Вычислительный фреймворк для электромеханической модели сердца

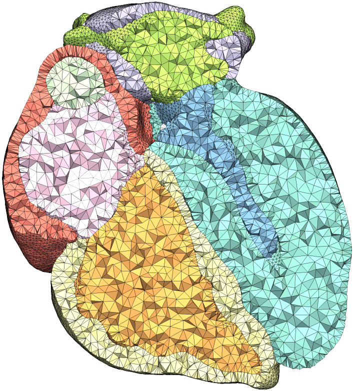
А. Легкий[1,2], А. Чернышенко[1]

[1] Институт вычислительной математики им. Г.И. Марчука
[2] Московский физико-технический институт

BIOMATH 2020. 3 ноября 2020

Modelling components for cardiac electromechanics

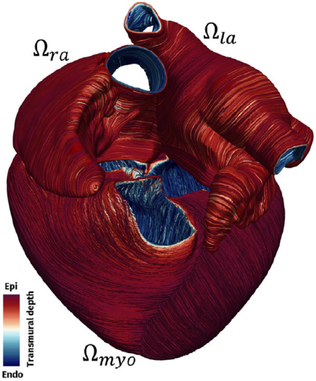
1. Geometrical models + mesh generation



- VHP heart or ceCT/MRI data
- User-guided ITK-SNAP based segmentation
- CGAL/Gmsh + Ani3d

Modelling components for cardiac electromechanics

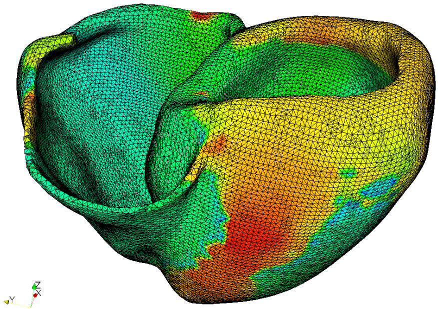
1. Geometrical models + mesh generation
2. Tissue anisotropy - rule-based methods



- **Ventricles**: Bayer JD, ..., Trayanova N., *A novel rule-based algorithm for assigning myocardial fiber orientation to computational heart models, 2012*
- **Atria**: Piersanti R, ..., Quarteroni A., *Modeling cardiac muscle fibers in ventricular and atrial electrophysiology simulations, 2020*

Modelling components for cardiac electromechanics

1. Geometrical models + mesh generation
2. Tissue anisotropy - rule-based methods
3. Equations and numerical schemes



- Electophysiology: monodomain/bidomain equaitons
- Ionic model (CellML model repository)
- Mechanics: active strain/active stress model

Bidomain problem

Domain Ω with boundary $\partial\Omega$

ϕ_e extracellular electrical potential

v transmembrane voltage

$$\begin{aligned} \chi\left(C_m\frac{\partial v}{\partial t} + I_{ion}(\mathrm{w}, v)\right) - \nabla\cdot(\sigma_{\mathrm{i}}\nabla(v+\phi_e)) &= I_i, \\ \nabla\cdot((\sigma_{\mathrm{i}}+\sigma_{\mathrm{e}})\nabla\phi_e + \sigma_{\mathrm{i}}\nabla v) &= -I_{total}, \\ \frac{\partial \mathrm{w}}{\partial t} &= \mathrm{f}(\mathrm{w}, v), \end{aligned}$$

+ b.c.

C_m cell membrane capacitance, χ - cell membrane surface-to-volume ratio

σ_i & σ_e intra- & extracellular conductivity tensors

I_i, I_e intra- and extra-cellular stimulus currents

$I_{\text{total}} = I_i + I_e$ total stimulus current

I_{ion} - current in ionic channels, f cellular model, w - state variables

Numerical methods

- FEM discretization on tetrahedral meshes
- implicit first order/BDF2 time scheme

FEM system for bidomain problem

$$\begin{bmatrix} \kappa M + K_i & K_i \\ K_i & K_{i+e} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v^{n+1} \\ \phi_e^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} M(\kappa v^n - \chi i_{ion} + i_i) \\ M i_{total} \end{bmatrix},$$

FEM system for monodomain problem

$$[\kappa M + K]\, v^{n+1} = M(\kappa v^n - \chi i_{ion}^n + i_{stim})$$

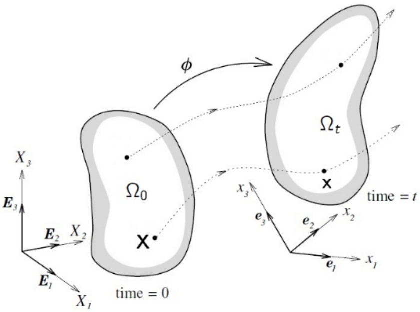
M - mass matrix, K_i, K_{i+e} stiffness matrices
i_{ion}, i_i, i_{total} - vectors of currents and stimulus.
$\kappa = \chi C_m/\tau$, τ - timestep

Parallel implementation

- Finite Element Method: Ani3D framework, BCGStab linear solver + ILU(0) preconditioner
- INMOST platform for MPI parallelization, ParMETIS for partitioning
- ODEs parallelization:
  1. CVODE solver and OpenMP
  2. Massively Parallel GPU-ODE Solver (MPGOS)

- **Verification:** A. Chernyshenko, A. Danilov, Y.Vassilevski, *Numerical Simulations for Cardiac Electrophysiology Problems// BIOMAT 2018 book.*
- **Parallel Performance:** A. Chernyshenko, A. Danilov, V. Kramarenko, *Coupling of PDE and ODE Solvers in INMOST Parallel Platform: Application to Electrophysiology//RuSCDays 2019*

Mechanics



- $X \in \Omega_0$ - начальное состояние, $x \in \Omega_t$ - текущее состояние
- $x = \phi(X, t)$ - деформация
- $u = x - X$ - перемещение
- $\mathbb{F}$ - градиент деформации, $\mathbb{E}$ - тензор деформации Коши-Грина

$$\mathbb{F} = \frac{\partial \phi}{\partial \mathrm{X}} = \mathbb{I} + \frac{\partial \mathrm{u}}{\partial \mathrm{X}}, \;\; \mathbb{E} = \frac{1}{2}(\mathbb{F}^T\mathbb{F} - \mathbb{I}), \;\; J = \det \mathbb{F}$$

Уравнения модели:

- Уравнение равновесия ($\mathbb{P}$ - первый тензор напряжений Пиола-Кирхгофа):

$$-\nabla_j \mathbb{P}_{ij} = 0 \ \textit{в} \ \Omega^0$$

- Условие несжимаемости:

$$J - 1 = 0 \ \textit{в} \ \Omega^0$$

- Смешанные граничные условия ($\partial\Omega^0 = \Gamma_D \cup \Gamma_N \cup \Gamma_p$):

$$\mathrm{u} = 0 \ \textit{на} \ \Gamma_D, \ \ \mathbb{P}\cdot\mathrm{n} = 0 \ \textit{на} \ \Gamma_N, \ \ \mathbb{P}\cdot\mathrm{n} = -p_0\mathbb{I}\cdot\mathrm{n} \ \textit{на} \ \Gamma_p$$

- Условие гиперупругости, несжимаемости *и наличие активного напряжения* ($\mathcal{W}$ - упругий потенциал, p - множитель Лагранжа, f - направление волокон):

$$\mathbb{P} = \mathbb{F}\frac{\partial\mathcal{W}}{\partial\mathbb{E}} - pJ\mathbb{F}^{-T}$$

Cardiac mechanic equations

Уравнения модели:

- Уравнение равновесия ($\mathbb{P}$ - первый тензор напряжений Пиола-Кирхгофа):

$$-\nabla_j \mathbb{P}_{ij} = 0 \text{ } \textit{в} \text{ } \Omega^0$$

- Условие несжимаемости:

$$J - 1 = 0 \text{ } \textit{в} \text{ } \Omega^0$$

- Смешанные граничные условия ($\partial\Omega^0 = \Gamma_D \cup \Gamma_N \cup \Gamma_p$):

$$\mathrm{u} = 0 \text{ } \textit{на} \text{ } \Gamma_D, \ \mathbb{P} \cdot \mathrm{n} = 0 \text{ } \textit{на} \text{ } \Gamma_N, \ \mathbb{P} \cdot \mathrm{n} = -p_0 \mathbb{I} \cdot \mathrm{n} \text{ } \textit{на} \text{ } \Gamma_p$$

- Условие гиперупругости, несжимаемости *и наличие активного напряжения* ($\mathcal{W}$ - упругий потенциал, p - множитель Лагранжа, f - направление волокон):

$$\mathbb{P} = \mathbb{F}\frac{\partial \mathcal{W}}{\partial \mathbb{E}} - pJ\mathbb{F}^{-T} + \mathbb{F}T^a \mathrm{f} \otimes \mathrm{f}$$

Coupled model. Active strain, first steps

- Подход активных деформаций ($\mathbb{F}_e$ - пассивная деформация, $\mathbb{F}_a$ - активная, f - продольное направление волокон, t - поперечное):

$$\mathbb{F} = \mathbb{F}_e \mathbb{F}_a \Rightarrow \mathbb{F}_e = \mathbb{F}\mathbb{F}_a^{-1}$$

$$\mathbb{F}_a = \mathbb{I} + \gamma_f \mathrm{f} \otimes \mathrm{f} + \gamma_t \mathrm{t} \otimes \mathrm{t}, \; J_a = \det \mathbb{F}_a$$

- Упругий потенциал (простая модель - Neo-Hookean, μ - задано):

$$\mathcal{W} = J_a \hat{\mathcal{W}}, \; \hat{\mathcal{W}}(\mathbb{F}_e) = \frac{\mu}{2} \mathrm{tr}(\mathbb{F}_e^T \mathbb{F}_e - \mathbb{I})$$

- Механо-электрическое взаимодействие ($\beta, \varepsilon_1, c_0^*, c_R, \upsilon_{min}, \upsilon_{max}$ - заданы):

$$\gamma_f(\upsilon, [Ca]_+) = -\beta \frac{\upsilon - \upsilon_{min}}{\upsilon_{max} - \upsilon_{min} + \upsilon} + \varepsilon_1 \beta \frac{l_0^I}{1 + \eta([Ca]_+)(l_0^I - 1)}, \; \gamma_t = -\frac{\gamma_f}{1 + \gamma_f}$$

F.Nobile, A.Quarteroni, R.Ruiz-Baier, *An active strain electromechanical model for cardiac tissue* // 2011

Coupled model. Active strain, first steps

- Подход активных деформаций ($\mathbb{F}_e$ - пассивная деформация, $\mathbb{F}_a$ - активная, f - продольное направление волокон, t - поперечное):

$$\mathbb{F} = \mathbb{F}_e \mathbb{F}_a \Rightarrow \mathbb{F}_e = \mathbb{F}\mathbb{F}_a^{-1}$$

$$\mathbb{F}_a = \mathbb{I} + \gamma_f \mathrm{f} \otimes \mathrm{f} + \gamma_t \mathrm{t} \otimes \mathrm{t}, \;\; J_a = \det \mathbb{F}_a$$

- Monodomain electromechanical system

$$-\nabla \cdot (\mu J_a (\mathbb{I} + \nabla u) \mathbb{F}_a^{-1} \mathbb{F}_a^{-T} - pJ(\mathbb{I} + \nabla u)^{-T}) = 0, \;\; \text{в } \Omega_0$$

$$J = 1 \text{ в } \Omega_0$$

$$\chi \left(C_m \frac{\partial Jv}{\partial t} + JI_{ion} \right) - \nabla \cdot (J(\mathbb{I} + \nabla u)^{-1} \sigma (\mathbb{I} + \nabla u)^{-T} \nabla v) = JI_i, \;\; \text{в } \Omega_T$$

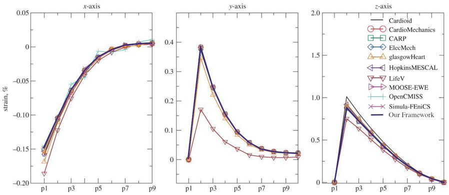
F.Nobile, A.Quarteroni, R.Ruiz-Baier, *An active strain electromechanical model for cardiac tissue* // 2011

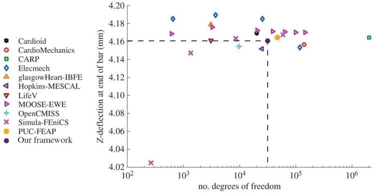
Numerical methods

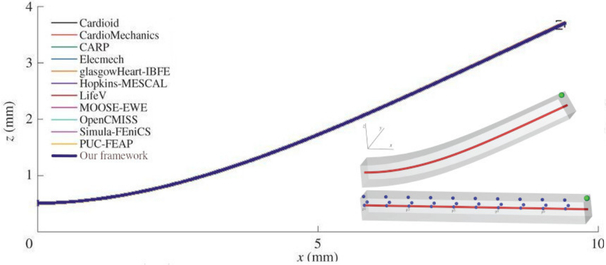
- МКЭ (P2-P1)
- INMOST
- CasADi для автоматического дифференцирования
- Верификация на серии бенчмарков
  Land S., et. al, *Verification of cardiac mechanics software: benchmark problems and solutions for testing active and passive material behaviour* // 2015

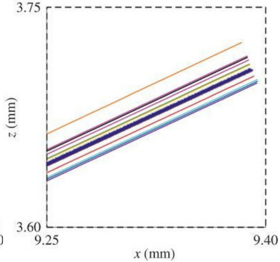
Cardiac mechanics. Benchmark 1

Изгиб прямоугольной балки



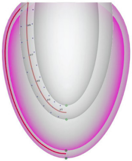


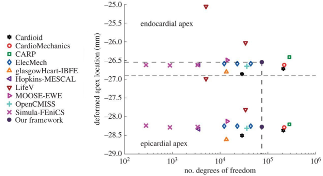


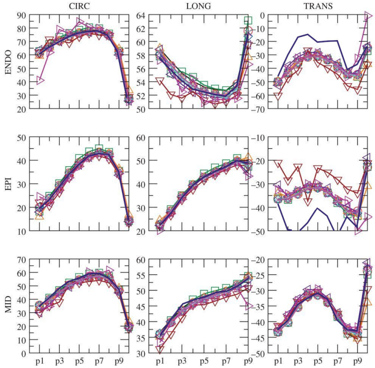


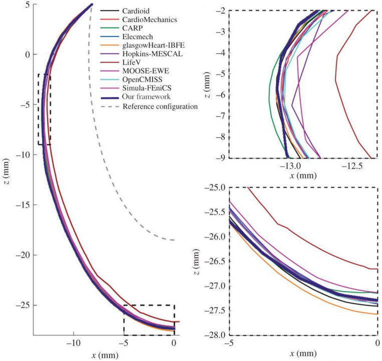
Cardiac mechanics. Benchmark 2

Раздутие изотропного эллипсоида



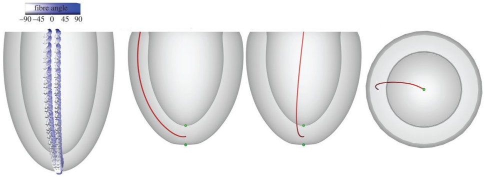


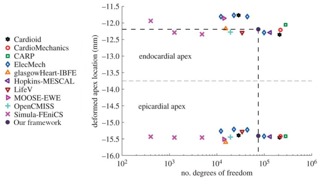


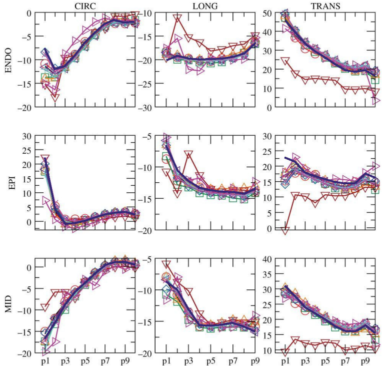


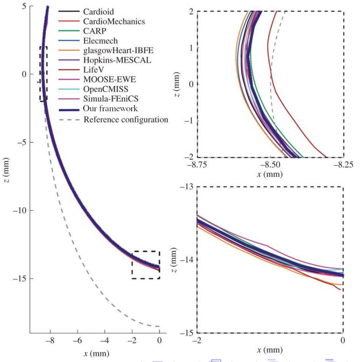
Cardiac mechanics. Benchmark 3

Раздутие анизотропного эллипсоида с активным напряжением









Conclusions

- Представлены численные методы вычислительного фреймворка для электромеханической модели сердца
- Электрофизиологический солвер верифицирован, исследована параллельная эффективность
- Механический солвер верифицирован на серии бенчмарков
- Проводится тестирование общей задачи

Спасибо за внимание!