



Сеченовский Университет



Университет  
Сириус



НИИ механики МГУ

## CarNum: новая параллельная платформа для численного моделирования электромеханики сердца

---

Легкий А.А.<sup>1,2,3,4</sup>, Чернышенко А.Ю.<sup>1,4</sup>, Данилов А.А.<sup>1,2,3,4</sup>, Семин Ф.А.<sup>4</sup>

<sup>1</sup>ИВМ РАН

<sup>2</sup>Сеченовский университет

<sup>3</sup>Университет "Сириус"

<sup>4</sup>НИИ механики МГУ

XIV конференция

«Математические модели и численные методы в биологии и медицине»

## Введение

---



Разработка массивно-параллельного программного комплекса для  
детального моделирования электромеханики сердца

## Мотивация:

- новые методы диагностики
- новые методы лечения
- "золотой" стандарт
- генерация данных

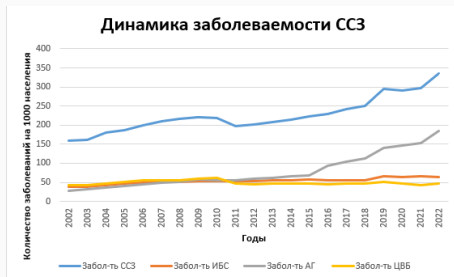
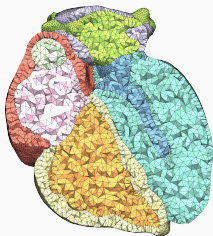
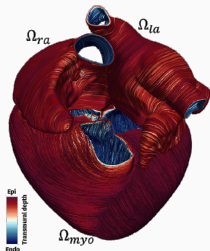


Рис. 1: Динамика ССЗ в России.

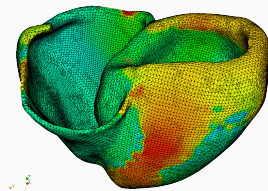
<https://doi.org/10.23670/IRJ.2023.134.103>



Генерация/считывание геометрии камер и построение сетки



Генерация/считывание направления мышечных волокон



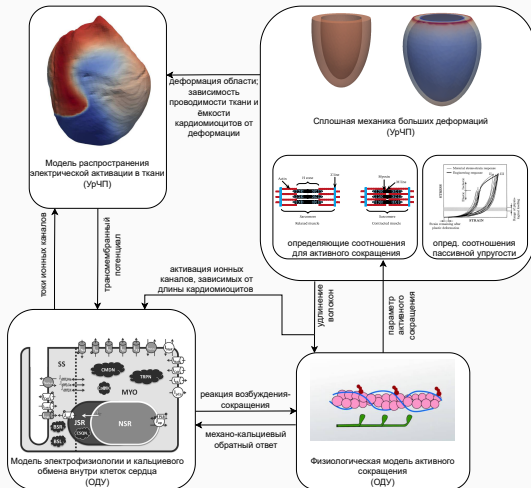
Решение уравнений электромеханической модели

## Математическая модель

---

## Особенности моделей:

- мультифизичность
- многомасштабность
- сложная геометрия
- прямые и обратные связи
- значимая нелинейность



Сухая сопряжённая модель электромеханики сердца

- Механика конечных деформаций,  $\mathbf{u}$  - поле перемещений:

$$\rho_0 \partial_{tt} \mathbf{u}^i - \nabla_j \mathbb{P}^{ij}(\mathbb{F}, \mathbf{a}) = 0, \quad \mathbb{F} = \mathbb{I} + \nabla \mathbf{u}$$

- Однодоменная модель распространения электрической активации,  $v$  - трансмембранный потенциал:

$$\chi_m C_m(\mathbb{F}) \partial_t v - \nabla \cdot (\sigma(\mathbb{F}) \nabla v) + \chi_m i_{ion}(v, \mathbf{w}, \mathbb{F}) = I_{stim}(t)$$

- Модель электрофизиологии и кальциевого обмена клетки,  $\mathbf{w}$  - переменные состояния модели:

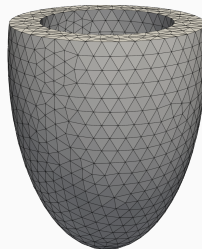
$$\partial_t \mathbf{w} = \mathbf{q}(v, \mathbf{w}, \mathbb{F})$$

- Физиологическая модель активного сокращения,  $\mathbf{a}$  - переменные состояния модели:

$$\partial_t \mathbf{a} = \mathbf{r}(\mathbf{a}, \mathbf{w}, \mathbb{F})$$

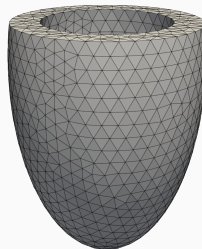
По пространству есть 2 сетки:  $\Rightarrow$  интерполяция данных между сетками на грубой - неизвестные из 3D механики, на мелкой - остальные неизвестные

- механика сплошной среды:
  - МКЭ, перемещение  $u - (P_2)^3$  - "давление" для несжимаемости  $p - P_1$
- распространение электрической активации:
  - МКЭ, трансмембранный потенциал  $v - P_1$
- клеточные процессы:
  - неизвестные  $w, \alpha$  в точках квадратур, системы ОДУ решаются независимо



По пространству есть 2 сетки:  $\Rightarrow$  интерполяция данных между сетками на грубой - неизвестные из 3D механики, на мелкой - остальные неизвестные

- механика сплошной среды:
  - МКЭ, перемещение  $\mathbf{u}$  -  $(P_2)^3$  + "давление" для несжимаемости  $p$  -  $P_1$
- распространение электрической активации:
  - МКЭ, трансмембранный потенциал  $v$  -  $P_1$
- клеточные процессы:
  - неизвестные  $\mathbf{w}$ ,  $\mathbf{a}$  в точках квадратур, системы ОДУ решаются независимо

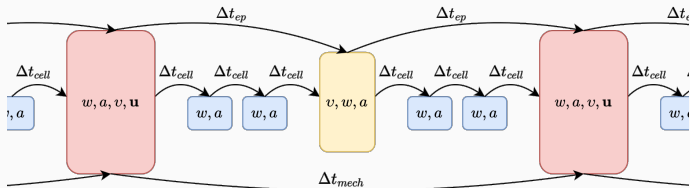


# Дискретизация по времени

Метод разделения по процессам:

каждый процесс имеет собственный шаг по времени:  $\Delta t_{mech}$ ,  $\Delta t_{ep}$ ,  $\Delta t_{cell}$

- механика сплошной среды:
  - неявная схема центральных разностей
  - ↔ нелинейная алгебраическая система
- распространение электрической активации:
  - неявный метод Эйлера
  - ↔ СЛАУ
- клеточные процессы:
  - в каждой точке система нелинейных ОДУ решается совместно
  - используется многоступенчатый метод переменного порядка с изменяющимся шагом решения жёстких систем из SUNDIALS/CVODE



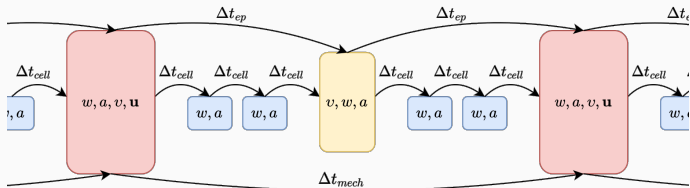


# Дискретизация по времени

Метод разделения по процессам:

каждый процесс имеет собственный шаг по времени:  $\Delta t_{mech}$ ,  $\Delta t_{ep}$ ,  $\Delta t_{cell}$

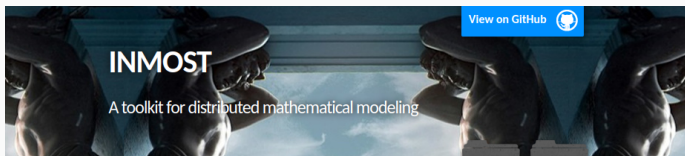
- механика сплошной среды:
  - неявная схема центральных разностей
- ↪ нелинейная алгебраическая система
- распространение электрической активации:
  - неявный метод Эйлера
- ↪ СЛАУ
- клеточные процессы:
  - в каждой точке система нелинейных ОДУ решается совместно
  - используется многоступенчатый метод переменного порядка с изменяющимся шагом решения жёстких систем из SUNDIALS/CVODE



## CarNum: структура платформы

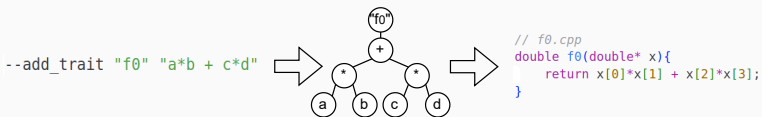
---

- Вычислительное ядро платформы реализовано на одном ЯП C++
- Массивная MPI/OpenMP-параллельность
  - Основа для платформы - **INMOST**



- Поддержка чтения скалярных символьных выражений
- Гибкая процедура подготовки модели
- Двойственность интерфейсов: низко- и высокоуровневые реализации

- Вычислительное ядро платформы реализовано на одном ЯП C++
- Массивная MPI/OpenMP-параллельность
- Поддержка чтения скалярных символьных выражений
  - построение и оценка функций из символьных выражений
  - символьное дифференцирование
  - генерация C++ кода для выражений
  - JIT-компиляция



- Гибкая процедура подготовки модели
- Двойственность интерфейсов: низко- и высокоуровневые реализации

- Вычислительное ядро платформы реализовано на одном ЯП C++
- Массивная MPI/OpenMP-параллельность
- Поддержка чтения скалярных символьных выражений
- Гибкая процедура подготовки модели
  - определение новых параметров из констант или сеточных данных
  - ассоциация параметров с параметрами конкретных подмоделей
  - человекочитаемый язык описания клеточных моделей
  - возможность выгрузки клеточных моделей из формата CellML

$$\frac{dw}{dt} = - \left( \varepsilon + \frac{\mu_1 w}{\mu_2 + v} \right) (w + kv(v - a - 1))$$

$$I_{ion} = kw(w - a)(w - 1) + vw$$

```
// ... definition of constants
```

```
v=(Vm-vm_rest)/vm_norm;
```

```
Iion = (k*w*(w-a)*(w-1)+w*v)*vm_norm/t_norm;
```

```
// ODE definition: dV/dt = f(V), V(0) = V_init
```

```
w_init = 0;
```

```
diff_w = -(epsilon+mu1*w/(mu2+v))*(v+k*v*(v-a-1))/t_norm;
```

- Двойственность интерфейсов: низко- и высокоуровневые реализации

- Вычислительное ядро платформы реализовано на одном ЯП C++
- Массивная MPI/OpenMP-параллельность
- Поддержка чтения скалярных символьных выражений
- Гибкая процедура подготовки модели
  - определение новых параметров из констант или сеточных данных
  - ассоциация параметров с параметрами конкретных подмоделей
  - человекочитаемый язык описания клеточных моделей
  - возможность выгрузки клеточных моделей из формата CellML
  - человекочитаемый язык описания формы потенциала

$$\psi = c_0(e^{c_1(I_1-3)^2+c_2(I_4f-1)^2} - 1)$$



```
# Specification of May-Yin anisotropical material model
Var c0:"f:parname0" = 5.95e6, # kPa
    c1 = 1.48e-3, c2;
Fiber f:"f:fiber_f", s;
Let I1 = Invariant(1), I4f = Invariant(f);
Potential = c0 * (exp(c1 * (I1 - 3)^2 + c2 * (I4f - 1)^2) - 1);
```

- Двойственность интерфейсов: низко- и высокоуровневые реализации

- Вычислительное ядро платформы реализовано на одном ЯП C++
- Массивная MPI/OpenMP-параллельность
- Поддержка чтения скалярных символьных выражений
- Гибкая процедура подготовки модели
- Двойственность интерфейсов: низко- и высокоуровневые реализации

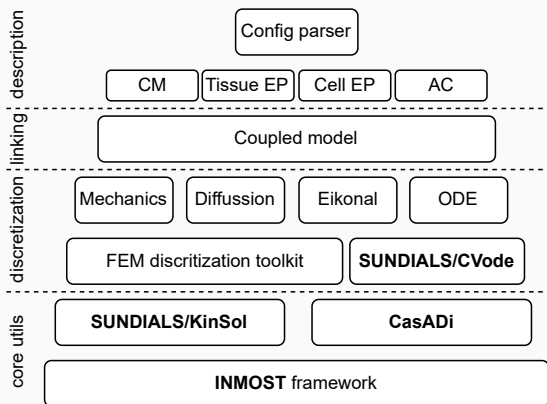


Схема организации платформы. *description* - структуры с описанием параметров подмоделей и основной парсер. *linking* - обобщённый интерфейс для сопряжения подмоделей друг с другом, установки межмодельных итераций по времени и интерполяторов с сетки одной подмодели на сетку другой. *discretization* - пространственно-временные схемы дискретизации нескольких вариантов поддерживаемых уравнений. *core utils* - инструменты для работы с распределёнными данными, сетками, алгебраическими решателями и символьными выражениями

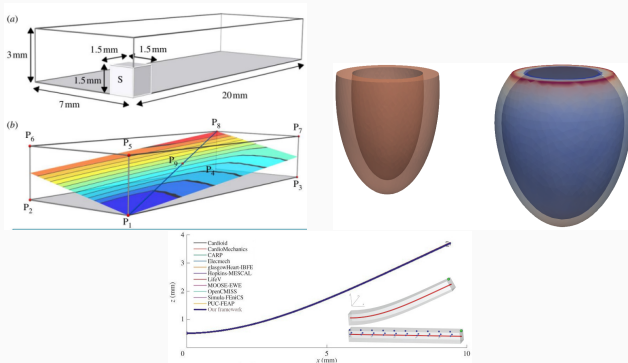


## Результаты

---

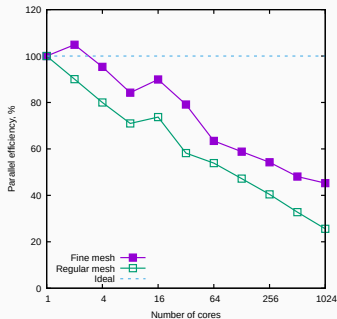
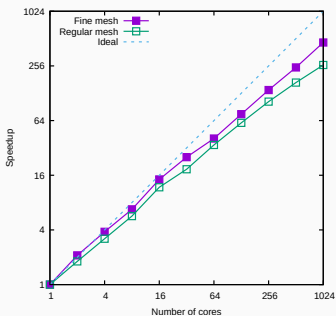
# Верификация мультифизического солвера платформы

- Pathmanathan et al. 2014 Verification of computational models of cardiac electro-physiology
- Niederer et al 2011 Verification of cardiac tissue electrophysiology simulators using an N-version benchmark
- Land et. al. 2015 Verication of cardiac mechanics software: benchmark problems and solutions for testing active and passive material behaviour



# MPI-параллельная эффективность платформы

- Тестовая лин. задача с возбуждением участка миокарда  
S.A. Niederer et al., Philos. Trans. R. Soc. 369, 4331–4351 (2011))
- Встроенный лин. солвер INMOST: MPT\_ILUC
- Fine mesh: разбиение 256x256x256 для области 2x2x2 мм  
regular mesh: разбиение 256x64x32 для области 20x7x3 мм
- Время расчётов  
на 1 процессоре: Fine mesh - 68ч, regular mesh - 43.5ч  
на 1024 процессорах: Fine mesh - 9 мин, regular mesh - 10 мин





Подготовлена платформа для быстрой развёртки широкого класса моделей электромеханики сердца.

В рамках работы над платформой также подготовлена библиотека для построения КЭ дискретизаций для слабых постановок уравнений общего вида AniFem++.

Проведено исследование MPI-параллельной эффективности для линейной тестовой задачи.

Изложенные результаты были опубликованы в работе:

Liogky A. A., Chernyshenko, A. Y., Danilov, A. A., Syomin, F. A. CarNum: parallel numerical framework for computational cardiac electromechanics //Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. – 2023. – Т. 38. – №. 3. – С. 127-144.

Работа производится при фин. поддержке РФФ 22-71-10007

Спасибо за внимание!

---