
doi: <https://doi.org/10.15407/dopovidi2019.02.040>

УДК [532.54:532.72:615.002.5]:51.001.57

**А.Ф. Булат¹, В.І. Єлісеєв¹, Ю.П. Совіт²,
Р.Н. Молчанов³, О. Блюсс⁴**

¹ Інститут геотехнічної механіки ім. М.С. Полякова НАН України, Дніпро

² Дніпровський національний університет ім. Олеся Гончара

³ ДЗ “Дніпропетровська медична академія МОЗ України”, Дніпро

⁴ Лондонський університет королеви Марії, Великобританія

E-mail: igtmanu@ukr.net

Математичне моделювання конвективно-дифузійного масопереносу в комірці гемодіалізного апарата

Представлено академіком НАН України А.Ф. Булатом

На основі теорії масопереносу і аналізу задачі гемодіалізу запропоновано математичну модель комірки гемодіалізного апарата. Отримано відносні витрати нейтральних компонентів і їх розподіл в розрахунковій області з урахуванням гідродинамічного впливу напівпроникної мембрани. Показано можливість регулювання витратами компонентів за допомогою профілювання опору мембрани.

Ключові слова: гемодіаліз, масоперенос, дифузія, розподіл компонентів.

Створення нових матеріалів і розвиток мембранних технологій [1, 2] уможливили розробку більш сучасного медичного обладнання, зокрема апаратів для сепарації і очищення крові. Штучне очищення крові в сучасній медицині загально визнане і використовується як ефективний метод для іонного гомеостазу, детоксикації і дегідратації організму [3]. Одним із перспективних напрямів використання діалізу є контрольована доставка препаратів [4]. Цей метод може застосовуватися для рівномірної доставки ліків в організм, а також в багатьох технологічних процесах інших галузей. Процес гемодіалізу пов'язаний з перебігом складних масообмінних процесів у каналах, що розділені мембранними перегородками, через які фільтрується рідина і дифундують низькомолекулярні компоненти крові: сечовина, креатинін, токсичні речовини тощо. Основою гемодіалізного апарата є пучок порожнистих волокон, стінки яких є напівпроникними мембранами. Всередину волокна подається кров пацієнта, а в міжволоконний простір — діалізний розчин, як правило, в протитечії. Внаслідок перепаду тиску на мембрані потік рідини, що становить 90 % плазми крові, разом з метаболітами фільтрується в діалізний канал, через що концентрація формених елементів і протеїнів у волокні збільшується, що супроводжується підвищенням в'язкості крові. Кров є гетерогенним середовищем, вона складається з кров'яних клітин (формені елементи — дис-

© А.Ф. Булат, В.І. Єлісеєв, Ю.П. Совіт, Р.Н. Молчанов, О. Блюсс, 2019

персне середовище) і дисперсійно плинної маси — плазми. Плазма являє собою біологічний колоїдний розчин, що містить як низькомолекулярні речовини, так і високомолекулярні білкові сполуки. В цілому процес гемодіалізу розглядається на сьогодні як з гідродинамічних позицій [5, 6], так і на засадах теорії конвективно-дифузійного масопереносу за наявності молекулярної взаємодії компонентів з поверхнями апарату [7, 8]. У цій роботі на основі математичної моделі розглянуто деякі питання масопереносу, які мають істотне значення в практиці гемодіалізу і в інших мембранних технологіях.

Математична модель масопереносу. Основне рівняння для електрично нейтральних компонентів можна записати у вигляді [9]

$$\frac{\partial(\rho_J c_{K,J})}{\partial t} + u_J \frac{\partial \rho_J c_{K,J}}{\partial x} + v_J \frac{\partial \rho_J c_{K,J}}{\partial r} = \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\rho_J D_{K,J} \frac{\partial c_{K,J}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{r \partial r} \left(\rho_J D_{K,J} r \frac{\partial c_{K,J}}{\partial r} \right) \right] + J_J, \quad (1)$$

де t — час; x, r — система координат; u_J, v_J — компоненти швидкості; $c_{K,J}$ — концентрація дослідної компоненти; $D_{K,J}$ — коефіцієнти дифузії; J_J визначає зміну концентрації; індекс $J = C, M, D$ позначає область течії: в капілярі (C), мембрані (M) і діалізному каналі (D); індекс K належить до компонентів: $K = 1$ — досліджуваний компонент, що знаходиться в крові і дифундує в діалізний розчин; $K = 2$ — досліджуваний компонент, що знаходиться в діалізному розчині і дифундує в капіляр. Прийmemo в подальшому, що $J_J = 0$; коефіцієнти дифузії в кожній з областей різні, але постійні; густина рідини в капілярі змінюється тільки уздовж капіляра, а густина рідин у мембрані і діалізному каналі постійні і дорівнюють один одному, тобто $\rho_M = \rho_D$. Як граничні умови використовуватимемо відомі з теорії масообміну співвідношення [10]: рівності масових потоків і концентрацій. Так, зокрема, на границях капіляр — мембрана і мембрана — діалізний канал умови для концентрацій мають вигляд

$$c_{K,M}(x, r)_{r=R_C} = H_{K,MC} c_{K,C}(x, r)_{r=R_C},$$

$$c_{K,M}(x, r)_{r=R_M} = H_{K,MD} c_{K,D}(x, r)_{r=R_M},$$

де R_C — радіус капіляра, він же внутрішній радіус мембрани; R_M — зовнішній радіус мембрани, або внутрішній радіус діалізного каналу; $H_{K,MC}$ і $H_{K,MD}$ — коефіцієнти Генрі. Для пасивних щодо розчину мембран можна прийняти, що $H_{K,MC} = (\rho_D / \rho_C)$ і $H_{K,MD} = 1$. На осі капіляра виконуються умови симетрії, на стінці діалізного каналу — умови рівності нулю потоків. У торцевих ділянках комірки співвідношення мають такий вигляд: у капілярі, де L — довжина капіляра,

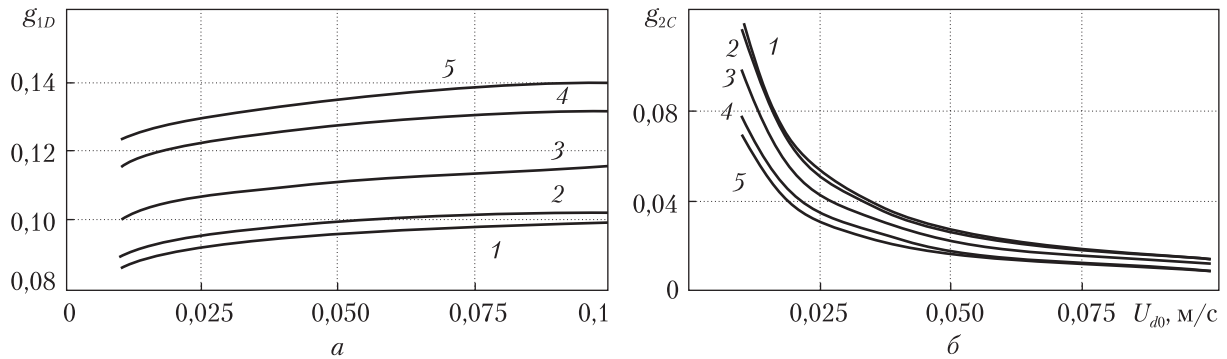
$$c_{1,C}(0, r) = C_{C0}, \quad (\partial c_{1,C} / \partial x)_{x=L} = 0; \quad (2)$$

$$[u_C - D_{2,C} (\partial c_{2,C} / \partial x)]_{x=0} = 0, \quad (\partial c_{2,C} / \partial x)_{x=L} = 0;$$

у діалізному каналі

$$(\partial c_{1,D} / \partial x)_{x=0} = 0, \quad [u_D - D_{1,D} (\partial c_{1,D} / \partial x)]_{x=L} = 0; \quad (4)$$

$$(\partial c_{2,D} / \partial x)_{x=0} = 0, \quad c_{2,D}(L, r) = C_{D0};$$



Зміна відносної витрати компонента 1 на виході з діалізного каналу (а) і з капіляра (б) залежно від величини U_{D0} і коефіцієнта a_C ($U_{C0} = 0,01$ м/с): 1 – $a_C = 0,001$; 2 – 0,01; 3 – 0,04; 4 – 0,08; 5 – 0,1

у мембрані має місце рівність нулю потоків досліджуваних компонентів. Виписана система рівнянь і граничних умов досить загальна, що дає можливість моделювати складні випадки масообміну. Відзначимо, що значення швидкості u_J, v_J знаходяться, як правило, з розв'язку гідралічної задачі. З огляду на квазілінійний характер течії з метою отримання закономірностей масопереносу, пов'язаного з подачею деякого компонента в діалізний розчин, можна розглядати зворотню задачу, тобто задавати профіль поздовжньої і поперечної швидкості відповідно, а потім профілювати опір мембрани. Як приклад розглянемо таку модельну задачу. Прийmemo, що швидкість у капілярі має профіль Пуазейля і подана у вигляді

$$u_C = U_{C0} [1 - (a_C + b_C \zeta) \zeta] (1 - \eta^2),$$

де $\zeta = x/L$, $\eta = r/R_C$, a_C і b_C – коефіцієнти, що характеризують перетікання рідини, що фільтрується через мембрану. У дослідженні для модельного уявлення була взята наведена залежність зміни швидкості крові в капілярі, яка може бути доповнена відповідно до чисельного розв'язку гідралічної задачі. Густина крові, що записана у вигляді $\rho_C = \alpha_R \rho_R + \alpha_P \rho_P + \alpha_F \rho_F$, де ρ_R, ρ_P, ρ_F – густина розчину, що фільтрується ($\rho_R = \rho_D$), протеїнів у плазмі і формених елементів відповідно; $\alpha_R, \alpha_P, \alpha_F$ – об'ємна частка цих компонентів крові, визначається за умов збереження маси, кожного з цих компонентів. Було прийнято, що всі компоненти крові мають одну й ту саму поздовжню швидкість. Беручи до уваги, що $\alpha_R + \alpha_P + \alpha_F = 1$, за умов збереження маси визначаються відповідні залежності зміни об'ємної частки компонентів уздовж поздовжньої осі. Це, у свою чергу, дає можливість знайти значення поперечної швидкості, як у капілярі, мембрані, так і в діалізному каналі.

Розв'язання виписаної системи проводилося чисельно явним методом після обезрозмірювання і введення масштабу часу $T = R_C^2/D$. У розрахунках було прийнято: $L = 30$ см, $R_C = 0,3$ мм; $R_M = 0,35$ мм; $R_D = 0,7$ мм; $D = (10)^{-9}$ м²/с; $D_{1,C} = D_{2,C} = 0,9D$; $D_{1,M} = D_{2,M} = 0,2D$; $D_{1,D} = D_{2,D} = D$; $\alpha_{F0} = 0,4$; $\alpha_{P0} = 0,1$; $\rho_F = 1090$ кг/м³; $\rho_{PL} = \alpha_{R0} \rho_R + \alpha_{P0} \rho_P = 1020$ кг/м³ (густина плазми крові); $\rho_R = 1000$ кг/м³ [6, 7].

Результати розв'язання показані на рисунку: $a - g_{1D} = G_{1D}/G_{10}$, $b - g_{2C} = G_2 / G_{20}$, де G_{10}, G_{1D} – масова витрата першого досліджуваного компонента на вході в капіляр і на

виході з діалізного каналу відповідно; G_{20} , G_{2C} — масова витрата другого досліджуваного компонента на вході в діалізний канал і на виході з капіляра відповідно.

На рисунку, *a* наведені залежності g_{1D} від швидкості U_{D0} для різних значень a_C при $b_C = 0$. У випадку малих значень a_C (0,001 і 0,01) маємо практично дифузійне перенесення компонента 1 з капіляра в діалізний канал. Зі збільшенням значення a_C роль фільтраційної швидкості зростає, внаслідок чого витрата компонента 1 у діалізному каналі помітно підвищується. Вплив швидкості діалізного розчину в межах вказаного інтервалу швидкостей на перенесення компонента 1 порівняно невелика. Воно, звичайно, пов'язано з винесенням даного компонента від зовнішньої поверхні мембрани всередину каналу за рахунок поперечної швидкості і за рахунок осьової швидкості до вихідного перетину.

Аналіз залежностей відносних витрат g_{2C} (див. рисунок, *b*) показує, що досліджуваний компонент проникає в капіляр з кров'ю з діалізного розчину, при цьому його величина слабо зростає зі збільшенням швидкості розчину, хоча його відносна величина швидко падає. Величина фільтраційного потоку сильно впливає на відношення G_{2C}/G_{20} . Залежності 1 і 2 практично збігаються, що також підтверджує практично дифузійне перенесення компонента при таких значеннях швидкості фільтрації. Далі із зростанням коефіцієнта a_C зменшується потік з діалізного каналу. Це природно, тому що конвективна складова процесу стає більшою від дифузійної. Розрахунки були проведені до $a_C = 0,1$, з подальшим збільшенням параметра a_C відношення G_{2C}/G_{20} стає приблизно однаковим з розрахунковою помилкою.

Величину проникнення різних речовин можна регулювати, як шляхом зміни перетікання рідини, що фільтрується, так і за умови утримання загального перетікання, але за рахунок профілювання опору мембран, відповідно за визначеними величинами a_C і b_C . Таким чином, за допомогою моделювання процесу гемодіалізу доведено можливість підвищення його ефективності шляхом регульованого перетікання компонентів.

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. Брык М.Т., Цапюк Е.А. Ультрафильтрация. Киев: Наук. думка, 1989. 288 с.
2. Брык М.Т., Голубев В.Н., Чагаровский А.П. Мембранная технология в пищевой промышленности. Киев: Урожай, 1991. 224 с.
3. Стецюк Е.А. Основы гемодиализа. Москва: ИД ГЭОТАР-МЕД, 2001. 392 с.
4. Pallone T.L., Hyver S., Petersen J. The simulation of continuous arteriovenous hemodialysis with a mathematical model. *Kidney Int.* 1989. **35**. P. 125–133.
5. Eloot S. Experimental and numerical modeling of dialysis: PhD dissertation / Ghent University, Gent, 2004.
6. Каграманов Г.Г. Диффузионные мембранные процессы: учеб. пособие. Москва: РХТУ им. Менделеева, 2009. 73 с.
7. Aniot J., Chupin L., Cîndea N. Mathematical model of calcium exchange during hemodialysis using a citrate containing dialysate. *Math. Med. Biol.* 2018. **35**, suppl. 1. P. 87–120. doi: <https://doi.org/10.1093/imammb/dqx013>
8. Annan K. Mathematical modeling for hollow fiber dialyzer: blood and HCO_3^- dialysate flow characteristics. *Int. J. Pure Appl. Math.* 2012. **79**, № 3. P. 425–452.
9. Эрдеи-Груз Т. Явления переноса в водных растворах. Москва: Мир, 1986. 595 с.
10. Дытнерский Ю.И. Процессы и аппараты химической технологии. Ч. 2. Массообменные процессы и аппараты. Москва: Химия, 1995. 366 с.

Надійшло до редакції 04.12.2018

REFERENCES

1. Bryik, M. T. & Tsapyuk, E. A. (1989). Ultrafiltration. Kiev: Naukova Dumka (in Russian).
2. Bryik, M. T. Golubev, V. N. & Chagarovskiy, A. P. (1991). Membrane technology in the food industry. Kiev: Urozhay (in Russian).
3. Stetsyuk, E. A. (2001). Basics of hemodialysis. Moscow: GEOTAR-MED (in Russian).
4. Pallone, T. L., Hyver, S. & Petersen, J. (1989). The simulation of continuous arteriovenous hemodialysis with a mathematical model. *Kidney Int.*, pp. 125-133.
5. Eloot, S. (2004). Experimental and numerical modeling of dialysis (PhD dissertation). Ghent University, Ghent (in Belgium).
6. Kagramanov, G. G. (2009). Diffusion membrane processes: tutorial. Moscow: RHTU im. Mendeleeva (in Russian).
7. Aniort, J., Chupin, L. & Cindea, N. (2018). Mathematical model of calcium exchange during hemodialysis using a citrate containing dialysate. *Math. Med. Biol.*, 35, suppl. 1, pp. 87-120. doi: <https://doi.org/10.1093/imammb/dqx013>
8. Annan, K. (2012). Mathematical modeling for hollow fiber dialyzer: blood and HCO_3^- dialysate flow characteristics. *Int. J. Pure Appl. Math.*, 79, No. 3, pp. 425-452.
9. Erdei-Gruz, T. (1986). Transfer phenomena in aqueous solutions. Moscow: Mir (in Russian).
10. Dyinerskiy, Yu. I. (1995). Processes and devices of chemical technology. Pt. 2. Mass transfer processes and devices. Moscow: Khimiya (in Russian).

Received 04.12.2018

*А.Ф. Булат*¹, *В.И. Елисеев*¹, *Ю.П. Совит*², *Р.Н. Молчанов*³, *О. Блюсс*⁴

¹ Институт геотехнической механики им. Н.С. Полякова НАН Украины, Днепро

² Днепропетровский национальный университет им. Олеса Гончара

³ ГУ “Днепропетровская медицинская академия МОЗ Украины”, Днепро

⁴ Лондонский университет королевы Марии, Великобритания

E-mail: igtmnanu@ukr.net

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КОНВЕКТИВНО-ДИФФУЗИОННОГО МАССОПЕРЕНОСА В ЯЧЕЙКЕ ГЕМОДИАЛИЗНОГО АППАРАТА

На основе теории массопереноса и анализа задач гемодиализа предложена математическая модель ячейки гемодиализного аппарата. Получены относительные расходы нейтральных компонентов и их распределения в расчетной области с учетом гидродинамического влияния полупроницаемой мембраны. Показана возможность регулирования расходами этих компонентов с помощью профилирования сопротивления мембраны.

Ключевые слова: гемодиализ, массоперенос, диффузия, распределение компонентов.

*A.F. Bulat*¹, *V.I. Eliseev*¹, *Yu.P. Sovit*², *R.N. Molchanov*³, *O. Blyuss*⁴

¹ N. Polyakov Institute of Geotechnical Mechanics of the NAS of Ukraine, Dnipro

² Oles Honchar Dnipro National University

³ “Dnipropetrovsk Medical Academy of the Ministry of Health of Ukraine”, Dnipro

⁴ Queen Mary University of London, United Kingdom

E-mail: igtmnanu@ukr.net

MATHEMATICAL MODELING OF THE CONVECTIVE-DIFFUSIVE MASS TRANSFER IN A HEMODIALYSIS CELL

A mathematical model of a hemodialysis cell is proposed based on the theory of mass transfer and the analysis of the hemodialysis problem. Relative costs of the neutral components and their distributions in the calculated area are obtained with the hydrodynamic effect of a semipermeable membrane taken into account. The ability to regulate the costs of these components by profiling the membrane resistance is shown.

Keywords: hemodialysis, mass transfer, diffusion, distribution of components.