



Una aproximación algebraica para CFD: Hacia la dosificación de medicamento intravenoso.

A. Arenas-López, C. Hernández-Rosales, R. Femat, N. Carbajal
Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica A.C. (IPICYT)
División de Matemáticas Aplicadas
Camino a la Presa san José 2055, lomas 4ª sección.
[rfemat, heros, alfonso.arenas@ipicyt.edu.mx](mailto:rfemat,heros,alfonso.arenas@ipicyt.edu.mx), teléfono: (52)-444-8342000

Resumen—Se presenta el diseño e implementación de un algoritmo para la simulación computacional de la mecánica de fluidos (CFD por sus siglas en inglés) de una sustancia al ser suministrada por una bomba de infusión por la vía intravenosa. Cabe mencionar que, a pesar de que la mayoría de los bombas existentes en el mercado realizan el suministro en velocidades bajas < 10 cm/s, aún no existen estudios numéricos que describan cuantitativamente lo que sucede dentro del recipiente al realizarse el suministro. De esta forma, la principal contribución del presente trabajo se enmarca en el diseño, y desarrollo de CFD que permita simular el comportamiento de un fluido a través de una jeringa graduada con geometría de tubo recto. De esta forma el CFD diseñado permitirá cuantificar los perfiles del flujo y los gradientes de presión dentro del recipiente, lo cual permitirá en una etapa posterior establecer los rangos de velocidades que eviten regímenes de turbulencia al momento de la dosificación. Además, corroborar parámetros de diseño del dosificador como por ejemplo el torque y velocidad del motor.

Palabras clave: Dinámica Computacional de Fluidos (CFD), Bombas de Infusión, Dosificación de Medicamento.

I. INTRODUCCIÓN

En los últimos años las herramientas computacionales utilizadas para el estudio de fenómenos de transporte han cobrado relevancia principalmente porque han permitido resolver problemas asociados al diseño de equipos en las distintas áreas de la ingeniería. En la actualidad existen paquetes gratuitos y comerciales, algunos de los cuales son de propósitos específicos. Uno de los paquetes comerciales más utilizados es ANSYS, que integra dentro de sus múltiples herramientas a Gambit y FLUENT. Gambit es la encargada de discretizar el espacio en el que resolverán las ecuaciones de transporte, y FLUENT contiene los modelos de flujo y algoritmos computacionales para resolver dichas ecuaciones.

Cabe mencionar que ANSYS está orientada a aplicaciones industriales de espacios geométricos a gran escala, sin embargo tiene la limitante de que el usuario no puede introducir algunas especificaciones del modelo a resolver, por ejemplo el sistema de coordenadas, ya que la mayoría de los modelos integrados en el software se encuentran dadas en coordenadas rectangulares o cilíndricas, aunado a esto su costo es elevado. En el caso de aquellos que son gratuitos el usuario debe seleccionar adecuadamente cada uno de los

bloques que conformarán al CFD, a fin de lograr la compatibilidad entre ellos, principalmente porque hasta el momento solo existen CFD gratuitos que abordan problemas muy específicos. Por esta razón el objetivo del presente trabajo consistió en desarrollar un CFD orientada al área biomédica, que permita simular fenómenos en geometrías simples y complejas (i.e. coordenadas toroidales), donde el usuario pueda programar los modelos matemáticos de acuerdo al tipo de aplicación.

II. MOTIVACIÓN

El área biomédica que se desea abordar está relacionada con la dosificación de medicamento. Un ejemplo de dosificación es encontrada en la Diabetes Mellitus Tipo 1 (DMT1), la cual es un padecimiento crónico-degenerativo que se caracteriza por una nula producción de insulina y se le relaciona con una disfunción de las células beta del páncreas. De tal forma que para sobrevivir el paciente con DMT1 debe suministrarse la insulina de manera externa. Así, parte fundamental en la terapia de este tipo de diabetes es garantizar un suministro preciso del medicamento.

En la terapia tradicional de la DMT1 el suministro es realizado de forma manual usando una jeringa graduada. En la terapia moderna se busca que el suministro sea realizado mediante bombas semiautomáticas que provean dosis constantes a lo largo del tiempo también llamadas “basales” y dosis constantes en un tiempo determinado llamadas “bolus”. Este problema ha sido clasificado como el de páncreas artificial y también incluye algoritmos de control para el cálculo autoajutable en el suministro de insulina.

III. FUNCIONAMIENTO DE LAS BOMBAS COMERCIALES

En la actualidad existen diversos tipos de bombas comerciales que realizan un suministro semiautomático de insulina, algunos de los fabricantes más importantes son; Animas corporation, Deltec company, Disetronics inc. y Minimed Company. La Figura 1 muestra en términos genéricos las etapas principales (mecánica y electrónica) de que consta una bomba comercial (Michael L. Blomquist, 2005), (Soo Bong C., 2005). En estos dispositivos, una alternativa es que la etapa electrónica controle la velocidad angular de un motor de corriente directa, el cuál proporciona mediante una etapa de reducción el torque necesario a la etapa mecánica para dosificar la insulina.

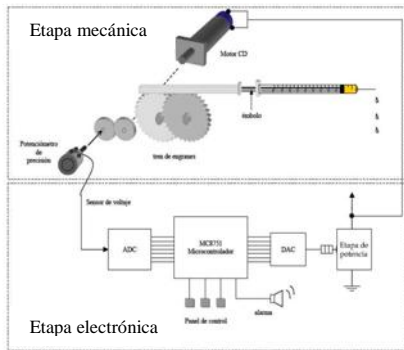


Figura 1. Diagrama esquemático de un dispositivo mecatrónico genérico usado para el suministro de medicamento.

Las dosis que suministran estas bombas son programadas por el usuario mediante un teclado. Con dicha información la etapa electrónica calcula el voltaje necesario para que el motor desplace una determinada distancia al émbolo de la jeringa, la distancia recorrida es proporcional al volumen entregado al paciente. Por otro lado, y a pesar de que estas bombas han ganado aceptación en su uso (Jillweissberg-Benchell y col., 2003), (Pickup y Kenn., 2002). Observamos que existe poca información referente al comportamiento del fluido dentro del contenedor de insulina. Aunado a esto, recientemente se han reportado nuevos esquemas de dosificación variantes en el tiempo como el mostrado en la Figura 2 que prometen mejorar el control de glucosa en pacientes con DMT1 (Ruiz-Velázquez y col., 2004), (Femat y col., 2009). No obstante se puede observar de la Figura 2 que para lograr que la bomba realice el suministro se requerirá acelerar y desacelerar al motor. Esta situación hace necesario simular previamente el comportamiento del medicamento al ser suministrado en tasas.

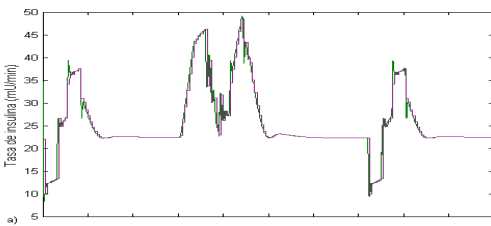


Figura 2. Dosis de Insulina calculados por el algoritmo de control reportado por Ruiz-Velázquez y colaboradores (Femat y col., 2009).

De esta forma, generar herramientas computacionales que permitan estudiar el comportamiento de la insulina en las bombas de infusión actuales, permitirá proveer de elementos científicos que garanticen la confiabilidad de este tipo de dispositivos lo cual podría favorecer o incrementar su uso.

IV. DINÁMICA COMPUTACIONAL DE FLUIDOS (CFD)

La Dinámica Computacional de Fluidos, es una disciplina que concilia dos áreas, por un lado la mecánica de fluidos y por otro la ingeniería de la computación (Ferziger y Peric, 2002). La primera, se emplea para la obtención de los modelos matemáticos que describan el fenómeno que se quiere resolver, y la segunda proporciona los métodos

numéricos y algoritmos computacionales, afín de obtener una aproximación numérica cercana a la solución analítica del problema en cuestión, si es que dicha solución existe.

En la Figura 3 se muestra los bloques principales de que consta un CFD. Haciendo énfasis que nuestra aportación está en el diseño y desarrollo del *Resolvedor*, además de la integración de los tres bloques. En lo que respecta al *Generador de mallas*, hemos elegido uno gratuito que garantiza ortogonalidad entre los nodos y trabaja con coordenadas cilíndricas.



Figura 3. Módulos principales que conforman un CFD.

El *postprocesamiento* fue programado en Matlab y conforma la etapa en la cual se acondicionan y analizan los resultados.

V. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

Hoy en día y gracias a los avances tecnológicos se puede contar con herramientas computacionales más avanzadas tanto en software como en hardware que en décadas pasadas. Las cuales combinadas con un adecuado lenguaje de programación y métodos numéricos apropiados es posible retomar la solución de problemas o modelos matemáticos que en el pasado resultaban difíciles de abordar analíticamente y que ahora es posible afrontarlos desde un enfoque computacional aproximando sus soluciones de forma numérica.

El procedimiento general que se sigue en el área de la CFD consiste en entender el modelo matemático ó la fenomenología del problema en caso de que dicho modelo no exista. En cualquiera de los casos, una vez que se tiene el modelo matemático, se procede a seleccionar el método numérico que permita deducir el modelo numérico, que en conjunto con las condiciones de frontera y las consideraciones realizadas al problema permitan la correcta formulación del mismo.

En lo que respecta a la parte computacional, el reto consiste en diseñar un algoritmo que garantice estabilidad y convergencia numérica de la solución que se desea aproximar. Aunado a esto, la programación del algoritmo debe explotar las herramientas del lenguaje donde será resuelto, a la par de hacer un uso eficiente del hardware en el que se realizará dicha simulación.

Por otra parte, el dominio de simulación, se refiere al espacio geométrico en la cual se simula el fenómeno, en nuestro caso *la jeringa*, consiste de un tubo recto con sección transversal circular y pared rígida. La longitud del tubo es de 10 cm y el radio de la sección transversal es de 1 mm. Cabe señalar que como primera aproximación, se asume que las propiedades físicas de la insulina son similares a las del agua, es decir, se considera que es un fluido de tipo newtoniano y no compresible. Dicha consideración puede ser válida dado a que no se ha encontrado reportes en la literatura de que sea un fluido no-newtoniano. Sin embargo para saber lo anterior, es necesario

caracterizar la insulina e incluir (en un futuro) dichas propiedades. Afortunadamente el algoritmo aquí propuesto (que resuelve el modelo) sería muy similar, ya que solo cambiarían algunos coeficientes o en el peor de los casos se agregaría una ecuación adicional.

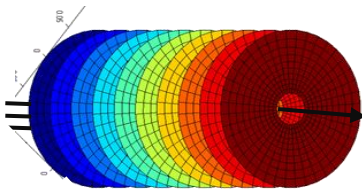
La Tabla 1 muestra la ecuación de continuidad y de momento que describen la mecánica de fluidos en coordenadas cilíndricas; donde u, v y w representan las componentes de la velocidad en las direcciones r, θ, z y ρ es la densidad, P es la presión y ν la viscosidad cinemática (Byron y col., 2007).

Tabla1. Modelo matemático de la mecánica de fluidos en coordenadas cilíndricas (Byron y col., 2007).

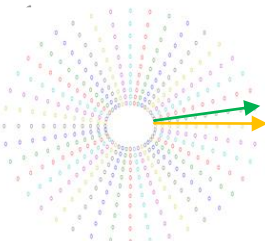
$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (\rho r u) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} (\rho v) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho w) = 0$
$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{v}{r} \frac{\partial u}{\partial \theta} + w \frac{\partial u}{\partial z} - \frac{v^2}{r} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial r} + \frac{\mu}{\rho} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r u) \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 u}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} - \frac{2}{r^2} \frac{\partial v}{\partial \theta} \right]$
$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial r} + \frac{v}{r} \frac{\partial v}{\partial \theta} + w \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{u v}{r} = -\frac{1}{\rho r} \frac{\partial P}{\partial \theta} + \frac{\mu}{\rho} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r v) \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} + \frac{2}{r^2} \frac{\partial u}{\partial \theta} \right]$
$\frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial r} + \frac{v}{r} \frac{\partial w}{\partial \theta} + w \frac{\partial w}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial z} + \frac{\mu}{\rho} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial w}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 w}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right]$

VI. METODOLOGÍA

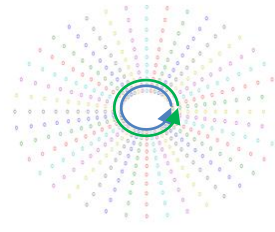
Para poder llevar a cabo la simulación es necesario discretizar el espacio geométrico en el cual el problema será resuelto, al resultado de este proceso se le denomina malla de simulación. La generación de la malla se realiza mediante un software libre llamado **Gen4u**. Para que este programa pueda generar la malla es necesario proporcionarle información acerca del contorno del dominio y del tamaño de lado del elemento deseado. El contorno se especifica mediante unos puntos base, los cuales siempre se consideran parte de la malla, definiendo así una poligonal cerrada. Así, la malla queda formada por un número finito de elementos discretos (nodos) donde se realizan los cálculos de presión y velocidad en cada punto de la malla. La manera en cómo se recorre la malla en las tres direcciones (coordenadas) es usando tres elementos; los cuales hemos denominado *rayos*, *círculos concéntricos* y *discos*. Un disco ver Figura 4(a), es una rebanada de longitud dL que representa una pequeña fracción de la longitud total del tubo.



4(a)



4(b)



4(c)

Figura. 4. Dominio de simulación; (a) discos, (b) rayos, (c) círculos concéntricos.

Un rayo, ver Figura 4(b) son líneas rectas trazadas desde el centro de un disco hasta la pared del tubo. Los círculos concéntricos del disco, ver Figura 4(c), son circunferencias concéntricas cuyo radio debe ser mayor que cero pero menor que el radio total del disco.

La *discretización* es el proceso por el cual se obtiene el modelo numérico y consiste en aproximar las soluciones de las ecuaciones diferenciales a través de un sistema de ecuaciones algebraicas para cierta variable en espacio y tiempo. En esta aplicación para obtener el modelo numérico se aplicó el Método de Diferencias Finitas al conjunto de ecuaciones que se muestran en la tabla 1. La notación utilizada en la discretización permite enumerar con índices escalares las posiciones en los nodos de la malla de simulación i, j y k , y las variaciones en el tiempo con el índice l .

Para iniciar la discretización, se parte del modelo matemático descrito en la Tabla 1, que consiste de un sistema de cuatro ecuaciones diferenciales parciales acopladas con cuatro incógnitas. Una manera de resolver este sistema es expresándolo en términos de una sola variable, la presión. El procedimiento que se propone es el siguiente; de las ecuaciones de momento se despeja las derivadas temporales de la velocidad, $\frac{\partial u}{\partial t}$, $\frac{\partial v}{\partial t}$ y $\frac{\partial w}{\partial t}$. Se discretizan las ecuaciones, donde la presión es promediada temporalmente, en un tiempo pasado y futuro, y es multiplicado por factores de ponderación \Rightarrow y \Leftarrow .

Tabla 2. Ecuaciones discretas de los tres componentes de la velocidad en términos de presión, forzados y difusivos.

$\frac{u^{l+\frac{1}{2}} - u^{l-1/2}}{\Delta t/2} = -\frac{1}{\rho} \left[\alpha \frac{P_{ijk}^{l+\frac{1}{2}} - P_{ij-1jk}^{l+\frac{1}{2}}}{\Delta r} + \beta \frac{P_{ijk}^l - P_{ij-1jk}^l}{\Delta r} \right] - A_{r_{ijk}}^l + B_{r_{ijk}}^l$
$\frac{v^{l+\frac{1}{2}} - v^{l-1/2}}{\Delta t/2} = -\frac{1}{\rho r_i^l} \left[\alpha \frac{P_{ijk}^{l+\frac{1}{2}} - P_{ij-1k}^{l+\frac{1}{2}}}{\Delta \theta} + \beta \frac{P_{ijk}^l - P_{ij-1k}^l}{\Delta \theta} \right] - A_{\theta_{ijk}}^l + B_{\theta_{ijk}}^l$
$\frac{w^{l+\frac{1}{2}} - w^{l-1/2}}{\Delta t/2} = -\frac{1}{\rho} \left[\alpha \frac{P_{ijk}^{l+\frac{1}{2}} - P_{ijk-1}^{l+\frac{1}{2}}}{\Delta z} + \beta \frac{P_{ijk}^l - P_{ijk-1}^l}{\Delta z} \right] - A_{z_{ijk}}^l + B_{z_{ijk}}^l$

Los parámetros de ponderación sirven para garantizar estabilidad numérica y también para involucrar los diferentes pulsos de presión que representan la variación discreta de la presión a lo largo del tiempo. Posteriormente se discretiza la ecuación de continuidad realizando un promediado en dos

tiempos, donde se utilizan los factores de ponderación tal y como se hizo con la presión en la ecuación de momento.

$$\rho\alpha \left[\frac{u_{ijk}^{l+\frac{1}{2}}}{r_i^{l+\frac{1}{2}}} + \frac{u_{i+1jk}^{l+\frac{1}{2}} - u_{ijk}^{l+\frac{1}{2}}}{\Delta r} + \frac{1}{r_i^{l+\frac{1}{2}}} \frac{v_{ij+1k}^{l+\frac{1}{2}} - v_{ijk}^{l+\frac{1}{2}}}{\Delta\theta} + \frac{u_{ijk}^{l+\frac{1}{2}} - u_{ijk}^{l+\frac{1}{2}}}{\Delta z} \right] + \left[\rho\beta \left[\frac{u_{ijk}^l}{r_i^l} + \frac{u_{i+1jk}^l - u_{ijk}^l}{\Delta r} + \frac{1}{r_i^l} \frac{v_{ij+1k}^l - v_{ijk}^l}{\Delta\theta} + \frac{u_{ijk}^{l+1} - u_{ijk}^l}{\Delta z} \right] \right] = 0$$

De la ecuación de momento, se despejan los términos de velocidad expresadas en un tiempo futuro, y se sustituyen cada una de ellas en la ecuación de continuidad, quedando esta última expresada en términos de presión, velocidades, términos forzados y difusivos, en un tiempo pasado y futuro.

Tabla 3. Términos que componen la ecuación de continuidad discreta.

$\frac{u_{ijk}^{l+\frac{1}{2}}}{r_i^{l+\frac{1}{2}}} = -\frac{\Delta t}{2\rho r_i \Delta r} \left[\alpha(P_{ijk}^{l+\frac{1}{2}} - P_{i-1jk}^{l+\frac{1}{2}}) + \beta(P_{ijk}^l - P_{i-1jk}^l) \right] - \frac{\Delta t}{2r_i} (A_{r_{ijk}}^l - B_{r_{ijk}}^l) + \frac{1}{r_i} u_{ijk}^l$
$\frac{u_{i+1jk}^{l+\frac{1}{2}}}{\Delta r} = -\frac{\Delta t}{2\rho \Delta r^2} \left[\alpha(P_{i+1jk}^{l+\frac{1}{2}} - P_{ijk}^{l+\frac{1}{2}}) + \beta(P_{i+1jk}^l - P_{ijk}^l) \right] - \frac{\Delta t}{2\Delta r} (A_{r_{i+1jk}}^l - B_{r_{i+1jk}}^l) + \frac{1}{\Delta r} u_{i+1jk}^l - \left[-\frac{\Delta t}{2\rho \Delta r^2} \left[\alpha(P_{r_{ijk}}^{l+\frac{1}{2}} - P_{i-1jk}^{l+\frac{1}{2}}) + \beta(P_{ijk}^l - P_{i-1jk}^l) \right] \right] - \frac{\Delta t}{2\Delta r} (A_{r_{ijk}}^l - B_{r_{ijk}}^l) + \frac{1}{\Delta r} u_{ijk}^l$
$\frac{v_{ij+1k}^{l+\frac{1}{2}}}{r_i^{l+\frac{1}{2}} \Delta\theta} = -\frac{\Delta t}{2\rho \Delta\theta^2 r_i^2} \left[\alpha(P_{ij+1k}^{l+\frac{1}{2}} - P_{ijk}^{l+\frac{1}{2}}) + \beta(P_{ij+1k}^l - P_{ijk}^l) \right] - \frac{\Delta t}{2\Delta\theta r_i} (A_{\theta_{ij+1k}}^l - B_{\theta_{ij+1k}}^l) + \frac{1}{\Delta\theta r_i} v_{ij+1k}^l - \left[-\frac{\Delta t}{2\rho \Delta\theta^2 r_i^2} \left[\alpha(P_{ijk}^{l+\frac{1}{2}} - P_{ij-1k}^{l+\frac{1}{2}}) + \beta(P_{ijk}^l - P_{ij-1k}^l) \right] \right] - \frac{\Delta t}{2\Delta\theta r_i} (A_{\theta_{ijk}}^l - B_{\theta_{ijk}}^l) + \frac{1}{\Delta\theta r_i} v_{ijk}^l$
$\frac{w_{ijk+1}^{l+\frac{1}{2}}}{\Delta z} = -\frac{\Delta t}{2\rho \Delta z^2} \left[\alpha(P_{ijk+1}^{l+\frac{1}{2}} - P_{ijk}^{l+\frac{1}{2}}) + \beta(P_{ijk+1}^l - P_{ijk}^l) \right] - \frac{\Delta t}{2\Delta z} (A_{z_{ijk+1}}^l - B_{z_{ijk+1}}^l) + \frac{1}{\Delta z} w_{ijk+1}^l - \left[-\frac{\Delta t}{2\rho \Delta z^2} \left[\alpha(P_{ijk}^{l+\frac{1}{2}} - P_{ijk-1}^{l+\frac{1}{2}}) + \beta(P_{ijk}^l - P_{ijk-1}^l) \right] \right] - \frac{\Delta t}{2\Delta z} (A_{z_{ijk}}^l - B_{z_{ijk}}^l) + \frac{1}{\Delta z} w_{ijk}^l$

Las variables que están en tiempos pasados se asumen conocidas y se despejan los términos futuros. La resolución numérica de la presión en el tiempo futuro se hace iterativa hasta lograr convergencia. Una vez que la presión ha convergido, se realiza el cálculo de la velocidad radial tangencial y axial. La Tabla 4 muestra las ecuaciones para el cálculo de la velocidad en la dirección axial, la cual debe calcularse en tres tiempos diferentes para completar un paso de tiempo completo. Se emplea el método IDA puesto que las velocidades u, v, w varían en la dirección radial, tangencial, axial a lo largo del tiempo. El mismo procedimiento se utiliza para realizar los cálculos de la velocidad radial y tangencial, pero por razones de espacio dichas ecuaciones no son mostradas en la tabla 4. Empero el procedimiento para su discretización es similar. Cuando las

velocidades hayan convergido, es posible introducir un nuevo pulso de presión al sistema.

Tabla 4. Discretización de la velocidad axial, que permite calcular su variación en la dirección radial, tangencial y axial del tubo.

$w_{ijk}^{l+\frac{1}{2}} = -\frac{\Delta t}{2\rho} \left[\alpha \frac{P_{ijk}^{l+\frac{1}{2}} - P_{ijk-1}^{l+\frac{1}{2}}}{\Delta z} + \beta \frac{P_{ijk}^l - P_{ijk-1}^l}{\Delta z} \right] - \frac{\Delta t}{2} \left(u_{ijk}^l \frac{w_{ijk}^{l+\frac{1}{2}} - w_{i-1jk}^{l+\frac{1}{2}}}{\Delta r} + \frac{v_{ijk}^l}{r_i^l} \frac{w_{ijk}^l - w_{ij-1k}^l}{\Delta\theta} + w_{ijk}^l \frac{w_{ijk}^l - w_{ijk-1}^l}{\Delta z} \right) + \frac{\Delta t}{2} \left(\mu \left[\frac{u_{i+1jk}^{l+\frac{1}{2}} - 2w_{ijk}^{l+\frac{1}{2}} + w_{i-1jk}^{l+\frac{1}{2}}}{\Delta r^2} + \frac{1}{r_i^{l+\frac{1}{2}}} \frac{w_{ijk}^{l+\frac{1}{2}} - w_{i-1jk}^{l+\frac{1}{2}}}{\Delta r} \right] + \frac{1}{r_i^{l+\frac{1}{2}}} \frac{w_{ij+1k}^{l+\frac{1}{2}} - 2w_{ijk}^{l+\frac{1}{2}} + w_{ij-1k}^{l+\frac{1}{2}}}{\Delta\theta^2} + \frac{w_{ijk+1}^{l+\frac{1}{2}} - 2w_{ijk}^{l+\frac{1}{2}} + w_{ijk-1}^{l+\frac{1}{2}}}{\Delta z^2} \right) + w_{ijk}^l$
$w_{ijk}^{l+\frac{2}{3}} = -\frac{\Delta t}{2\rho} \left[\alpha \frac{P_{ijk}^{l+\frac{1}{2}} - P_{ijk-1}^{l+\frac{1}{2}}}{\Delta z} + \beta \frac{P_{ijk}^l - P_{ijk-1}^l}{\Delta z} \right] - \frac{\Delta t}{2} \left(u_{ijk}^l \frac{w_{ijk}^{l+\frac{1}{2}} - w_{i-1jk}^{l+\frac{1}{2}}}{\Delta r} + \frac{v_{ijk}^l}{r_i^l} \frac{w_{ijk}^{l+\frac{1}{2}} - w_{ij-1k}^{l+\frac{1}{2}}}{\Delta\theta} + w_{ijk}^l \frac{w_{ijk}^l - w_{ijk-1}^l}{\Delta z} \right) + \frac{\Delta t}{2} \left(\mu \left[\frac{u_{i+1jk}^{l+\frac{1}{2}} - 2w_{ijk}^{l+\frac{1}{2}} + w_{i-1jk}^{l+\frac{1}{2}}}{\Delta r^2} + \frac{1}{r_i^{l+\frac{1}{2}}} \frac{w_{ijk}^{l+\frac{1}{2}} - w_{i-1jk}^{l+\frac{1}{2}}}{\Delta r} \right] + \frac{1}{r_i^{l+\frac{1}{2}}} \frac{w_{ij+1k}^{l+\frac{1}{2}} - 2w_{ijk}^{l+\frac{1}{2}} + w_{ij-1k}^{l+\frac{1}{2}}}{\Delta\theta^2} + \frac{w_{ijk+1}^{l+\frac{1}{2}} - 2w_{ijk}^{l+\frac{1}{2}} + w_{ijk-1}^{l+\frac{1}{2}}}{\Delta z^2} \right) + w_{ijk}^{l+\frac{1}{3}}$
$w_{ijk}^{l+1} = -\frac{\Delta t}{2\rho} \left[\alpha \frac{P_{ijk}^{l+\frac{1}{2}} - P_{ijk-1}^{l+\frac{1}{2}}}{\Delta z} + \beta \frac{P_{ijk}^l - P_{ijk-1}^l}{\Delta z} \right] - \frac{\Delta t}{2} \left(u_{ijk}^l \frac{w_{ijk}^{l+\frac{1}{2}} - w_{i-1jk}^{l+\frac{1}{2}}}{\Delta r} + \frac{v_{ijk}^l}{r_i^l} \frac{w_{ijk}^{l+\frac{1}{2}} - w_{ij-1k}^{l+\frac{1}{2}}}{\Delta\theta} + w_{ijk}^l \frac{w_{ijk}^{l+1} - w_{ijk-1}^{l+1}}{\Delta z} \right) + \frac{\Delta t}{2} \left(\mu \left[\frac{u_{i+1jk}^{l+\frac{1}{2}} - 2w_{ijk}^{l+\frac{1}{2}} + w_{i-1jk}^{l+\frac{1}{2}}}{\Delta r^2} + \frac{1}{r_i^{l+\frac{1}{2}}} \frac{w_{ijk}^{l+\frac{1}{2}} - w_{i-1jk}^{l+\frac{1}{2}}}{\Delta r} \right] + \frac{1}{r_i^{l+\frac{1}{2}}} \frac{w_{ij+1k}^{l+\frac{1}{2}} - 2w_{ijk}^{l+\frac{1}{2}} + w_{ij-1k}^{l+\frac{1}{2}}}{\Delta\theta^2} + \frac{w_{ijk+1}^{l+1} - 2w_{ijk}^{l+1} + w_{ijk-1}^{l+1}}{\Delta z^2} \right) + w_{ijk}^{l+\frac{2}{3}}$

La Figura 5 muestra el diagrama de flujo del algoritmo que resuelve el modelo numérico. En la etapa de los coeficientes se definen principalmente las características del dominio de simulación y las propiedades físicas del fluido. La inicialización de las matrices se refiere a la reserva de la memoria para cada una de las variables que serán utilizadas durante el cálculo. Enseguida se muestran la función que realiza el cálculo de la presión a lo largo de todo y cada uno de los nodos del tubo. La presión en la dirección axial forma parte de una de las condiciones de frontera, y se considera positiva y uniforme en todos los nodos del primer disco, esta suposición es válida porque el émbolo que empuja al líquido es plano. La presión en la entrada del tubo es de 0.5 dinas/cm² y en la salida es 0, con lo cual existe un gradiente de presión positivo que provoca un flujo del fluido, y que se espera decaiga conforme se propaga el fluido. Si la aproximación numérica de la presión no converge a la primera iteración a lo largo de todo el tubo, se debe hacer tantas iteraciones como sean necesarias hasta que se logre la convergencia de la presión en todo el tubo, que en este caso la tolerancia es de 1x10⁻⁵. Así una vez que la presión ha convergido, se prosigue a realizar los cálculos de la velocidad. Para el caso del cálculo de las velocidades, se considera que no existe deslizamiento del fluido en las paredes del tubo, lo que equivale a que la derivada de la velocidad u, v, w en estos puntos son cero y forman parte de

las condiciones de frontera. Por otro lado como se asume que el pulso de presión es uniforme en todos los puntos de un mismo disco, se espera que la magnitud de las velocidades radial y tangencial (u, v), sean cercanas a cero, no así la velocidad en la dirección axial.

del modelo numérico se basa principalmente en tratar a las variables como arreglos de matrices.

$$\begin{bmatrix} u_{1,1} & u_{1,1} & u_{1,1} & u_{1,1} & \dots & u_{1,4,1} \\ u_{2,1} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ u_{3,1} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ u_{4,1} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ u_{5,1} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & u_{5,4,1} \end{bmatrix}$$

Figura 6. Matriz bidimensional, en la que se almacena la información generada en cada uno de los nodos del n -ésimo disco.

Por ejemplo la matriz de la velocidad radial puede ser leída de la siguiente forma; cada renglón representa un círculo concéntrico, y cada columna de la matriz, representa un rayo. Los resultados obtenidos del cálculo de un tubo completo fueron guardados en archivos que soportan matrices bidimensionales y tridimensionales. De esta forma haciendo uso de los archivos anteriores, resulta rápido el manejo de la información para acceder, almacenar, modificar y sobre-escribir datos. Lo anterior se ilustra en la Figura 7, en donde cada arreglo bidimensional corresponde a la información de una variable u en todo un disco, La información total del tubo se genera partiendo desde el disco 1 hasta el disco n . Cabe señalar que arreglos similares son requeridos para almacenar la presión y velocidad en las 3 direcciones.

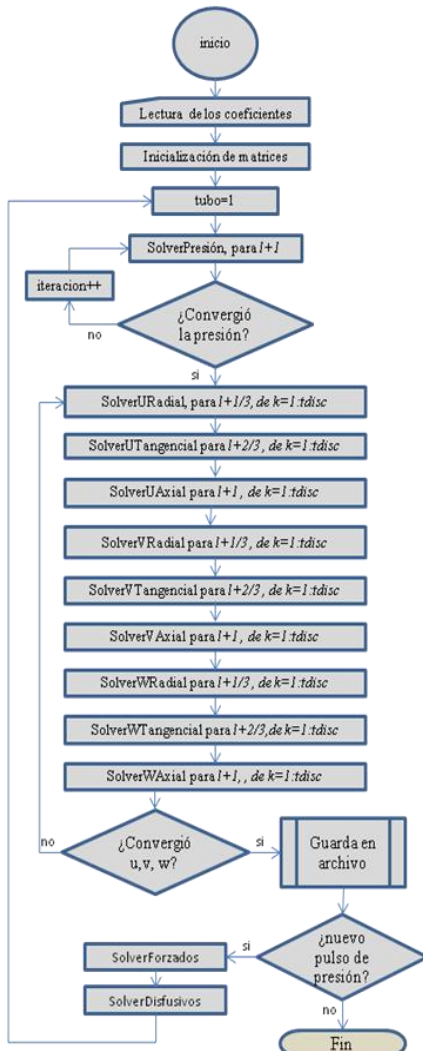


Figura 5. Diagrama de flujo del algoritmo computacional que resuelve el modelo numérico.

Cabe señalar que debido a la naturaleza de las ecuaciones del modelo matemático las componentes del vector velocidad varían tanto temporal y espacialmente en las tres direcciones, así lo que se sugiere en el modelo numérico es realizar el cálculo de las velocidades en cada una de las tres direcciones a lo largo de todo el tubo ver Figura 5. De la misma forma que para la presión, se realizan las iteraciones necesarias hasta que se logre convergencia numérica de las velocidades de acuerdo a la tolerancia establecida.

Como una primera versión, y a fin de lograr una rápida implementación del modelo numérico obtenido, se utilizó el software de MATLAB®. Para aprovechar las características del lenguaje seleccionado se guardó especial cuidado en la discretización del modelo matemático, de manera tal que el conjunto de operaciones a realizar pudieran ser calculadas por medio del álgebra de matrices. Así que la programación

Figura 7. Arreglo matricial tridimensional donde se almacena la información correspondiente a una de las componentes del vector velocidad.

El proceso de *postprocesamiento* se refiere al acondicionamiento y visualización de los resultados. En este caso la información que nos interesa analizar es la magnitud de los gradientes de presión y de las velocidades. Visualizar los datos por medio de gráficas resulta útil en el proceso de validación de los resultados, además de que facilita la depuración del código. Para la parte de visualización y gracias a que se guardó especial cuidado en el almacenamiento de la información bajo el formato propio de MATLAB®, solo se requiere direccionar la información y graficarla mediante la función *quiver3*, este comando despliega en pantalla los perfiles de velocidad en 3D correspondientes a cada uno de los discos que componen el tubo.

VII. RESULTADOS

Un criterio fundamental en el algoritmo numérico que se propone es garantizar la convergencia de la presión a lo

largo de todo el tubo, principalmente porque es quien provee la energía que provoca el movimiento del fluido. Numéricamente hablando significa que una vez que la presión ha convergido es posible garantizar la convergencia de las velocidades. La Figura 8 muestra la forma en cómo la presión va convergiendo hacia el criterio preestablecido.

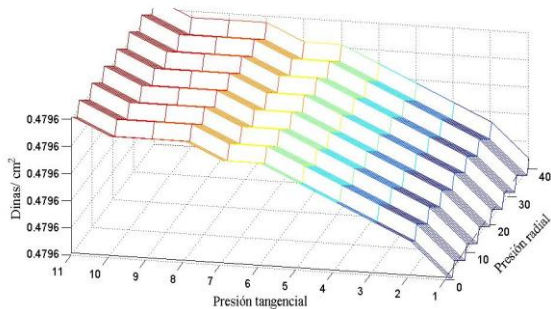


Figura 8. Descripción cuantitativa de la convergencia de la presión en un disco la cual está dada en din/cm^2 .

Esto se corrobora porque la magnitud de la pendiente del escalonamiento de un mismo disco va disminuyendo, conforme aumenta el número de iteraciones a lo largo de todo el tubo. Para nuestro caso se dice que ya convergió cuando los valores ya no cambian entre una iteración y otra, por ejemplo en la Figura 8, el valor superior de la presión es $.4795851499$ y el valor inferior es 0.4795849 , de tal manera que si se toma como criterio de convergencia 1×10^{-5} , la convergencia ha sido alcanzada, lo que visualmente sería que la pendiente del escalón es prácticamente cero. Cabe precisar que para este caso el número de iteraciones necesarias para alcanzar la convergencia fue de 100,000, lo que en tiempos de cómputo equivale a aproximadamente a una hora. Una vez que se ha logrado la convergencia de la presión, y de acuerdo a la Figura 5, se debe hacer el cálculo del vector velocidad.

La Figura 9 muestra el perfil de velocidades para un pulso inicial de $0.5 \text{ din}/\text{cm}^2$, en la Figura 9(a) se observa que el perfil del fluido es parabólico, lo cual concuerda cualitativamente con el comportamiento de este tipo de fluido en un tubo recto, con esto podemos decir que los resultados que provee el algoritmo propuesto son congruentes. Para este caso solo se muestra una sección del tubo de longitud $dL=0.1\text{cm}$, y en dicha sección se encuentra un total de 100 discos, de los cuales solo se muestran el disco 2, 22, 42, 62 y 82, cuyas velocidades máximas son 3.71×10^{-6} , 2.49×10^{-6} , 2.48×10^{-6} , 2.485×10^{-6} y 2.483×10^{-6} respectivamente. La Figura 9(b) muestra como decrece la magnitud del vector velocidad a lo largo de todo el tubo dado el gradiente de presión, con lo cual se corrobora la convergencia de la velocidad tal y como se esperaría para este tipo de fluidos.

Cabe señalar que la convergencia es una de las tareas más costosas durante el proceso de la resolución numérica en cuanto a tiempo de cómputo se refiere, sin embargo es la más importante pues de ello depende la confiabilidad de los resultados.

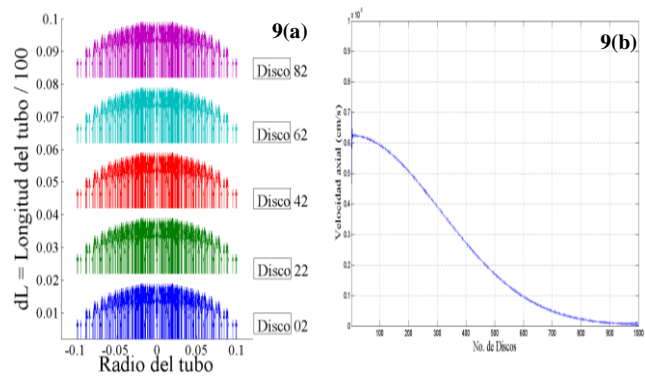


Figura 9. Descripción cuantitativa de los perfiles de velocidad en cm/s , (a) en diferentes discos del dominio de simulación, (b) a lo largo de todo el tubo.

VIII. CONCLUSIONES Y TRABAJO FUTURO

En este artículo se mostró el desarrollo de un algoritmo computacional que forma parte de un CFD que permitirá resolver el modelo numérico que describe la mecánica de un fluido fluyendo a través de un tubo recto, no obstante que este problema ya ha sido resuelto, lo relevante de esto es la herramienta aquí desarrollada que permitirá en una etapa posterior del proyecto encontrar un rango de velocidades confiables en la dosificación de medicamento (insulina).

Por otra parte y gracias a las características de los componentes que conforman nuestro CFD será posible resolver modelos no solo en coordenadas cilíndricas, sino en general en coordenadas curvilíneas (i.e. toroidales) que permitirán resolver problemas en geometrías más complejas y en otro tipo de áreas, como por ejemplo en lo referente a la simulación numérica en venas y arterias que poseen curvatura variable.

IX. REFERENCIAS

- Animas Corporation: <http://www.animascorp.com/>, Deltec Compañy: <http://www.cozmorc.com/>, Disetonic Inc.: <http://www.disetronic-usa.com/>, Minimed Compañy: <http://www.minimed.com/>, Omnipod Compañy: <http://www.myomnipod.com/>, SooilUSA: <http://www.sooil.com/english/products>
- Blomquist M., (2005), Programmable insulin pump, United State Patent No.: 6,852,104 B2, assignee: Smiths medical MD, Inc., Date of patent: February 8.
- Soo Bong C., (2005), Portable automatic insulin syringe device with blood sugar measuring function, united state patent No.: 6,875,195 B2, Date of patent: Apr. 5.
- Jillweissberg-Benchell, Antisdell-Lomaglio J., Seshadri R., (2003) Insulin Pump therapy: A Meta-análisis, Diabetes Care, 26, No.4.
- Pickup J., Frcpath D., Keen H., et, al., (2002) Continuous Subcutaneous Insulin Infusion at 25 Years: Evidence base for the expanding use of insulin pump therapy in type 1 diabetes, Diabetes Care, 25, No.3.
- Ruiz-Velázquez E., Femat R., Campos-Delgado D.U., (2004), Blood glucose control for type I diabetes mellitus: A robust tracking approach, Control Engineering Practice, 12, No.9, pp. 1179-1195.
- Femat R., Ruiz-Velázquez E., Quiroz G., (2009), Weighting Restriction for Intravenous Insulin Delivery on T1DM Patient via H-infinity Control. IEEE Transactions on automation science and engineering, 6, 239-247.
- Ferziger J.H., Peric M., (2002), Computational for Fluid Dynamics, 3rd Edition, Springer, ISBN 3-540-42074-6.
- Byron Bird R., Warren Stewart E., Lightfoot E., (2007), Transport Phenomena, 2nd Edition, John Wiley & Sons inc., ISBN 978-0-470-11539-8.