropriado para descrever o comportamento de partículas em estruturas ramificadas. Tradicionalmente, as trajetórias das partículas e frações de deposição são simuladas e analisadas para bifurcações simétricas simples, duplas e triplas, [106, 107] usando o modelo geométrico de Weibel [1]. Mais recentemente, Ertbruggen *et al.* [108] simularam o transporte de micropartículas usando o modelo simplificado de Horsfield *et al* [41], considerando condições estacionárias e uniformes de escoamento.

Medidas experimentais de deposição de partículas têm sido realizadas por Johnston *et al.* para bifurcações simples. Baseados no modelo de Weibel, Kim *et al.* [109] também estudaram a deposição de partículas em uma réplica em vidro das vias aéreas ramificadas. Zhou *et al.* mediram a deposição de partículas de partículas em um molde de um pulmão humano com nove bifurcações, mostrando experimentalmente que a presença de anéis cartilagosos afeta a deposição local de micropartículas.

O modelo de Weibel [1] admite simetria com respeito aos ângulos de ramificação e aos diâmetros das vias aéreas filhas. Análises estatísticas de dados morfométricos do sistema respiratório humano [110] revelaram, contudo, características assimétricas distintas dos padrões de ramificação das vias aéreas [111]. Tal assimetria no diâmetro das vias aéreas, ângulo de ramificação, ângulo azimutal e bipartição do escoamento pode afetar significativamente a distribuição local de deposição de partículas no interior das bifurcações das vias aéreas. Ertbruggen *et al.* [108] simularam o transporte de micropartículas em um modelo simplificado de vias aéreas fora do plano considerando o escoamento estacionário e condições uniformes na entrada da estrutura.

Estudos realizados por Kim *et al* [112, 113] apresentaram dados experimentais onde o efeito da assimetria foi examinado para condições de escoamento durante a inspiração e expiração. Balásházy *et al* [114] utilizaram técnicas analíticas para modelar deposição de partículas durante a inspiração em geometrias bifurcadas, as quais possuíam assimetria tanto no diâmetro como no ângulo de ramificação. A solução analítica da equação para o transporte de partícula exige, contudo, que a geometria ramificada e o escoamento sejam fortemente simplificados e que o efeito do movimento Browniano seja negligenciado.

Baseados em estudos anteriormente realizados, sabemos que: (1) os fluxos de deposição local de partículas de aerosol em árvores traqueobronquiais com bifurcações simétricas são calculados a partir da suposição de impacto inercial e mecanismos de

difusão e deposição [115]. Contudo, no trabalho de Gradon *et al* [115] os efeitos gravitacionais são desprezados. Além disso, as suposições acerca dos mecanismos de impacto não são suficientemente exatas para partículas com dimensões da ordem de submicrômetros; (2) modelos bidimensionais são detalhados em [116, 117, 118]; (3) um modelo numérico para deposição de partículas em tubos bifurcados foi delineado em [119]; (4) em [120], um modelo bidimensional computa somente o escoamento de ar, desconsiderando as trajetórias das partículas; (5) o modelo em [121] considera tubos de secção transversal retangular, e impacto e gravidade são considerados somente durante a computação do movimento das partículas.

No presente capítulo, o principal objetivo é promover um estudo acerca do transporte de partículas *com massa* conduzidas por um fluido no interior de uma estrutura ramificada tridimensional. O caráter intrinsecamente irregular na geometria destas estruturas adiciona um grau de complexidade ao problema, refletindo-se nas propriedades do escoamento bem como nas propriedades estatísticas dos campos de velocidade e pressão e, conseqüentemente, influenciando fortemente a natureza do transporte das citadas partículas. Portanto, compreender o comportamento deste sistema implica, entre outros aspectos, em entender o movimento das partículas sob a influência da geometria desordenada.

7.1 Transporte de Partículas

Esta seção é dedicada ao estudo do processo de transporte de partículas com massa sujeitas à ação de um fluido escoando em uma estrutura ramificada. A solução numérica das equações de Navier-Stokes para a determinação dos campos de velocidade e pressão do fluido no interior destes dutos já foi abordada no capítulo anterior.

Consideraremos a força de arraste como a única força que determina o movimento da partícula, visto que não há nenhuma interação entre as partículas e que a presença destas partículas não altera o escoamento. Logo, a equação que governa o movimento das partículas é dada por

$$m_P \frac{d^2 \vec{x}_P}{dt^2} = \frac{1}{8} \pi d_P^2 \rho C_D (\vec{u} - \vec{u}_P) |\vec{u} - \vec{u}_P| \quad (7.1)$$

onde m_P e $\vec{u}_P$ representam a massa e a velocidade de uma única partícula esférica de diâmetro d_P , $\vec{x}_P$ e C_P é o coeficiente de arraste, expresso através da equação empírica

$$C_D = a_1 + \frac{a_2}{Re_P} + \frac{a_3}{Re_P^2}, \quad (7.2)$$

onde os parâmetros a_i são constantes obtidas experimentalmente para partículas esféricas lisas sobre diversas escalas do número de Reynolds [29], como mostrado na Tabela 5.

Tabela 5: Coeficiente de arraste para diversos intervalos do número de Reynolds [29].

C_D	Re
$24/Re$	< 0.1
$22.73/Re + 0.0903/Re^2 + 3.69$	$0.1 < Re < 1.0$
$29.1667/Re - 3.8889/Re^2 + 1.222$	$1.0 < Re < 10.0$
$46.5/Re - 116.67/Re^2 + 0.6167$	$10.0 < Re < 100.0$
$98.33/Re - 2778/Re^2 + 0.3644$	$100.0 < Re < 1000.0$
$148.62/Re - 4.75 \cdot 10^4/Re^2 + 0.357$	$1000.0 < Re < 5000.0$
$-490.546/Re + 57.87 \cdot 10^4/Re^2 + 0.46$	$5000.0 < Re < 10000.0$
$-1662.5/Re + 5.4167 \cdot 10^6/Re^2 + 0.5191$	$10000.0 < Re < 50000.0$

Para compreendermos melhor o fenômeno, consideremos a condição-limite de escoamento no regime de Stokes ($0 < Re_P \leq 1.0$), onde o coeficiente de arraste expresso pela Eq. 7.2 reduz-se à

$$C_D = \frac{24}{Re_P}. \quad (7.3)$$

Logo, a Eq. 7.1 para o movimento das partículas pode ser reescrita na forma

$$\frac{du_P}{dt} = \frac{18\mu}{d_P^2 \rho_P} (u - u_P). \quad (7.4)$$

Podemos, então, representar as velocidades da partícula e do fluido em termos de grandezas adimensionais, de modo que

$$u_P^* = \frac{u_P}{U}, \quad (7.5)$$

$$u^* = \frac{u}{U}. \quad (7.6)$$

Analogamente, o tempo de trânsito da partícula escrito em termos de adimensionais é dado por

$$t^* = \frac{t}{h/U}, \quad (7.7)$$

onde h é a largura da entrada do duto. Desta maneira, a Eq. 7.4 pode ser reescrita em termos dos parâmetros adimensionais definidos anteriormente,

$$\frac{du_P^*}{dt^*} = \frac{18\mu h}{\rho_P d_P^2 U} (u^* - u_P^*). \quad (7.8)$$

O número de Stokes é definido, portanto, como a razão entre o tempo de resposta da partícula à ação do fluido (t_R) e o tempo de escoamento (t_E),

$$St = \frac{t_R}{t_E} = \frac{\rho_P d_P^2 u}{18h\mu}. \quad (7.9)$$

Aqui, o parâmetro St é especificado através do ajuste entre a densidade da partícula para um dado diâmetro da mesma e os parâmetros relativos ao fluido, previamente definidos durante o estudo do escoamento.

Para a entrada do tubo, um perfil uniforme para a velocidade de escoamento é especificado. O lançamento das partículas é feito a partir de uma superfície na entrada do duto. Em outras palavras, as partículas são uniformemente distribuídas na entrada na primeira geração (G_0), com velocidade de lançamento inicial ajustada à velocidade de escoamento do fluido.

As equações de transporte para as partículas são resolvidas a partir do mesmo *software* utilizado para solucionar o escoamento na estrutura ramificada, como discutido no capítulo anterior. A solução consiste, basicamente, em prever a trajetória de uma partícula, integrando-se a sua equação de movimento, como expresso na Eq. 7.1. Após cada iteração para cada partícula, as informações sobre a posição e a velocidade, bem como o tempo de trânsito no interior da estrutura ramificada são computadas.

No presente trabalho, são realizadas simulações para diferentes magnitudes de velocidade de lançamento das partículas, equivalente à variação da velocidade de escoamento entre $1m/s$ (correspondente à situação de um indivíduo em repouso, com $Re \approx 1300$) e $10m/s$ (correspondente à situação de um indivíduo em intensa atividade física, com $Re \approx 13000$). Em cada realização, 10000 partículas são lançadas no interior da estrutura ramificada. Parâmetros como número de Reynolds (Re) e Stokes (St) são variados para que o comportamento das partículas no interior da estrutura seja observado. Vale mencionar que as partículas não interagem entre si, apenas com o fluido, através do arraste, e com a superfície da estrutura, através da captura. O fluxo de partículas, assim como seus diâmetros são suficientemente pequenos de modo a não perturbar o escoamento.

7.2 Resultados e Discussão

Para uma melhor compreensão da influência do número de Stokes sobre o processo de

captura de partículas, realizamos simulações com diferentes números de Reynolds do fluido. A partir dos resultados apresentados na Fig. 64, observa-se que, qualitativamente, a distribuição de partículas capturadas permanece praticamente inalterável com a variação de Re , exceto pelo fato de que a porcentagem de partículas capturadas torna-se sistematicamente maior com o aumento do número de Reynolds. Para valores intermediários do número de Stokes, a diferença entre a porcentagem de partículas capturadas para baixos e elevados valores do número de Reynolds pode chegar a 20%. Com o propósito de compreender este comportamento, retomamos a definição do número de Stokes. Como mencionado anteriormente, o número de Stokes é definido como a razão entre o tempo de resposta da partícula à ação do escoamento e o tempo próprio de escoamento. Em outras palavras, partículas com baixos números Stokes ($t_R \ll t_E$) adaptam-se quase instantaneamente ao escoamento, comportando-se como traçadoras, independentemente do número de Reynolds do fluido. Nesta situação, as trajetórias das partículas são praticamente coincidentes com as linhas de corrente do escoamento. Portanto, nesta circunstância, a captura de partículas pelas paredes da estrutura é mínima, como ilustra a região *I* da Fig. 64. Em contrapartida, o aumento do número de Stokes acarreta uma redução substancial da porcentagem de partículas que conseguem sair da estrutura. Este fenômeno pode ser explicado pelo fato de que, nesta situação, o tempo de resposta da partícula à ação do escoamento é extremamente elevado ($t_R \gg t_E$), de forma que o processo de adaptação da citada partícula ao escoamento é extremamente lento. Nesta situação, o transporte de partículas é controlado pelos efeitos inerciais do sistema. Mais precisamente, as partículas podem mover-se entre as linhas de corrente e alcançar as paredes da estrutura, sendo, então, capturadas, independente do número de Reynolds do fluido. Praticamente todas as partículas com St elevado permanecem dentro da estrutura ao final da simulação, como ilustra a região *III* da Fig. 64. Para partículas com número de Stokes intermediário, a região *II* na Fig. 64, o tempo de resposta desta partícula à ação do fluido possui a mesma ordem de magnitude do tempo de escoamento. Neste caso, o transporte de partículas é controlado pela competição localizada entre a interação partícula-fluido, através do arraste, e pela interação partícula-estrutura, através da captura. Desta maneira, as partículas são mais sensíveis à assimetria do fluxo e, para valores elevados do número de Reynolds, a inércia do fluido torna-se um parâmetro preponderante sobre o comportamento das partículas.

A distribuição de partículas capturadas contra o número de Stokes permanece igualmente invariante, mesmo quando uma assimetria é introduzida no sistema. Para isto, variamos o ângulo azimutal, definido como o ângulo de rotação do plano dos ramos-filhos

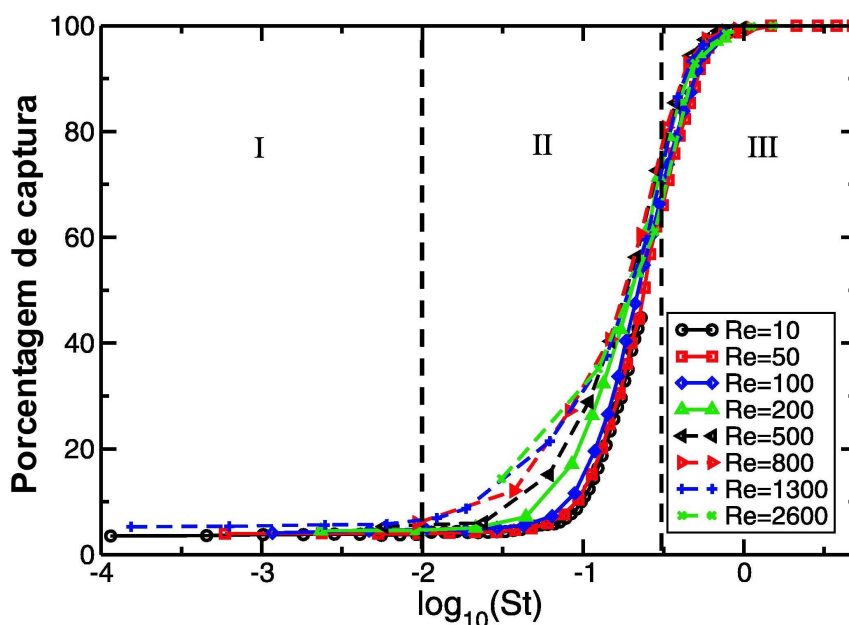


Figura 64: Porcentagem de partículas capturadas em função do número de Stokes da partícula.

em relação ao ramo-pai. A Fig. 65 mostra esta invariância e é possível ver que a distribuição de partículas não depende da assimetria da estrutura, mas depende da resposta da partícula à ação do escoamento. Em outras palavras, a distribuição de partículas depende somente do número de Stokes da partícula em uma geração específica da estrutura ramificada. Então, podemos assegurar que o comportamento previamente descrito é válido mesmo para estruturas que apresentam assimetria originada pela rotação do plano dos ramos-filhos.

Com o objetivo de realizar uma análise mais profunda do comportamento descrito acima, plotamos a derivada da função $F(\%)$, que representa a porcentagem de partículas que saem da estrutura, em relação ao diâmetro da partícula. As duas regiões de saturação (Fig. 64) correspondem às regiões de mínimo na Fig. 64. A região central na Fig. 66 corresponde à zona de transição que aparece na Fig. 64. Observa-se que este gráfico possui um máximo, que pode ser interpretado como um diâmetro crítico, para um diâmetro específico da partícula. Abaixo deste diâmetro crítico, as partículas comportam-se, de maneira geral, como traçadoras, sendo arrastadas pelo fluido, seguindo as linhas de corrente do escoamento e saindo da estrutura ramificada atravessando uma das oito possíveis saídas. Portanto, este diâmetro crítico é o limite acima do qual as partículas que são lançadas no interior da geometria são capturadas pelas paredes da estrutura ramificada, sem conseguir atingir uma das oito possíveis saídas.

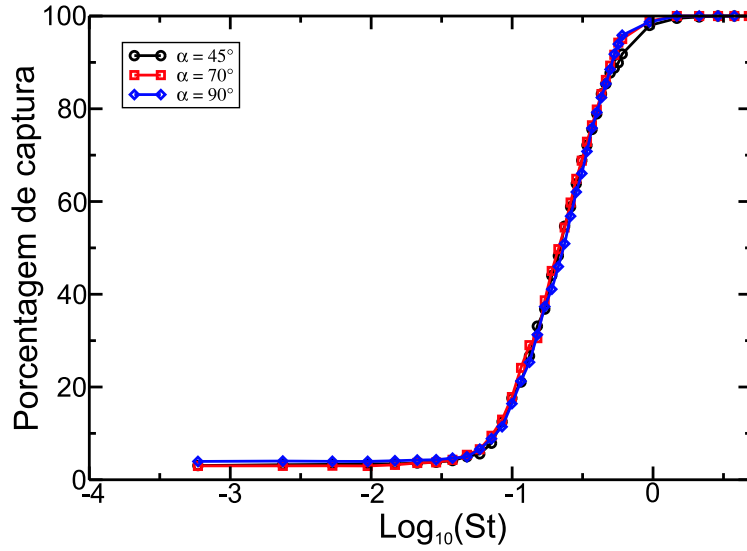


Figura 65: Porcentagem de partículas capturadas em função do número de Stokes das partículas para diferentes ângulos azimutais, para $Re = 50$.

A Fig. 67 ilustra o comportamento do diâmetro crítico como uma função do número de Reynolds. É fácil ver que o diâmetro crítico é fortemente dependente do número de Reynolds do fluido. Para valores elevados de Re , observa-se um considerável decaimento em d_C . Este comportamento pode ser explicado pelo fato de que, para baixos valores do número de Reynolds, o transporte de partículas é governado pelos efeitos viscosos do sistema e até mesmo partículas com grandes diâmetros comportam-se como traçadoras, seguindo as linhas de corrente do escoamento. O aumento do número de Reynolds origina um forte decréscimo no diâmetro crítico e tal fato acontece porque, neste momento, o transporte de partículas é controlado pelos efeitos inerciais. Neste caso, as partículas possuem energia suficiente para cruzar as linhas de corrente e alcançar as paredes da estrutura ramificada, sendo, então, aprisionadas.

Observando a Fig. 66, define-se Δd como a largura média do gráfico $dF(\%)/dd_P$, onde $F(\%)$ é uma função que representa a porcentagem de partículas que saem da estrutura e d_P , o diâmetro da partícula. Na Fig. 68, mostramos a variação de Δd em função do diâmetro crítico.

Um aspecto interessante a ser levado em conta neste estudo é o caráter multiplicativo da probabilidade de uma partícula atravessar uma estrutura ramificada específica. Inicialmente, construímos uma estrutura ramificada com apenas uma bifurcação e fator de homotesia $h = 0.79$. Por definição, em uma árvore respiratória, h representa a redução sistemática dos comprimentos e diâmetros a cada geração que compõe a árvore. Em

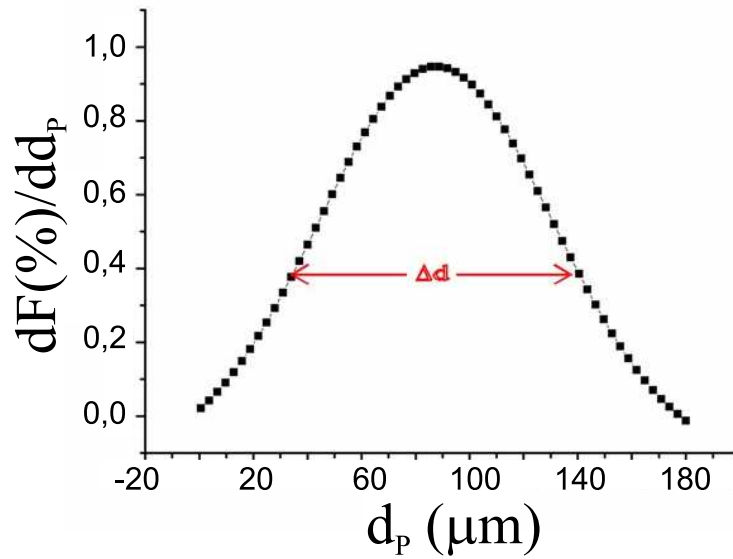


Figura 66: Variação de $dF(\%)/dd_p$, onde a função $F(\%)$ representa a porcentagem de partículas que saem da estrutura, em relação ao diâmetro da partícula. Neste caso, $Re = 200$ e $\alpha = 90^\circ$.

uma árvore ideal, os sucessivos segmentos das vias aéreas são homotéticas com uma razão igual a $(1/2)^{1/3} \cong 0.7937$. O próximo passo foi computar a probabilidade de uma partícula atravessar completamente esta estrutura composta por uma bifurcação. Comparando o resultado mencionado acima com a curva previamente obtida para a probabilidade de uma partícula atravessar uma estrutura composta de três bifurcações com $h = 0.79$, observa-se que a probabilidade de uma partícula ser capturada pelas paredes da estrutura, ao final de três bifurcações, é dada por

$$P_3 = 1 - (1 - P_1)^3, \quad (7.10)$$

como mostrado na Fig. 69. Na Eq. 7.10, P_1 representa a probabilidade de captura de uma partícula no interior de uma estrutura com apenas uma bifurcação. Em outras palavras, no caso de uma árvore fractal com fator de homotesia $h = 0.79$, o número de Stokes permanece aproximadamente constante ao longo da árvore. Desta forma, a probabilidade de uma partícula atravessar uma estrutura com N bifurcações, para um dado número de Stokes, é simplesmente a probabilidade desta partícula atravessar a primeira bifurcação à potência N , onde N representa o número de bifurcações. Além disso, podemos afirmar que existe uma célula unitária, representada por uma estrutura com apenas uma bifurcação, capaz de representar o comportamento de toda a árvore com N bifurcações. Conseqüentemente, a natureza complexa do transporte de partículas no interior de estruturas ramificadas com N bifurcações pode ser significativamente reduzida, já que seria

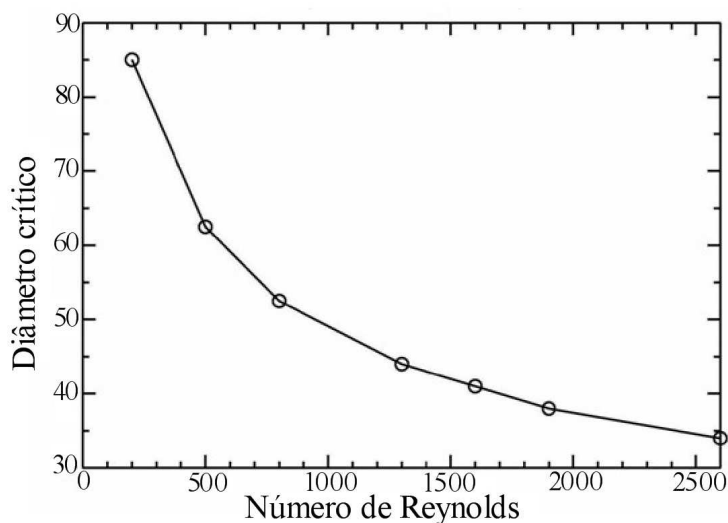


Figura 67: Diâmetro crítico em função do número de Reynolds para uma estrutura ramificada com quatro gerações e $\alpha = 90^\circ$.

possível investigar as propriedades do transporte de partículas através de uma estrutura com apenas uma bifurcação e, assim, estender os resultados obtidos para uma estrutura mais complexa com N bifurcações. Além disso, a partir da Fig. 69, podemos notar que o transporte de partículas através de estruturas ramificadas é um processo Markoviano, visto que a distribuição de probabilidades de um estado futuro do processo, dado o estado presente em todos os estados passados, depende somente do estado presente e não dos estados passados, i.e. é um processo condicionalmente independente os estados passados (o caminho do processo) dado o estado presente.

Do mesmo modo, investigamos a natureza complexa da distribuição de partículas com respeito ao número de Stokes para estruturas com diferentes valores do fator de homotesia, h . Assim, com o intuito de compreender a fundo o comportamento da captura de partículas no interior de uma estrutura ramificada, estudamos o transporte de partículas através de uma estrutura cujos fatores de homotesia variam a cada geração. Desta forma, construímos uma estrutura com quatro gerações e três valores distintos para o fator de homotesia, $h_1 = 0.79$, $h_2 = 0.9$ e $h_3 = 0.6$, como ilustra a Fig. 70.

É fácil inferir que variações no fator de homotesia acarretam modificações não-uniformes no número de Stokes para partículas ao longo de uma estrutura ramificada, diferentemente do que ocorre na árvore ideal, onde o fator de homotesia ($h = 0.79$) permanece constante através da estrutura. Por definição, o número de Stokes depende da razão u/D , onde u representa a velocidade do fluido na entrada da estrutura e D representa o diâmetro do primeiro tubo. Portanto, variações no fator de homotesia levam a modifi-

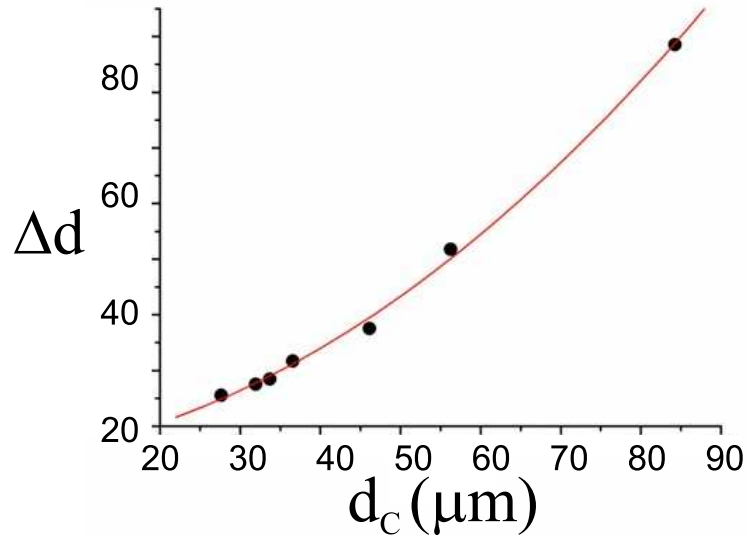


Figura 68: Variação de Δd em função do diâmetro crítico da partícula, para uma estrutura ramificada com quatro gerações e ângulo azimutal $\alpha = 90^\circ$.

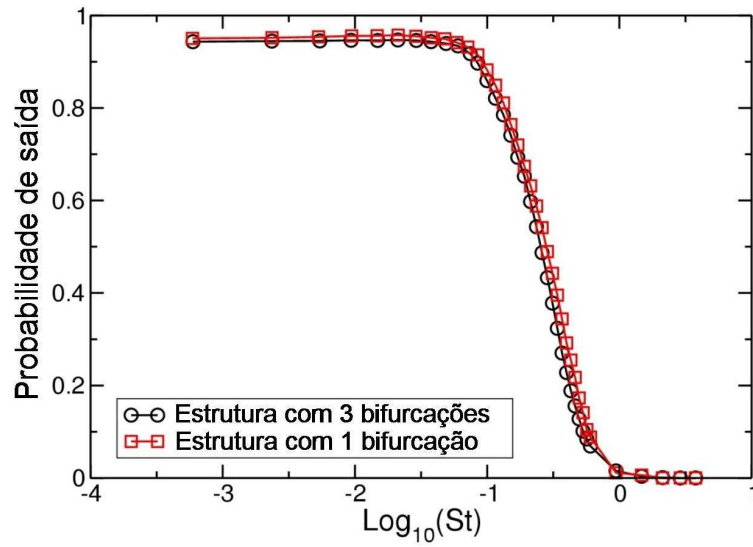


Figura 69: Probabilidade de atravessar uma estrutura com três bifurcações e fator de homotesia $h = 0.79$ com $Re = 50$.

cações no diâmetro dos tubos que compõem a estrutura e, conseqüentemente, os campos de velocidade no interior destes tubos são, também, modificados. Usando argumentos de conservação do fluido, temos que

$$d_n^2 \cdot u_n = 2(d_{n+1})^2 \cdot u_{n+1}, \quad (7.11)$$

onde d_n e u_n representam, respectivamente, o diâmetro e a velocidade de escoamento ao longo da n -ésima geração. Os parâmetros d_{n+1} e u_{n+1} representam, por sua vez, o

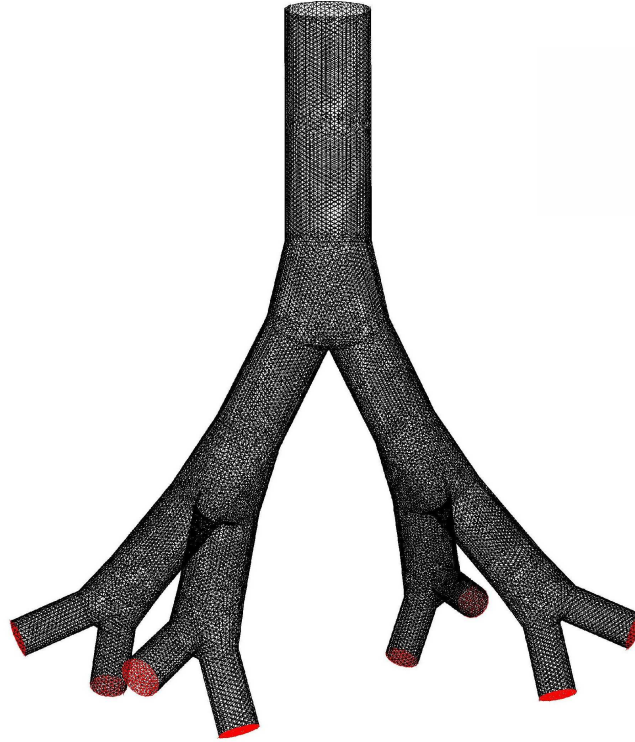


Figura 70: Geometria de uma estrutura ramificada com quatro gerações e diferentes valores para o fator de homotesia.

diâmetro e a velocidade de escoamento ao longo da geração $(n + 1)$, respectivamente. De acordo com a definição do fator de homotesia, h , o diâmetro da geração $(n + 1)$ é dado por

$$d_{n+1} = d_n \cdot h. \quad (7.12)$$

Logo, temos que:

$$d_n^2 \cdot u_n = 2d_n^2 h^2 u_{n+1}, \quad (7.13)$$

de modo que a velocidade de escoamento do fluido na geração $(n + 1)$ é dada por:

$$u_{n+1} = \frac{u_n}{2h^2}. \quad (7.14)$$

Desta maneira, o número de Stokes para a n -ésima geração será dado por:

$$St_{n+1} = \frac{\rho_P d_P^2 u_{n+1}}{18\mu d_{n+1}} \quad (7.15)$$

$$St_{n+1} = \frac{\rho_P d_P^2 u_n}{18\mu d_n} \cdot \frac{1}{2h^3}. \quad (7.16)$$

Logo, podemos expressar St_{n+1} em função de St_n ,

$$St_{n+1} = St_n \left(\frac{1}{2h^3} \right), \quad (7.17)$$

onde St_n é o número de Stokes para partículas que transitam através da geração anterior, n . Assim, ao final da estrutura com quatro gerações, o número de Stokes pode ser expresso como

$$St = St_i \left(\frac{1}{2h_1^3}\right) \left(\frac{1}{2h_2^3}\right) \left(\frac{1}{2h_3^3}\right), \quad (7.18)$$

onde St_i representa o número de Stokes para uma partícula na entrada da estrutura ramificada. A Fig. 71 indica que o comportamento do processo de captura de partículas é independente do fator de homotesia da estrutura. Em outras palavras, a porcentagem de partículas que saem da estrutura permanece inalterada, mesmo quando estas partículas transitam através de uma estrutura cujo fator de homotesia varia de maneira não regular. As curvas da Fig. 71 não estão superpostas devido à correção no número de Stokes, que deve ser feita para partículas que atravessam a estrutura que possui h variável. Este resultado corrobora a idéia de que o número de Stokes da partícula é o parâmetro que governa a dinâmica do transporte de partículas através de estruturas ramificadas.

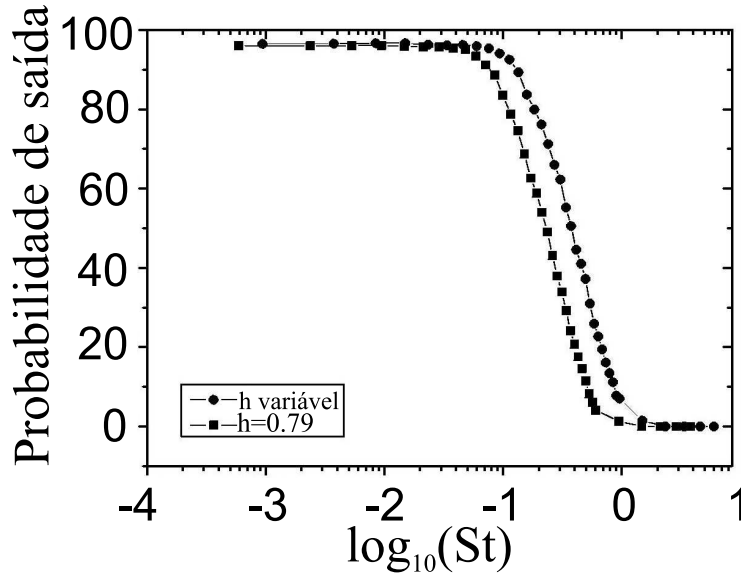


Figura 71: Porcentagem de partículas que saem da estrutura com quatro gerações em função do número de Stokes da partícula, para $Re = 50$.

Agora, consideremos três estruturas distintas, compostas de apenas uma bifurcação, onde cada uma destas estruturas possui um fator de homotesia distintos dos demais, definidos como $h_1 = 0.79$, $h_2 = 0.9$ e $h_3 = 0.6$. Estas três estruturas estão ilustradas na Fig. 72.

Assim, estudamos a dinâmica do transporte de partículas como função do número de Stokes para estas três diferentes geometrias. A Fig. 73 indica que, qualitativamente, a

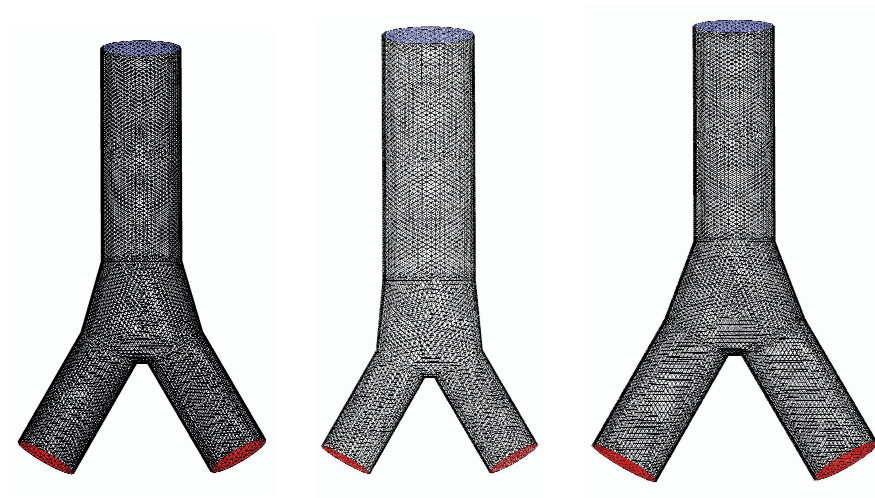


Figura 72: Geometria de uma estrutura ramificada com duas gerações. Da esquerda para a direita, o fator de homotesia assume os valores $h = 0.79$, $h = 0.6$ e $h = 0.9$.

probabilidade de atravessar uma estrutura para partículas lançadas em três geometrias distintas permanece praticamente inalterada com a variação do fator de homotesia, h , excetuando-se o fato de que a probabilidade de atravessar a estrutura torna-se sistematicamente maior com o aumento do fator de homotesia.

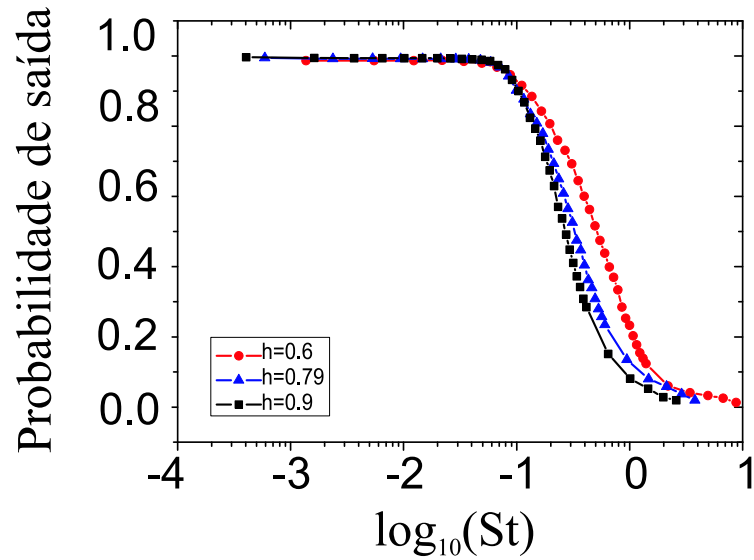


Figura 73: Porcentagem de partículas não-capturadas em função do número de Stokes da partícula, para $Re = 50$. Nesta situação, as partículas transitam no interior de três estruturas distintas, compostas por duas gerações e diferentes fatores de homotesia.

Além disso, confrontamos os resultados previamente obtidos para a probabilidade de atravessar uma estrutura composta por três bifurcações com diferentes fatores de homotesia a cada geração ($h_1 = 0.79$, $h_2 = 0.9$, $h_3 = 0.6$) e a probabilidade de atravessar três

estruturas compostas por uma bifurcação, cada uma com um valor diferente para o fator de homotesia. Estes valores para o fator de homotesia para as estruturas compostas por uma bifurcação assumem, propositalmente, os mesmos valores de h escolhidos para a estrutura composta por três bifurcações. Após estimar a probabilidade para uma partícula atravessar cada uma das três diferentes estruturas, observamos na Fig. 74 que a estrutura com três bifurcações pode ser interpretada como uma associação de três estruturas compostas de uma bifurcação que, por sua vez, pode ser interpretada como uma célula unitária neste processo iterativo, como mencionado anteriormente. Por conseguinte, este resultado nos leva a deduzir que a probabilidade de uma partícula atravessar uma estrutura com três bifurcações, cujos fatores de homotesia são h_1 , h_2 e h_3 é igual ao produto das probabilidades desta mesma partícula atravessar três diferentes estruturas compostas por apenas uma bifurcação, cujos valores do fator de homotesia são h_1 , h_2 e h_3 .

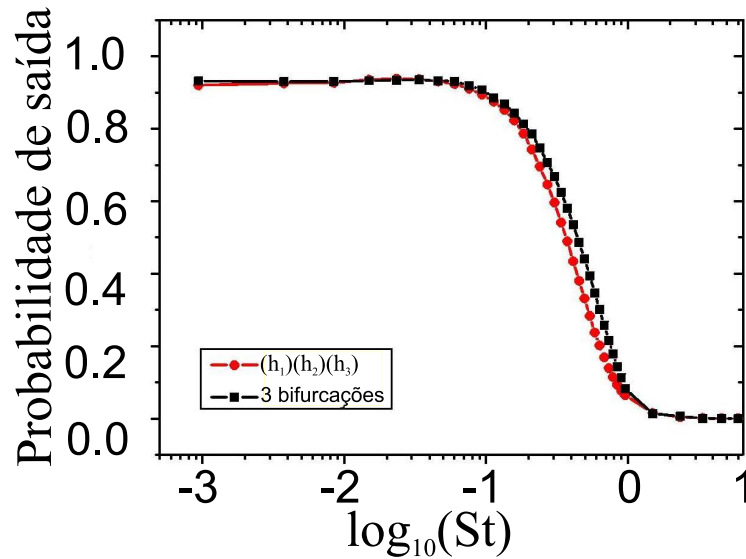


Figura 74: Probabilidade de uma partícula atravessar uma estrutura composta de três bifurcações com diferentes valores do fator de homotesia a cada geração e $Re = 50$.

Analogamente, traçamos a probabilidade de uma partícula atravessar uma estrutura ramificada em função do número de Stokes desta partícula, para diferentes valores do ângulo azimutal. Aqui, consideramos que a estrutura possui três bifurcações e diferentes valores para o fator de homotesia a cada geração. A Fig. 75 indica que a probabilidade de uma partícula atravessar uma estrutura ramificada é invariante com respeito à rotação entre os planos do ramo-pai e ramos-filhos. Isto significa que a assimetria rotacional não atua no processo do transporte de partículas. Este resultado ratifica uma importante propriedade do transporte de partículas no interior de geometrias bifurcadas, mencionado anteriormente: o número de Stokes é o parâmetro que governa a dinâmica do transporte

de partículas através de estruturas ramificadas.

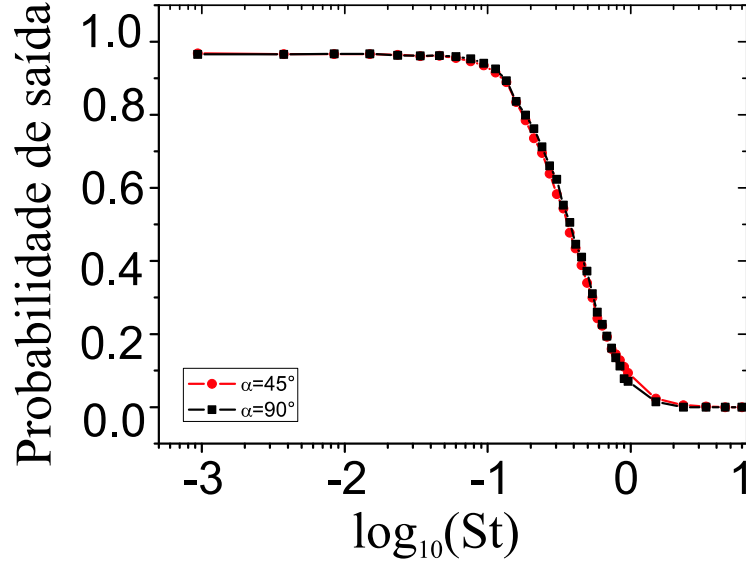


Figura 75: Comportamento da probabilidade de uma partícula atravessar uma estrutura composta de três bifurcações e diferentes valores do fator de homotesia a cada geração, com respeito à variação do ângulo azimutal e $Re = 50$.

Conforme afirmamos anteriormente, o número de Stokes é o parâmetro que governa a dinâmica do transporte de partículas através de estruturas ramificadas. Tal afirmação é feita baseada no estudo numérico deste processo de transporte. Tentaremos corroborar tal assertiva através de argumentos analíticos. Consideremos o escoamento de um fluido na metade superior de um plano. Os componentes da velocidade de escoamento do fluido são dados por

$$u_x = kx \quad (7.19)$$

e

$$u_y = -ky \quad (7.20)$$

Obviamente, este fluido obedece as equações da continuidade e de Navier-Stokes ($\Delta \vec{u} = 0$ e $\nabla \cdot \vec{u} = 0$). Este escoamento é uma aproximação de um escoamento no interior de uma estrutura bifurcada bidimensional, visto que as linhas de corrente têm início no ponto (x_0, y_0) e terminam no ponto $(+\infty, 0)$ ou $(-\infty, 0)$, de acordo com o sinal de x_0 . Nosso interesse é estudar o comportamento de uma partícula com massa m inicialmente em (x_0, y_0) para $t = 0$, de modo que a velocidade da partícula coincida com a velocidade de escoamento do fluido. Tal partícula obedece à lei de Newton:

$$m \vec{\gamma} = \vec{F} \quad (7.21)$$

onde $\vec{F}$ é a força de arraste, dada por $\vec{F} = -D(\vec{u}_P - \vec{u})$. Expressa em termos da posição da partícula, (x_P, y_P) , a equação se torna:

$$m\partial^2 tx_P = -D(\partial_t x_P - u_x) = -D(\partial_t x_P - kx_P) \quad (7.22)$$

e

$$m\partial^2 ty_P = -D(\partial_t y_P - u_y) = -D(\partial_t y_P - ky_P) \quad (7.23)$$

$$m\partial^2 tx_P + D(\partial_t x_P - Dkx_P) = 0 \quad (7.24)$$

e

$$m\partial^2 ty_P + D(\partial_t y_P + Dky_P) = 0 \quad (7.25)$$

Estas equações são matematicamente idênticas à equação de dois osciladores harmônicos amortecidos. Para impactar contra a superfície definida por $y = 0$, a partícula deve alcançar a condição $y_P = 0$ em um instante de tempo finito. Para isto, as raízes da segunda equação devem ser complexas, a fim de termos osciladores que cruzarão o eixo Ox . Isto implica que:

$$D^2 - 4Dkm < 0 \quad (7.26)$$

ou

$$m > \frac{D}{4k} \quad (7.27)$$

Definiremos $\lambda = \frac{D}{2m}$, $\mu = \lambda(\frac{4km}{D} + 1)^{1/2}$ e $\omega = \lambda(\frac{4km}{D} - 1)^{1/2}$. Assim, as raízes da equação característica da evolução de x_P são $(-\lambda \pm \mu)$, e para a evolução de y_P as raízes são $(-\lambda \pm i\omega)$. Assim, x_P e y_P assumem a seguinte forma:

$$x_P = e^{-\lambda t}[A_1 \cosh(\mu t) + A_2 \sinh(\mu t)] \quad (7.28)$$

e

$$y_P = e^{-\lambda t}[B_1 \cosh(\omega t) + B_2 \sinh(\omega t)]. \quad (7.29)$$

Em $t = 0$, a posição da partícula é (x_0, y_0) , o que leva a:

$$A_1 = x_0 \quad (7.30)$$

e

$$B_1 = y_0. \quad (7.31)$$

Lembrando que a velocidade da partícula coincide com a velocidade de escoamento do fluido, $(kx_0, -ky_0)$. Assim,

$$A_2 = \frac{\lambda + k}{\mu} x_0 \quad (7.32)$$

e

$$B_2 = \frac{\lambda - k}{\omega} y_0. \quad (7.33)$$

Inserindo as equações acima nas equações precedentes, obtemos, finalmente, a evolução temporal da posição da partícula, dada por:

$$x_P = x_0 e^{-\lambda t} [\cosh(\mu t) + (\frac{\lambda + k}{\mu}) \sinh(\mu t)] \quad (7.34)$$

e

$$y_P = y_0 e^{-\lambda t} [\cosh(\omega t) + (\frac{\lambda - k}{\omega}) \sinh(\omega t)]. \quad (7.35)$$

Iremos expressar as equações anteriores em termos do número de Stokes da partícula. Por definição,

$$St = \frac{\rho^2 d_P^2 U}{18 \mu d} = \frac{m}{6 \pi \mu r_P} \frac{U}{d} \quad (7.36)$$

onde μ representa a viscosidade do fluido e d é ao diâmetro do duto inicial. Limitando-se a região de interesse a um quadrado de lado d , a velocidade da partícula será, tipicamente, da ordem de kd . Além disso, o fator $6\pi\mu r_P$, que entra na equação de Stokes para a força de arraste será denominado de D em nossos cálculos. Assim, temos a seguinte relação para o número de Stokes:

$$St = \frac{mk}{D} \quad (7.37)$$

Como consequência, λ , μ e ω podem ser expressos como:

$$\lambda = k \frac{St}{2}, \quad (7.38)$$

$$\mu = k \frac{St}{2} (4St + 1)^{1/2} \quad (7.39)$$

e

$$\omega = k \frac{St}{2} (4St - 1)^{1/2} \quad (7.40)$$

Assim, as equações Eq. 7.34 e Eq. 7.35 são as equações de uma curva parametrizada onde o tempo t pode ser substituído pelo tempo rescalonado $T = kt$ sem alterar a forma da trajetória. Usando este tempo rescalonado, os únicos parâmetros deixados em sua forma original são as posições iniciais (x_0, y_0) e o número de Stokes da partícula. Além disso, a forma das trajetórias "adimensionais" x_P/x_0 e y_P/y_0 depende somente do número de Stokes. Em outras palavras, qualquer que seja a magnitude da velocidade de escoamento do fluido (caracterizada pelo parâmetro k), o tamanho das zonas de partida e de chegada são proporcionais, e os seus raios são completamente determinados pelo número de Stokes das partículas.

Mais precisamente, é possível computar o ponto de chegada das partículas. Inicialmente, computaremos o tempo de trânsito da partícula, τ . O tempo de trânsito é definido como o menor tempo para o qual $y_P(t)$. Assim:

$$\cos(\omega t) + \left(\frac{\lambda - k}{\omega}\right) \sin(\omega t) = 0 \quad (7.41)$$

ou

$$\tau = \frac{1}{\omega} \arctan\left(\frac{\omega}{k - \lambda}\right). \quad (7.42)$$

Isto implica que para $St < 1/4$, o tempo para alcançar o eixo Ox diverge, de forma que a partícula nunca atinge tal ponto. Quando $St > 1/4$, o que significa que a partícula possui inércia, o ponto de chegada x_L é dado por:

$$\frac{x_L}{x_0} = e^{-a} [\cosh((4St + 1)^{1/2}a) + \left(\frac{1 + \frac{2}{St}}{(4St + 1)^{1/2}}\right) \sinh((4St + 1)^{1/2}a)], \quad (7.43)$$

sendo

$$a = \lambda\tau = (4St - 1)^{1/2} \arctan\left(\frac{(4St - 1)^{1/2}}{\frac{2}{St} - 1}\right). \quad (7.44)$$

Analisando os resultados obtidos na seção precedente, podemos deduzir que uma árvore respiratória pode ser vista, aproximadamente, como uma sucessão de bifurcações. A cada bifurcação, a partícula será capturada ou atravessará toda a estrutura ramificada, segundo uma probabilidade determinada pelo seu número de Stokes. No modelo apresentado acima, partículas com número de Stokes menor do que $1/4$ não são capturadas. Para altos valores do número de Stokes, a probabilidade de captura da partícula é praticamente constante e relativamente elevada (entre $1/3$ e $1/2$). Desta maneira, há uma transição abrupta na probabilidade de captura de uma partícula na região $0.1 < St < 1$.

Em uma árvore, a probabilidade irá variar de uma bifurcação para a outra, visto que o número de Stokes depende não apenas da massa e do diâmetro da partícula, mas também do diâmetro do duto e da velocidade de escoamento do fluido, parâmetros que variam conforme a geração da árvore respiratória. O número de Stokes para a geração $n + 1$, conforme deduzido anteriormente, é dado por

$$St_{n+1} = St_n \frac{1}{2h^3}. \quad (7.45)$$

Portanto, no caso de uma árvore fractal cujo fator de homotesia é igual a $2^{-1/3}$, a probabilidade de uma partícula atravessar toda a estrutura ramificada para um dado número de Stokes é, simplesmente, a probabilidade desta partícula atravessar a primeira bifurcação à potência N , sendo N o número de bifurcações da estrutura.

Para uma árvore fractal cujo fator de homotesia é diferente de $2^{-1/3}$, o número de Stokes irá crescer ou decrescer geometricamente, e a probabilidade de uma partícula atravessar toda a estrutura ramificada será o produto das probabilidades para os sucessivos números de Stokes a cada geração. Estas probabilidades podem ser facilmente vistas a partir do colapso das curvas.

Considerando uma estrutura composta por quatro gerações como um modelo representativo das vias respiratórias superiores, observamos a Fig. 76, que representa a distribuição uniforme de partículas na entrada da estrutura ramificada. As partículas são representadas em suas posições iniciais e as diferentes cores representam suas localizações quando são capturadas pelas paredes da estrutura ou quando conseguem escapar da mesma.

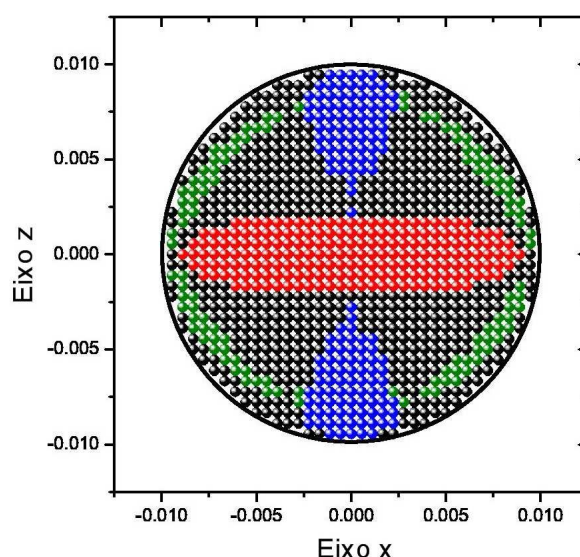


Figura 76: Distribuição de partículas na entrada da estrutura. As partículas representadas em vermelho são capturadas na primeira bifurcação enquanto as partículas representadas em azul são capturadas na segunda bifurcação. As partículas representadas em verde, por sua vez, ficam depositadas na terceira bifurcação. Finalmente, a cor preta representa as partículas que conseguiram escapar da estrutura.

Como podemos observar, as partículas que impactam na primeira bifurcação, representadas em vermelho na Fig. 76, possuem a origem das suas trajetórias ao longo do eixo x , i.e. ao longo do eixo alinhado com a primeira carina. Por outro lado, partículas capturadas na segunda bifurcação (representadas em azul na Fig. 76) iniciam suas trajetórias ao longo do eixo z , i.e., ao longo do eixo alinhado com as duas carinas secundárias. Além disso, partículas capturadas na terceira bifurcação, representadas em verde na Fig. 76, possuem suas posições iniciais ao longo do eixo x, z , i.e., ao longo do eixo alinhado com as quatro terceiras carinas. Finalmente, partículas que conseguem sair da estrutura são

representadas em preto na Fig. 76. Este resultado nos fornece uma idéia a respeito da relação entre as posições iniciais das partículas e as regiões de captura das mesmas através da estrutura ramificada. O passo seguinte é considerar uma secção transversal no ponto médio da segunda bifurcação. A distribuição de partículas nesta secção está ilustrada na Fig. 77. Podemos notar que as partículas capturadas na segunda bifurcação (representadas em vermelho na Fig. 77) possuem suas posições ao longo do eixo z , ou seja, ao longo do eixo alinhando com as duas carinas secundárias. Além disso, partículas capturadas na terceira bifurcação (representadas em azul na Fig. 77), estão localizadas ao longo do eixo x, z , isto é, ao longo do eixo alinhado com as quatro terceiras carinas. Partículas que saem da estrutura são representadas em preto na Fig. 77. Comparando as distribuições de partículas com a dinâmica de captura a partir de cortes feitos nas primeira e segunda bifurcações, observamos uma analogia significativa entre tais distribuições, denotando a existência de um perfil característico que se repete de uma geração à outra. Este comportamento pode indicar que, durante a exploração da árvore, a seção da entrada pode ser decomposta em "campos de partículas" que seriam capturadas em uma maneira sucessiva, indicando que estes campos poderiam ser interpretados como uma divisão fractal da seção da entrada da estrutura em estudo.

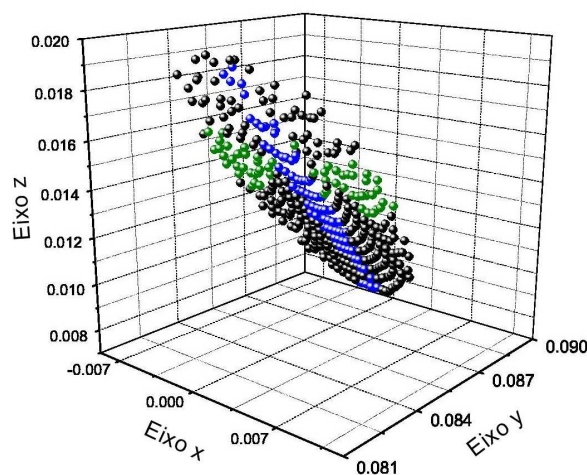


Figura 77: Distribuição de partículas em uma secção transversal na segunda bifurcação. As partículas representadas em azul são capturadas na segunda bifurcação, ao passo que a cor verde representa as partículas capturadas na terceira bifurcação. Por fim, as partículas representadas em preto conseguem escapar da estrutura ramificada.

Por fim, observamos que a estrutura ramificada estudada neste trabalho apresenta propriedades de filtragem de partículas. Este aspecto bastante peculiar do nosso estudo está representado na Fig. 78, que mostra um histograma da porcentagem de partículas

que saem por cada uma das oito possíveis saídas da estrutura. Neste caso, a estrutura ramificada é completamente simétrica, com ângulo azimutal igual a 90° . Além disso, admitimos que as partículas interagem com a superfície da estrutura ramificada através de colisões elásticas, de forma que a partícula não perde energia durante o choque. Esta condição foi imposta para que possamos garantir que todas as partículas escapam da estrutura ramificada. Observamos que partículas com diâmetro reduzido transitam no interior da estrutura ramificada de modo que as oito saídas da estrutura são igualmente visitadas. O aumento do diâmetro da partícula acarreta, gradualmente, o surgimento de caminhos preferenciais, de forma que, para valores elevados de d_p , apenas as quatro saídas mais centrais da estrutura (saídas 3, 4, 5 e 6 na Fig. 79) concentram aproximadamente 70% do total de partículas que atravessam a estrutura ramificada.

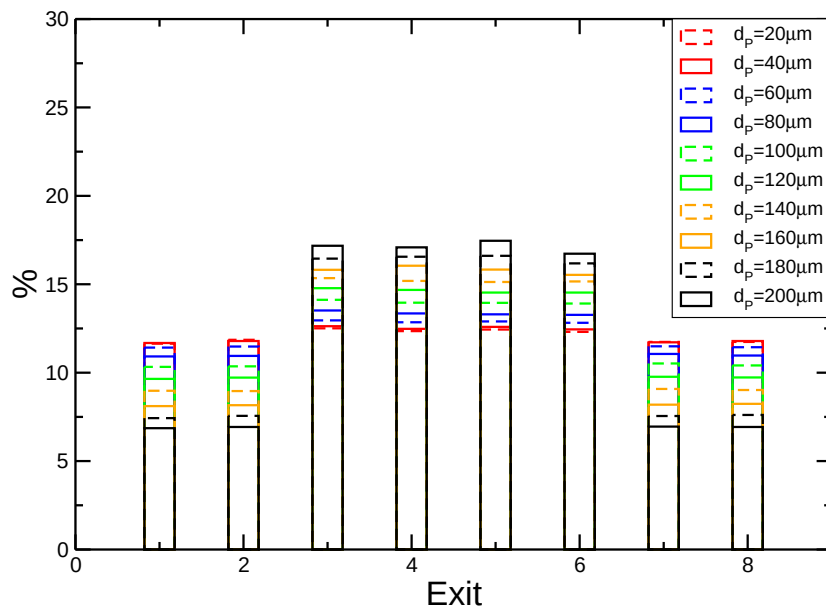


Figura 78: Histograma da porcentagem de partículas que saem por cada uma das oito possíveis saídas da estrutura, para $\alpha = 90^\circ$, $Re = 50$ e $\kappa = 1.0$.

A Fig. 80 ilustra o comportamento da distribuição de partículas que saem da estrutura como função do número de Stokes, para diferentes saídas da estrutura ramificada. Observamos, novamente, que não existe caminho preferencial para partículas com baixos números de Stokes. Com o aumento de St , observamos uma segregação cada vez maior das partículas, que optam realizar o trajeto dentro da estrutura ramificada atravessando as saídas mais centrais da estrutura. Nesta situação, o movimento das partículas é gov-

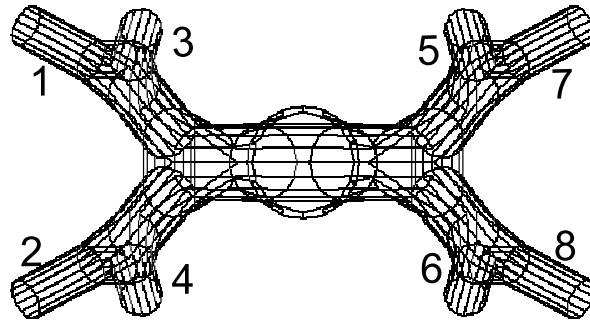


Figura 79: Geometria da estrutura ramificada com 4 gerações, $\alpha = 90^\circ$ e $h = 0.79$

ernado pela combinação de dois mecanismos distintos: a interação entre a partícula e a estrutura, através das colisões, e a interação entre a partícula e o fluido, através do arraste. Esta segregação de partículas parece atingir um máximo para um número de Stokes específico, ($St \sim 0.32$). Partículas com $St > 0.32$ tendem a percorrer a estrutura ramificada, visitando todas as possíveis saídas da estrutura e esta homogeneidade se torna cada vez mais intensa com o aumento do número de Stokes.

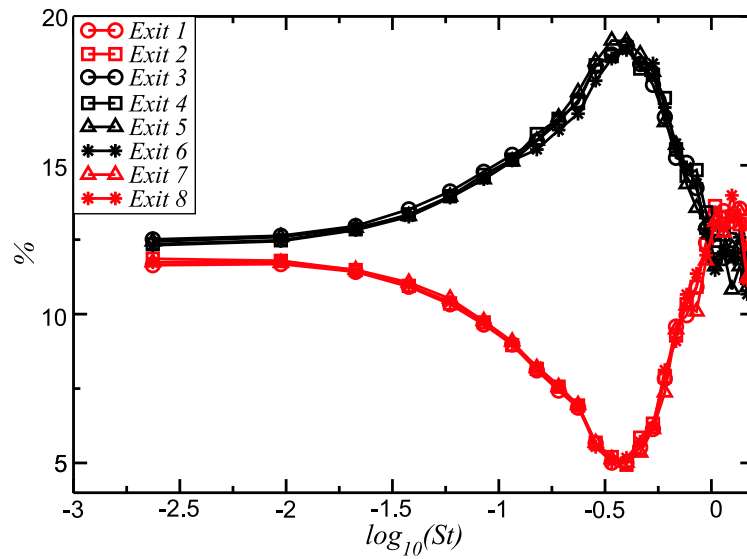


Figura 80: Distribuição de partículas que saem da estrutura ramificada em função do número de Stokes, para $\alpha = 90^\circ$, $Re = 50$ e $\kappa = 1.0$.

O comportamento anteriormente descrito é mais acentuado quando uma assimetria é introduzida no sistema. Para isto, o plano de bifurcação foi rotacionado, de uma geração à outra, de um ângulo de 45° . Em outras palavras, o ângulo azimutal vale 45° . Observando a Fig. 81, percebemos que, analogamente ao que foi dito anteriormente, a probabilidade de uma partícula com diâmetro reduzido sair por qualquer uma das oito saídas é praticamente

a mesma (cerca de 12% para cada saída). Em contrapartida, partículas maiores parecem “escolher” apenas duas dentre as oito saídas da estrutura. Quando $d_p = 200\mu m$, por exemplo, quase 50% das partículas que entram na estrutura finalizam suas trajetórias atravessando apenas as duas saídas mais centrais da estruturas, enquanto as outras 50% restantes se distribuem pelas outras seis possíveis saídas.

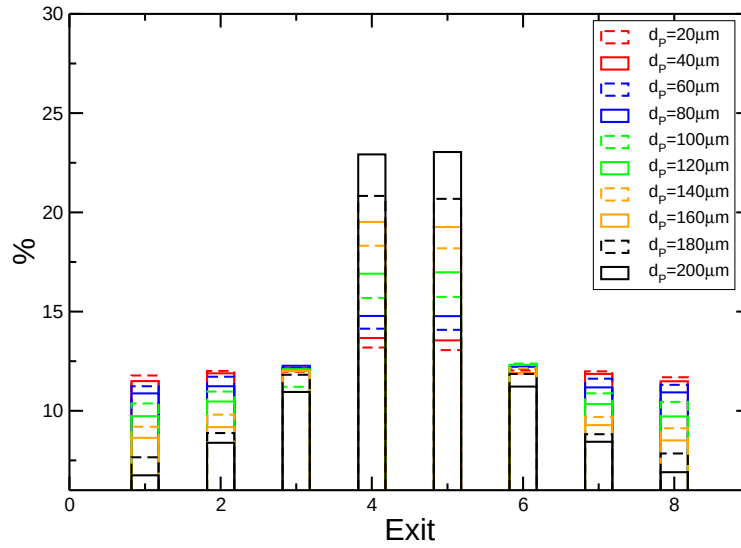


Figura 81: Histograma da porcentagem de partículas que saem por cada uma das oito possíveis saídas da estrutura, para $\alpha = 45^\circ$, $Re = 50$ e $\kappa = 1.0$.

A Fig. 82 corrobora o que foi dito acima: a assimetria do sistema intensifica a separação de partículas. Podemos observar que, a despeito da porcentagem de partículas que atravessam a estrutura cruzando a saída 1 (mais externa) se manter constante com a variação do ângulo azimutal, a alteração de α acarreta um aumento significativo na porcentagem de partículas que atravessam a saída mais interna da estrutura. Isto ocorre porque, quando 45° , existem duas saídas (saídas 4 e 55 na Fig. 83) alinhadas com o ramo da primeira geração.

Um aspecto importante a ser investigado é a dependência da propriedade de filtragem da estrutura ramificada em relação ao fator de homotesia que caracteriza a citada estrutura. Como sabemos, variações no fator de homotesia acarretam modificações não-uniformes no número de Stokes para partículas ao longo de uma estrutura ramificada, diferentemente do que ocorre na árvore ideal, onde o fator de homotesia ($h = 0.79$) permanece constante através da estrutura. Para este valor específico ($h = 0.79$), o número

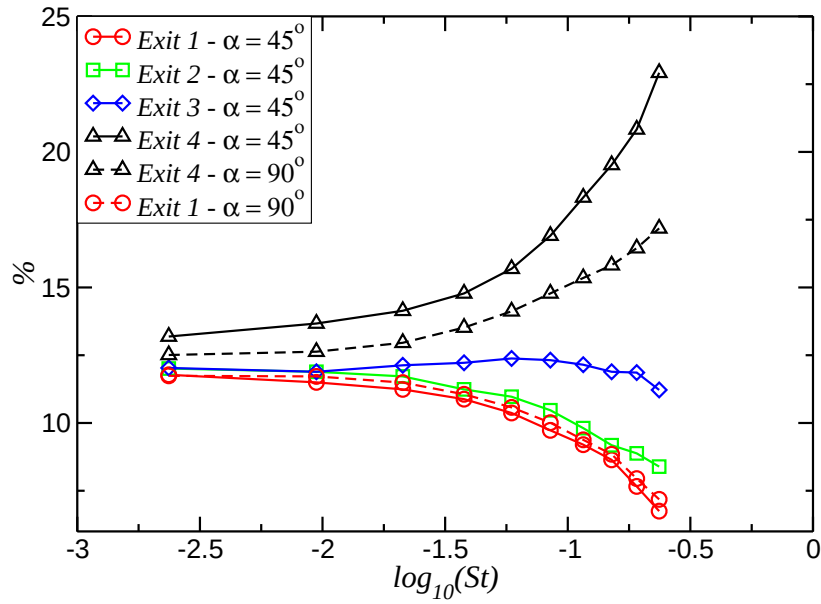


Figura 82: Distribuição de partículas que saem da estrutura ramificada em função do número de Stokes, para diferentes ângulos azimutais, $Re = 50$ e $\kappa = 1.0$.

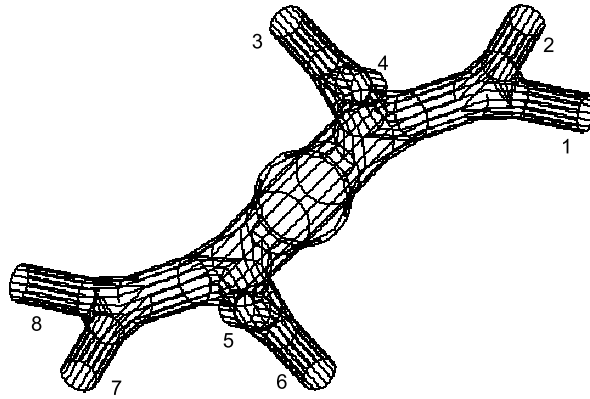


Figura 83: Geometria da estrutura ramificada com 4 gerações, $\alpha = 45^\circ$ e $h = 0.79$

de Stokes se mantém constante ao longo da árvore. Por definição, o número de Stokes depende da razão u/D , onde u representa a velocidade do fluido na entrada da estrutura e D representa o diâmetro do primeiro tubo. Portanto, variações no fator de homotesia levam a modificações no diâmetro dos tubos que compõem a estrutura e, conseqüentemente, os campos de velocidade no interior destes tubos são, também, modificados. Com base neste fato, geramos uma nova estrutura cujo fator de homotesia é igual a $h = 1$. Isto significa que o diâmetro dos tubos que compõe esta nova árvore se manterá constante ao longo da estrutura, como ilustra a Fig. 84.

A Fig. 85 ilustra o comportamento da distribuição de partículas que saem da estrutura

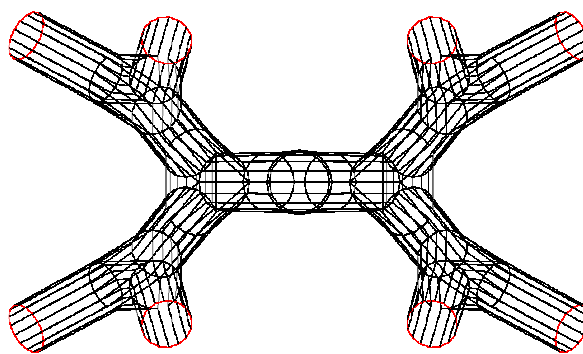


Figura 84: Geometria da estrutura ramificada com 4 gerações, $\alpha = 90^\circ$ e $h = 1.0$

como função do número de Stokes, para diferentes saídas da estrutura ramificada. Neste caso, o fator de homotesia é fixado em $h = 1$. Observamos que, qualitativamente, não há alterações significativas na propriedade de filtragem para esta estrutura. Observamos que partículas com baixos números de Stokes transitam no interior desta estrutura ramificada visitando igualmente todas as saídas da estrutura. No entanto, este comportamento é alterado à medida que o número de Stokes se torna cada vez mais elevado. Observamos uma segregação de partículas cada vez mais acentuada com o crescimento do número de Stokes. Isto nos leva a crer que esta propriedade de filtragem da estrutura bifurcada é independente do fator de homotesia. Em outras palavras, a progressão das dimensões dos ramos em função da sua geração, ao longo da árvore respiratória, é irrelevante frente à propriedade de filtragem que a estrutura apresenta.

Em seguida, realizamos uma comparação qualitativa da propriedade de filtragem de partículas para os dois casos anteriormente abordados: uma árvore com $h = 0.79$ e outra árvore com $h = 1$. Segundo a Fig. 86 percebemos que, qualitativamente, a propriedade de filtragem de partículas permanece praticamente inalterável com a variação de h , exceto pelo fato de que o número de Stokes que maximiza esta propriedade de filtragem é ligeiramente maior para $h = 1$. Isto ocorre porque, para $h = 1$, os diâmetros dos tubos que compõem a árvore ramificada não sofrem redução ao longo da estrutura. Assim sendo, para $h = 1$, a redução das magnitudes de velocidade ao longo da estrutura são consideravelmente maiores, se compararmos com o caso onde $h = 0.79$. Portanto, se as magnitudes da velocidade são menores para $h = 1$, é necessário que St assuma valores moderadamente mais elevados para que observemos esta propriedade.

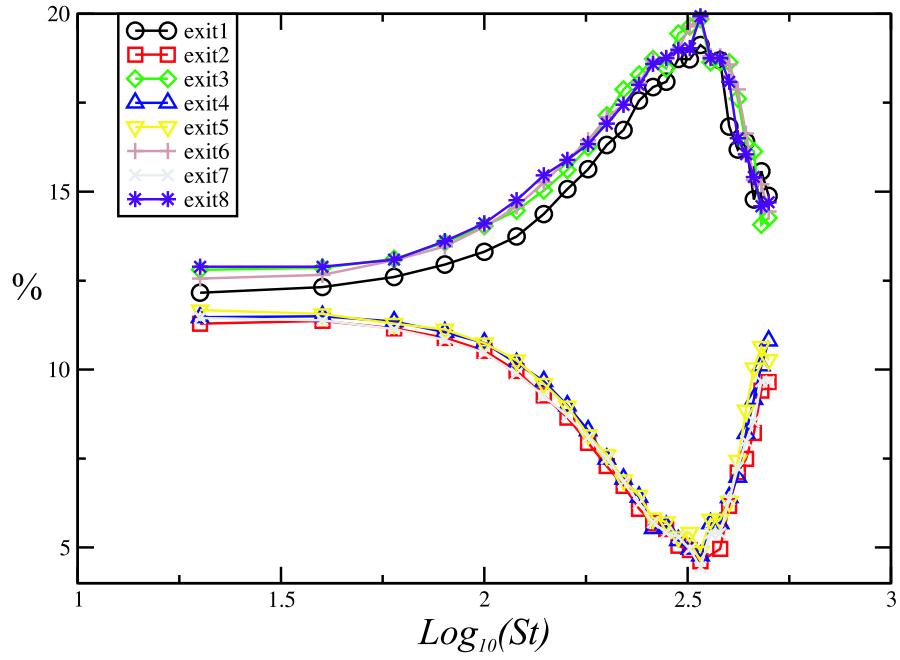


Figura 85: Distribuição de partículas que saem da estrutura ramificada em função do número de Stokes, para $h = 1$. Neste caso, $\alpha = 90^\circ$, $Re = 50$ e $\kappa = 1.0$.

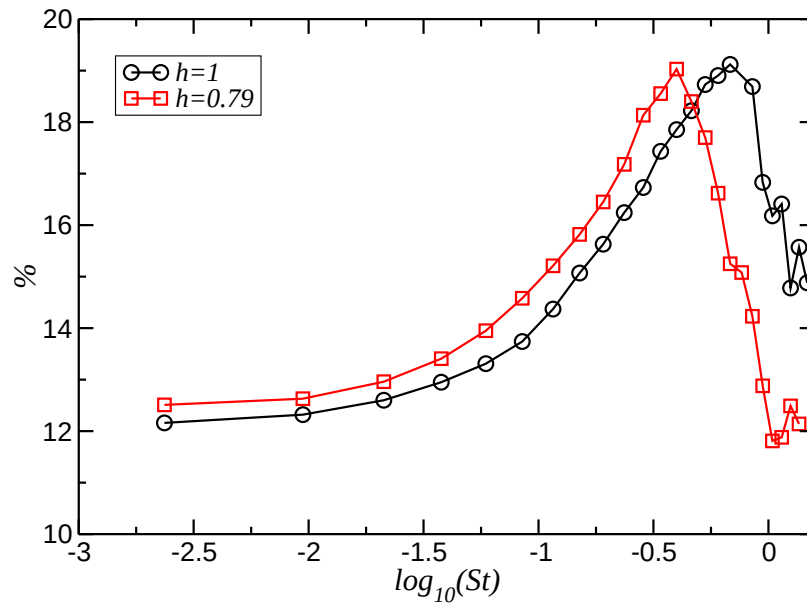


Figura 86: Geometria de uma estrutura ramificada com quatro gerações e diferentes valores para o fator de homotesia.

8 Conclusão

Na presente tese, investigamos o processo de transporte de fluido e massa através de sistemas irregulares. À princípio, analisamos a dinâmica do escoamento de um fluido através de dutos rugosos que apresentam geometria auto-afim. À nível macroscópico, o processo de escoamento ocorre através de canais rugosos fraturados. Portanto, o primeiro passo dado no sentido de investigar as propriedades de transporte e simular o escoamento de fluidos no interior de dutos rugosos foi a descrição da topologia da rede fraturada, estudando o modo como tais fraturas estão conectadas umas às outras. Em seguida, o aspecto geométrico do meio poroso foi estudado, observando que tal geometria possui propriedades estatísticas invariantes sob transformações de escala anisotrópicas. A resolução analítica do problema do escoamento em estruturas com superfície rugosa envolve dificuldades algébricas. O procedimento adotado no presente trabalho foi a obtenção de uma solução numérica aproximada, visto que não é possível obter solução analítica para este problema. A simulação do escoamento foi realizada por meio da utilização de um *software* de simulação computacional de fenômenos de transporte. O primeiro passo do procedimento foi a divisão do domínio onde o fenômeno ocorre em um conjunto de células ou subdomínios de mesma dimensão, originando uma malha ou rede computacional. Em seguida, as equações da continuidade e de Navier-Stokes foram aplicadas a cada célula do domínio e resolvidas numericamente, com as condições de contorno apropriadas. Desta maneira, um conjunto de equações acopladas foi obtido. Estas equações, resolvidas numericamente e de forma iterativa, originaram um conjunto de soluções para o campo de velocidades. Tais soluções constituíram-se em um resultado aproximado daquele que obteríamos se pudéssemos resolver analiticamente as equações governantes. Resumidamente, as equações governantes que descrevem a física do fenômeno do escoamento foram discretizadas em uma malha computacional e transformadas em equações algébricas, usualmente não-lineares, para serem resolvidas numericamente e de forma iterativa. Com as condições de contorno

apropriadas, obtivemos a solução e os valores das incógnitas nos nós das malhas, os quais, por sua vez, podem ser apresentados graficamente para, então, procedermos a análise do fenômeno em estudo. Conforme resultados obtidos a partir destas simulações computacionais, observamos que a característica auto-afim da superfície rugosa exerce importante influência sobre as propriedades do escoamento no interior do duto rugoso. Estudamos o efeito provocado pela variação da largura efetiva deste duto, possibilitando o surgimento de regiões de estrangulamento na estrutura e acarretando mudanças significativas nos campos de velocidade.

Em um capítulo subsequente, abordamos o transporte de partículas com massa carregadas por um fluido no interior de estruturas rugosas bidimensionais com geometria auto-afim. Integrando-se a equação de movimento para uma dada partícula, são obtidas informações sobre sua posição e velocidade, bem como o tempo de trânsito no interior da estrutura rugosa. As equações de transporte para estas partículas são resolvidas a partir do mesmo programa comercial utilizado para solucionar o escoamento em dutos rugosos. O *software* prediz a trajetória de uma partícula discreta, resolvida numericamente, integrando o balanço de força sobre esta partícula. Estudamos o efeito dos aspectos morfológico e topológico do duto rugoso sobre o comportamento de partículas com diferentes números de Stokes interagindo com a geometria através de colisões. Investigamos, ainda, o comportamento do tempo médio de trânsito de partículas em função do coeficiente de restituição, para diferentes comprimentos do duto rugoso. Partículas com baixos valores do número de Stokes ($St = 0.05$) comportam-se como traçadoras, adaptando-se quase instantaneamente ao campo de velocidades do escoamento ($t_R \ll t_E$), de modo que as trajetórias destas coincidem com as linhas de corrente do campo de velocidades do escoamento, não havendo colisões entre as paredes da estrutura e as citadas partículas. Nesta situação, o tempo médio de trânsito é praticamente constante e, portanto, insensível à variação do coeficiente de restituição. Partículas com Stokes extremamente alto ($St = 5.0$) apresentam uma variação do tempo médio de trânsito bastante suave, havendo uma ligeira elevação em $\langle t \rangle$ quando o coeficiente de restituição assume valores baixos. Nesta situação, as colisões controlam o transporte de partículas imersas no fluido e, como o tempo de resposta destas à ação do escoamento é extremamente alto, o processo de adaptação ao campo de velocidades do escoamento é lento, de modo que as partículas escapam das linhas corrente e colidem diversas vezes com as paredes da estrutura rugosa, independentemente do valor numérico assumido por κ . Partículas com Stokes intermediário ($St = 0.5$) possuem tempo de resposta à ação do fluido (t_R) da ordem do tempo de escoamento (t_E), de modo que o transporte destas partículas é controlado pela

competição entre as colisões (interação partícula-estrutura) e o escoamento (interação partícula-fluido). Nesta circunstância, o coeficiente de restituição torna-se o parâmetro preponderante sobre o comportamento das partículas, de modo que o tempo médio de trânsito é sensivelmente afetado pela variação de κ . Observamos que o tempo médio de permanência das partículas no interior do tubo é máximo para baixos coeficientes de restituição. O aumento de κ acarreta menor perda de energia da partícula durante o choque contra a parede, permitindo que a mesma retorne às regiões centrais do duto rugoso, onde as velocidades assumem valores mais elevados. Tal fato provoca um decaimento no tempo médio de trânsito destas partículas à medida que as colisões tornam-se cada vez mais elásticas.

Posteriormente, estudamos o processo de escoamento no interior de meios porosos. A dinâmica do transporte de fluido em meios porosos abrange uma combinação de fenômenos em diferentes escalas. Microscopicamente, o fenômeno de transporte de fluidos acontece através dos espaços vazios intersticiais presentes no meio poroso. Nesta escala é possível conjugar-se de forma consistente aspectos estruturais e fenomenológicos associados ao processo. No presente trabalho, estudamos o fenômeno da captura inercial de partículas em um meio poroso periódico bidimensional. Para o modelo periódico, na ausência de gravidade, existe um número de Stokes finito abaixo do qual as partículas nunca são capturadas. Além disso, nossos resultados indicam que a transição do regime de captura para o regime de não-captura é uma transição de segunda ordem com um expoente de escalonamento $\alpha \approx 0.5$. Na presença da gravidade, mostramos que (i) este regime de não-captura é suprimido (i.e., $St_c = 0$) e (ii) o expoente de escalonamento assume o valor $\alpha \approx 1$. Finalmente, o comportamento do meio poroso aleatório sujeito à ação da gravidade é consistente com a afirmação anterior. Uma consequência interessante dos nossos resultados e sua interpretação física é a diferença significativa no comportamento da eficiência de captura em função do número de Stokes na presença e na ausência de gravidade. As relações de escalonamento obtidas a partir desta análise podem, certamente, ser úteis para determinar o papel microscópico dos mecanismos de captura inercial na performance e *design* de processos de filtração.

Investigamos, também, o processo de transporte de partículas com massa conduzidas por um fluido no interior de uma estrutura ramificada tridimensional. À princípio, realizamos um estudo acerca da fisiologia e morfologia do sistema respiratório. Posteriormente, analisamos a dinâmica do escoamento de um fluido através de uma geometria ramificada tridimensional. Finalizando nosso estudo, examinamos o transporte de partículas com massa no interior desta estrutura, preenchida pelo citado fluido.

Inicialmente, analisamos a dinâmica do escoamento de um fluido através de uma estrutura ramificada. O procedimento adotado no presente trabalho foi a obtenção de uma solução numérica aproximada, por meio do mesmo *software* comercial de fluidodinâmica computacional mencionado anteriormente, visto que não é possível obter solução analítica para este problema. Conforme resultados obtidos a partir destas simulações computacionais, observamos que as bifurcações, assim como as conexões entre os dutos, exercem importante influência sobre as propriedades do escoamento no interior da árvore respiratória. Notamos o aparecimento de uma assimetria no perfil de velocidades, nomeadamente *M-shape*, decorrente da inércia, que provoca um deslocamento vertical das regiões de maiores magnitudes de velocidades. Esta configuração governa a partição do fluido nas bifurcações posteriores.

Em um capítulo subsequente, abordamos o transporte de partículas com massa carregadas por um fluido no interior de uma estrutura ramificada tridimensional. Integrando-se a equação de movimento para uma dada partícula, são obtidas informações sobre sua posição e velocidade, bem como o tempo de trânsito no interior da estrutura ramificada. As equações de transporte para estas partículas são resolvidas a partir do mesmo programa comercial utilizado para solucionar o escoamento em estruturas ramificadas. O *software* prediz a trajetória de uma partícula discreta, resolvida numericamente, integrando o balanço de força sobre esta partícula. Após cada iteração para cada partícula, são obtidas as informações sobre posição, velocidade, temperatura, bem como o tempo de trânsito no interior da estrutura rugosa. Estudamos o efeito dos aspectos morfológicos da estrutura ramificada sobre o comportamento de partículas com diferentes números de Stokes interagindo com a geometria através da captura. Observamos que, qualitativamente, a distribuição de partículas capturadas permanece praticamente inalterável com a variação de Re , exceto pelo fato de que a porcentagem de partículas capturadas torna-se sistematicamente maior com o aumento do número de Reynolds. Além disso, observamos que partículas com baixos números Stokes ($t_R \ll t_E$) adaptam-se quase instantaneamente ao escoamento, comportando-se como traçadoras, independentemente do número de Reynolds do fluido. Portanto, nesta circunstância, a captura de partículas pelas paredes da estrutura é mínima. Em contrapartida, o aumento do número de Stokes acarreta uma redução substancial da porcentagem de partículas que conseguem sair da estrutura. Este fenômeno pode ser explicado pelo fato de que, nesta situação, o tempo de resposta da partícula à ação do escoamento é extremamente elevado ($t_R \gg t_E$), de forma que o processo de adaptação da citada partícula ao escoamento é extremamente lento. Nesta situação, o transporte de partículas é controlado pelos efeitos inerciais do sistema. Para

partículas com número de Stokes intermediário, o tempo de resposta desta partícula à ação do fluido possui a mesma ordem de magnitude do tempo de escoamento. Neste caso, o transporte de partículas é controlado pela competição localizada entre a interação partícula-fluido, através do arraste, e pela interação partícula-estrutura, através da captura. Desta maneira, as partículas são mais sensíveis à assimetria do fluxo e, para valores elevados do número de Reynolds, a inércia do fluido torna-se um parâmetro preponderante sobre o comportamento das partículas. Percebemos, assim, que a distribuição de partículas depende somente do número de Stokes da partícula em uma geração específica da estrutura ramificada.

Outro aspecto interessante analisado ao longo deste estudo foi o caráter multiplicativo da probabilidade de uma partícula atravessar uma estrutura ramificada específica. De acordo com os resultados obtidos, a probabilidade de uma partícula atravessar uma estrutura com N bifurcações, para um dado número de Stokes, é simplesmente a probabilidade desta partícula atravessar a primeira bifurcação à potência N , onde N representa o número de bifurcações da estrutura. Além disso, podemos afirmar que existe uma célula unitária, representada por uma estrutura com apenas uma bifurcação, capaz de representar o comportamento de toda a árvore com N bifurcações. Conseqüentemente, a natureza complexa do transporte de partículas no interior de estruturas ramificadas com N bifurcações pode ser significativamente reduzida, já que seria possível investigar as propriedades do transporte de partículas através de uma estrutura com apenas uma bifurcação e, assim, estender os resultados obtidos para uma estrutura mais complexa com N bifurcações. De mais a mais podemos notar que o transporte de partículas através de estruturas ramificadas é um processo Markoviano, visto que a distribuição de probabilidades de um estado futuro do processo, dado o estado presente em todos os estados passados, depende somente do estado presente e não dos estados passados, i.e. é um processo condicionalmente independente os estados passados (o caminho do processo) dado o estado presente.

Apesar deste trabalho representar mais uma contribuição para o entendimento das propriedades de transporte em estruturas desordenadas, também temos o objetivo de iniciar uma série de estudos, especialmente no que concerne a fenômenos de transporte em geometrias complexas. O seguinte conjunto de sugestões desponta como um passo natural a ser dado para a realização de futuros trabalhos nesta área de pesquisa:

- Durante nosso estudo, admitimos que o processo de fraturar a rocha não produz deformações ou interstícios subseqüentes no material e as partes fraturadas da amostra

são simplesmente separadas de uma distância h normal ao plano médio, de modo que a abertura local assume valor constante. Alternativamente, em investigações posteriores, pretendemos introduzir uma translação lateral a uma destas superfícies, de modo a haver um deslocamento relativo d no plano médio da fratura [3].

- Este estudo foi inteiramente baseado na suposição de que o fluxo de partículas no interior da estrutura ramificada é baixo, assim como o diâmetro das mesmas é reduzido, de modo que o escoamento não é perturbado pela presença das citadas partículas. Pretendemos modelar o escoamento e o transporte de partículas considerando o acoplamento entre a fase discreta (partículas) e o fluido (escoamento). Nesta circunstância, o processo de escoamento acontece concomitantemente ao transporte de partículas. Em outras palavras, os campos de velocidade e pressão serão afetados pela presença das partículas e vice-versa.
- Nossa descrição detalhada da mecânica de fluidos no interior da geometria ramificada foi baseada nas suposições de que o escoamento é laminar e estacionário e o fluido é contínuo, Newtoniano e incompressível. Portanto, o escoamento ocorre no regime de Stokes, caracterizado por baixos valores do número de Reynolds. Nesta situação, as forças viscosas sobrepõem-se às forças inerciais. Aspiramos modelar o transporte de fluidos em diferentes regimes de escoamento, onde o número de Reynolds assume valores moderados e elevados. Nesta circunstância, teremos um regime de escoamento turbulento e os efeitos inerciais serão bem característicos.
- Pretendemos também realizar simulações transientes com o intuito de modelar, por exemplo, a sequência temporal inspiração-expiração, mais realística do processo respiratório.

9 *Apêndice A*

Este anexo apresenta informações a respeito da geometria e dos métodos de cálculo abordados nos Capítulos 4 e 5. As estruturas trabalhadas no citado capítulo necessitam de um estudo geométrico detalhado, principalmente no que concerne à construção dos ramos. A descrição inicial é uma estrutura filiforme. Em outras palavras, a estrutura inicial é composta de um conjunto de fios que, em seguida, serão "recobertos" com cilindros. Levando-se em conta a sua espessura, estes cilindros não podem ter comprimentos idênticos ao modelo filiforme. O cálculo destes comprimentos leva em consideração as noções básicas da geometria. Após a compreensão do modelo geométrico, a principal dificuldade passa a ser a conexão entre os cilindros, mais especificamente da base do cilindro-pai com o topo dos cilindros-filhos.

Neste anexo descrevemos, também, as diferentes etapas dos cálculos, desde a obtenção da geometria até a sua visualização. Os programas foram escritos em *C++*.

9.1 Parâmetros geométricos dos ramos

A estrutura geométrica utilizada neste trabalho possui todas as dimensões baseadas em dados fisiológicos correspondentes ao pulmão humano adulto. Desta forma, o diâmetro do ramo da primeira geração é 2cm , equivalente ao diâmetro da traquéia, e os diâmetros seguintes decrescem de um fator $2^{-1/3} \sim 0.79$ a cada geração, segundo E. R. Weibel [35]. Conseqüentemente, os diâmetros da segunda, terceira e quarta gerações valem, respectivamente 1.58cm , 1.24cm e 0.98cm . O comprimento dos tubos é ligado a um parâmetro de estudo deste modelo, nomeadamente a razão entre o comprimento e o diâmetro L/D , que admitimos ser constante ao longo de toda a árvore respiratória. Os resultados apresentados neste trabalho foram obtidos para $L/D = 3$. As ramificações são coplanares e o

ângulo entre os ramos-filhos é fixado em 60° , aproximadamente como visto em pulmões reais. Outro parâmetro a ser especificado é o ângulo de rotação α entre os planos de ramificação da árvore, denominado ângulo azimutal. Com o intuito de verificar o efeito da variação deste parâmetro sobre a dinâmica de transporte de partículas, o ângulo azimutal foi variado entre 45° e 90° . O ângulo $\alpha = 0^\circ$ corresponde a uma árvore coplanar.

Do ponto de vista da discretização da geometria, os ramos são cilindros cuja base é um polígono de dezesseis lados. A construção geométrica da ramificação é baseada nestes polígonos e mais particularmente, na condição de divisibilidade por quatro do número das bases.

9.2 Modelização das ramificações

9.2.1 Passagem do modelo filiforme para o modelo 3D

Por razão de simplificação, a estrutura ramificada é descrita, inicialmente, em duas dimensões. No entanto, a conversão da estrutura bidimensional para uma estrutura tridimensional não é simples e aplicação de alguns conceitos de geometria elementar se torna necessária para a construção desta estrutura. Inicialmente, as informações disponíveis sobre a árvore são os comprimentos, os diâmetros e os pontos que definem o início de cada tubo. Um problema crucial na construção desta geometria é o ponto de intersecção dos ramos. Desta forma, determinamos que os ramos-filhos (ramos 2 e 3 na Fig. 87) se toquem e, então, que o ramo-filho de maior diâmetro toque o ramo-pai. Esta configuração é mostrada na Fig. 88 como um corte ao longo do plano de bifurcação. Neste exemplo, admite-se que os ramos-filhos se tocam em C . A base do ramo-pai, portanto, tocará a ordenada do ponto B , ponto mais "elevado" do eixo y .

Observando-se a Fig. 87, nota-se que é necessário determinar os parâmetros h_2 e h_3 , assim como h_1 (que assume o valor de y_B neste caso). A partir destes parâmetros, será possível construir os cilindros. Primeiramente, é necessário calcular as expressões de h_2 e h_3 em função dos dados do problema e, para isto, são aplicados os teoremas de Pitágoras e de Al Kaschi. De acordo com a Fig. 88, aplica-se Pitágoras em (OCF_1) e (OCF_2) e Al Kaschi em (OF_2F_3) e (F_2F_3C) , o que leva à

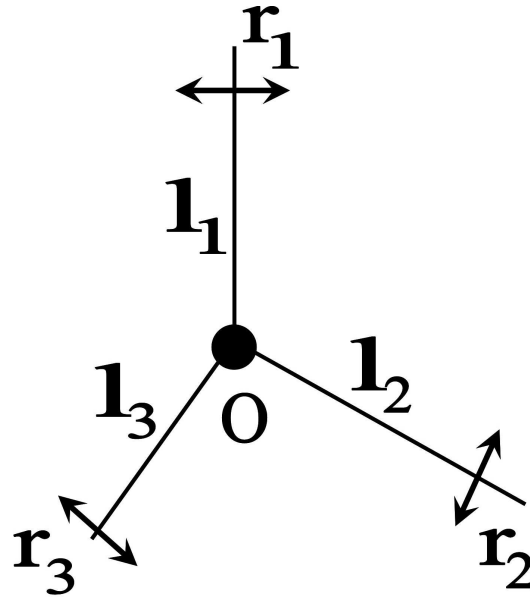


Figura 87: Ilustração do processo de construção do modelo filiforme para a árvore respiratória. Parte-se de três segmentos, cujos comprimentos são conhecidos e a idéia é "vestir" estes segmentos de retas com cilindros, onde $(l_1, l_2 \text{ e } l_3)$ e $(r_1, r_2 \text{ e } r_3)$ representam, respectivamente, os comprimentos e os raios dos cilindros desejados. Além disso, supomos que a árvore se ramifica de maneira coplanar, o que facilita os cálculos.

$$h_2 = \frac{r_3 + \cos(\theta_1 + \theta_2)r_2}{\sin(\theta_1 + \theta_2)}, \quad (9.1)$$

$$h_3 = \frac{r_2 + \cos(\theta_1 + \theta_2)r_3}{\sin(\theta_1 + \theta_2)}. \quad (9.2)$$

Em seguida, é necessário determinar o valor de h_1 , que corresponde à ordenada de um ponto entre B e D : àquele que é o mais elevado no eixo dos y , como ilustra a Fig. 88. Portanto, é fundamental calcular as coordenadas dos pontos B e D no plano.

$$x_B = h_2 \sin(\theta_2) + r_2 \cos(\theta_2) y_B = -h_2 \cos(\theta_2) + r_2 \sin(\theta_2) \quad (9.3)$$

e

$$x_D = -h_3 \sin(\theta_1) - r_3 \cos(\theta_1) y_D = -h_3 \cos(\theta_1) + r_3 \sin(\theta_1) \quad (9.4)$$

Desta maneira, h_1 é escolhido em função das ordenadas dos pontos B e D .

$$h_1 = \max(y_B, y_D) \quad (9.5)$$

A aplicação destes resultados é feita da seguinte maneira: os cilindros são construídos

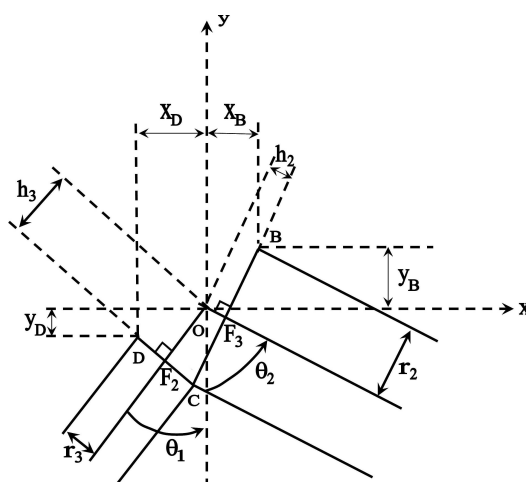


Figura 88: Corte ao longo do eixo axial dos cilindros, no plano da ramificação. Na figura, os cilindros estão ilustrados pelas linhas cheias. Os ramos-filhos são tangentes em C , enquanto o ramo-pai toca o ramo-filho número 2 em B .

em relação ao ponto médio dos ramos. Assim, o cilindro do ramo-pai é decomposto em dois semi-cilindros. O cilindro superior possui comprimento definido pelo ramo imediatamente superior a ele. Já o cilindro inferior possui comprimento dado por $l_1/2 - h_1$.

Todavia, é necessário que algumas modificações destes parâmetros sejam efetuadas, no sentido de tornar esta estrutura mais realista. Primeiramente, se o raio do ramo-pai é muito grande, não é possível usar diretamente a grandeza h_1 , visto que o ramo-filho de maior raio tocará o ramo-pai no interior da seção da base do cilindro (no exemplo da Fig. 88, isto significa que o ponto B encontra-se "no meio" da base do ramo-pai). Tal situação, irreal, prejudicaria a circulação do fluxo e seria preciso aumentar sensivelmente o valor de h_1 (em geral, escolhe-se um fator empírico da ordem de 1,2). Em seguida, a condição de tangência dos cilindros dos ramos 2 e 3 não é necessariamente ideal, visto que tal condição acarreta o surgimento de ângulos muito agudos, levando a singularidades durante as simulações numéricas. Assim, para suavizar esta ramificação, h_2 e h_3 assumem, em geral, valores um pouco mais elevados do que aqueles encontrados acima (que foram multiplicados por um fator 1,2). Isto facilita, também, a construção da interseção descrita na seção seguinte.

9.2.2 Construção geométrica de uma ramificação

Uma vez determinadas as propriedades dos cilindros, a etapa seguinte é a construção da geometria da ramificação. Admitiremos que os segmentos utilizados obedecem às seguintes condições:

- conectam entre si os topos da base inferior do ramo-pai aos topos das bases superiores dos ramos-filhos.
- conectam os topos das bases superiores dos dois ramos-filhos.

A partir destas condições, são geradas faces de três ou quatro lados que nem sempre são coplanares. O passo seguinte é a descrição da construção da ramificação, como ilustra a Fig. 89. Note o polígono P_M que se forma na base inferior do ramo-pai. Note também os polígonos P_1 e P_2 , formados nas bases superiores dos ramos-filhos. A idéia é seleccionar os topos S_1 e S_2 mais próximos, S_1 sendo escolhido sobre P_1 e S_2 , sobre P_2 . Estes dois pontos serão conectados por um segmento. Então, como o número de lados N dos polígonos é um múltiplo de 4, conecta-se os $N/4$ topos aos pontos S_1 e S_2 . Em seguida, note S_3 como o topo oposto a S_1 sobre P_1 . S_4 é denominado do topo do polígono PM sendo o mais próximos de S_3 . Conecta-se S_3 e S_4 por um segmento, assim como os $N = 2$ pontos. Nota-se em seguida que S_5 é o topo oposto a S_4 sobre PM. Conecta-se ao topo oposto a S_2 sobre P_2 , assim como os $N = 4$ topos. A estrutura obtida é formada por $3N = 2$ faces de quatro lados e por 2 faces de três lados.

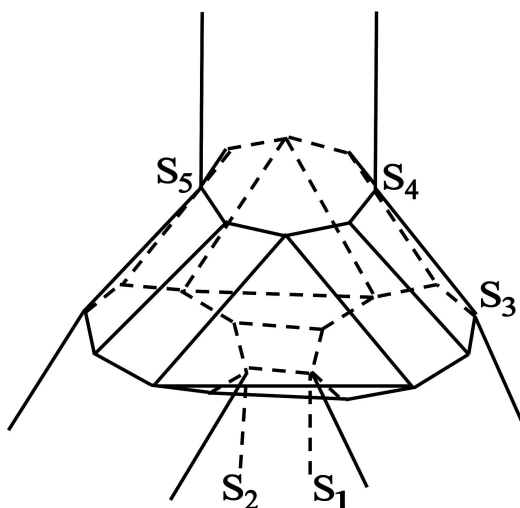


Figura 89: Construção da geometria ramificada ($N = 8$). Os ápices dos polígonos são conectados por segmentos de reta.

Este método de construção é particularmente adaptado a árvores que se ramificam de maneira simétrica. No caso de ramificações assimétricas, existem casos onde algumas faces (de quatro lados) são muito estreitas para se construir a malha computacional. esta face, é, então, associada a uma de suas vizinhas, criando uma face de seis lados, não coplanar. A partir destas faces, é possível construir uma malha computacional bidimensional da superfície da árvore. Em seguida, a partir da malha desta superfície, cria-se uma malha volumétrica. O principal método utilizado para construir esta malha é o método de Voronoi.

9.3 Métodos Numéricos

Nesta seção, descreveremos esquematicamente o tratamento do problema da criação da estrutura ramificada desejada.

A numeração seqüencial dos ramos de uma árvore dicotômica (bifurcada) é uma das ferramentas mais importantes desde trabalho. Ela é a base das etapas 1 e 2, apresentadas anteriormente. Esta numeração é descrita pela Fig. 90, e consiste à numerar os ramos de maneira descendente na árvore ao longo de um caminho. Uma vez atingida a extremidade, refazemos o caminho percorrido até encontrarmos um ramo que possua um ramo-filho ainda não numerado. Assim, a numeração dos ramos é realizada é feita de maneira descendente na árvore, a partir deste ramo-filho até uma extremidade. E assim, sucessivamente até que todos os ramos que compõem a árvore estejam numerados. Este método é utilizado por H. Kitaoka [132] em seu programa de modelização do pulmão.

Os métodos de tratamento numérico são constituídos de uma sucessão de etapas elementares, a seguir:

- Obtenção de um arquivo de dados dos ramos (cuja extensão é ".doc"), que contém um conjunto de parâmetros, tais como: número, diâmetro e comprimento do ramo, assim como as coordenadas relativas às suas extremidades. A redimensionalização de certos parâmetros das árvores é gerada por meio de programas (comprimento dos ramos e ângulo entre os ramos de bifurcação). O programa de construção deste modelo de pulmão escrito por H. Kitaoka foi modificado, de forma a termos um arquivo de saída de dados ".doc".
- A partir do arquivo obtido na etapa precedente, efetuamos a descrição da geometria

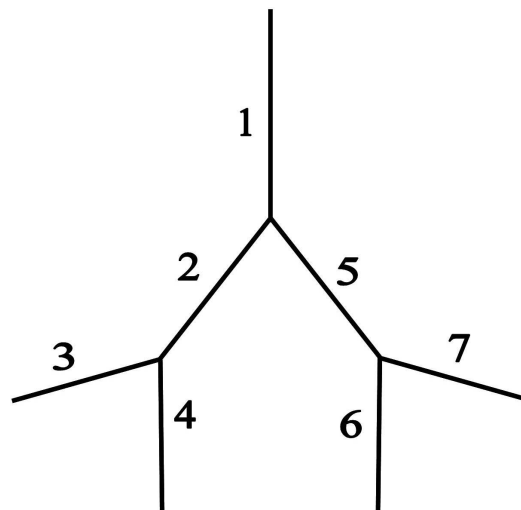


Figura 90: Exemplo do processo de numeração sequencial dos ramos de uma árvore dicotômica.

em termos de pontos, linhas e faces (com três, quatro e dezesseis lados) e estes dados são convertidos em formato Gambit (extensão ".dat").

- O *software* Gambit gera a malha computacional, primeiramente na superfície e, em seguida, no volume da árvore. Desta maneira, a estrutura é discretizada em volumes tetraédricos.
- Em seguida, as condições de contorno são impostas à entrada e às saídas da estrutura em estudo. Esta é a etapa mais demorada do processo, visto que são necessários cálculos numéricos pesados.
- Finalmente, um arquivo ".msh" é gerado. Este arquivo será lido pelo *software* Fluent. Tem início, então, ao processo de resolução do escoamento propriamente dito.

Este método é sistematicamente utilizado para a geração de todas as estruturas ramificadas utilizadas neste trabalho.

Referências

- [1] E. R. Weibel, *Morphometry of the Human Lung* (Springer-Verlag/Academic Press, Heidelberg, New York, 1963)
- [2] M. Sahimi, *Rev. Mod. Phys.* Flow Phenomena in Rock: From Continuum Models to Fractals, Percolation, Cellular Automata, and Simulated Annealing, **65**, 1393 (1993).
- [3] G. Drazer e J. Koplik, *Phys. Rev. E* **62**, 8076 (2000).
- [4] E. Bouchaud, G. Lapasset e J. Planès, *Europhys. Lett.* Fractal Dimension of Fractured Surfaces: A Universal Value?, **13**, 73 (1990).
- [5] G. Drazer e J. Koplik, *Phys. Rev. E* Transport in Rough Self-Affine Fractures, **66**, 026303 (2002).
- [6] B. B. Mandelbrot, D. E. Passoja e A. J. Paullay, *Nature* Fractal Character of Fracture Surfaces of Metals, **308**, 721 (1984).
- [7] A. Hansen, E. L. Hinrichsen e S. Roux, *Phys. Rev. Lett.* Roughness of Crack Interfaces, **66**, 2476 (1991).
- [8] M. Sahimi, *Flow and Transport in Porous Media and Fractured Rock* (VCH, Weinheim, 1995).
- [9] S. Kostek, L. M. Schwartz e D. L. Johnson, *Phys. Rev. B* **45**, 186 (1992).
- [10] N. Martys e E. J. Garboczi, *Phys. Rev. B* **46**, 3319 (1997).
- [11] J. S. Andrade Jr., M. P. Almeida, J. Mendes Filho, S. Havlin, B. Suki e H. E. Stanley, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 3901 (1997).
- [12] J. S. Andrade Jr., D. A. Street, T. Shinohara, Y. Shibusa e Y. Arai, *Phys. Rev. E* **51**, 5725 (1995).
- [13] F. A. Dullien, *Porous Media - Fluid Transport and Pore Structure*, (Academic, New York, 1979).
- [14] O. Gipouloux, *Contribution numérique à L'homogénéisation des Équations de Stokes et de Navier-Stokes en Milieu Poreux* (Tese de Doutorado, Université de Bordeaux I, 1992). Numéro d'ordre: 673.
- [15] J. Bear, *Dynamics of Fluids in Porous Materials*, (Elsevier, New York, 1972).
- [16] E. Bouchaud, *J. Phys.:Condens. Matter* **9**, 4319 (1997).
- [17] F. Plouraboué, J.-P. Hulin, S. Roux e J. Koplik, *Phys. Rev. E* **58**, 3334 (1998).

- [18] C. Poon, R. Sayles e T. Jones, *J. Phys. D* **25**, 1269 (1992).
- [19] W. Power *et al*, *Geophys. Rev. Lett* **14**, 29 (1987).
- [20] R. F. Voss, *Fundamental Algorithms for Computer Graphics*, R. A. Earnshaw, ed. NATO ASI Series, Vol. F17 (Springer, Berlin, 1985), p. 805.
- [21] G. Hagen, *Ann. Phys. Chem.* **46**, 423 (1939).
- [22] J. L. Poiseuille, *Compte Rendus* **11**, 961 e 1041 (1940).
- [23] J. L. Poiseuille, *Compte Rendus* **12**, 112 (1941).
- [24] C. A. J. Fletcher, *Computacional Techniques for Fluid Dynamics*, Vol. 1 (Springer-Verlag, Berlin, 1991).
- [25] *Fluent 6 User's Guide*. vol. 5, chap.22.
- [26] S. V. Patankar, Washington DC, 1980).
- [27] J. K. Comer, C. Kleinstreuer e C. S. Kim, *J. Fluid Mech.* **435**, 25-54 (2001).
- [28] J. K. Comer, C. Kleinstreuer e C. S. Kim, *J. Fluid Mech.* **435**, 55 (2001).
- [29] S. A. Morsi e A. J. Alexander, *J. Fluid Mech.* **55**, 193 (1972).
- [30] M. G. Levitzky, *Pulmonary Physiology* (McGraw-Hill, Crawfordsville, Indiana, 2003).
- [31] A. C. Guyton e J. E. Hall, *Tratado de Fisiologia Médica* (Guanabara Koogan, Rio de Janeiro, 2002).
- [32] B. Sapoval, E. R. Weibel e M. Filoche, *Fractals in Biology and Medecine* Eds. G. A. Losa, D. Merlini, T. F. Nonnenmacher e E. R. Weibel, (Birkhauser, Bâle 2002). pp 25-38.
- [33] B. Sapoval, M. Filoche e E. R. Weibel *P. N. A. S* **99** (16) 10411-10416 (2002)
- [34] Centre de Microscopie Electronique à Balayage et micro-Analyse, Université de Rennes 1, <http://www.cmeba.univ-rennes1.fr/niveau2/niveau3/PageApplicationsBiologie.htm>
- [35] E. R. Weibel, *The pathway for oxygen. Structure and function in the mammalian respiratory system* (Harvard University Press, Cambridge, Massachusetts e London, England, 1984)
- [36] E. R. Weibel, *Design and Morphometry of the pulmonary gas exchanger dans "The Lung: Scientific Foundations"* Eds. R. G. Crystal, J. B. West et al. (Raven Press, New York, 1991)
- [37] E. R. Weibel e C. R. Taylor *Design of the human lung for gas exchange* in. Fishman AP, ed. *Pulmonary Diseases and Disorders*, terceira edição New York, NY; McGraw-Hill (1998)
- [38] The Ultrastructure website, Prof. Louis De Vos, <http://www.ulb.ac.be/sciences/biodic/EAnatomie.html>

- [39] E. R. Weibel, B. Sapoval, M. Filoche *Respiratory Physiology and Neurobiology* **148** 3-21 (2005)
- [40] E. R. Weibel e D. M. Gomez *Science* **137** 577-585 (1962)
- [41] K. Horsfield, G. Dart, D. E. Olson, G. F. Filley e G. Cumming *J. Appl. Physiol.* **31** 207-217 (1971)
- [42] W. R. Hess *Physiologische Abteilung* (1914)
- [43] C. D. Murray *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **12** 207-214 (1926)
- [44] E. R. Weibel, *Design of airways and blood vessels considered as branching trees dans "The Lung: Scientific Pountations"* Eds. R. G. Crystal, J. B. West et al. (Raven Press, New York, 1991)
- [45] E. R. Weibel *Design and morphometry of the pulmonary gas exchanger* In: Crystal, RG., West, JB., Weibel, ER., Barnes, PJ. (Eds.), *The Lung: Scientific Foundations*, vol. 1, Segunda edição (Lippincott-Raven Publishers, Philadelphia 1997) pp. 1147-1157.
- [46] E. R. Weibel *Design of airways and blood vessels considered as branching trees* In: Crystal, RG., West, JB., Weibel, ER., Barnes, PJ. (Eds.), *The Lung: Scientific Foundations*, vol. 1, Segunda edição (Lippincott-Raven Publishers, Philadelphia 1997), pp. 1061-1071.
- [47] K. Horsfield *Pulmonary airways and blood vessels considered as confluent trees* In: Crystal, RG., West, JB., Weibel, ER., Barnes, PJ. (Eds.), *The Lung: Scientific Foundations*, vol. 1, Segunda edição (Lippincott-Raven Publishers, Philadelphia 1997) pp. 1073-1079
- [48] B. J. West, V. Bhargava e A. L. Goldberger *J. Appl. Physiol.* **60** (3) 1089-1097 (1986)
- [49] K. Horsfield *Bulletin of mathematical biology* **38** 305-315 (1976)
- [50] M. J. Woldenberg e K. Horsfield *J. Theor. Biol.* **122** 127-204 (1986)
- [51] M. P. Almeida, J. S. Andrade Jr., S. V. Buldyrev, F. S. A. Cavalcante, H. E. Stanley e B. Suki *Phys. Rev. E* **60** (5) 5486-5494 (1999)
- [52] J. S. Andrade, A. M. Alencar, M. P. Almeida, J. Mendes Filho, S. V. Buldyrev e S. Zapperi *Phys. Rev. Letters* **81** (4) 926-929 (1998)
- [53] M. La Barbera *Science* **249** 992-1000 (1990)
- [54] T. A. Wilson *Nature* **February** 18 (1967)
- [55] B. Mauroy, M. Filoche e J. S. Andrade Jr. *Phys. Rev. Letters* **90** 148101 (2003)
- [56] H. Hoppeler e E. R. Weibel *The Journal of Experimental Biology* **201** 1051-1064 (1998)

- [57] E. R. Weibel *Lung morphometry and models in respiratory physiology*. In *Respiratory Physiology. An analytical approach*. H. K. Chang e M. Paiva eds. New York: Marcel Dekker (1989)
- [58] J. H. Comroe *Physiology of Respiration* segunda edição, Chicago (1974)
- [59] J. A. Clements e D. F. Tierney, Alveolar instability associated with altered surface tension. In: Fenn WO, Rahn H, eds. *Handbook of Physiology, sec. 3: Respiration* Washington DC: American Physiological Society (1965); 2: 1567-1568
- [60] J. Keener e J. Sneyd *Mathematical Physiology* eds. J. E. Marsden, L. Sirovich, S. Wiggins Springer-Verlag, New York (1998).
- [61] R. M. Winslaw e K. D. Vandegriff. Oxygen-Hemoglobin dissociation curve dans “The Lung: Scientific Foundations” ed. by R. G. Crystal, J. B. West et al. Raven Press, New York (1991)
- [62] RnCeus Interactive, <http://www.rnceus.com/abgs/abgcurve.html>
- [63] M. Felici, Physique du Transport Diffusif de l’Oxygène dans le Poumon Humain (Tese de Doutorado, Ecole Polytechnique, 2003)
- [64] J. C. Cruz, D. R. Jeng, D. HanWu e X. F. Flores *Respir. Physiology* **1** 58-74 (1997)
- [65] D. R. Jeng, G. Wu, J. C. Cruz, D. Han e X. F. Flores *Annals of biomedical engineering* **28** 453-462 (2000)
- [66] P. W. Scherer, J. D. Neufeld, J. E. Baumgardner e G. R. Neufled *Respir. Physiology* **103** 99-103 (1996)
- [67] B. Dutrieue, F. Vanholsbeeck, S. Verbank e M. Paiva *J. Appl. Physiol.* **89** 1859-1867 (2000)
- [68] E. R. Weibel, W. J. Federspiel, F. Fryder-Doffey, C. C. W. Hsia, M. König, V. Stalder-Navarro e R. Vock *Respiration Physiology* **93** 125-149 (1993)
- [69] P. D. Wagner, H. A. Saltzman e J. B. West *J. Appl. Physiol.* **36** 588-599 (1974)
- [70] C. R. Taylor e E. R. Weibel Learning from comparative physiology, dans “The Lung: Scientific Foundations” ed. by R. G. Crystal, J. B. West et al. Raven Press, New York (1991)
- [71] E. Denny e T. Siccama, <http://www.hubbardbrook.org/.../w1/sapbeech.jpg>
- [72] T. J. Pedley, R. C. Shroter e M. F. Sudlow, *Respir. Physiol.* **9**, 387 (1970)
- [73] J. B. Grotberg, *Annu. Rev. Biomed. Eng.* **3**, 421 (2001).
- [74] B. Snyder, D. R. Dantzker e M. J. Jaeger, *J. Appl. Physiol.* **51**, 598 (1981).
- [75] B. Snyder e M. J. Jaeger, *J. Appl. Physiol.* **54**, 749 (1983).
- [76] A. S. Slutsky, G. G. Berdini e J. M. Drazen, *J. Appl. Physiol.* **49**, 417 (1980).
- [77] D. J. Isabey, *J. Biomech* **15**, 395 (1982).

- [78] J. L. Allen, I. D. Frantz e J. J. Fredberg, *J. Clin. Invest.* **76**, 620 (1985).
- [79] A. Tsuda e J. J. Fredberg, *J. Appl. Physiol.* **69**, 546 (1990).
- [80] A. Tsuda e J. J. Fredberg, *J. Appl. Physiol.* **69**, 553 (1990).
- [81] F. Wilquem e G. Degrez, *J. Biomech. Eng.* **119**, 59 (1997).
- [82] Y. Zhao, C. T. Brunskill e B. B. Lieber, *J. Biomech. Eng.* **119**, 52 (1997).
- [83] T. B. Martonen, X. Guan e R. M. Schreck, *Inhal. Toxicol.* **13**, 261 (2001).
- [84] H. K. Chang e M. Paiva, *Respiratory Physiology* (Dekker, New York, 1989).
- [85] B. B. Mandelbrot, *The Fractal Geometry of Nature* (W. H. Freeman, San Francisco, 1982).
- [86] W. I. Newman, D. L. Turcotte e A. M. Gabrielov, *Fractals* **5**, 603 (1997).
- [87] B. Sapoval, *Universalités et Fractales* (Flammarion, Paris, 1997).
- [88] M. F. Shlesinger e B. J. West. *Phys. Rev. Lett.* **67**, 2106 (1991).
- [89] W. I. Li, M. Perzl, J. Heyder, R. Langer, J. D. Brain, K. H. Englemeier, R. W. Niven e D. A. Edwards *J. Aerosol Sci.* **27**, 1269-1286 (1996)
- [90] K. W. Stapleton, E. Guentsch, M. K. Hoskinson e W. H. Finlay. *J. Aerosol Sci.* **31**, 739-749 (2000)
- [91] T. B. Martonen e I. M. Katz. *J. Aerosol Med.* **6**, 251-274 (1993)
- [92] D. A. Edwards *J. Aerosol Sci.* **26**, 293-317 (1995)
- [93] T. B. Martonen, Y. Yang e Z. Q. Xue. *Inhalation Toxicol.* **6**, 185-203 (1994)
- [94] I. Balashazy e W. Hoffman. *J. Aerosol Sci.* **26**, 273-292 (1995)
- [95] I. Balashazy, W. Hoffman e T. Heistracher. *J. Aerosol Sci.* **30**, 185-203 (1999)
- [96] Z. Zhang, C. Kleinstreuer e C. S. Kim. *J. Aerosol Sci.* **33**, 257-281 (2002)
- [97] Z. Zhang e C. Kleinstreuer. *J. Aerosol Med.* **14** 13-29 (2001)
- [98] Z. Zhang e C. Kleinstreuer. *Phys. Fluids* **14** 862-880 (2002)
- [99] C. Swirling Caro *Ann. Biomed. Eng.* **29**, S138 (2001).
- [100] R. M. Schreck, *Laminar flow through bifurcations with applications to the human lung*, (Northwestern University thesis, 1972).
- [101] M. Tawhai, A. A. Pullan e P. J. Hunter *Ann. Biomed. Eng.* **28**, 793-802 (2000)
- [102] V. Sauret, K. A. Goatman, J. S. Fleming e A. G. Bailey *Phys. Med. Biol.* **44**, 1625-1638 (1999)
- [103] T. B. Martonen e W. Hofmann *Radiat. Prot. Dosim.* **15**, 225-232 (1986)

- [104] T. Myojo *J. Aerosol Sci.* **18**, 337-347 (1987)
- [105] L. Gradon e D. Orlicki *J. Aerosol Sci.* **21**, 3-19 (1990)
- [106] A. A. Kinsara, R. V. Tompson, S. K. Loyalka, *Health Phys.* **64**, 13 (1993).
- [107] L. Zhang, B. Asgharian, S. Anjilvel, *Aerosol Sci. Technol.* **26**, 97 (1997).
- [108] C. V. Ertbruggen, C. Hirsch, M. Paiva, *J. Appl. Physiol.* **98**, 970 (2005).
- [109] C. S. Kim, D. M. Fischer, *Aerosol. Sci. Technol.* **31**, 198 (1999).
- [110] O. G. Raabe, H. C. Yeh, G. M. Schum e R. F. Phalen *Tracheobronchial geometry: human, dog, rat, hamster* (Lovelace Foundation Report LF-53, 1976)
- [111] L. Koblinger e W. Hofmann *Phys. Med. Biol.* **30**, 541-556 (1985)
- [112] C. S. Kim e A. J. Iglesias *J. Aerosol Med.* **2**, 1-14 (1989)
- [113] C. S. Kim, A. J. Iglesias e L. Garcia *J. Aerosol Med.* **2**, 15-27 (1989)
- [114] I. Balásházy, W. Hofmann e T. B. Martonen *J. Aerosol Sci.* **22**, 15-30.(1991)
- [115] L. Gradon e D. Orlicki, *J. Aerosol Sci.* **21**, 3 (1990)
- [116] K. A. Bell e S. K. Friendlander, *Staub-Reinhalt. Luft.* **33**, 178 (1973)
- [117] K. A. Bell, in *Recent Developments in Aerosol Science* (Wiley, New York, 1978), p. 97
- [118] F. T. Smith, *Proc. R. Soc. London Ser. A* (1976)
- [119] W. E. Pracht e J. U. Brackbill, Los Alamos Scientific Laboratory Reports. LA-6342, UC-32 e UC-34, August 1976
- [120] G. A. Ferron, A. Hillebrecht, J. Peter, E. Priesack, M. Thoma, I. Künzer, R. Mederer e U. G. Klump, *J. Aerosol Sci.* **22**, S809 (1991)
- [121] J. W. Lee e J. H. Goo, *J. Aerosol Med.* **4**, S1, 33 (1991)
- [122] D. L. Koch and R. J. Hill, *Annu. Rev. Fluid Mech.* **33**, 619 (2001).
- [123] C. Tien, *Granular Filtration of Aerosols and Hydrosols* (Butterworths, Boston, 1989).
- [124] C. Ghidaglia, L. de Arcangelis, J. Hinch and E. Guazzelli, *Phys. Rev. E* **53**, R3028 (1996); *Phys. Fluids* **8**, 6 (1996).
- [125] J. Lee and J. Koplik, *Phys. Fluids* **13**, 1076 (2001).
- [126] H. Marshall, M. Sahraoui and M. Kaviani, *Phys. Fluids* **6**, 507 (1993).
- [127] L. M. Levin, Izdatel'stvo Akademii Nauk SSSR (1961), *Eng. Transl. Foreign Techn. Div. Doc. No. FTD-HT-23-1593-67*; N. A. Fuchs, *The Mechanics of Aerosols* (Pergamon, New York, 1964); D. B. Ingham, L. T. Hildyard and M. L. Hildyard, *J. Aerosol Sci.* **21**, 935 (1990).

-
- [128] J. S. Andrade Jr., D. A. Street, T. Shinohara, Y. Shibusa and Y. Arai, Phys. Rev. E **51**, 5725 (1995); H. E. Stanley, J. S. Andrade Jr., S. Havlin, H. A. Makse and B. Suki, Physica A **266**, 5 (1999); J. S. Andrade Jr., U. M. S. Costa, M. P. Almeida, H. A. Makse and H. E. Stanley, Phys. Rev. Lett. **82**, 5249 (1999).
- [129] S. Torquato, *Random Heterogeneous Materials: Microstructure and Macroscopic Properties* (Springer-Verlag, New York, 2001).
- [130] A. D. Araujo, J. S. Andrade Jr. and H. J. Herrmann, Phys. Rev. Lett. **97**, 138001 (2006).
- [131] S. V. Patankar, *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow* (Hemisphere, Washington DC, 1980); The FLUENT (trademark of FLUENT Inc.) fluid dynamics analysis package has been used in this study.
- [132] H. Kitaoka, T. Ryuji e B. Suki *J. Appl. Physiol.* **87**, 2207-2217 (1999)

Livros Grátis

(<http://www.livrosgratis.com.br>)

Milhares de Livros para Download:

[Baixar livros de Administração](#)

[Baixar livros de Agronomia](#)

[Baixar livros de Arquitetura](#)

[Baixar livros de Artes](#)

[Baixar livros de Astronomia](#)

[Baixar livros de Biologia Geral](#)

[Baixar livros de Ciência da Computação](#)

[Baixar livros de Ciência da Informação](#)

[Baixar livros de Ciência Política](#)

[Baixar livros de Ciências da Saúde](#)

[Baixar livros de Comunicação](#)

[Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE](#)

[Baixar livros de Defesa civil](#)

[Baixar livros de Direito](#)

[Baixar livros de Direitos humanos](#)

[Baixar livros de Economia](#)

[Baixar livros de Economia Doméstica](#)

[Baixar livros de Educação](#)

[Baixar livros de Educação - Trânsito](#)

[Baixar livros de Educação Física](#)

[Baixar livros de Engenharia Aeroespacial](#)

[Baixar livros de Farmácia](#)

[Baixar livros de Filosofia](#)

[Baixar livros de Física](#)

[Baixar livros de Geociências](#)

[Baixar livros de Geografia](#)

[Baixar livros de História](#)

[Baixar livros de Línguas](#)

[Baixar livros de Literatura](#)
[Baixar livros de Literatura de Cordel](#)
[Baixar livros de Literatura Infantil](#)
[Baixar livros de Matemática](#)
[Baixar livros de Medicina](#)
[Baixar livros de Medicina Veterinária](#)
[Baixar livros de Meio Ambiente](#)
[Baixar livros de Meteorologia](#)
[Baixar Monografias e TCC](#)
[Baixar livros Multidisciplinar](#)
[Baixar livros de Música](#)
[Baixar livros de Psicologia](#)
[Baixar livros de Química](#)
[Baixar livros de Saúde Coletiva](#)
[Baixar livros de Serviço Social](#)
[Baixar livros de Sociologia](#)
[Baixar livros de Teologia](#)
[Baixar livros de Trabalho](#)
[Baixar livros de Turismo](#)