

ИНСТИТУТ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ
ИМ. Г.И. МАРЧУКА РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

ОТЧЕТ О НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЕ

**Новые математические методы и технологии в актуальных задачах
геофизики и биомеханики**

Грант РФФ 21-71-30023. Этап первый.

Руководитель проекта:
чл.-корр. РАН Ю.В. Василевский

15 декабря 2021 г.

Аннотация

Данный отчет посвящен результатам исследований в рамках первого этапа (2021 год) проекта "Новые математические методы и технологии в актуальных задачах геофизики и биомеханики". На данном этапе были запланированы следующие работы:

Задача 1.1. Разработка неинвазивных методов диагностики ишемической болезни сердца (ИБС)

- Подготовка пакета документов для регистрации исследования, получения одобрения локального этического комитета и начала сбора клинических данных
- Клинический сбор данных ПКТ, их статистическая обработка
- Разработка алгоритмов и подходов для совместной регистрации изображений разной модальности (ПКТ и КТ-ангиографии)
- Разработка алгоритмов обработки ПКТ-данных пациентов для автоматизированной идентификации ишемических участков миокарда
- Разработка редуцированной модели коронарного кровотока с учетом пространственного положения коронарных артерий в толще работающего миокарда

Задача 1.2. Виртуальный персонализированный раскрой створок аортального клапана при его реконструкции из аутоперикарда

- Метод автоматической сегментации корня аорты на основе КТ-изображений с контрастом и метод нахождения точек комиссур нативного клапана
- Исследование применимости мембранного приближения с помощью метода гиперупругих узловых сил для моделирования закрытия створок аортального клапана
- Сравнительный анализ методов моделирования контакта створок клапана с точки зрения времени проведения расчетов и адекватности результатов
- Протокол для проведения натурального эксперимента на образце свиного аортального клапана для валидации результатов математической модели закрытия аортального клапана

Задача 1.3. Предсказательное моделирование одножелудочковой коррекции врожденных пороков сердца у детей (операция Фонтена)

- Разработка методов усвоения 4D FLOW-данных МРТ исследования пациента в краевых условиях для редуцированной гемодинамической модели кровотока

-
- Верификация методов усвоения 4D FLOW-данных МРТ в редуцированной модели на основе трехмерных детальных расчетов кровотока
 - Разработка методов автоматизированной сегментации МРТ-данных с выделением легочных артерий, полых вены, камер сердца и построения расчетных сеток
 - Сбор клинических данных по пациентам со сложными пороками сердца

Задача 1.4. Персонализированные модели подсистем опорно-двигательного аппарата

- Анализ имеющейся информации относительно анатомических и морфологических ориентиров для связок коленного сустава
- Разработка и апробация алгоритма на примере медицинских КТ-изображений коленного сустава

Задача 2.1. Разработка негидростатической модели сжимаемой атмосферы для задач прогноза погоды и моделирования климата

- Реализация процедур параллельного вычисления основных горизонтальных дифференциальных операторов (градиент, дивергенция, завихренность, лапласиан) 2-го и 4-го порядка аппроксимации с помощью ранее реализованной библиотеки параллельных вычислений на сетке кубическая сфера ParCS.
- Реализация упрощенной версии динамического блока (отсутствует рельеф поверхности, явная схема интегрирования по времени, эйлерова адвекция), испытание на общепринятых тестовых задачах (распространение гравитационной волны, теплый пузырек, плотностное течение).
- Параллельная реализация и проверка алгоритма генерации коррелированных по пространству и времени полей на сфере (AR1) в рамках существующей модели атмосферы ПЛАВ. Реализация возмущений вертикального компонента завихренности в модели ПЛАВ

Задача 2.2. Развитие вычислительных технологий для моделирования Мирового океана

- Разработка новой версии модели динамики океана в z системе координат и реализация криволинейной системы координат на сфере с несимметрично-смещенными полюсами.
- Разработка программной реализации новой версии модели динамики океана на основе гибридного подхода MPI-OpenMP. Будут проведены эксперименты для оценки масштабируемости динамики океана для последующей оптимизации программного кода на различных вычислительных системах (суперкомпьютеры СКЦ МГУ и МСЦ РАН) в режимах высокого разрешения на небольшие времена интегрирования и в режиме промежуточного разрешения на большие времена интегрирования.

- Выбор набора параметризаций вертикального перемешивания и их проверка на доступных результатах вихреразрешающего (LES) моделирования и данных измерений. Реализация набора турбулентных замыканий в модели океана, в том числе, перспективных схем вертикального перемешивания, допускающих поддержание турбулентности при любой устойчивой стратификации.

Задача 2.3. Разработка эффективных вычислительных технологий для прогнозирования и диагноза состояния атмосферы в городской среде

- Анализ и обобщение известных экспериментальных данных и результатов численного моделирования турбулентных течений в городской среде (в том числе, результатов LES-расчетов, проведенных ранее авторами проекта).
- Проведение дополнительных LES и DNS расчетов стратифицированных турбулентных течений в областях с идеализированной "городской" геометрией. Статистическая обработка данных вихреразрешающего моделирования.
- Проведение аналогичных расчетов с 3D RANS моделью. Сравнение результатов различных моделей и выявление дефектов моделей RANS, связанных с использованием распространенных замыканий.

Задача 2.4. Разработка модели динамики морского льда

- Построение неравномерной триангуляции расчетной области Арктики со сгущением сетки в области с потенциально высокой сплоченностью льда, в узких проливах и у берега.
- Реализация конечно-элементной квази-монотонной схемы Тейлора-Галеркина с коррекцией потоков для численного решения уравнения переноса скаляров и ее тестирование.
- Реализация схемы численного интегрирования уравнения динамики (mEVP) и ее тестирование в связке с решателем уравнения переноса.
- Разработка эффективной системы интерполяции сеточных данных.

По результатам исследований были получены следующие **научные результаты**:

Задача 1.1. Разработка неинвазивных методов диагностики ишемической болезни сердца (ИБС)

- Разработан алгоритм совместной регистрации изображений разной модальности (перфузионной компьютерной томографии (ПКТ) и КТ-ангиографии). Алгоритм основан на дополнительной обработке КТ-снимков перфузии миокарда в покое и при гиперемии, при которой вычисляются

значения трансмурального перфузионного отношения (TPR) для 16-ти зон миокарда. Дополнительная обработка позволяет упростить процедуру и извлекать данные ПКТ и КТ-ангиографии в рамках одного статического КТ-перфузионного исследования по протоколу «покой-стресс».

- Предложен алгоритм обработки ПКТ-данных пациента, позволяющий автоматизированно идентифицировать ишемические участки миокарда и сопоставить их с коронарными сосудами, полученными при сегментации снимков КТ ангиографии. Терминальный конец каждой коронарной артерии сопоставляется с зоной миокарда, ближе к которой он находится. Поэтому предлагается искусственно добавить в сеть сосудов синтетические артерии, снабжающие кровью зоны миокарда без соответствующей им артерии, диаметром не больше самого тонкого из разрешимых сосудов. Это позволит приписать каждую ишемическую зону миокарда к какой-либо магистральной коронарной артерии.
- Разработана редуцированная одномерная модель коронарного кровотока, учитывающая регистрируемые ранее зоны миокарда и модифицирующая граничные условия в зависимости от ПКТ-данных пациента. Если коронарная артерия заканчивается в зоне с патологической (низкой) перфузией, то граничное условие в терминальной точке имеет повышенное микроциркуляторное сопротивление. Степень повышения сопротивления зависит от величины коэффициента TPR, определяемого из ПКТ-данных. Модель учитывает данные ПКТ в покое и при гиперемии (стрессе) при расчёте различных режимов коронарного кровотока: в норме или при введении вазодилататора (при гиперемии).

Задача 1.2. Виртуальный персонализированный раскрой створок аортального клапана при его реконструкции из аутоперикарда

- Исследована применимость метода автоматической сегментации корня аорты на основе КТ-изображений с контрастом с учетом кальциноза стенок аортального клапана. Предложен метод нахождения полосы отрицательной кривизны на внутренней поверхности корня аорты, в которой находятся точки комиссур нативного клапана.
- Реализована модель закрытия аортального клапана в рамках мембранного приближения для створок клапана, которая позволяет использовать произвольные определяющие соотношения для описания гиперупругого материала.
- Реализованы два геометрических подхода для моделирования контактов между отдельными телами. Реализован интерфейс для задания произвольных геометрических методов обработки контактов типа "вершина-треугольник".
- Предложена и реализована численная модель деформирования тонкостенной гиперупругой структуры с учетом её изгибной жесткости.

-
- Разработан протокол проведения натуральных экспериментов на образце свиного аортального клапана для валидации результатов математической модели закрытия аортального клапана.

Задача 1.3. Предсказательное моделирование одножелудочковой коррекции врожденных пороков сердца у детей (операция Фонтена)

- Разработана двухмасштабная 1D3D модель кровообращения Фонтена, а также методы ее персонализации под конкретного пациента. В том числе предложен метод усвоения 4D FLOW данных МРТ исследования в краевых условиях (подходит как для двухмасштабной 1D3D, так и для редуцированной 1D модели).
- Построенная модель и предложенные методы ее персонализации верифицированы на данных конкретного пациента.

Задача 1.4. Персонализированные модели подсистем опорно-двигательного аппарата

- Проведен анализ имеющейся информации относительно анатомических и морфологических ориентиров для связок коленного сустава.
- Разработаны и апробированы на медицинских КТ-изображениях коленного сустава алгоритмы автоматического и полуавтоматического детектирования наиболее крупных связок коленного сустава.

Задача 2.1. Разработка негидростатической модели сжимаемой атмосферы для задач прогноза погоды и моделирования климата

- Реализован ряд конечно-разностных аппроксимаций горизонтальных и вертикальных операторов на сетке кубическая сфера, основанных на применении метода SBP-SAT. Данный подход к численному решению уравнений динамики атмосферы ранее не применялся.
- На основе данных методов реализовано динамическое ядро глобальной трехмерной негидростатической модели атмосферы без учета рельефа поверхности. Динамическое ядро испытывалось на стандартных тестовых задачах "геострофическое равновесие" "распространение гравитационной волны" "плотностное течение" "теплый пузырек" и показало уровень точности, соответствующий современному мировому уровню. В задаче "твердое вращение для которой доступно аналитическое решение, был показан эффективный порядок аппроксимации >3 для поля давления и >2 для поля вертикальной скорости (в C -норме). Реализованная версия динамического блока масштабируется до 4000 тысяч ядер с эффективностью 70% при использовании сетки размерностью $6 \times 512 \times 512$, 30 уровней по вертикали (разрешение - 20 км по горизонтали, 300 м по вертикали).

- Была подобрана амплитуда возмущения тенденции поля завихренности модели ПЛАВ. Возмущение тенденции завихренности приближает разброс к среднеквадратической ошибке среднего по ансамблю прогноза, что повышает качество прогностического ансамбля.

Задача 2.2. Развитие вычислительных технологий для моделирования Мирового океана

- Разработана модель динамики океана в z системе координат. Система уравнений гидротермодинамики океана в приближении Буссинеска и гидростатики рассматривается в криволинейной ортогональной системе координат на сфере с несимметрично-смещенными полюсами. В модели используются сетки со смещенными в область суши полюсами, в том числе сохраняющие симметричность относительно экватора в низких широтах и совпадающие с широтно-долготной сеткой в Южном полушарии. В численной модели применяется полунявный метод для дискретизации уравнений по времени, а консервативные конечно-разностные схемы второго порядка точности на разнесенной сетке используются для аппроксимации по пространству.
- Программная реализация модели основана на использовании гибридного MPI-OpenMP подхода для расчета на параллельных вычислительных системах. Показана возможность масштабирования реализации численной модели до нескольких десятков тысяч вычислительных ядер. С помощью гибридной MPI-OpenMP-CUDA технологии разработана программная реализация для графических процессоров двумерного переноса скаляров в криволинейной системе координат на сфере.
- В модели океана реализован набор двухпараметрических замыканий, включающих прогностические уравнения для кинетической энергии турбулентности и скорости ее диссипации. Параметризации дополнены функциями устойчивости, полученными из замыканий второго порядка, которые допускают поддержание турбулентности при любой устойчивости. Для параметризации вертикального перемешивания предложено вычислительно эффективное замыкание первого порядка, аппроксимирующее стационарные решения двухпараметрической модели.

Задача 2.3. Разработка эффективных вычислительных технологий для прогнозирования и диагноза состояния атмосферы в городской среде

- Выполнен анализ ошибок трехмерных RANS моделей при воспроизведении стратифицированных турбулентных течений в городской среде и в пограничном слое атмосферы над городом:
- На основе анализа данных LES-модели предложена новая аппроксимация турбулентного масштаба длины для RANS-моделей городской среды. Показано, что предлагаемая нами модель турбулентного масштаба на рассмотренных геометриях поверхности превосходит по качеству параметризации, построенные на основе обобщения геометрических параметров городской среды.

- Предложен и реализован новый алгоритм проведения расчетов турбулентности над поверхностями сложной формы, предназначенный для получения равновесного состояния стратифицированного течения с заданными значениями определяющих параметров. Равновесное состояние достигается за счет вариаций по времени температуры поверхности в ходе расчета. Показано, что аэродинамические свойства "городских" поверхностей не зависят от стратификации (в случае устойчивого АПС). При этом, мы провели расчеты в широком диапазоне значений параметра устойчивости $\langle h \rangle / L$ (где $\langle h \rangle$ - средняя высота элементов шероховатости, а L - масштаб Обухова). Результаты свидетельствуют о том, что в рассмотренных случаях динамический параметр шероховатости $z_{\{0u\}}$ в основном определяется геометрическими характеристиками верхнего слоя обтекаемых объектов, а конфигурация объектов вблизи земли и динамика турбулентности в нижнем слое не оказывают существенного влияния на обмен импульсом между поверхностью в целом и внешним течением.
- Показано, что устойчивая стратификация при больших значениях параметра $\langle h \rangle / L$ вызывает более выраженное снижение эффективности теплообмена с поверхностью, чем это предсказывает теория подобия Монина-Обухова при неизменных свойствах поверхности. Формально этот эффект можно представить как значительное уменьшение термического параметра шероховатости $z_{\{0t\}}$. Выявленные эффекты существенно влияют на турбулентную диффузию примесей внутри городской среды, а именно - будут приводить к существенному накоплению загрязняющих веществ у поверхности земли при устойчивой стратификации. Современные модели турбулентной диффузии учитывают этот эффект не полностью.

Задача 2.4. Разработка модели динамики морского льда

- Реализован универсальный алгоритм обработки данных береговой линии, замыкания области, сгрубления береговой линии и построения треугольной сетки с возможностью сгущения в область с потенциально высокой сплоченностью морского льда и у береговой линии. Была построена сетка для области Северного Ледовитого океана, Берингова моря и Северной Атлантики с использованием сеточного генератора библиотеки Ani-2D на основе данных береговой линии GSHHG, а также исторических данных по сплоченности льда для реализации сгущения сетки.
- Реализован набор временных схем типа Тейлора-Галеркина 2-го, 3-го и 4-го порядка с коррекцией потоков. Как показала практика, использование вычислительно затратных схем переноса высокого порядка по времени оправдано в случае чисел Куранта, больших 0,6. Данная конфигурация возникает в случае использования большого шага по времени в модели (например, в случае климатических расчетов).
- Реализовано численное решение уравнения баланса импульса стандартным mEVP методом. Также был предложен ускоренный mEVP-opt метод интегрирования уравнения баланса импульса, который основан на идее локального подбора параметра простой итерации, минимизирующего

квадрат нормы невязки. Оптимально настроенный ускоренный mEVP-opt метод может ускорить процесс вычислений на 30%.

- Программный код для схем переноса и mEVP-opt метода реализован в параллельном варианте на языке C++. Параллелизация проводилась в рамках программного комплекса INMOST. Вплоть до 1000 процессов код демонстрирует линейную масштабируемость.
- Разработан и реализован параллельный универсальный код для считывания произвольного NetCDF файла, который может состоять из одного или нескольких уровней по вертикали, а также хранить данные в целочисленном формате, что требует “раскодирования” данных при считывании. Считанные данные затем интерполируются на модельную сетку билинейным образом. Интерполяция векторных величин происходит с учетом поворота локального базиса.

Результаты, полученные в рамках проекта на данном этапе, **опубликованы в следующих статьях** в журналах, индексируемых в базах данных “Сеть науки” (Web of Science) или “Скопус” (SCOPUS):

1. Vassilevski Y.V., Liogky A.A., Salamatova V.Yu. Application of Hyperelastic Nodal Force Method to Evaluation of Aortic Valve Cusps Coaptation: Thin Shell vs. Membrane Formulations. *Mathematics* 2021, 9, 1450. <https://doi.org/10.3390/math9121450>
2. Dobroserdova T.K., Vassilevski Yu.V., Simakov S.S., Gamilov T.M., Svobodov A.A. and Yurpolskaya L.A. Two-scale haemodynamic modelling for patients with Fontan circulation. *Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling*, vol. 36, no. 5, 2021, pp. 267-278.
<https://doi.org/10.1515/rnam-2021-0022>
3. Liogky A.A., Karavaikin P.A., Salamatova V.Yu. Impact of Material Stiffness and Anisotropy on Coaptation Characteristics for Aortic Valve Cusps Reconstructed from Pericardium. *Mathematics* 2021, 9, 2193. <https://doi.org/10.3390/math9182193>
4. Simakov S.S., Gamilov T.M., Liang F., Kopylov P.Yu. Computational Analysis of Haemodynamic Indices in Synthetic Atherosclerotic Coronary Networks. *Mathematics* 2021, 9, 2221.
<https://doi.org/10.3390/math9182221>
5. Yurova A.S., Salamatova V.Yu., Lychagin A.V., Vassilevski Yu.V. Automatic detection of attachment sites for knee ligaments and tendons on CT images. *International Journal of Computer Assisted Radiology and Surgery* (2021). <https://doi.org/10.1007/s11548-021-02527-6>
6. Zilitinkevich S.S., Kadantsev E.V., Repina I.A., Mortikov E.V., Glazunov A.V. Order out of chaos: Shifting paradigm of convective turbulence. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 78(12), 3925-3932. DOI: <https://doi.org/10.1175/JAS-D-21-0013.1>

7. Petrov S.S., Iakovlev N.G. The suite of Taylor–Galerkin class schemes for ice transport on sphere implemented by the INMOST package. Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modellingvol, 36, no. 4, 2021, pp. 227-238. <https://doi.org/10.1515/rnam-2021-0019>
8. Glazunov A., Debolskiy A., Mortikov E. "Turbulent length scale for multilayer RANS model of urban canopy and its evaluation based on Large-Eddy Simulations". Supercomputing Frontiers and Innovations, 2021 (принята к печати)
9. Goyman G.S., Shashkin V.V. Implementation of Elliptic Solvers within ParCS Parallel Framework. Communications in Computer and Information Science, 2021 (принята к печати)

Оглавление

Аннотация	i
Оглавление	x
1. Биомеханика	2
Задача 1.1. Разработка неинвазивных методов диагностики ишемической болезни сердца (ИБС)	2
1.1.1 Сбор клинических данных	2
1.1.2 Разработка алгоритмов и подходов для совместной регистрации изображений разной модальности (ПКТ и КТ-ангиографии). Разработка алгоритмов обработки ПКТ-данных пациентов для автоматизированной идентификации ишемических участков миокарда	6
1.1.3 Разработка редуцированной модели коронарного кровотока с учетом пространственного положения коронарных артерий в толще работающего миокарда	8
Задача 1.2. Виртуальный персонализированный раскрой створок аортального клапана при его реконструкции из аутоперикарда	14
1.2.1 Метод автоматической сегментации корня аорты на основе КТ-изображений с контрастом и метод нахождения точек комиссур нативного клапана	14
Метод нахождения точек комиссур нативного клапана.	15
1.2.2 Исследование применимости мембранного приближения с помощью метода гиперупругих узловых сил для моделирования закрытия створок аортального клапана	18
Кинематика оболочки.	18
Определяющие соотношения.	19
Слабая постановка.	20
Дискретизация.	20
Дискретизация мембранной части.	21
Дискретизация изгибной части.	21
Сравнение результатов мембранной и оболочечной моделей.	22
1.2.3 Сравнительный анализ методов моделирования контакта створок клапана с точки зрения времени проведения расчетов и адекватности результатов	22
Обзор методов моделирования контактов.	23
Используемые алгоритмы.	24
Сравнение работы алгоритмов.	24
1.2.4 Протокол для проведения натурального эксперимента на образце свиного аортального клапана для валидации результатов математической модели закрытия аортального клапана	27
Предлагаемый протокол проведения натуральных исследований.	27

Задача 1.3. Предсказательное моделирование одножелудочковой коррекции врожденных пороков сердца у детей (операция Фонтена)	31
1.3.1 Методы моделирования операции Фонтена	31
1.3.2 Анализ 4D FLOW МРТ данных	33
1.3.3 Разработка методов автоматизированной сегментации МРТ-снимков с выделением лёгочных артерий, полых вен, камер сердца и построения расчётных сеток	35
1.3.4 Двухмасштабная модель кровообращения Фонтена	38
1.3.5 Персонализация двухмасштабной 1D3D модели кровотока	39
1.3.6 Разработка методов усвоения 4D FLOW-данных МРТ исследования пациента в крайних условиях модели	41
1.3.7 Верификация методов усвоения 4D FLOW-данных МРТ в модели кровообращения Фонтена	43
Задача 1.4. Персонализированные модели подсистем опорно-двигательного аппарата	48
1.4.1 Анализ имеющейся информации относительно анатомических и морфологических ориентиров для связок коленного сустава	48
1.4.2 Разработка и апробация алгоритма на примере медицинских КТ-изображений коленного сустава	51
Сухожилие четырёхглавой мышцы бедра.	51
Сухожилие подколенной мышцы.	52
Сухожилие двуглавой мышцы бедра.	53
Латеральная коллатеральная связка	53
Медиальная коллатеральная связка	54
Валидация алгоритмов.	54
2. Геофизика	63
Задача 2.1. Разработка негидростатической модели сжимаемой атмосферы для задач прогноза погоды и моделирования климата	63
2.1.1 Построение конечно-разностных аппроксимаций основных дифференциальных операторов уравнений динамики атмосферы	63
Вычислительная сетка кубическая сфера для модели атмосферы.	63
Устойчивость пространственной аппроксимации на примере линейных уравнений мелкой воды.	64
Пример SBP-SAT метода в одномерном случае.	65
SBP операторы градиента и дивергенции для двумерной и трехмерной криволинейных сеток.	68
Список реализованных дискретизаций дифференциальных операторов.	68
2.1.2 Реализация и тестирование первой версии динамического блока для негидростатической модели глобальной атмосферы	69
Описание динамического блока.	69
Результаты тестирования	70
Эксперимент “Распространение инерционно-гравитационной волны”.	70
Эксперимент “Подъем теплого пузырька”.	70
Эксперимент “Плотностное течение”.	70
Эксперимент “Геострофическое равновесие”.	71
Параллельная эффективность динамического ядра.	71
2.1.3 Развитие технологий ансамблевого моделирования	73

Задача 2.2. Развитие вычислительных технологий для моделирования Мирового океана	79
2.2.1 Модель динамики океана в z системе координат	79
2.2.2 Программная реализация	81
2.2.3 Параметризации вертикального перемешивания	83
Задача 2.3. Разработка эффективных вычислительных технологий для прогнозирования и диагноза состояния атмосферы в городской среде	88
2.3.1 Анализ публикаций по численному моделированию турбулентных течений над поверхностями городского типа и по сравнению таких расчетов с экспериментальными данными	88
2.3.2 Трехмерная RANS модель турбулентного течения над поверхностью городского типа . .	89
2.3.3 LES- и RANS-моделирование нейтрально-стратифицированных турбулентных течений над поверхностью городского типа	91
2.3.4 Постановка численных экспериментов	92
2.3.5 Результаты LES	94
2.3.6 Турбулентный масштаб длины для RANS	94
2.3.7 Результаты RANS и их сравнение с данными LES	96
2.3.8 Заключительные замечания по результатам сравнения LES- и RANS- моделирования турбулентности в городской среде	98
2.3.9 Дополнительные расчеты с вихреразрешающими моделями. Моделирование стратифицированных турбулентных течений над поверхностью городского типа	99
Задача 2.4. Разработка модели динамики морского льда	105
2.4.1 Триангуляция Арктического региона	105
2.4.2 Схемы переноса типа Тейлора-Галеркина	108
Временная дискретизация	109
Одношаговый метод Тейлора-Галеркина 2-го порядка.	109
Двухшаговый метод Тейлора-Галеркина 2-го порядка.	109
Двухшаговый метод Тейлора-Галеркина 3-го и 4-го порядка.	110
Метод коррекции потоков.	110
Тесты схем переноса	111
Выводы	112
2.4.3 Метод численного решения уравнения баланса импульса (mEVP)	114
2.4.4 Эффективная система считывания и интерполяции сеточных данных	117

1. Биомеханика

Задача 1.1. Разработка неинвазивных методов диагностики ишемической болезни сердца (ИБС)

Подготовка пакета документов для регистрации исследования, получения одобрения локального этического комитета и начала сбора клинических данных. Клинический сбор данных ПКТ, их статистическая обработка. Разработка алгоритмов и подходов для совместной регистрации изображений разной модальности (ПКТ и КТ-ангиографии). Разработка алгоритмов обработки ПКТ-данных пациентов для автоматизированной идентификации ишемических участков миокарда. Разработка редуцированной модели коронарного кровотока с учетом пространственного положения коронарных артерий в толще работающего миокарда.

1.1.1 Сбор клинических данных

В рамках работ на данном этапе были подготовлены документы для регистрации исследования. Тема и протокол утверждены на заседании Института персонализированной кардиологии НЦМУ «Цифровой биодизайн и персонализированное здравоохранение» ФГАОУ ВО «ПМГМУ им. И.М.Сеченова» МЗ РФ (Сеченовский Университет). Протокол исследования составлен с учетом положений Хельсинкской декларации Всемирной медицинской ассоциации от 2013 года; протокол исследования одобрен локальным этическим комитетом Сеченовского Университета.

В качестве формата изображений используется DICOM. КТ-ангиографическое исследование выполняется на спиральном томографе с 640 или 320 срезами и детектором шириной не менее 150 мм. Используемое контрастное вещество и все используемые препараты одобрены для клинического применения в Российской Федерации. При регистрации КТ-снимков для каждого сегмента коронарных артерий необходимо добиться равномерного заполнения контрастным веществом без смывов или потоков неконтрастированной крови, что необходимо для достаточной визуализации окклюзированной артерии. Компьютерная томография с определением перфузии миокарда проводится в покое и стрессе [1].

Состояние стресса достигается с помощью введения метаболического средства с сосудорасширяющим действием. Результаты мультимодального КТ-исследования подвергаются анализу, в ходе которого выявляются расположение стенозов (при наличии), их степень (в процентах перекрытия просвета), а также обозначаются зоны нарушения перфузии.

Собраны клинические данные (ПКТ, ангиография до операции, история болезни) у 24 пациентов, из которых 15 подходят для исследования – наличие клиники стенокардии напряжения II-III функционального класса. Все пациенты подписали информированное согласие на участие в исследовании. Произведено обезличивание. Помимо ПКТ и КТ-ангиографии собраны демографические данные, анамнез заболевания, анамнез жизни, данные объективного осмотра (частота сердечных сокращений ЧСС, артериальное давление АД и т.д.).

Первичными КТ данными каждого пациента являются четыре серии DICOM снимков:

- *Компьютерная томография (КТ) коронарного кальция или определение кальциевого индекса (Calcium score)*

Кальциевый индекс является маркером коронарного атеросклероза и выполняется для выявления и оценки степени кальциноза венечных артерий у пациентов с сомнительными нагрузочными тестами, начальными признаками кардиосклероза, атипичным болевым синдромом. Для оценки коронарного кальция сканируется область сердца без контрастного препарата. Кальций очень хорошо задерживает рентгеновские лучи, поэтому мультиспиральный томограф способен определить даже самые небольшие отложения кальция на сосудах. Присутствие кальция в коронарных артериях совершенно точно указывает на присутствие атеросклеротических бляшек и развитие атеросклероза, а количество этого кальция показывает тяжесть поражения артерий.

- *Компьютерная томография (КТ) коронарных сосудов с контрастом (Cardiac CE REST CTA)*

Для проведения процедуры вводится контрастное вещество в локтевую или другую периферическую вену. В отличие от стандартной коронарографии сердца с применением контраста, этот метод позволяет отследить состояние стенки коронарной артерии и структуру бляшек, приводящих к стенозу. В данном исследовании КТ коронарных сосудов используется главным образом для извлечения геометрии сосудов пациента.

- *Компьютерная томография перфузии миокарда в покое (Cardiac CE REST perfusion)*

Перфузионная компьютерная томография (ПКТ, КТ-перфузия) — измерение количественного изменения параметров кровотока в исследуемом органе. КТ-перфузия проводится совместно с коронарографией, что сокращает затраты на исследование. Статическая ПКТ позволяет визуально и полуколичественно оценить изображения, охватывающие весь миокард левого желудочка [1]. Выявление дефекта перфузии миокарда при стресс-тесте, частично или полностью обратимого в покое, указывает на наличие проходящей ишемии, а соответствующий дефект перфузии в покое указывает на наличие зоны некроза. Выявленные зоны нарушения перфузии миокарда могут использоваться для постановки граничных условий при построении модели коронарного кровотока.

- Компьютерная томография перфузии миокарда при нагрузке (*Cardiac CE STRESS perfusion*)

Для оценки перфузии широко применяются стресс-тесты [2]. Именно это позволяет визуализировать области преходящей ишемии миокарда, спровоцированные этими нагрузочными тестами, дифференцировать ишемическое и рубцовое повреждение миокарда и оценивать состояние резерва дистальных отделов коронарного русла. Применяются преимущественно два вида стресс-тестов: 1) тесты с физической нагрузкой на тредмиле или велоэргометре; 2) фармакологические стресс-тесты двух типов: с фармакологическими препаратами, вызывающими вазодилатацию (дипиридамол, аденозин) и приводящими к коронарной гиперемии; с инохронотропными адренергическими препаратами (добутамин, арбутамин), увеличивающими потребность миокарда в кислороде. В силу специфики (возраст, заболевания) когорты пациентов, участвующих в данном исследовании, тесты с физической нагрузкой не рассматривались в качестве возможных стресс-тестов. Применение инохотропных препаратов противопоказано больным с нестабильной стенокардией. В связи с этим в качестве стресс-теста предлагается использовать введение аденозинтрифосфата натрия.

Основным преимуществом такого препарата является его быстрый метаболизм в плазме крови, что позволяет минимизировать вероятность развития осложнений. Внутривенное введение аденозина (который выделяется при введении) в дозировке 0.14 мг/кг/мин вызывает снижение АД, влекущее за собой тахикардию, и максимальное или субмаксимальное увеличение миокардиального кровотока примерно в 4 раза. Преимущество использования подобного теста при эмиссионной компьютерной томографии миокарда, помимо его безопасности, определяется также высокой чувствительностью и специфичностью этой пробы в выявлении ИБС (до 90%).

На рисунке 1.1 представлены примеры снимков КТ коронарного кальция и КТ коронарных сосудов одной и той же области сердца (у корня аорты). На рисунке видно, что снимки КТ коронарного кальция не подствечены контрастом, кальций хорошо видно на фоне окружающих органов и сосудов. Эти две серии снимков используются для построения структуры коронарных артерий, поиска стенозов и оценки их степени.

Примеры снимков КТ-перфузии в покое и при нагрузке (стрессе) представлены на рисунке 1.2. При нагрузке окраска более равномерная, т.к. перфузионный поток крови повышается в 3-4 раза по сравнению с покоем. Снимки КТ-перфузии используются для поиска зон миокарда с нарушенной микроциркуляцией. Сосуды на снимках покоя (слева) ярче, чем на снимках при нагрузке (справа) из-за автоматической настройки яркости, выполняемой компьютерным томографом. Максимумы и минимумы яркости отличаются, поэтому может показаться, что на снимках при нагрузке в сосудах меньше контраста, несмотря на более высокие значения потока крови.

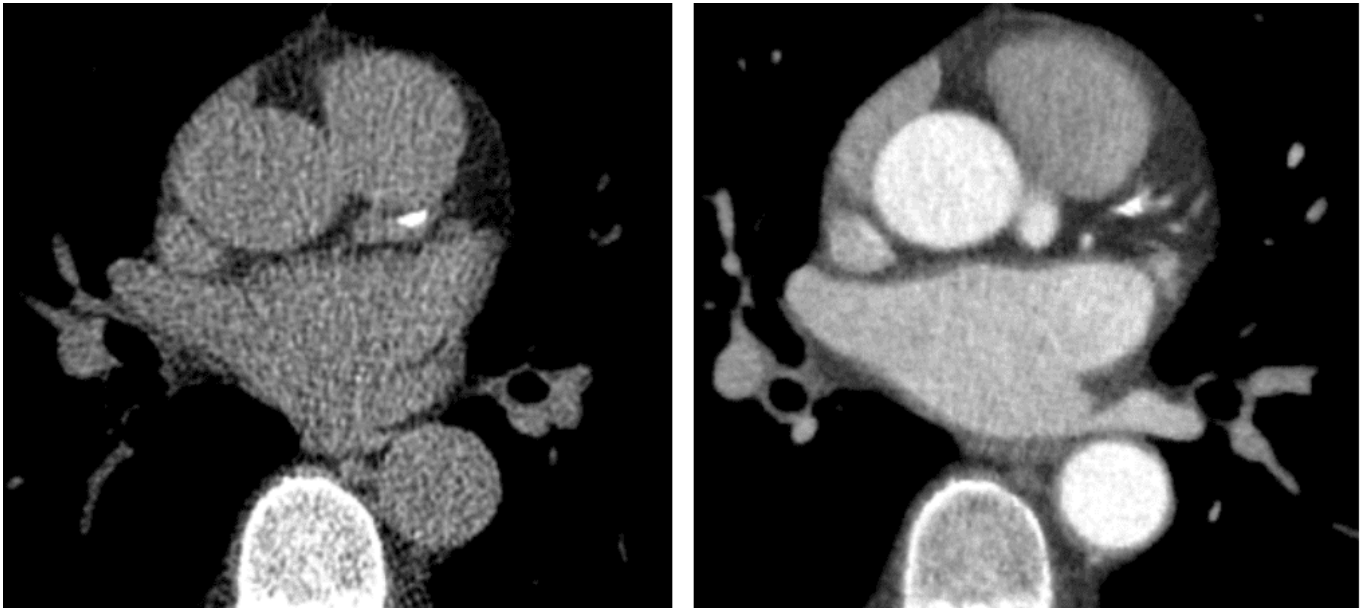


Рис. 1.1: КТ коронарного кальция (слева) и КТ коронарных сосудов (справа)

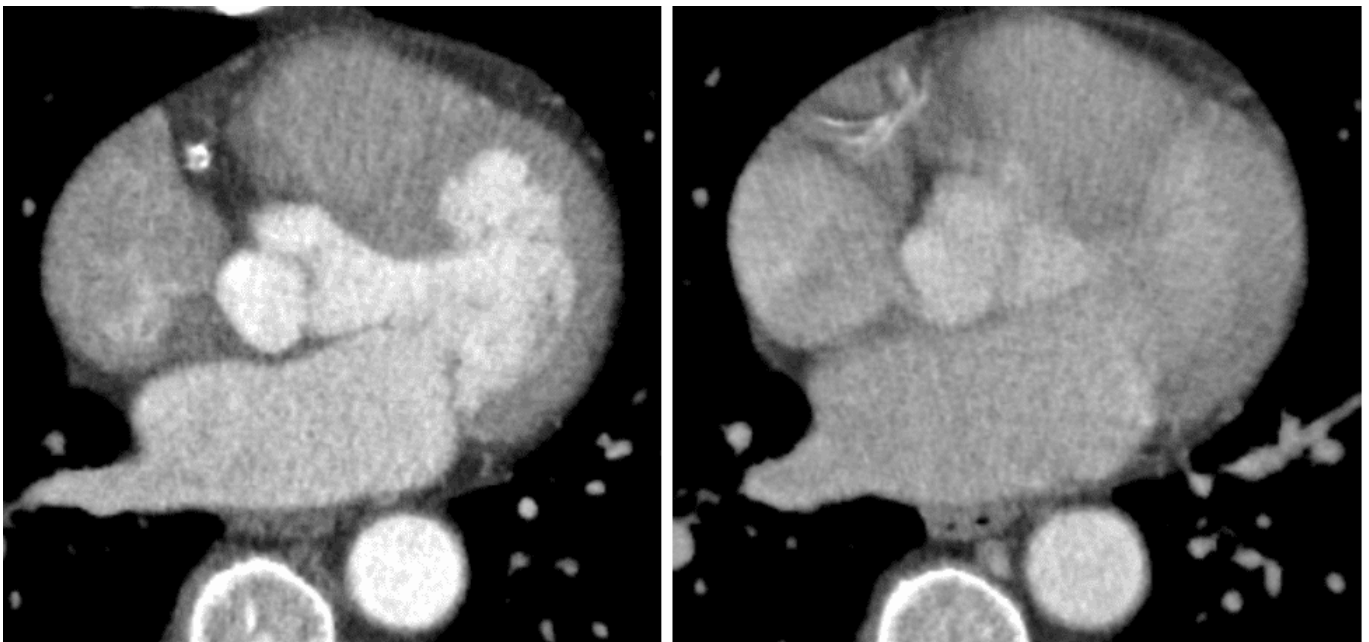


Рис. 1.2: КТ-перфузия миокарда в покое (слева) и при нагрузке (справа)

1.1.2 Разработка алгоритмов и подходов для совместной регистрации изображений разной модальности (ПКТ и КТ-ангиографии). Разработка алгоритмов обработки ПКТ-данных пациентов для автоматизированной идентификации ишемических участков миокарда

Использование изображений различных модальностей при диагностике ишемической болезни сердца необходимо для комплексного анализа причин заболевания. Различают две основные причины ИБС [3]. Первой причиной являются патологии сосудов — сужения, стенозы и т.п. Второй причиной является поражение микроциркуляции миокарда. Очень часто одна причина может вызывать другую: стеноз коронарной артерии снижает поток крови, что приводит к повреждению тканей миокарда, снабжаемым этим сосудом. В других ситуациях взаимосвязь между стенозом коронарной артерии и нарушениями микроциркуляции установить сложнее [4] и необходимо комплексное лечение. Устранение стеноза приведёт к повышению показателя ФРК (фракционированный резерв кровотока), но это не всегда устраняет проблемы с микроциркуляцией.

Для совместной регистрации ПКТ и КТ-ангиографии рассматривалось два подхода совместной регистрации изображений различной модальности. Первый подход основан на совмещении маркеров, один из которых устанавливается на корне аорты, а другой — на верхушке сердца. Подобный подход уже используется при совмещении данных коронарной КТ-ангиографии и ПЭТ-перфузии (ПЭТ - позитронная эмиссионная томография), что позволяет строить модели кровотока, учитывающие особенности микроциркуляции пациента [5, 6].

Второй подход, использовавшийся в работе на текущем этапе, предполагает вторичную обработку данных перфузии и расчёте параметра TPR (Transmural Perfusion Ratio – трансмуральное перфузионное отношение) для 16-ти зон миокарда. Статическая ПКТ позволяет визуально и полуколичественно оценить изображения, охватывающие весь миокард левого желудочка. Выявление дефекта перфузии миокарда при стресс-тесте/покое указывает на наличие преходящей ишемии/зоны некроза. Кроме того, для полуколичественной оценки может использоваться коэффициент трансмуральной перфузии (transmural perfusion ratio — TPR), который определяется как отношение изменения плотности одного сегмента субэндокарда к изменению плотности всего субэпикардального слоя. TPR является относительным индексом, поэтому он меньше зависит от величины коронарного кровотока.

Граничные условия в модели коронарного кровотока могут учитывать выявленные зоны нарушения перфузии миокарда. В сочетании с оценкой ФРК (фракционного резерва кровотока) это позволит получить полную оценку поражения сосудистого и микрососудистого русла. Поскольку наличие поражений микрососудистого русла искажает значения ФРК, наличие зон нарушения перфузии требует критического отношения к значениям ФРК.

На рисунке 1.3 указан пример КТ-данных по перфузии со значениями TPR. Схематическое расположение зон миокарда на левом желудочке представлено на рисунке 1.4.

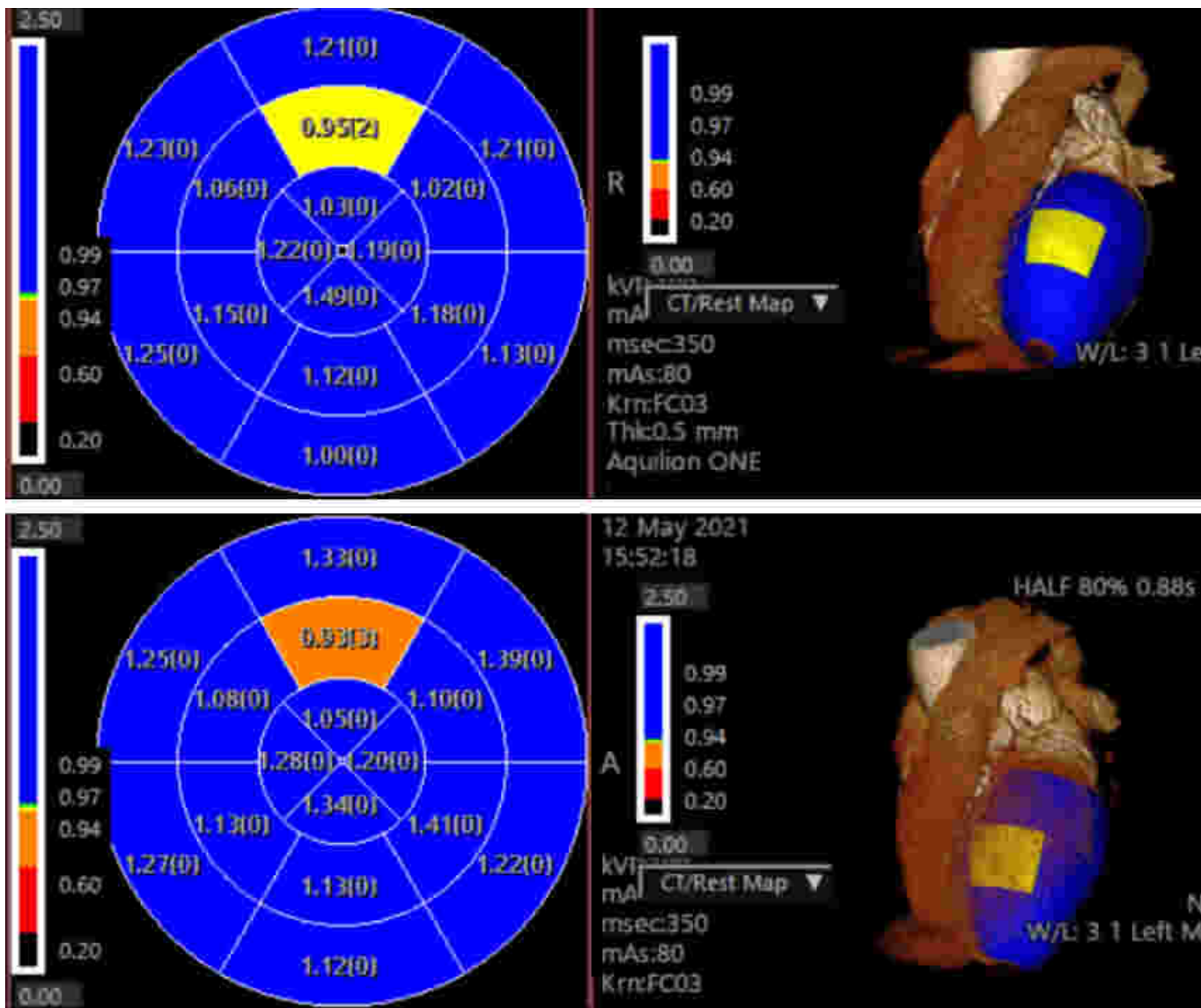


Рис. 1.3: Пример данных КТ-перфузии с указанными значениями TPR в покое (сверху) и при нагрузке (снизу) для одного из пациентов

Алгоритм обработки ПКТ-данных пациента для автоматизированной идентификации ишемических участков заключается в сопоставлении стандартизированных зон миокарда и коронарных сосудов пациента. Каждому идентифицированному сосуду сопоставляется зона миокарда, которую он снабжает кровью. Сопоставление происходит на основании близости центра зоны к проходящему сосуду. При отсутствии распознанных сосудов вблизи зоны происходит генерация синтетических коронарных артерий малого диаметра, снабжающих их кровью.

Полученная структура сосудов и соответствующих зон миокарда используется редуцированной моделью коронарного кровотока для оценки ключевых гемодинамических индексов (например, фракционный резерв кровотока ФРК) и параметров кровотока (давление, поток). Пространственное положение

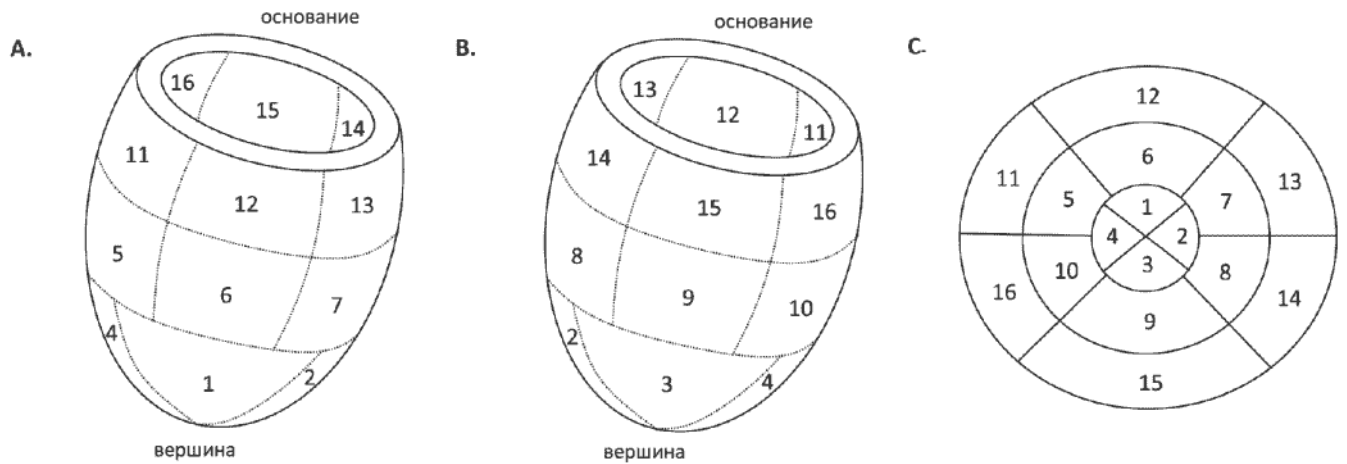


Рис. 1.4: Зоны миокарда левого желудочка. Вид спереди (А), вид сзади (В) и схематическое изображение зон (С).

коронарных артерий сопоставляется с расположением зон миокарда и значением TPR для задания граничных условий.

1.1.3 Разработка редуцированной модели коронарного кровотока с учетом пространственного положения коронарных артерий в толще работающего миокарда

В качестве базовой одномерной модели кровотока использовалась квазиодномерная модель пульсирующего течения вязкой несжимаемой крови в эластичном сосуде [7]. Для извлечения сети сосудов из КТ-снимков использовались алгоритмы сегментации и скелетонизации [8].

Приведем краткое описание модели кровотока. Для каждой эластичной трубки записываются законы сохранения массы и импульса:

$$\partial S_k / \partial t + \partial (S_k u_k) / \partial x = 0, \quad (1.1)$$

$$\partial u_k / \partial t + \partial (u_k^2 / 2 + p_k / \rho) / \partial x = f_{fr} (S_k / S_k^0, u_k), \quad (1.2)$$

где t — время; x — координата вдоль сосуда; ρ — плотность крови (предполагается постоянной и равной 1 г/см^3); k — номер сосуда; S_k — поперечное сечение сосуда; S_k^0 — поперечное сечение сосуда при нулевом давлении; u_k — линейная скорость потока, осредненная по поперечному сечению; P_k — давление в сосуде, отсчитываемое от атмосферного; f_{fr} — сила вязкого трения

$$f_{fr} (S_k, u_k, S_k^0) = -\frac{4\pi\mu u_k}{S_k^2} \left(\frac{S_k}{S_k^0} + \frac{S_k^0}{S_k} \right), \quad (1.3)$$

μ — динамическая вязкость крови (предполагается равной 4 мПа·с).

Для замыкания системы (1.1)–(1.2) используется уравнение, связывающее площадь поперечного сечения сосуда и давление:

$$p_k(S_k) - p_{*k} = \rho c_k^2 f(S_k), \quad (1.4)$$

где p_{*k} — давление в окружающих тканях, c_k — скорость распространения малых возмущений в покое ($S_k = S_k^0$), S-образная функция $f(S)$ приближается как

$$f(S_k) = \begin{cases} \exp(S_k/S_k^0 - 1) - 1, & S_k > S_k^0 \\ \ln(S_k/S_k^0), & S_k \leq S_k^0 \end{cases}. \quad (1.5)$$

На входе в аорту (артерия, соединенная с сердцем) в качестве краевых условий задается объемный кровоток

$$u_{in}(t, 0) \cdot S_{in}(t, 0) = Q_{heart}(t). \quad (1.6)$$

Функция $Q_{heart}(t)$ представляет собой профиль, типичный для потока крови через аорту человека [9].

На концах терминальных сосудов задается условие:

$$R_k Q_k = p_k - p_v, \quad (1.7)$$

где p_v — центральное венозное давление (по умолчанию 8 мм рт ст), $p_k = p_k(S_k)$ — давление на конце терминальной артерии, $Q_k = S_k u_k$ — поток крови через терминальную артерию, R_k — сопротивление k -й области микроциркуляции.

Сопротивление R_k является сопротивлением не только микроциркуляторной области, но и части венозной системы, в которой давление выше центрального венозного. Сопротивления R_k в коронарных сосудах используются для моделирования сжатия миокарда. В фазу систолы сопротивления R_k увеличиваются в 3 раза [8]. Временной профиль сопротивления при этом имеет ту же форму, что и функция сердечного выброса (1.6). Базовые значения сопротивления рассчитываются пропорционально диаметрам терминальных артерий с помощью закона Мюррея со степенью 2.8 [7].

После этого базовые значения сопротивлений корректируется в соответствии со значением TPR области миокарда, которую снабжает кровью рассматриваемая артерия. Низкие значения TPR соответствуют патологической перфузии и высокому сопротивлению области микроциркуляции. Для учёта затруднённой перфузии каждое значение сопротивления R_k умножается на коэффициент α_k

$$\alpha_k = \begin{cases} 1, & TPR \geq 1.4 \\ a + b \exp(c \cdot TPR_k), & TPR < 1.4 \end{cases}, \quad (1.8)$$

$$a = 2 + 2/\sqrt{3}, \quad b = \sqrt{\frac{(4-a)^3}{2-a}}, \quad c = 5 \ln \frac{4-a}{b}, \quad (1.9)$$

где TPR_k — значение TPR соответствующей области миокарда. Значения a, b, c подбираются так, чтобы $\alpha_k = 1$ при $TPR_k = 1.4$ и $\alpha_k = 4$ при $TPR_k = 0.2$. Кроме того, значение $\alpha_k = 2$ приписывается $TPR_k = 0.6$, чтобы обозначить переходную область от серьёзных нарушений перфузии к критическим. Поток крови при $TPR < 0.2$ при подобной корректировке становится практически нулевым.

Экспоненциальная функция выбрана для того, чтобы изменения TPR от 1.4 до 1.0 мало влияли на сопротивление и кровоток, а изменения от 1.0 до 0.6 влияли сильнее, что соответствует клинической практике.

Корректировка граничных условий на терминальных артериях повышает сопротивление в областях с низкими TPR для имитирования затруднённой микроциркуляции. Для тестирования работы предложенной модели рассмотрим пациента со структурой сосудов, изображённой на рисунке 1.5. Параметры сосудов приведены в таблицах 1.1 и 1.2. Стенозы (сегменты 3, 5, 9) моделируются как отдельные сосуды с меньшим диаметром.

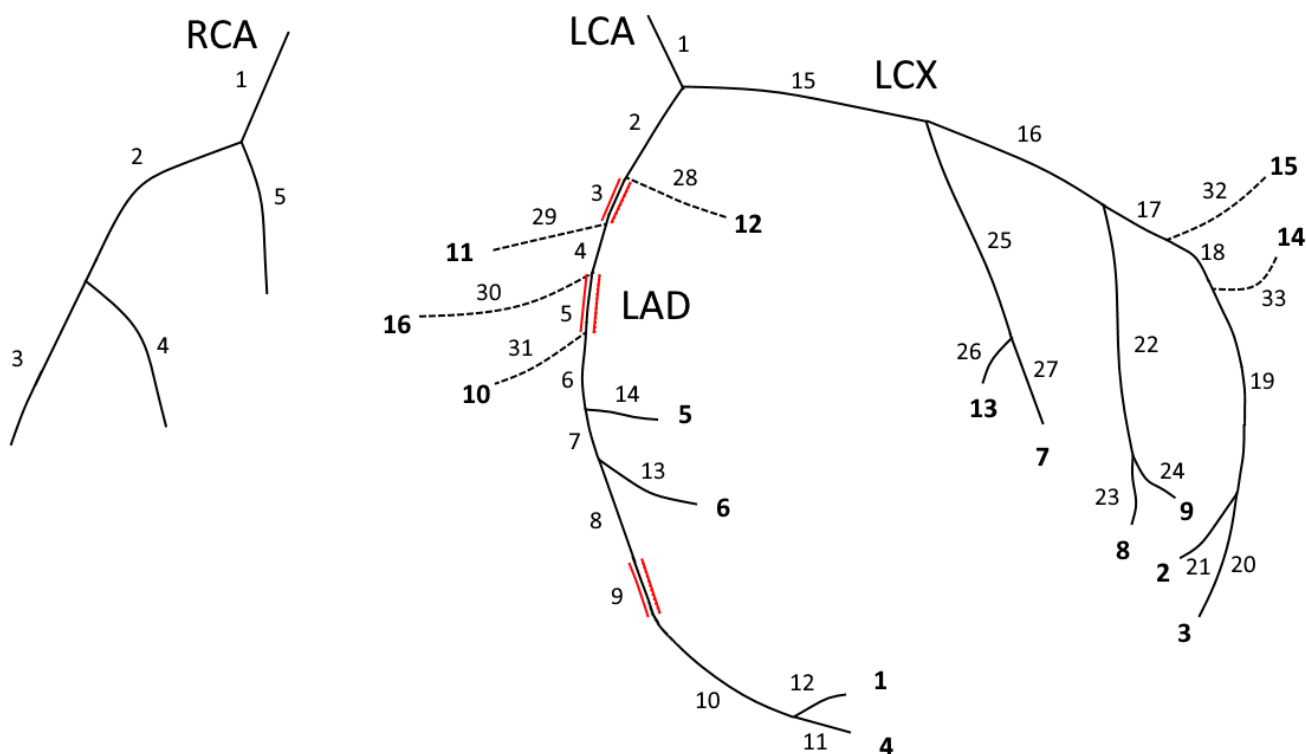


Рис. 1.5: Структура сосудов правой коронарной артерии (RCA) и левой коронарной артерии (LCA). Пунктирные линии обозначают синтетические сосуды. Стенозы обозначены двумя красными линиями

ФРК измерено в дистальной части передней нисходящей артерии (LAD), что соответствует сегменту 10 на рис. 1.5. Измеренное значение ФРК — 0.43. Оценка ФРК при моделировании без учёта значений TPR — 0.39. Оценка ФРК при моделировании с учётом значений TPR — 0.41. Кроме того, проведено

ТАБЛИЦА 1.1: Параметры ветвей левой коронарной артерии (рисунок 1.5): l — длина, d — диаметр, Зона — номер соответствующей зоны миокарда, TPR_{rest} — значение TPR в покое, TPR_{stress} — значение TPR при нагрузке.

No	l ,	d ,	Zone	TPR_{rest}	TPR_{stress}	No	l ,	d ,	Zone	TPR_{rest}	TPR_{stress}
1	10.5	3.3	-	-	-	18	2.3	1.7	-	-	-
2	25.0	3.7	-	-	-	19	27.8	2.5	-	-	-
3	7.8	1.3	-	-	-	20	34.3	2.3	3	1.49	1.34
4	8.6	3.4	-	-	-	21	21.1	2.5	2	1.19	1.20
5	4.9	1.9	-	-	-	22	39.5	2.5	-	-	-
6	24.4	3.3	-	-	-	23	5.4	2.2	8	1.18	1.41
7	2.4	2.6	-	-	-	24	15.2	1.2	9	1.12	1.13
8	12.4	2.7	-	-	-	25	57.4	2.3	-	-	-
9	6.5	0.4	-	-	-	26	14.6	1.1	13	1.21	1.39
10	62	1.9	-	-	-	27	20.1	1.6	7	1.02	1.10
11	9.7	1.3	4	1.22	1.28	28	20.3	0.7	12	1.21	1.33
12	9.9	0.7	1	1.03	1.05	29	15.6	0.7	11	1.23	1.25
13	15.3	1.3	6	0.95	0.93	30	46.8	0.7	16	1.25	1.27
14	6.7	2.5	5	1.06	1.08	31	17.5	0.7	10	1.15	1.13
15	36.1	3.5	-	-	-	32	38.3	0.7	15	1.00	1.12
16	57.4	2.3	-	-	-	33	17.4	0.7	14	1.13	1.22
17	11.1	2.1	-	-	-						

ТАБЛИЦА 1.2: Параметры правой коронарной артерии: l — длина, d — диаметр.

No	l , мм	d , мм
1	52.3	3.8
2	68.6	3.2
3	43.2	2.1
4	43.4	2.1
5	58.1	2.3

исследование изменения рассчитанного ФРК при изменении TPR в зонах миокарда 1 и 4, дистальных к месту измерения ФРК. Результаты приведены на рисунке 1.6. При ухудшении перфузии (низкие значения TPR) значения ФРК повышаются, что может привести к неправильной оценке гемодинамической значимости стеноза. При отсутствии стеноза и нарушении перфузии ФРК не даёт информации о наличии патологии, т.к. ФРК является показателем патологий сосудов.

Таким образом, разработана модель коронарного кровотока, позволяющая принимать во внимание данные коронарной перфузии. На следующих этапах предполагается модификация и оптимизация модели, а также её апробация на собранных данных пациентов.

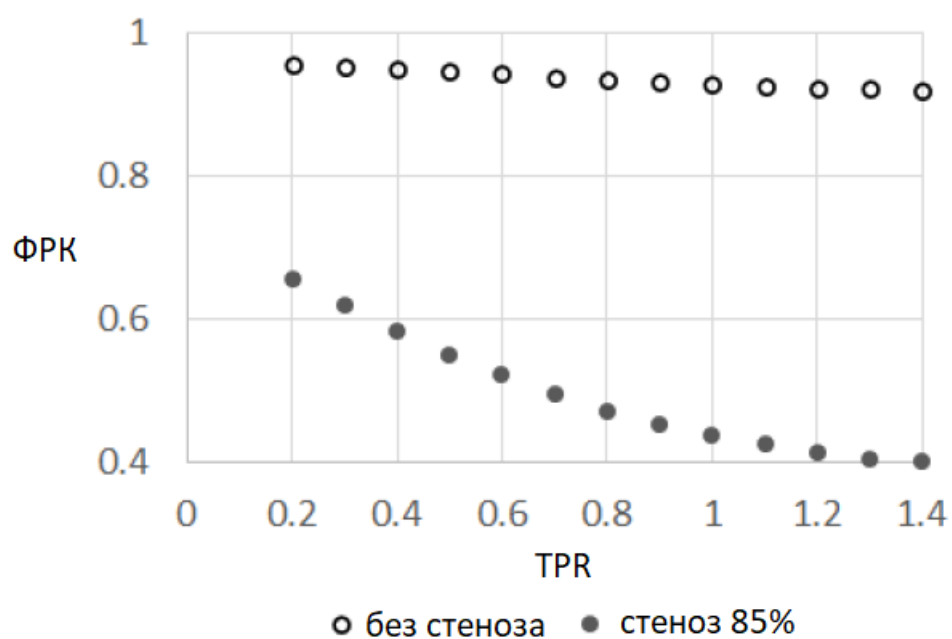


Рис. 1.6: Рассчитанные значения ФРК при наличии и отсутствии стеноза для различных значений TPR в зонах, дистальных к стенозам.

Литература

- [1] Омаров Ю.А. Сухина Т.С. Веселова Т.Н. Шахнович Р.М. Жукова Н.С. Меркулова И.Н. Певзнер Д.В. Терновой С.К. Староверов И.И. Возможности перфузионной компьютерной томографии миокарда в диагностике ишемической болезни сердца // *Кардиология*. — 2020. — Vol. 60, no. 10. — Pp. 122–131.
- [2] Branch K. R. Haley R. D. Bittencourt M. S. Patel A. R. Hulten E. Blankstein R. Myocardial computed tomography perfusion // *Cardiovascular diagnosis and therapy*. — 2017. — Vol. 7, no. 5. — Pp. 452–462.
- [3] Camici Paolo G, Magnoni Marco. How important is microcirculation in clinical practice? // *European Heart Journal Supplements*. — 2019. — Vol. 21, no. Supplement B. — Pp. B25–B27.
- [4] Sambucetti Gianmario, L'Abbate Antonio, Marzilli Mario. Why should we study the coronary microcirculation? // *American Journal of Physiology-Heart and Circulatory Physiology*. — 2000. — Vol. 279, no. 6. — Pp. H2581–H2584.
- [5] Integrating CT Myocardial Perfusion and CT-FFR in the Work-Up of Coronary Artery Disease // *JACC: Cardiovascular Imaging*. — 2017. — Vol. 10, no. 7. — Pp. 760–770.
- [6] Performance of computed tomography-derived fractional flow reserve using reduced-order modelling and static computed tomography stress myocardial perfusion imaging for detection of haemodynamically significant coronary stenosis / Abdul Rahman Ihdahid, Takuya Sakaguchi, Jesper J Linde et al. // *European Heart Journal - Cardiovascular Imaging*. — 2018. — Vol. 19, no. 11. — Pp. 1234–1243.
- [7] Computational Analysis of Haemodynamic Indices in Synthetic Atherosclerotic Coronary Networks / Sergey Simakov, Timur Gamilov, Fuyou Liang, Philipp Kopylov // *Mathematics*. — 2021. — Vol. 9, no. 18.
- [8] Gamilov T.M. Kopylov Ph. Yu. Pryamonosov R.A. Simakov S.S. Virtual fractional flow reserve assesment in patient-specific coronary networks by 1D hemodynamic model // *Rus. J. Num. Anal. Math. Mod.* — 2015. — Vol. 30, no. 5. — Pp. 269–276.
- [9] Ganong W. F. Review of Medical Physiology. — Stanford, CT: Appleton and Lange, 1999.

Задача 1.2. Виртуальный персонализированный раскрой створок аортального клапана при его реконструкции из аутоперикарда

Метод автоматической сегментации корня аорты на основе КТ-изображений с контрастом и метод нахождения точек комиссур нативного клапана. Исследование применимости мембранного приближения с помощью метода гиперупругих узловых сил для моделирования закрытия створок аортального клапана. Сравнительный анализ методов моделирования контакта створок клапана с точки зрения времени проведения расчетов и адекватности результатов. Протокол для проведения натурального эксперимента на образце свиного аортального клапана для валидации результатов математической модели закрытия аортального клапана.

1.2.1 Метод автоматической сегментации корня аорты на основе КТ-изображений с контрастом и метод нахождения точек комиссур нативного клапана

Операции по замене аортального клапана зачастую сопряжены с кальцинозом аортального клапана. На рисунке 2.1 показан срез корня аорты пациента с сильно выраженным кальцинозом артериального клапана. Кальцинированные отложения (кальцинаты) и кровь с контрастным веществом имеют близкие значения по шкале Хаунсфильда, что ставит вопрос о корректности использования существующих методов автоматической сегментации корня аорты на основе КТ-изображений с контрастом.

В рамках работ по проекту был исследован метод автоматической сегментации аорты, описанный в [1] и приведенный в виде Алгоритма 1. В текущей реализации данного алгоритма отложения кальция на стенках аорты и лепестках аортального клапана учитываются при определении просвета аорты.

Algorithm 1 Алгоритм автоматической сегментации просвета аорты согласно [1]

1. На анатомически нижнем слое применить фильтр Хафа для нахождения центра $xcenter$ и радиуса RA наибольшего светлого диска.
 2. Найти минимальную интенсивность T внутри диска.
 3. Выделить содержащую $xcenter$ связную маску M по порогу T .
 4. Применить алгоритм Isoperimetric Distance Tree (IDT) к маске M и $xcenter$ и получить маску MA .
 5. Сузить и расширить маску MA на слой толщины $Rsmooth(RA)$.
 6. Скопировать маску MA в маску $Msmooth$. Сузить $Msmooth$ на слой толщины $Rsmooth(RA)$ вокселей, затем расширить на слой толщины $Rsmooth(RA) + Tsmooth(RA)$.
 7. Удалить из маски MA воксели, не принадлежащие маске $Msmooth$.
-

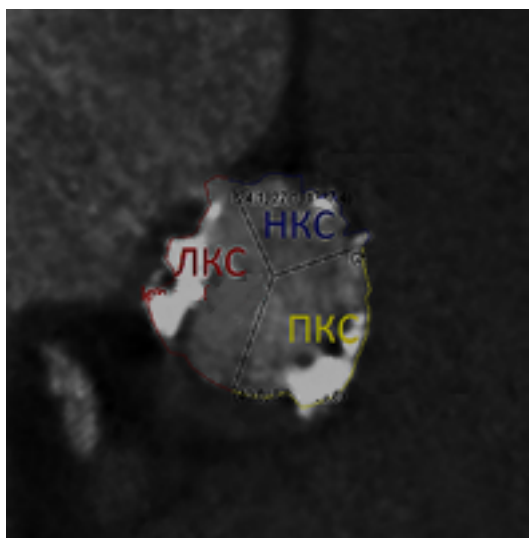


Рис. 2.1: Пациент с сильно выраженным кальцинозом артериального клапана (белые области на рисунке). ЛКС — это левая коронарная створка; НКС — некоронарная створка; ПКС — правая коронарная створка.

При проведении пришивания неостворок аортального клапана кальцинат счищают, что может вызвать изменение просвета аорты. Проведенные исследования показали, что это изменение незначительно меняет величину просвета, хотя форма стенки аорты в местах отложения кальция может оказаться неровной. Отдельного исследования требует автоматическое определение IV формы кальциноза стенки аорты, поскольку при этом аутоперикардальное протезирование становится невозможным и при клиническом применении данной технологии об этом необходимо сообщать хирургу.

Метод нахождения точек комиссур нативного клапана. Точки комиссур определяют область соединения створок аортального клапана, линия крепления которых полностью определяется синусами Вальсавы корня аорты. Синусы Вальсавы представляют собой выпячивания стенки аорты и образуют седловидную поверхность, которая характеризуется отрицательной гауссовой кривизной. Для детектирования точек комиссур нативного клапана предлагается использовать данный факт и анализировать локальную топологию внутренней поверхности корня аорты. Таким образом, задача сводится к нахождению областей отрицательной гауссовой кривизны внутренней поверхности стенки

аорты. В качестве входных данных используется результат применения метода автоматической сегментации просвета аорты. Таким образом, поверхность аорты представлена воксельной маской, а не триангулированной поверхностью, что является особенностью задачи. За основу вычисления гауссовой кривизны на воксельных поверхностях взят метод [2] вычисления гауссовой кривизны K в каждой точке дискретизированной поверхности с использованием первой и второй фундаментальной форм:

$$K = \frac{(h_{11}h_{22} - h_{12}h_{21})}{(g_{11}g_{22} - g_{12}g_{21})},$$

где g_{ij} , h_{ij} — компоненты первой и второй фундаментальных форм соответственно:

$$\begin{aligned} g_{11} &= \mathbf{X}_{,u} \cdot \mathbf{X}_{,u}, & g_{12} &= \mathbf{X}_{,u} \cdot \mathbf{X}_{,v}, & g_{21} &= \mathbf{X}_{,v} \cdot \mathbf{X}_{,u}, & g_{22} &= \mathbf{X}_{,v} \cdot \mathbf{X}_{,v}; \\ h_{11} &= \mathbf{X}_{,uu} \cdot \mathbf{N}, & h_{12} &= \mathbf{X}_{,uv} \cdot \mathbf{N}, & h_{21} &= \mathbf{X}_{,vu} \cdot \mathbf{N}, & h_{22} &= \mathbf{X}_{,vv} \cdot \mathbf{N}. \end{aligned}$$

Здесь и далее введем следующие обозначения $\partial f / \partial u = f_{,u}$, $\partial^2 f / \partial u \partial v = f_{,uv}$. Вычисления гауссовой кривизны K реализовано в виде Алгоритма 2.

Algorithm 2 Вычисление гауссовой кривизны для воксельной маски сегментированного корня аорты

Входные данные: двоичная маска сегментированного корня аорты.

1. Создание масок «толстой» поверхности и «тонкой» поверхности.

Операция эрозии с размером элемента 4 вокселя к исходной маске \rightarrow «толстая» поверхность.

«Тонкая» поверхность — подмножество вокселей «толстой» поверхности, у которых в окрестности U_ε есть по крайней мере один фоновый воксель, то есть не принадлежащий поверхности.

U_ε представляет собой куб $3 \times 3 \times 3$ с выколотым центром.

2. Вычисление вектора нормали \mathbf{N} в каждом вокселе поверхности.

3. Вычисление перпендикулярных направлений \mathbf{u} и \mathbf{v} , для образования ортогонального базиса с нормалью.

4. Вычисление компонент первой фундаментальной формы g_{ij} .

5. Вычисление второй фундаментальной формы h_{ij} .

6. Вычисление гауссовой кривизны в каждой точке поверхности K .

Для оценки работоспособности алгоритм вычисления кривизны K был протрестирован на аналитически заданных поверхностях: шар (поверхность с постоянной положительной кривизной), цилиндр (поверхность с постоянной нулевой кривизной) и поверхность седловидной формы GoldfeatherShape, описанной в [3]. Для шара и цилиндра в каждой точке известна аналитическая формула для нормали, которая сравнивалась с нормалью, вычисленной на дискретизированной поверхности. За качество близости двух нормалей брались их скалярное произведение, при этом 1 соответствует 100% сходству и -1 нулевому сходству. Качество вычисления нормалей на дискретизированных поверхностях шара оказалось 99%, а на дискретизированных поверхностях цилиндра — 96 %. При этом измельчение шага дискретизации в 100 раз не приводило к существенному улучшению качества. Диапазон разброса вычисленной гауссовой кривизны на шаре составил $[0.12, 0.20]$ при аналитической оценке 0.16. Средняя величина кривизны на цилиндре (поверхность с нулевой аналитической кривизной) составляет 0.023 с дисперсией 0.00068.

На фигуре седловой формы GoldfeatherShape качество соответствия нормалей составляет 96.8%, при этом область отрицательной кривизны определяется довольно устойчиво, хотя абсолютные значения могут довольно сильно отличаться от аналитических. Общий результат проведенных предварительных исследований на аналитических фигурах — абсолютная величина гауссовой кривизны K может определяться неточно, при этом знак определяется верно.

Результат вычисления гауссовой кривизны на сегментированной аорте представлен на рис. 2.2. Кривизна лежит в диапазоне $[-1.27, 1.45]$, при этом 99% результатов лежит в диапазоне $[-0.01, 0.01]$. Поэтому поверхность на рис. 2.2а однотонная, с едва различимыми синими и красными участками, соответствующие отрицательной и положительной кривизне соответственно. Если применить к вычисленной кривизне K функцию ошибки $\operatorname{erf}(x/0.001)$, то распределение кривизны (рис. 2.2б) становится более отчетливым. При этом прослеживается непрерывная область отрицательной кривизны в местах соединения синусов с аортой. Эта область характеризуется наибольшим числом связанных граней, в которых все три вершины имеют отрицательную кривизну (показано зеленым цветом на рис. 2.2с). Таким образом удастся выделить полосу отрицательной гауссовой кривизны в области соединения синусов и аорты, в которых находятся и точки комиссур, и линии крепления нативного аортального клапана. Более точное определение точек комиссур сводится к определению пересечений линий креплений нативного клапана, что является задачей, запланированной на 2022 год.

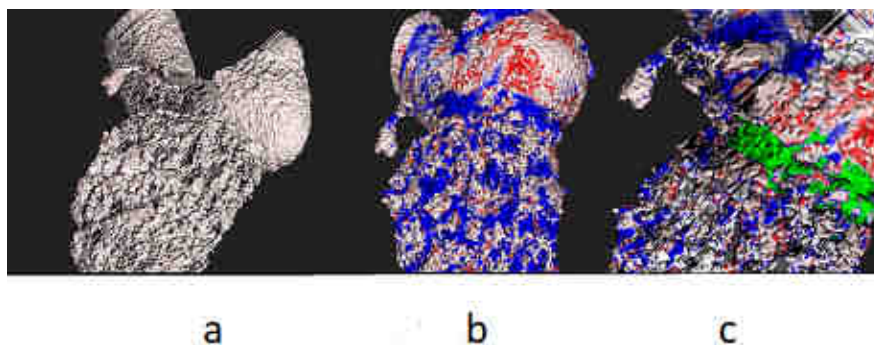


Рис. 2.2: а) поверхность аорты с изображением кривизны в полном диапазоне $K \in [-1.27, 1.45]$; б) кривизна на поверхности с применением функции ошибок $\operatorname{erf}(x)$ с $\sigma = 0.001$; в) полоса отрицательной кривизны в корне аорты отмечена зеленым. Цветовая шкала на рисунках соответствует диапазону $[-0.01, 0.01]$, где глубокий синий цвет — кривизна -0.01 , красный цвет — кривизна 0.01 , белый цвет — нулевая кривизна.

1.2.2 Исследование применимости мембранного приближения с помощью метода гиперупругих узловых сил для моделирования закрытия створок аортального клапана

Достаточное смыкание (коаптация) створок аортального клапана и конфигурация клапана в диастолическом (закрытом) состоянии определяют должное функционирование сердечного клапана. Коаптационные и конфигурационные характеристики закрытого клапана можно оценить, используя модели оболочки или мембраны при описании механического поведения аортальной створки. Был проведен анализ работ по моделированию закрытия створок аортального клапана с точки зрения использования различных постановок (мембранной или оболочечной). Единого мнения, как влияет изгибная жесткость оболочечной модели на коаптационные характеристики и диастолическую конфигурацию клапана, в научной литературе нет, более того, отсутствуют работы по сравнению интересующих характеристик для оболочечной и мембранной постановок. На данном этапе была предложена и реализована численная модель деформирования гиперупругой оболочки. Данная модель является комбинацией метода гиперупругих узловых сил (мембранная часть) и использования специальных конечных элементов (rotation-free shell element) для учета изгибной жесткости упругой структуры. Были проведены численные эксперименты по сравнению коаптационных и конфигурационных характеристик закрытого состояния аортального клапана при использовании моделей оболочки и мембраны.

По результатам работ были опубликованы статьи [4, 5], основные моменты из которых приведены ниже.

Кинематика оболочки. Мы рассматриваем деформацию тонкой гиперупругой оболочки, считая что нормаль к срединной поверхности оболочки до деформации остается нормалью к срединной поверхности при деформации оболочки (гипотеза Кирхгофа — Лява). Пусть отображение $\Psi : \mathcal{A} \rightarrow \Omega_0 \in \mathbb{R}^3$ определяет срединную поверхность оболочки в начальной (до деформации) конфигурации, где $\mathcal{A} \subset \mathbb{R}^2$ является компактным множеством. Оболочка в начальной конфигурации \mathcal{S}_0 определяется как

$$\mathcal{S}_0 = \{\mathbf{X} \in \mathbb{R}^3 | \mathbf{X}(\xi^1, \xi^2, \xi^3) = \Psi(\xi^1, \xi^2) + \xi^3 \mathbf{N}(\xi^1, \xi^2), (\xi^1, \xi^2) \in \mathcal{A}, \xi^3 \in [-H/2, H/2]\},$$

где H — начальная толщина оболочки, \mathbf{N} — единичная нормаль к срединной поверхности в начальной конфигурации. Аналогично определим актуальную (после деформации) конфигурацию оболочки \mathcal{S}_t

$$\mathcal{S}_t = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 | \mathbf{x}(\xi^1, \xi^2, \xi^3) = \psi(\xi^1, \xi^2) + \xi^3 \lambda \mathbf{n}(\xi^1, \xi^2), (\xi^1, \xi^2) \in \mathcal{A}, \xi^3 \in [-H/2, H/2]\},$$

где $\psi : \mathcal{A} \rightarrow \Omega_t \in \mathbb{R}^3$ — срединная поверхность в актуальной конфигурации, $\lambda = h/H$, h — толщина оболочки в актуальной конфигурации, \mathbf{n} — единичная нормаль к срединной поверхности в актуальной конфигурации.

Конвективные системы координат для начальной (G_i) и актуальной (g_i) конфигураций определяются как:

$$\mathbf{G}_\alpha = \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \xi^\alpha} = \Psi_{,\alpha} + \xi^3 \mathbf{N}_{,\alpha}, \quad \mathbf{G}_3 = \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \xi^3} = \mathbf{N}, \quad \mathbf{g}_\alpha = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \xi^\alpha} = \psi_{,\alpha} + \xi^3 (\lambda \mathbf{n})_{,\alpha}, \quad \mathbf{g}_3 = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \xi^3} = \lambda \mathbf{n}, \quad \alpha = 1, 2.$$

Геометрия срединной поверхности определяется компонентами метрического тензора

$$a_{\alpha\beta} = \mathbf{g}_\alpha|_{\xi^3=0} \cdot \mathbf{g}_\beta|_{\xi^3=0} = \psi_{,\alpha} \cdot \psi_{,\beta} \quad \alpha, \beta = 1, 2,$$

и компонентами тензора кривизны $\kappa_{\alpha\beta} = -\psi_{,\alpha\beta} \cdot \mathbf{n} = \frac{1}{2} (\psi_{,\alpha} \cdot \mathbf{n}_{,\beta} + \psi_{,\beta} \cdot \mathbf{n}_{,\alpha})$, $\alpha, \beta = 1, 2$.

Градиент деформации \mathbb{F} для оболочки определяется как

$$\mathbb{F} = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{X}} = \sum_{i=1}^3 \mathbf{g}_i \otimes \mathbf{G}^i,$$

где $\mathbf{a} \otimes \mathbf{b} \equiv \mathbf{ab}^T$, $\mathbf{G}^i = \mathbb{G}^{-1} \mathbf{G}_j$, матрица \mathbb{G} имеет компоненты $G_{ij} = \mathbf{G}_i \cdot \mathbf{G}_j$. В теории тонких оболочек правый тензор деформаций Коши-Грина $\mathbb{C} = \mathbb{F}^T \mathbb{F} = \sum_{i,j=1}^3 (\mathbf{g}_i \cdot \mathbf{g}_j) \mathbf{G}^i \otimes \mathbf{G}^j$ представим следующим образом [6]:

$$\mathbb{C} = \sum_{\alpha,\beta=1}^2 c_{\alpha\beta} \mathbf{G}^\alpha \otimes \mathbf{G}^\beta + \lambda^2 \mathbf{N} \otimes \mathbf{N}, \quad c_{\alpha\beta} = a_{\alpha\beta} + 2\lambda \xi^3 \kappa_{\alpha\beta}. \quad (2.1)$$

Определяющие соотношения. Считаем, что материал оболочки гиперупругий, т.е. существует упругий потенциал (функция энергии деформации) $W(\mathbb{C})$, который полностью задает определяющее соотношение. Для гиперупругого материала второй тензор Пиолы-Кирхгоффа \mathbb{S} определяется как:

$$\mathbb{S} = 2 \frac{\partial W}{\partial \mathbb{C}} = \sum_{i,j=1}^3 s^{ij} \mathbf{G}_i \otimes \mathbf{G}_j, \quad s^{ij} = 2 \frac{\partial W}{\partial c_{ij}}.$$

Для случая несжимаемых гиперупругих оболочек $I_3^{(3D)} = 1$ мы можем переписать все трехмерные инварианты с помощью поверхностных инвариант $I_1, I_{4,\alpha}, J$ [7]:

$$I_1 = \text{tr} \mathbb{C}^{(2d)}, \quad I_2 = \det \mathbb{C}^{(2d)} = J^2, \quad I_{4,\alpha} = \mathbb{C}^{(2d)} : (\mathbf{M}_\alpha \otimes \mathbf{M}_\alpha), \quad \alpha = 1, 2,$$

соответствующие трехмерные инварианты переписутся как

$$I_1^{(3d)} = I_1 + I_2^{-1} = I_1 + J^{-2}, \quad I_{4,\alpha}^{(3d)} = I_{4,\alpha}, \quad I_{4,\alpha}^* = \kappa(I_1 + I_2^{-1}) + (1 - 3\kappa)I_{4,\alpha},$$

и следовательно, $W(\mathbb{C}) = \widehat{W}(I_1, I_{4,\alpha}, J)$. При переходе к двумерным инвариантам мы считали, что на поверхности заданы два семейства волокон, определяющих анизотропию поверхности, т.е. $(\mathbf{M}_1, \mathbf{N}) =$

0, $(\mathbf{M}_2, \mathbf{N}) = 0$, где \mathbf{M}_α — единичный вектор, определяющий среднее направление семейства волокон до деформации.

Слабая постановка. Рассмотрим равновесие тонкой оболочки под действием внешних сил плотности \mathbf{b} . Пусть граница срединной поверхности $\partial\Omega_t$ разделена на две части $\partial\Omega_t = \Gamma_u(t) \cup \Gamma_\sigma(t)$, $\Gamma_u(t) = \bar{\Gamma}_u(t)$. Смешанные граничные условия запишутся как

$$\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} \quad \text{на } \Gamma_u(t), \quad \mathbb{T}\mathbf{n}_t = \bar{\mathbf{t}} \quad \text{на } \Gamma_\sigma(t), \quad (2.2)$$

где $\mathbf{u} = \mathbf{x} - \mathbf{X}$ — поле перемещений точек срединной поверхности, \mathbf{n}_t — единичная внешняя нормаль к $\partial\Omega_t$, $\mathbb{T} = (1/\det \mathbb{F}) \mathbb{F} \mathbb{S} \mathbb{F}^T$ — тензор усилий Коши, $\bar{\mathbf{u}}$ and $\bar{\mathbf{t}}$ — заданные перемещения и усилия на соответствующих границах.

Согласно принципу виртуальной работы задача сводится к нахождению такого $\mathbf{u} \in \tilde{\mathbf{H}}^1(\Omega_t)$, $\tilde{\mathbf{H}}^1(\Omega_t) := \{\mathbf{v} \in (H^1(\Omega_t))^3, \mathbf{v} = \bar{\mathbf{u}} \text{ on } \Gamma_u(t)\}$, что

$$\delta U - \delta W_{ext} = 0, \quad \delta U = \delta \left(\int_{S_0} \widehat{W}(I_1(\nabla \mathbf{u}), J(\nabla \mathbf{u})) dV \right), \quad \delta W_{ext} = \int_{\Gamma_\sigma(t)} \bar{\mathbf{t}} \cdot \delta \mathbf{u} dt + \int_{\Omega_t} \mathbf{b} \cdot \delta \mathbf{u} ds. \quad (2.3)$$

Учитывая (2.1), мы можем переписать (2.3): следующим образом

$$\begin{aligned} \delta U &= \int_{\Omega_0} \mathbf{l} : \delta \mathbf{a}(\nabla \mathbf{u}) ds + \int_{\Omega_0} \mathbf{m} : \delta \boldsymbol{\kappa}(\nabla \mathbf{u}) ds, \quad \mathbf{l} = (l_{11}, l_{22}, l_{12})^T, \quad l_{ij} = \int_{-H/2}^{H/2} s^{ij} d\xi^3, \\ \mathbf{m} &= (m_{11}, m_{22}, m_{12})^T, \quad m_{ij} = \int_{-H/2}^{H/2} s^{ij} \lambda \xi^3 d\xi^3, \quad \mathbf{a} = (a_{11}, a_{22}, 2a_{12})^T, \quad \boldsymbol{\kappa} = (\kappa_{11}, \kappa_{22}, 2\kappa_{12})^T. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Первый член в уравнении (2.4) описывает поведение упругой структуры в касательной плоскости, в то время как второй член характеризует изгибную часть упругой структуры. Для дискретизации первого слагаемого будем использовать метод гиперупругих узловых сил [8], а для дискретизации второго слагаемого (изгибной части) — метод Enhanced Basic Shell Triangle (EBST) [6].

Дискретизация. Рассмотрим срединную поверхность в начальной конфигурации Ω_0 , представленную в виде треугольной сетки. Для нахождения приближенного решения уравнений (2.3), (2.4) мы будем использовать P_1 конечные элементы при дискретизации мембранной части и rotation free конечные элементы при дискретизации изгибной части. Пусть деформация треугольника T_P с вершинами $\mathbf{P}_1, \mathbf{P}_2, \mathbf{P}_3$ в треугольник T_Q с вершинами $\mathbf{Q}_1, \mathbf{Q}_2, \mathbf{Q}_3$ определяется с помощью отображения $\mathbf{x}(\mathbf{X})$. Обозначим площадь треугольника до деформации T_P как A_P , площадь треугольника после деформации T_Q как A_Q .

Дискретизация мембранной части. Мембранная часть энергии деформации (упругого потенциала) треугольника T_P [8]:

$$\delta U_m^h = \int_{T_P} \mathbf{l} : \delta \mathbf{a}(\nabla \mathbf{u}^h) ds, \quad (2.5)$$

где \mathbf{u}^h — P_1 конечно-элементное перемещение, соответствующая узловая сила i -ого узла треугольника T_P имеет вид

$$\mathbf{F}_i^m(T_P) = -\frac{\partial U_m^h}{\partial \mathbf{Q}_i} = -A_P H \frac{\partial \widehat{W}^h|_{\xi^3=0}}{\partial \mathbf{Q}_i}. \quad (2.6)$$

Дискретизация изгибной части. Изгибная часть упругой деформации (упругого потенциала) T_P дискретизируется как

$$\delta U_b^h = \int_{T_P} \mathbf{m} : \delta \boldsymbol{\kappa}(\nabla \mathbf{u}^h) ds. \quad (2.7)$$

Постоянное поле кривизны на треугольнике T_P вычисляется согласно [6]:

$$\kappa_{\alpha\beta} = -\frac{1}{A_P} \int_{T_P} \psi_{,\alpha\beta}^h \cdot \mathbf{n} ds, \quad (2.8)$$

где A_P — площадь центрального треугольника T_P патча Π_P (объединение T_P и его ближайших соседей через ребро) в начальной конфигурации, $\psi_{,\alpha\beta}^h$ — вторые производные P_2 -вектор функции ψ^h при заданных \mathbf{Q}_i на патче Π_P . Численно интегрируя (2.8), получаем следующую формулу для компонент тензора кривизны

$$\kappa_{\alpha\beta} = \mathbf{h}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{n}, \quad \mathbf{h}_{\alpha\beta} = \sum_{k=1}^3 \frac{1}{2} \left(L_{k,i}^M \psi_{,j}^h(E_k) + L_{k,j}^M \psi_{,i}^h(E_k) \right), \quad \alpha, \beta = 1, 2, \quad (2.9)$$

где $(L_{k,1}^M, L_{k,2}^M)^T = -\frac{l_k}{2A_P} (n_1^k, n_2^k)^T$, $\mathbf{n}^k = (n_1^k, n_2^k)^T$ — k -ое ребро центрального элемента T_P в начальной конфигурации, l_k и E_k — длина и средняя точка k -ого ребра, соответственно.

Уравнение (2.9) связывает вариацию $\delta \boldsymbol{\kappa}$ с вектором $\delta \mathbf{Q} = (\mathbf{n} \cdot \delta \mathbf{Q}_1, \mathbf{n} \cdot \delta \mathbf{Q}_2, \mathbf{n} \cdot \delta \mathbf{Q}_3, \mathbf{n} \cdot \delta \mathbf{Q}_4, \mathbf{n} \cdot \delta \mathbf{Q}_5, \mathbf{n} \cdot \delta \mathbf{Q}_6)^T$ и матрицей кривизны \mathbf{B}_b [6]: $\delta \boldsymbol{\kappa} = \mathbf{B}_b \delta \mathbf{Q}$. Изгибные силы для i -ого узла патча Π_P определяются как

$$\mathbf{F}_j^b = -A_P \frac{\delta U_b^h}{\delta \mathbf{Q}_j}, \quad j = 1, \dots, 6, \quad (\mathbf{F}_1^b, \mathbf{F}_2^b, \mathbf{F}_3^b, \mathbf{F}_4^b, \mathbf{F}_5^b, \mathbf{F}_6^b) = -A_P \mathbf{n} \otimes (\mathbf{m}^T \mathbf{B}_b). \quad (2.10)$$

Предложенный подход для учета изгибной жесткости является общим для гиперупругих материалов и обладает всем необходимым для легкой реализации любого гиперупругого потенциала.

Сравнение результатов мембранной и оболочечной моделей. Было проведено сравнение оболочечных и мембранных расчетов закрытого состояния идеализированного аортального клапана для различных гиперупругих моделей. Согласно полученным результатам, использование оболочечной формулировки приводит обычно к меньшей зоне коаптации, чем использование мембранной формулировки, причем разница становится ощутимой в случае жестких материалов. Площадь зоны коаптации для оболочки меньше, чем для соответствующей мембранной модели: разница в площади достигает 8% для мягких материалов (модуль сдвига = 900 кПа) и 16% для жестких материалов (модуль сдвига = 3000 кПа). Разница в коаптационных высотах также наиболее выражена для случая жестких материалов: она может достигать 1-2 мм в центральной зоне коаптации, что сопоставимо с высотой центральной коаптации в нативном аортальном клапане (около 3 мм).

Таким образом, несмотря на то, что использование мембранного приближения более привлекательно с точки зрения времени и простоты вычисления, для обоснования применимости мембранного приближения требуется более подробное исследование механических свойств обработанного перикарда, а также проведение натурального эксперимента по коаптации аортального клапана.

Отметим, что в настоящий момент при замене створок аортального клапана шаблон неостворки (новой створки) зачастую сильно больше нативного, и коаптационные характеристики в большей степени определяются начальным “вшитым” положением новой створки, чем типом используемой модели.

1.2.3 Сравнительный анализ методов моделирования контакта створок клапана с точки зрения времени проведения расчетов и адекватности результатов

При моделировании закрытия створок аортального клапана одной из основных целей является корректное воспроизведение областей контакта (коаптации) лепестков клапана. Выбор подхода для моделирования контактного взаимодействия имеет ключевое значение для численной оценки областей коаптации створок. Отметим, что на реальных геометриях шаблоны неостворки клапана часто являются избыточными, что создаёт дополнительные трудности при моделировании контактов. Задача отыскания и обработки контактов является вычислительно дорогой и может оказаться узким местом всей модели, вследствие чего при моделировании клапанов либо совсем стараются отказаться от моделирования контактов, ограничиваясь решением задач на симметричных идеализированных геометриях [9], либо используют ненадёжные ad-hoc алгоритмы [10].

При моделировании закрытия клапана мы предлагаем решать квазистатическую задачу равновесия, в которой время, как физическая величина, отсутствует. Однако, далее в этом разделе будет использоваться понятие n -го шага по времени, и под ним будет подразумеваться n -ый шаг нелинейного солвера (например, метода Ньютона или метода верхней релаксации). Для нахождения диастолической конфигурации створок закрытого аортального клапана мы рассматриваем положение только срединной

поверхности лепестка, и его толщина выступает лишь в качестве параметра, который сильно меньше, чем линейные размеры лепестка. Моделирование контактного взаимодействия для такого рода поверхностей часто называют моделированием столкновения ткани (cloth collision modeling). Много работ посвящены данной проблеме, охватить их все не представляется возможным. Далее приведен краткий обзор основных подходов к моделированию контактного взаимодействия.

Обзор методов моделирования контактов. Одним из основных методов моделирования контактного взаимодействия является геометрический подход [11]. Суть метода заключается в отслеживании пересечения элементов расчетных сеток контактирующих тел на $(n + 1)$ -м шаге по времени в предположении постоянства скорости сдвига узлов сеток. Найденные на $(n + 1)$ -м шаге пересекающиеся элементы позволяют специальным образом модифицировать переход с n -ого шага на $(n + 1)$ -м шаг, чтобы получить должным образом контактирующие поверхности.

В геометрическом подходе выделяют три основных этапа. Первый этап называется «широкой» фазой (broad phase) определения коллизий и состоит в отыскании достаточно близких пар элементов сетки, которые потенциально могут пересечься. Следующий этап, так называемая, «узкая» фаза (narrow phase), которая уже точно проверяет степень близости и характер сближения пар элементов и убирает лишние пары. Оставшиеся пары элементов используются на последнем этапе, обработка столкновений (collision processing), где с ними производятся какие-то действия для формирования контактных поверхностей. Например, к ним могут прикладываться отталкивающие силы или импульсы. В зависимости от характера обработки столкновений можно выделить метод штрафов и метод ограничений. В методе штрафов к слишком близким или сближающимся парам элементов прикладываются силы или импульсы отталкивания. Метод ограничений устроен сложнее, он основан на рассмотрении конфигурационного пространства состояний системы и отыскания такого импульса, при котором система не нарушит ни одного из ограничений и не покинет область допустимых состояний. Основными недостатками геометрического подхода является вычислительная сложность «широкой» фазы, на которую может уходить большая часть времени моделирования, а также сложность алгоритмов обработки столкновений.

Отметим, что существуют совершенно отличные по своей сути подходы к моделированию контактов. Например, в рамках механики сплошной среды предлагается моделировать не только сами упругие тела, но и пространство между ними как дополнительный медиум [12]. Этот подход имеет два основных преимущества. Во-первых, он обеспечивает естественность обработки столкновений, поскольку дополнительный медиум не позволяет двум телам соприкоснуться, и кроме того даёт возможность легко влиять на характер обработки столкновений посредством выбора свойств дополнительного медиума. Во-вторых, в этом подходе не требуется отыскивать близкие пары элементов сетки. Однако, у этого метода есть недостаток, а именно, повышенное число степеней свободы за счёт степеней свободы, приходящихся на окружающую среду (медиум). Кроме того, требуется также построить объёмную сетку

окружающей среды с встроенными поверхностными сетками для упругих структур и поддерживать её «качество» для проведения расчетов, что не всегда оказывается легко.

Используемые алгоритмы. На данном этапе работ был исследован геометрический подход с точки зрения целесообразности его применения для моделирования закрытия створок аортального клапана. Далее мы рассмотрим несколько простых тестовых задач с использованием метода штрафных сил и метода ограничений. Мы не будем учитывать самопересечения, учёт которых планируется реализовать на дальнейших этапах проекта.

Введём ряд обозначений. Пусть V_j — j -ая вершина, T_i — i -ый треугольник с вершинами $V_{T_i,1}, V_{T_i,2}, V_{T_i,3}$. Пусть V_j^n, T_i^n обозначает положение вершины V_j и треугольника T_i на n -ом шаге по времени, $V_j^{*,n+1}, T_i^{*,n+1}$ — положение вершины V_j и треугольника T_i на $(n+1)$ -ом шаге в отсутствие контактного взаимодействия. Пусть d_c — некоторая заданная константа близости, $\text{dist}(X, Y) = \min_{\mathbf{x} \in X, \mathbf{y} \in Y} |\mathbf{x} - \mathbf{y}|$, $\text{proj}(X, Y) = \arg \min_{\mathbf{y} \in Y} \left(\min_{\mathbf{x} \in X} |\mathbf{x} - \mathbf{y}| \right)$, $\text{orth}(\mathbf{x}) = \frac{\mathbf{x}}{|\mathbf{x}|}$, $\mathbf{S}(T_i^n)$ — ориентированная площадь треугольника T_i^n . В качестве сталкивающихся пар элементов будем рассматривать пары вершина-треугольник, которые принадлежат разным створкам (лепесткам) аортального клапана. Для проведения «широкой» фазы будет использоваться иерархическая структура для хранения осеориентированных параллелепипедов из библиотеки BulletPhysics [13]. На «узкой» фазе для пары $V_j - T_i$ будем проверять простое условие:

$$\text{dist}(V_j^n, T_i^n) < d_c + |V_j^{*,n+1} - V_j^n|$$

Для обработки $V - T$ пар, прошедших «узкую» фазу, будем применять Алгоритм 3.

Algorithm 3 Алгоритм обработки $V-T$ пар. Слева штрафной метод, а справа метод ограничений

Пусть $\mathbf{n}_v = \text{orth}(\sum_{T:V \in T} \mathbf{S}(T^n))$ — нормаль к V^n , \mathbf{n}_t — ед. нормаль к T^n : $\mathbf{n}_t \cdot \mathbf{n}_v \leq 0$, \mathbf{F}_v — сила, прилож. к

V^n , $P^n = \text{proj}(V^n, T^n)$, w_k — бар. коорд. точки P^n на T^n , $P^{*,n+1} = \sum_{k=1}^3 w_k V_{T,k}^{*,n+1}$, $\mathbf{n}_p = \text{orth}(V^n - P^n)$

1. Вычисляем знаковое расстояние d_e

и проекцию силы f_n :

$$d_e = (V^n - P^n) \cdot \mathbf{n}_t$$

$$f_n = \mathbf{F}_v \cdot \mathbf{n}_t$$

2. Вычисляем штрафную функцию s

и эффективную проекцию f :

$$s = \begin{cases} 0, & \frac{d_e}{d_c} \geq 2 \\ 3 - 2\frac{d_e}{d_c}, & \frac{d_e}{d_c} < 1 \\ (2 - \frac{d_e}{d_c})^2, & \text{иначе} \end{cases} \quad f = \begin{cases} f_n, & f_n \leq 0 \\ -f_n, & f_n > 0, d_e \leq 0 \\ 0, & \text{иначе} \end{cases}$$

3. Изменяем силу \mathbf{F}_v : $\mathbf{F}_v \leftarrow \mathbf{F}_v - s f \mathbf{n}_t$

1. Вычисляем относит. сдвиг \mathbf{v}_r :

$$\mathbf{v}_r = (V^{*,n+1} - V^n) - (P^{*,n+1} - P^n)$$

2. Вычисляем и прикладываем импульсы:

if $\mathbf{n}_p \cdot \mathbf{v}_r < 0$ then

$$\mathbf{j} = (2d_c - \mathbf{n}_p \cdot (V^{*,n+1} - P^{*,n+1})) \mathbf{n}_p$$

$$V^{*,n+1} \leftarrow V^{*,n+1} + \frac{1}{2} \mathbf{j}$$

for $k \in \overline{1, 3}$ do

$$V_{T,k}^{*,n+1} \leftarrow V_{T,k}^{*,n+1} - \frac{w_k}{2} \mathbf{j}$$

end for

end if

Сравнение работы алгоритмов. Для оценки эффективности и надёжности предложенных подходов было проведено три численных эксперимента. Во всех экспериментах для решения задачи использовался метод верхней релаксации, константа близости d_c выбиралась так, чтобы обеспечить заданную

эффективную толщину моделируемых поверхностей H_0 . Во всех экспериментах материал описывался неогуковским упругим потенциалом с модулем сдвига μ , ко всем поверхностям прикладывалось одинаковое постоянное давление P . Расчёты проводились на сетках различной мелкости.

В первом эксперименте рассматривалось раздутие двух усечённых эллипсоидов, расположенных осесимметрично двух напротив друга (см. схему на рис. 2.3а). На рис. 2.5 видно, что метод штрафов приводил в данном тесте к падению $r^n = \frac{\|X^{n+1} - X^n\|}{\|X^1 - X^0\|}$ на 3-4 порядка, в то время, как метод ограничений не позволял r падать более, чем на 1 порядок. Время моделирования контакта примерно совпадало со временем расчета упругих сил в мембранном приближении.

Во втором эксперименте рассматривались два сближающихся лепестка разных размеров (см. рис. 2.3b). Разный размер был выбран, чтобы промоделировать ситуацию, когда больший лепесток совершает нахлест на меньший. Метод штрафов не справился с этим тестом и привёл расчёт к расходимости. Метод ограничений показал себя более стабильно, однако при его использовании r^n оставалось на уровне 0.5 и не падала несмотря на достижение видимой неподвижности поверхностей, что связано с возникшими колебаниями в части меньшего лепестка, которая оказалась между частями большего лепестка. Время моделирования контакта примерно в 2 раза превосходило время расчета упругих сил в мембранном приближении.

В третьем эксперименте было рассмотрено закрытие простой модели аортального клапана из статьи [10]. Метод штрафов не справился с её моделированием, т.к. в области столкновения всех трёх лепестков начал генерировать колебания, в то же время метод ограничений вёл себя стабильно, обеспечив падение r^n в 5 раз (график на рис. 2.4). Время моделирования контакта примерно в 3 раза превосходило время расчета упругих сил в мембранном приближении.

Для всех тестов получено, что время моделирования контакта растёт пропорционально числу элементов сетки и примерно 96% от него составляет моделирование «широкой» фазы (рис. 2.5). Для метода штрафов время моделирования контакта было примерно на 50% больше, чем для метода ограничений, поскольку метод требует вдвое большую величину d_c .

Согласно полученным результатам можно сделать вывод, что оба метода ещё не отвечают всем требованиям для их использования в реальной практике, т.к. недостаточно надёжны. Впрочем, тот факт, что на моделирование «узкой» фазы и этапа обработки контактов приходится лишь 4% времени, говорит, что есть возможность усложнять эти этапы без сильной потери в скорости для преодоления текущих проблем.

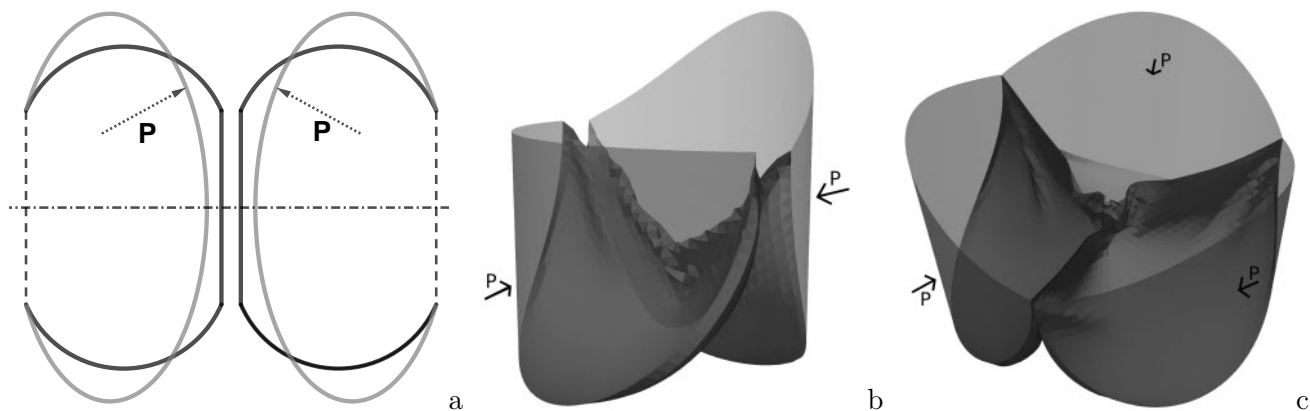


Рис. 2.3: Схемы тестовых задач. Полупрозрачным цветом обозначено начальное положение, а непрозрачным конечное. Стрелкой показано направление действия давления.

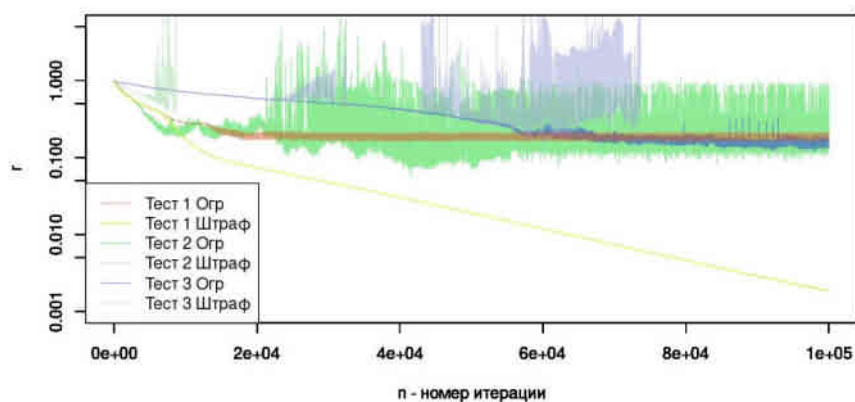


Рис. 2.4: Эволюция величины $r^n = \frac{\|X^n - X^{n-1}\|}{\|X^1 - X^0\|}$ для разных тестов. Для метода штрафов для второго и третьего тестов линия обрывается из-за расходимости расчёта.

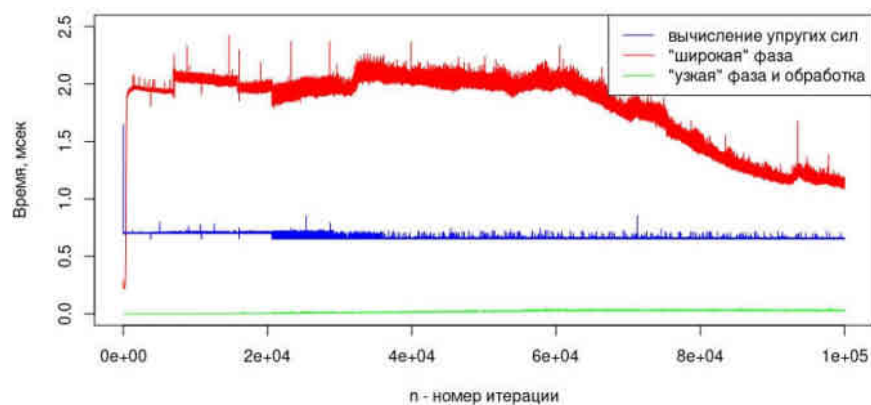


Рис. 2.5: Сравнение времени работы контактного модуля и модуля упругости на третьем тесте в случае метода ограничений.

1.2.4 Протокол для проведения натурального эксперимента на образце свиного аортального клапана для валидации результатов математической модели закрытия аортального клапана

В рамках разработки протокола проведения натурального эксперимента были выполнены следующие шаги:

1. был проведен анализ строения клапанного аппарата и размеров сердца человека и млекопитающих для выбора биологической модели;
2. был проведен анализ методов получения медицинских изображений объектов исследования для их последующей сегментации при построении соответствующей математической модели;
3. был проведен анализ основных методик протезирования створок аортального клапана, обоснован выбор методики S. Ozaki. При этом основным требованием было, чтобы методика расчёта размера и формы неостворок была воспроизводима, обоснована, обеспечивала физиологичную функцию аортального клапана и была выполнима в модели свиного сердца;
4. были проанализированы измеряемые параметры, отражающие замыкательную функцию аортального неоклапана и разработана методика их измерения. Основным требованием было следующее: измеряемые параметры должны в полной мере отражать замыкательную функцию аортального неоклапана и методика их измерения должна быть воспроизводима и стандартизована.

Предлагаемый протокол проведения натуральных исследований.

1. Свиные сердца для исследования забираются на локальной промышленной скотобойне в составе органокомплекса органов грудной полости, вместе с лёгкими, трахеей, пищеводом и париетальным перикардом.
2. Париетальный перикард отсекается в зоне переходной складки, отделяющей его от эпикарда. Далее париетальный перикард будет обрабатываться 6% раствором глутаральдегида по стандартной методике для поперечной сшивки коллагеновых волокон. Прецизионно выделяются лёгочный ствол на протяжении, начальные участки лёгочных артерий, тубулярная часть восходящей аорты, дуга аорты с начальными участками её двух ветвей, начальный участок нисходящей грудной аорты. Выделяются также приустьевые участки верхней и нижней полых вен, лёгочных артерий. Пересекаются полые вены, лёгочные вены (иногда высекаются вместе с венозным синусом левого предсердия), лёгочный ствол проксимальнее его бифуркации или лёгочные вены. Сердце с крупными сосудами отделяется от органокомплекса.

3. Выполняется диссекция корня аорты, начальных участков венечных артерий. Венечные артерии лигируются капроновой нитью 2-0 на расстоянии от устьев (иногда конечные ветви венечных артерий по отдельности). Аорта пересекается проксимальнее устья первой ветви дуги аорты, верхушка сердца отсекается, из полости левого желудочка сосочковые мышцы отделяются от стенки левого желудочка, пересекаются сухожильные нити митрального клапана. Для герметизации корня аорты попарно сшиваются свободные края соседних створок аортального клапана полипропиленовой нитью 7-0.
4. Выполняется компьютерная томография с контрастным усилением корня аорты на подготовленном препарате после наполнения корня контрастным агентом под давлением, соответствующим физиологическому диастолическому.
5. При оценке профиля коаптации для имитации смыкания створок клапана в диастолу выполняется заполнение просвета корня аорты раствором пищевого желатина (Магета, Щёлково, Россия), приготовленного из сухого вещества, растворённого в воде, с массовой долей желатина 16,7% (10 г сухого вещества, растворённого в 50 мл воды). Раствор приготавливается нагреванием на водяной бане. До застудневания раствора с помощью устройства, использованного ранее для заполнения корня аорты контрастным веществом, выполняется заполнение корня аорты раствором желатина после пережатия дистального края аорты пластиковым зажимом. Учитывая более высокую вязкость раствора, контроль гидростатического давления должен выполняться не в реальном времени, а дискретно после порционного нагнетания раствора желатина путём открытия и закрытия трёхходовым краном магистрали к манометру. По достижении давления 80-90 мм рт. ст. извлекается игла из просвета аорты.
6. Сердце помещается в морозильную камеру на 10 минут при температуре -2 С для быстрого застудневания раствора желатина. После застудневания желатина отпрепаровывается корень аорты: отсекаются ткани левого предсердия, ткани левого желудочка, фиброзного каркаса сердца до уровня надиров всех трёх створок, в области правого коронарного синуса ткани стенки левого желудочка отсекаются с оставлением небольшого массива, чтобы не отсечь правую коронарную неостворку, сохранить герметичность корня аорты. Визуализируются желудочковые поверхности тел неостворок. Маркером отмечаются проксимальные границы зон коаптации соседних створок попарно.

Литература

- [1] Methods of graph network reconstruction in personalized medicine / A. Danilov, Yu. Ivanov, R. Pryamonosov, Yu. Vassilevski // *International Journal for Numerical Methods in Biomedical Engineering*. — 2016. — Vol. 32, no. 8. — P. e02754.
- [2] Gaussian curvature using fundamental forms for binary voxel data / M. Kronenberger, O. Wirjadi, J. Freitag, H. Hagen // *Graphical Models*. — 2015. — Vol. 82. — Pp. 123–136.
- [3] *Goldfeather J., Interrante V.* A novel cubic-order algorithm for approximating principal direction vectors // *ACM Trans. Graph.* — 2004. — Vol. 23, no. 1. — Pp. 45–63.
- [4] *Liogky A., Karavaikin P., Salamatova V.* Impact of Material Stiffness and Anisotropy on Coaptation Characteristics for Aortic Valve Cusps Reconstructed from Pericardium // *Mathematics*. — 2021. — Vol. 9, no. 18. — P. 2193.
- [5] Application of Hyperelastic Nodal Force Method to Evaluation of Aortic Valve Cusps Coaptation: Thin Shell vs. Membrane Formulations / Y. Vassilevski, A. Liogky, V. Salamatova // *Mathematics*. — 2021. — Vol. 9, no. 12. — P. 1450.
- [6] *Oñate Eugenio, Flores Fernando G.* Advances in the formulation of the rotation-free basic shell triangle // *Computer methods in applied mechanics and engineering*. — 2005. — Vol. 194, no. 21-24. — Pp. 2406–2443.
- [7] *Lu Jia, Zhou Xianlian, Raghavan Madhavan L.* Inverse method of stress analysis for cerebral aneurysms // *Biomechanics and modeling in mechanobiology*. — 2008. — Vol. 7, no. 6. — Pp. 477–486.
- [8] *Salamatova V Yu, Liogky AA.* Method of Hyperelastic Nodal Forces for Deformation of Nonlinear Membranes // *Differential Equations*. — 2020. — Vol. 56, no. 7. — Pp. 950–958.
- [9] A general three-dimensional parametric geometry of the native aortic valve and root for biomechanical modeling / Rami Haj-Ali, Gil Marom, Sagit Ben Zekry et al. // *Journal of biomechanics*. — 2012. — Vol. 45, no. 14. — Pp. 2392–2397.
- [10] Computational model of aortic valve surgical repair using grafted pericardium / Peter E Hammer, Peter C Chen, J Pedro, Robert D Howe // *Journal of biomechanics*. — 2012. — Vol. 45, no. 7. — Pp. 1199–1204.

- [11] *Bridson Robert, Fedkiw Ronald, Anderson John*. Robust treatment of collisions, contact and friction for cloth animation // Proceedings of the 29th annual conference on Computer graphics and interactive techniques. — 2002. — Pp. 594–603.
- [12] *Sauer Roger A, De Lorenzis Laura*. A computational contact formulation based on surface potentials // *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. — 2013. — Vol. 253. — Pp. 369–395.
- [13] *Coumans Erwin et al*. Bullet Physics SDK. — URL: <http://bulletphysics.org>.

Задача 1.3. Предсказательное моделирование одножелудочковой коррекции врожденных пороков сердца у детей (операция Фонтена)

Разработка методов усвоения 4D FLOW-данных МРТ исследования пациента в крайних условиях для редуцированной гемодинамической модели кровотока. Верификация методов усвоения 4D FLOW-данных МРТ в редуцированной модели на основе трехмерных детальных расчетов кровотока. Разработка методов автоматизированной сегментации МРТ-данных с выделением легочных артерий, полых вен, камер сердца и построения расчетных сеток. Сбор клинических данных по пациентам со сложными пороками сердца

1.3.1 Методы моделирования операции Фонтена

Коррекция врожденных пороков сердца проводится хирургическим путем в несколько этапов, последним из которых является операция Фонтена. В результате правая часть сердца “выключается” из кровотока: нижняя и верхняя полые вены (НПВ и ВПВ) напрямую соединяются с правой и левой легочными артериями (ПЛА и ЛЛА). Такое соединение сосудов называется полным кавапульмональным соединением (ПКПС), а полученная система кровообращения — кровообращением Фонтена. Наиболее популярной и безопасной методикой формирования ПКПС считается создание двунаправленного кавапульмонального анастомоза (ДКПА) в модификации экстракардиального кондуита.

Несмотря на всеобщее признание эффективности данного паллиативного лечения, у некоторых пациентов развиваются осложнения, в том числе в отдаленном периоде. Причиной осложнений считаются нарушения кровотока. Как правило, пациенты с кровообращением Фонтена имеют повышенное центральное венозное давление, высокое легочное сопротивление, меньшее заполнение левого предсердия [1, 2].

Особенности созданной геометрии ПКПС являются причинами большинства возможных нарушений кровотока, поэтому некоторые осложнения могут быть предсказаны и оптимизированы путем математического моделирования. Оптимизация построенной конфигурации сосудов заключается в: 1) минимизации сопротивлений легких и ПКПС; 2) минимизации диссипации энергии в ПКПС; 3) сбалансированном распределении потоков крови между правым и левым легкими; 4) исключении областей с повышенным или пониженным напряжением на стенку. Иногда оптимальные конфигурации для разных критериев могут быть разными, поэтому окончательное решение о выборе тактики лечения должны принимать врачи с учетом анамнеза пациента [1], а критерии оптимизации должны быть улучшены [2].

На сегодняшний день для оптимизации ПКПС разработаны локальные трехмерные модели течения крови, основанные на уравнениях Навье-Стокса [1–5]. Сосудистая геометрия до операции строится на основе доступных КТ или МРТ данных пациента. Результаты 4D FLOW МРТ сканирования, УЗИ сосудов, внутрисосудистого измерения давления датчиками и других исследований могут использоваться для постановки граничных условий и задания параметров модели. В модели могут быть созданы возможные послеоперационные конфигурации сосудов. Наилучшая конфигурация сосудов выбирается на основе расчета контрольных индикаторов у полученных численных решений.

Однако предположение о том, что граничные условия до и после операции неизменны, не является корректным [3]: перераспределение кровотока вызывает существенные изменения гемодинамики на границах рассматриваемой области. Более того, локальные модели кровотока не могут учитывать сопутствующие патологии пациента, оценить послеоперационное центральное давление, проанализировать кровоток в печени (нарушение работы печени - частое осложнение после операции Фонтена), изменение гемодинамики при физических нагрузках, изменение гемодинамики в сердце. Таким образом, для моделирования кровообращения Фонтена разумнее использовать модели глобального кровообращения.

Ранее в работе [3] была построена двухмасштабная замкнутая 0D-3D модель течения крови, где область ДКПА или ПКПС считалась трехмерной, а остальная часть кровеносной системы - нольмерной и моделировалась по аналогии с электрическими цепями. Численные расчеты подтвердили, что необходим учет изменений граничных условий после операций. Однако настройка рассматриваемой 0D модели для конкретного пациента является очень сложной задачей, поскольку параметры электрической цепи не имеют прямого соответствия с реальными исследованиями гемодинамики пациента.

Квазиодномерную (1D) модель глобального кровотока можно персонализировать более естественным образом, чем 0D модели [6]. В ней могут учитываться различные патологии, внешние воздействия и физические нагрузки. Численное решение предоставляет информацию как о локальных, так и глобальных особенностях гемодинамики. Однако, корректный учет ПКПС в 1D модели не возможен без разработки специальных условий в точках стыковки ВПВ, ПЛА, ЛЛА и кондуита. Такие условия должны учитывать углы стыковки четырех сосудов, расстояния между ними, и разработка таких условий планируется на дальнейших этапах проекта.

На данном этапе была разработана двухмасштабная 1D-3D модель кровообращения Фонтена, где область ПКПС считалась трехмерной, а большой круг кровообращения — одномерным. Построенная модель была персонализирована под конкретного пациента. Она позволяет разрабатывать и верифицировать методы усвоения 4D FLOW данных в граничных условиях, поэтому подходит для решения разных актуальных медицинских задач.

1.3.2 Анализ 4D FLOW MPT данных

Технология 4D FLOW MPT рассчитывает зависимость потока, скорости и площади поперечного сечения от времени в течение сердечного цикла в выбранных поперечных срезах сосудов. Такие данные являются крайне привлекательными для персонализации математических моделей. Однако, их прямое использование может оказаться некорректным по следующим причинам.

Ниже детально проанализированы 4D FLOW MPT данные пациента, перенесшего две хирургические операции. На первом этапе в возрасте 3 лет был сформирован ДКПА (перевязан легочный ствол, ВПВ соединена с ПЛА). На втором этапе в 12 лет была проведена операция Фонтена, когда НПВ посредством установки экстракардиального кондуита была соединена с ПЛА. MPT исследование было проведено аппаратом Siemens Avanto 1.5T спустя 1.5 года после операции в возрасте 14 лет.

MPT исследование проводилось в области грудной клетки, поэтому данные могут быть получены как для вен, так и для артерий в этой области. 4D FLOW MPT данные были рассчитаны в нескольких сечениях аорты, НПВ, ВПВ, ПЛА, ЛЛА и представлены на рис. 3.1. В таблице 3.1 представлены средненные по времени потоки и площади поперечных сечений в обозначенных срезах.

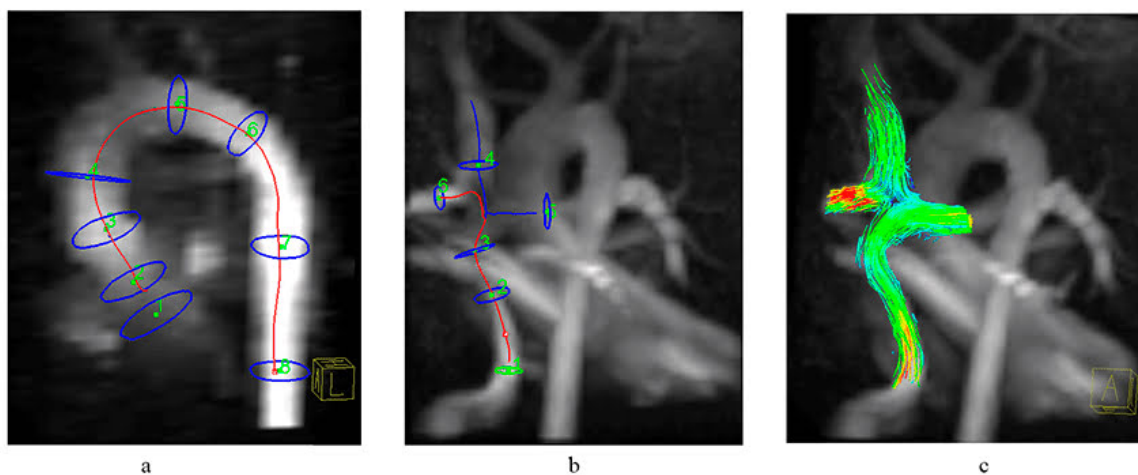


Рис. 3.1: Поперечные срезы аорты (а) и ПКПС(б), в которых проводился расчет 4D FLOW MPT данных, линии тока в ПКПС (с). Для ПКПС сечение 1 находится в области соединения кондуита и НПВ, сечение 2,3 - в кондуите, сечение 4 - в ВПВ, сечение 5 - в ЛПА, сечение 6 - в ПЛА.

Сечения 2 и 3 в ПКПС (рис. 3.1б) относятся к кондуиту, сечение 1 — к кондуиту или НПВ. Поскольку материал кондуита не растягивается в ширину, площадь поперечного сечения должна быть постоянной

Таблица 3.1: 4D FLOW MPT данные пациента: осредненные по времени потоки Q_{av} и площади поперечных сечений S_{av} в исследуемых срезах аорты и ПКПС. Номера срезов представлены на рис. 3.1.

Аорта				ПКПС			
Номер сечения	Название сосуда	Q_{av} мл/с	S_{av} (мм ²)	Номер сечения	Название сосуда	Q_{av} (мл/с)	S_{av} (мм ²)
3	Аорта (Aorta)	41.6	290.3	1	Конduit/НПВ (IVC)	15.9	75.9
4	Аорта (Aorta)	43.6	398.8	2	Конduit (conduit)	11.9	94.0
5	Аорта (Aorta)	24.8	182.7	3	Конduit (conduit)	12.6	124.3
6	Аорта (Aorta)	21.0	150.9	4	ВПВ (SVC)	13.0	96.9
7	Аорта (Aorta)	24.4	182.3	5	ПЛА (RPA)	13.8	86.1
8	Аорта (Aorta)	16.4	184.9	6	ЛЛА (LPA)	15.4	65.2

во времени и по длине трубки. Однако, осредненные площади сечений 2 и 3 по времени существенно различаются: 94.0 и 124.3 мм² (таблица 3.1). Более того, площадь поперечного сечения в течении сердечного цикла варьируется в диапазоне от 84.7 до 101.2 мм² (срез 2), и от 113.7 до 135.9 мм² (срез 3).

В собранной базе данных MPT исследований были два других пациента, для которых площадь поперечного сечения кондуита была измерена двумя методами: 4D FLOW MPT данные и кинорежим MPT. Данные 4D FLOW аналогично свидетельствовали о пульсации кондуита (площадь сечения у пациент А: минимальная 164,93 мм², максимальная - 179,86 мм²; пациент Б: минимальная 196,14 мм², максимальная - 224,59 мм²), тогда как площадь поперечного сечения кондуита в кинорежиме была практически постоянной (площадь сечения у пациент А: минимальная 235 мм², максимальная - 240 мм²; пациент Б: минимальная 270 мм², максимальная - 271 мм²), что и является правильным значением.

Таким образом, во-первых, 4D FLOW MPT данные существенно недооценивают реальную площадь поперечного сечения кондуита. Диаметр кондуита, как правило, выбирается больше, чем размер нижней поллой вены, с учетом дальнейшего роста пациента, что приводит к возникновению областей замедленного кровотока и увеличению погрешности MPT измерений. Для более точной оценки площади поперечного сечения сосуда лучше использовать методы с введением контраста (КТ или MPT с введением внутривенного контраста), либо другие режимы MPT сканирования. Во-вторых, результаты измерения сечения 4D FLOW MPT свидетельствуют о пульсации крови в кондуите. Однако измерения давления внутрисосудистым датчиком показывают постоянные значения в области ПКПС.

Согласно 4D FLOW MPT данным, закон сохранения массы не выполняется в одном сосуде при отсутствии ответвлений. Например, величина осредненных по времени потоков в сечениях 1 и 2 ПКПС существенно отличается: 15.9 и 11.9 мл/с, см.табл. 3.1. Сумма втекающих и вытекающих осредненных по времени потоков в области ПКПС должна быть равна 0. Закон сохранения в этой области тоже не выполняется: сумма вытекающих потоков в сечениях 5 и 6 равна 29.2 мл/с, сумма втекающих в сечениях 1 и 4 - 28.9 мл/с.

Поток в восходящей аорте, осредненный по времени, ожидается равным суммарному осредненному по времени потоку крови, протекающему через ПКПС. Для рассматриваемого пациента эти значения

существенно отличаются (см. табл. 3.1: 41.6 мл/с в сечении 3 аорты и 29.2 мл/с в ПКПС). Такая существенная разница может быть обусловлена наличием коллатерального кровотока между аортой и легочными артериями, а также погрешностью измерений. Скорость крови, измеренная МРТ подвержена наложению шума [7]. Уровень шума равен 15% от максимально возможной измеряемой скорости. Для рассматриваемого пациента уровень шума оказывается не менее 6 мл/с (табл. 3.1): для величины потока в сечениях 3 и 4 аорты это 15%, а для потоков в ПКПС - 40%.

Таким образом, измерения 4D FLOW МРТ нужно использовать с особой осторожностью при персонализации математических моделей. Далее в работе будет использоваться временной профиль потока крови в аорте, а осредненные по времени потоки крови в ВПВ, НПВ, ЛЛА, ПЛА и аорте будут использоваться лишь для настройки параметров модели (осреднение по времени уменьшает зашумленность данных). Измеренные площади поперечных сосудов не используются напрямую при построении модели.

1.3.3 Разработка методов автоматизированной сегментации МРТ-снимков с выделением лёгочных артерий, полой вены, камер сердца и построения расчётных сеток

Для сегментации данных МРТ и КТ существуют различные программные пакеты, такие как ITK-Snap ([8]) и SimVascular ([9]). Для полуавтоматизированной сегментации органов предпочтительно использовать пакет ITK-Snap. Он включает в себя алгоритм, позволяющий сначала вручную маркировать воксели с одинаковой интенсивностью определённым цветом, а далее автоматически окрашивающий все подобные воксели в данный цвет. Таким образом легко выполнять сегментацию органов, в том числе камер сердца.

Сегментация камер сердца проводится в три этапа. На первом этапе в ручном режиме в нескольких плоскостях всех трёх срезов (фронтального, аксиального и сагиттального) различными цветами выделяются желудочки, предсердия и аорта (рис.3.2а). На втором этапе с применением полуавтоматизированного алгоритма строится 3D модель каждого из рассматриваемых органов. Данный алгоритм опирается на ранее классифицированные по цветам срезы. На третьем этапе при необходимости происходит ручная корректировка модели. Поверхность может быть сглажена с помощью фильтра Smooth программы ParaView. Итоговый результат сегментации аорты и камер сердца представлен на рис.3.2b, поверхностная расчётная сетка на рис.3.2с.

Однако при работе с сосудами данный метод приводит к значительным неточностям. Это связано в первую очередь с их размерами: у взрослого человека диаметр самых крупных сосудов в норме не превышает 3 – 3,5 см. Более того, автоматизированные алгоритмы пакета ITK-Snap могут приводить к ошибочно выполненным сегментациям, в которых несколько тонких сосудов сливаются в один ввиду их близкого расположения друг к другу.

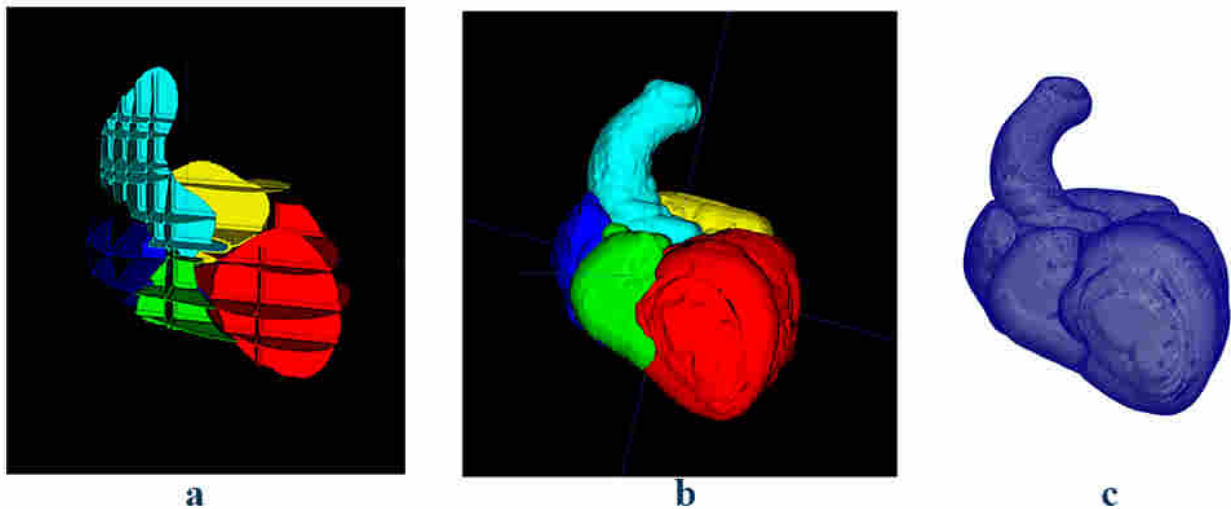


Рис. 3.2: а) Первый этап сегментации. Бирюзовым цветом обозначена аорта, красным - левый желудочек сердца, зелёным - правые желудочек, синим - правое предсердие, а жёлтым - левое предсердие. б) Итоговая сегментация. в) Поверхностная сетка просегментированной области.

Для построения 3D расчётной области ПКПС по контрастированным МРТ данным используется пакет SimVascular. Сама сегментация проходит в несколько этапов. Во-первых, выделяются пути вдоль каждого из рассматриваемых сосудов, состоящие из нескольких точек. Автоматическое соединение данных точек образует единые центральные линии полых вен и лёгочных артерий (рис. 3.3а).

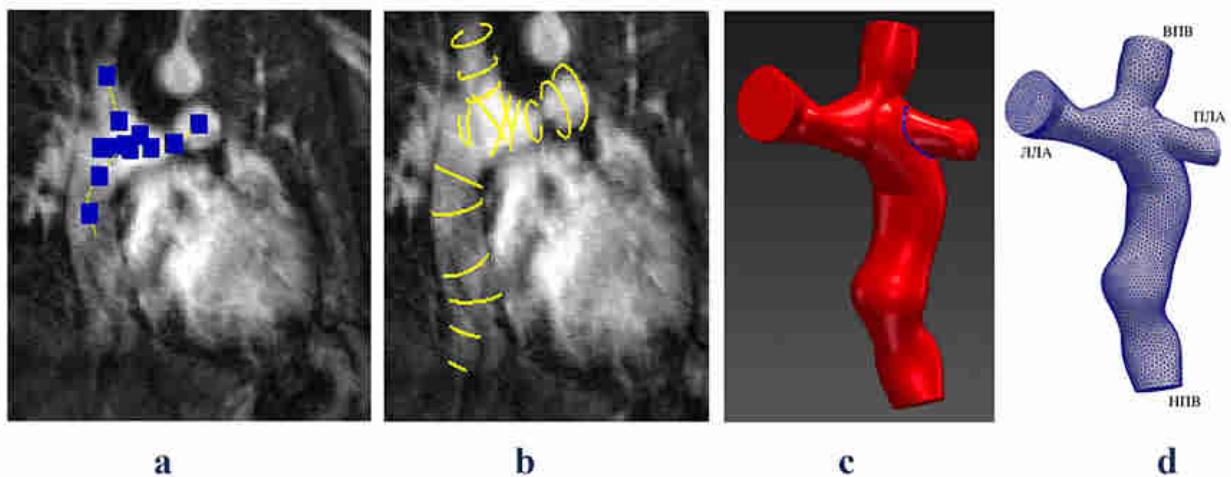


Рис. 3.3: Сегментация области ПКПС: а) выделение центральных линий; б) выделение контуров сосуда вдоль центральных линий; в) построение поверхности ПКПС; д) тетраэдральная сетка области ПКПС.

Во-вторых, двигаясь вдоль центральных линий и меняя контрастность изображения, определяем границы сосудов на нескольких поперечных срезах и получаем набор контуров (рис. 3.3б).

На третьем этапе уже автоматизированно на группы контуров натягивается поверхность, которая и является искомой моделью лёгочных артерий и полых вен. При необходимости проводится сглаживание мест стыковки сосудов, как на рис.3.3с, где синим обозначен уже скорректированный стык НПВ

и ПЛА.

Наконец, на основании полученной модели строится тетраэдральная сетка. Шаг сетки рассчитывается автоматически, но при желании может быть установлен пользователем. Итоговая расчётная сетка приведена на рис. 3.3d.

Все вышеперечисленные действия проводились со снимками МРТ с контрастированием, однако, сегментацию можно выполнять, пользуясь данными КТ-ангиографии. МРТ исследование имеет ряд значительных недостатков: время его проведения составляет не менее 40 минут, требуется глубокая седация пациента, минимальная величина вокселя составляет 0,8мм, к тому же в стандартных сканах воксель не является изотропным. КТ с внутривенным контрастированием проводится за 5 – 10 минут, что позволяет выполнять его и пациентам в тяжелом состоянии. Кроме того, пространственное разрешение КТ-снимков обеспечивается изотропным вокселем с размером 0,5мм, что в разы повышает качество изображения полученных снимков. На рис. 3.4 приведены примеры сеток, построенных по данным МРТ-сканирования и КТ-ангиографии двух различных пациентов.

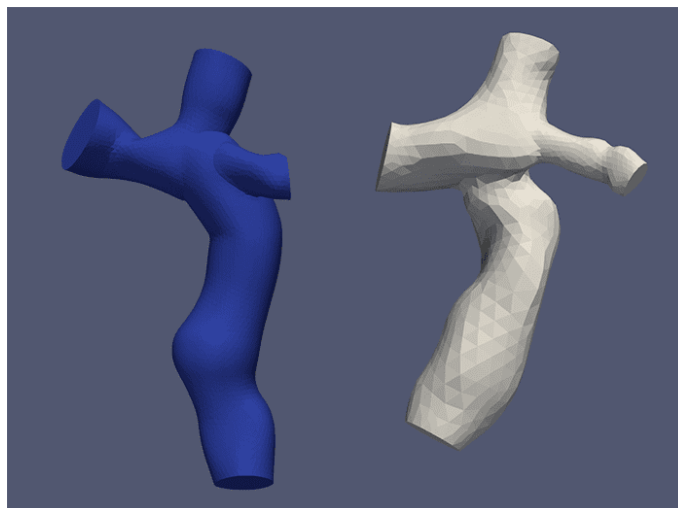


Рис. 3.4: Сравнение сеток, построенных на основе сегментаций по КТ (белая) и МРТ (синяя) снимкам.

При сегментации МРТ-снимков возникла сложность подбора уровня контраста для корректного отображения интересующих сосудов. При количестве 100 – 250 единиц и лёгочные артерии, и полые вены чётко просматривались во фронтальном разрезе МРТ-изображений. Если же диапазон менялся в одну из сторон, то ПЛА становилась едва отделимой от проходящих мимо неё сосудов. При сегментации по данным КТ-ангиографии такой проблемы не возникло благодаря повышенному качеству изображения.

Таким образом, при наличии и МРТ, и КТ данных целесообразнее использовать снимки, полученные в результате компьютерной томографии.

1.3.4 Двухмасштабная модель кровообращения Фонтена

Двухмасштабная 1D3D модель кровообращения состоит из сопряженных 1D и 3D моделей кровотока. Кровь считается вязкой несжимаемой жидкостью с вязкостью $\nu = 0.04 \text{ см}^2\text{с}^{-1}$ и плотностью $\rho = 1 \text{ г/см}^3$. ПКПС считается трехмерной областью Ω с границей $\partial\Omega$, состоящей из твердых стенок Γ_0 и границ втекания/вытекания $\Gamma_{in/out}$. Предполагая начальные условия $\mathbf{u} = \mathbf{u}_0$ ($\text{div } \mathbf{u}_0 = 0$) для $t = 0$, течение крови в области Ω описывается уравнениями Навье-Стокса:

$$\begin{aligned} \rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) - \nu \Delta \mathbf{u} + \nabla p &= \mathbf{f} & \Omega, \\ \text{div } \mathbf{u} &= 0 \\ \mathbf{u} &= \mathbf{0} & \Gamma_0, \\ \nu \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{n}} - p \mathbf{n} &= \gamma \mathbf{n} & \Gamma_{in/out}, \end{aligned} \quad (3.1)$$

где p – давление, \mathbf{u} – вектор скорости, \mathbf{n} – вектор внешней нормали, \mathbf{f} – внешняя сила, например, сила гравитации. На твердых стенках предполагаются условия прилипания и непротекания. На границах вытекания заданы условия Пуазейля:

$$\gamma = p_{out} + R \int_{\Gamma_{out}} \mathbf{u}(t, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{n} ds, \quad (3.2)$$

где R – гидродинамическое сопротивление на каждой границе, p_{out} – внешнее давление. Для численного решения применялся метод конечных элементов. Для дискретизации использовались элементы Тэйлора-Худа (P2/P1), обратный метод Эйлера(3.1).

В 1D модели течения крови сосуды считаются эластичными трубками с площадью поперечного сечения S и длиной b . Переменными являются давление \bar{p} и скорость крови \bar{u} , осредненные по сечению. Модель основана на законах сохранения массы, импульса и на уравнении состояния для трансмурального давления $\bar{p} - p_{ext}$:

$$\begin{cases} \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial(S\bar{u})}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial \bar{u}}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{u}^2/2 + \bar{p}/\rho)}{\partial x} = \psi(t, x, S, \bar{u}) \\ \bar{p} - p_{ext} = \rho_w c_w^2 f(\tilde{S}) \end{cases} \quad \text{for } x \in (0, b). \quad (3.3)$$

Здесь $\psi(t, x, S, \bar{u})$ – внешние силы (например, сила трения, гравитация), p_{ext} – давление окружающих тканей, $\tilde{S} = \hat{S}^{-1}S$, \hat{S} площадь сечения сосуда при нулевом трансмуральном давлении. Третье уравнение в (3.3) описывает эластичные свойства стенок сосудов, ρ_w – плотность стенки, c_w – скорость распространения малых возмущений, функция f определяется следующим образом [6]:

$$f(\tilde{S}) = \begin{cases} \exp(\tilde{S} - 1) - 1, & \tilde{S} > 1, \\ \ln \tilde{S}, & \tilde{S} \leq 1. \end{cases} \quad (3.4)$$

Начальные условия для модели: $\bar{u}|_{t=0} = \bar{u}_0$, $S|_{t=0} = S_0$. Для решения гиперболической системы уравнений (3.3) применяется сеточно-характеристический метод.

Микрососудистое русло представлено в модели виртуальными сосудами, расположенными между терминальными артериями и венами. Течение крови в этих сосудах также описывается системой уравнений (3.3).

В точках стыковки сосудов, включая стыковку с виртуальными сосудами, предполагаются условия Пуазейля (3.5) и закон сохранения массы (3.6)

$$\bar{p}_k(S_k(t, \tilde{x}_k)) - p_{node}^l(t) = \varepsilon_k R_k^l S_k(t, \tilde{x}_k) \bar{u}_k(t, \tilde{x}_k), k = k_1, k_2, \dots, k_M, \quad (3.5)$$

$$\sum_{k=k_1, k_2, \dots, k_M} \varepsilon_k S_k(t, \tilde{x}_k) \bar{u}_k(t, \tilde{x}_k) = 0, \quad (3.6)$$

где l – номер узла стыковки, M – количество стыкующихся сосудов, k_1, k_2, \dots, k_M – номера стыкующихся сосудов, $p_{node}^l(t)$ – давление в узле l , R_k^l – гидродинамическое сопротивление между k -м сосудом и l -м узлом. Для сосудов, входящих в узел, $\varepsilon_k = 1$, $\tilde{x}_k = L_k$, для выходящих – $\varepsilon_k = -1$, $\tilde{x}_k = 0$. На входе в сосудистую сеть задается поток $Q = S(t, x) \bar{u}(t, x)$. Ввиду гиперболического типа системы уравнений (3.3), система (3.5)-(3.6) дополняется условием совместности для каждого сосуда в каждой точке стыковки сосудов. Подробное описание модели представлено в монографии [6].

При сопряжении 1D и 3D моделей кровотока накладываются условия непрерывности потока и нормальной компоненты тензора напряжений. Итерационный алгоритм для численных расчетов подробно описан в работе [10].

1.3.5 Персонализация двухмасштабной 1D3D модели кровотока

3D расчетная область ПКПС строилась на основе данных КТ с помощью метода автоматизированной сегментации из раздела 1.3.3. Процесс сегментации и итоговая тетраэдральная сетка, состоящая из 15481 тетраэдров, показаны на рис. 3.5.

КТ и МРТ исследования проводятся только в области грудной клетки, поэтому построение персонализированного сосудистого дерева большого круга кровообращения для каждого пациента невозможно. Для построения 1D расчетной области была выбрана среднестатистическая артериальная сосудистая сеть здорового взрослого человека [11] (рис. 3.6а). Данная сосудистая сеть может быть адаптирована под конкретного пациента путем масштабирования длин и диаметров сосудов. В нашем случае рост пациента не был известен, однако, рост 14-летнего подростка близок к росту среднестатистического взрослого, и масштабирование длин сосудов не производилось. Согласно 4D FLOW МРТ данным диаметр аорты составлял примерно 75% от среднестатистического диаметра аорты взрослого человека. В связи с этим, диаметры всех артерий большого круга кровообращения были отмасштабированы на

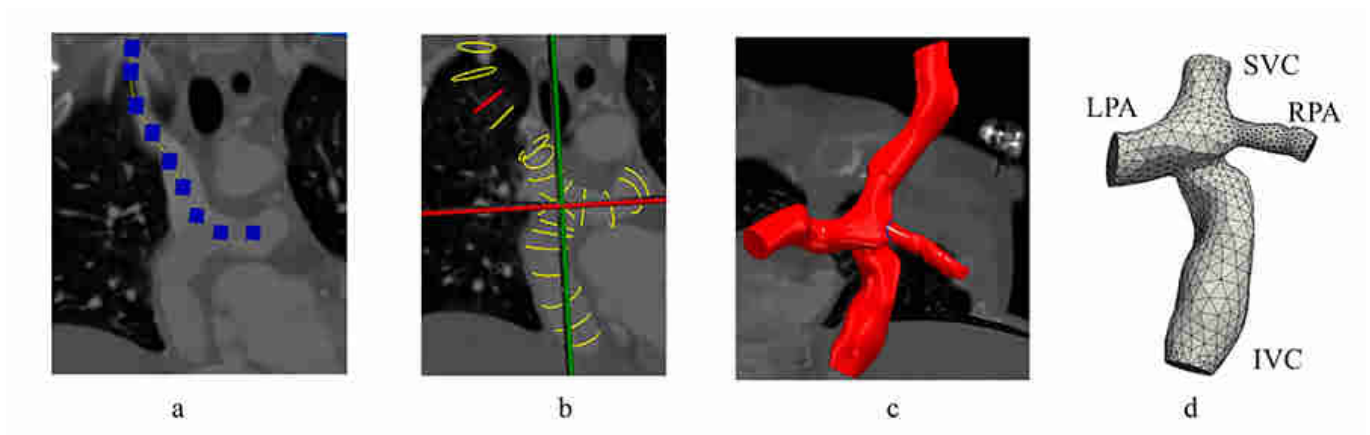


Рис. 3.5: Дискретизация области ПКПС: а) выделение центральных линий; б) выделение контуров сосуда вдоль центральных линий; в) построение поверхности ПКПС; д) тетраэдральная сетка области ПКПС.

множитель 0.75. Структура венозной сети была выбрана симметричной артериальной за исключением различий в структуре аорты и полых вен (рис. 3.6b). Диаметр вен был увеличен в 1.25 раз по сравнению с диаметрами сосудов исходного артериального дерева. Данный множитель был выбран с учетом осредненных по времени площадей поперечных сечений ВПВ и НПВ, рассчитанных программой 4D FLOW MPT.

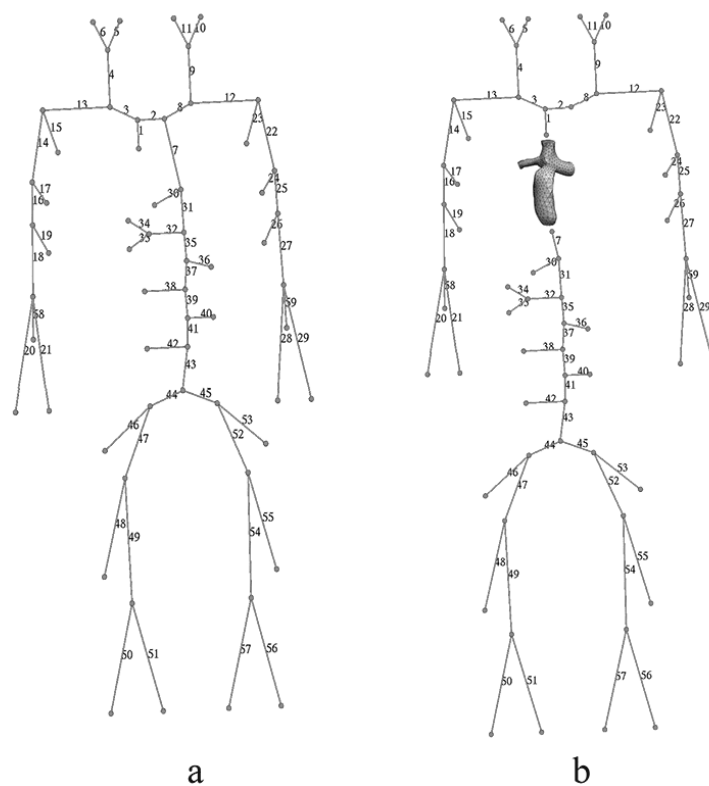


Рис. 3.6: 1D сосудистая сеть: а) артерии большого круга кровообращения; б) вены большого круга кровообращения.

Для настройки параметров модели необходимы дополнительные показатели гемодинамики конкретного пациента. Мы предполагаем, что для пациента должно проводиться измерение давления на руке. В нашем случае измерений не было, и мы предполагаем систолическое и диастолическое давления равными 110 и 70 мм рт ст (среднее по времени давление 100 мм рт ст). Венозное давление предполагается близким к значению давления в правом предсердии здорового человека, а именно 5 мм рт ст.

Сопротивление микрососудистого русла $R_{k^*}^l$ (k^* соответствует виртуальным сосудам) влияет на среднее давление в артериях и перепад давления между артериями и венами. Данный параметр был выбран $R_{k^*}^l = 5660$ дин·с/см⁵, чтобы осредненное давление на руке было равно давлению, измеренному манжетой (в нашем случае 100 мм рт. ст.). Гидродинамическое сопротивление R_k^l в точках стыковки сосудов (3.5) определяет распределение давления внутри сосудистого дерева. Данный параметр варьировался от 1 до 100 дин·с/см⁵, чтобы получить референтное среднестатистическое давление в нескольких артериях [6].

Скорость распространения малых возмущений c_w является характеристикой эластичности сосудов (3.3). Данный параметр влияет на амплитуду колебания давления, он может быть различным в разных сосудах и зависит от возраста, пола, образа жизни, анамнеза и т.д. [6]. В данной работе мы выбрали параметр c_w одинаковым для всех артерий $c_{w,a} = 650$ см/с (он обеспечивает референтную амплитуду давления в артерии на руке) и для всех вен $c_{w,v} = 350$ см/с (он обеспечивает корректную амплитуду колебания давления в венах). Виртуальные сосуды считаются более эластичными и для них выбрана скорость распространения малых возмущений $c_{k^*} = 200$ см/с.

Для корректного воспроизведения кровотока в области ПКПС, важно в модели обеспечить потоки крови по нижней и верхней полым венам, соответствующие потокам пациента. Для этого сопротивления микрососудистого русла $R_{k^*}^l$ в нижних конечностях масштабировались на коэффициент $\alpha_{up} = 1.125$, а в верхних конечностях - на коэффициент $\alpha_{low} = 0.875$. Такое масштабирование обеспечивает распределение крови из аорты между верхними и нижними конечностями, соответствующее данным 4D FLOW MPT пациента. Данное соотношение можно получить, сравнивая осредненные по времени потоки крови в аорте в сечениях Q_{Aorta}^7 и Q_{Aorta}^4 , см. табл. 3.1, или в нижней и верхней полых венах Q_{SVC} и Q_{IVC} . В обоих случаях 55% объема крови протекают через нижние конечности.

Представленная стратегия персонализации гемодинамической модели не позволяет воспроизвести гемодинамику пациента точь-в-точь. Однако, она просто реализуема на практике, воспроизводит необходимые параметры и паттерны кровотока, достаточна для целей данного проекта.

1.3.6 Разработка методов усвоения 4D FLOW-данных MPT исследования пациента в краевых условиях модели

В рамках текущего этапа проекта построена двухмасштабная 1D3D модель кровотока, включающая большой круг кровообращения и ПКПС. Такая модель требует постановки граничных условий на

втоке в аорту и вытоках из легочных артерий. В дальнейшем предполагается усложнение модели с добавлением легочного круга кровообращения и модели сердца. Замкнутая модель кровообращения снижает требования к количеству и качеству персонифицированных данных для настройки модели.

Для постановки граничных условий вытекания на выходе из трехмерной области ПКПС (ПЛА и ЛЛА) могут быть использованы различные подходы: сопряжение с 0D моделями [12], импедансные граничные условия [13], условия Пуазейля [6]. Мы используем условия Пуазейля (3.2), где p_{out} — давление в легочном микрососудистом русле, изначально предполагаемое равным 7 мм рт ст. Для подбора параметров сопротивлений в условиях Пуазейля на границах вытекания мы используем следующий итерационный алгоритм.

На границах втекания в 3D область в ВПВ и НПВ задаются постоянные осредненные по времени потоки из таблицы 3.1 (4D FLOW MPT данные) с профилем Пуазейля. Сопротивления на каждой границе вытекания определяются итерационно, исходя из известного распределения потоков между ПЛА и ЛЛА (табл.3.1 - 4D FLOW MPT данные): в ЛЛА 47% крови, в ПЛА 53 %. На первой итерации $n = 1$, предполагая $R_{RPA}^0 = R_{LPA}^0 = 138$ дин·с/см⁵, решаем уравнения Навье-Стокса (3.1) в 3D области ПКПС с условиями Пуазейля на выходе (3.2) и получаем давления, осредненные по границам вытекания в ПЛА и ЛЛА (P_{RPA}^n и P_{LPA}^n). Для следующей итерации сопротивления пересчитываются по формулам

$$R_{RPA}^{n+1} = (P_{RPA}^n - p_{out}) / (0.53Q_{SVC} + 0.53Q_{IVC}), \quad R_{LPA}^{n+1} = (P_{LPA}^n - p_{out}) / (0.47Q_{SVC} + 0.47Q_{IVC}).$$

В результате работы алгоритма получены следующие сопротивления: $R_{RPA}=90$ дин·с/см⁵, $R_{LPA}=321$ дин·с/см⁵.

Важно отметить, что желаемое распределение потоков крови между ПЛА и ЛЛА гарантируется только при таком суммарном втекающем в область потоке $Q_{in} = Q_{SVC} + Q_{IVC}$, который использовался в алгоритме по подбору сопротивлений. При изменении суммарного втекающего потока распределение крови между ПЛА и ЛЛА изменится, см. таблицу 3.2. Поэтому осредненный по времени поток, заданный на входе в аорту, должен быть равен суммарному потоку Q_{in} , протекающему через ПКПС: втекающему в НПВ и ВПВ и вытекающему из ПЛА и ЛЛА.

Таблица 3.2: Распределение потоков крови между ПЛА и ЛЛА в зависимости от суммарного входящего потока Q_{in} при $R_{RPA}=90$ дин·с/см⁵ и $R_{LPA}=321$ дин·с/см⁵.

Q_{in}	ПЛА	ЛЛА
$0.6Q_{in}$	58%	42%
$0.8Q_{in}$	55%	45%
Q_{in}	53%	47%
$1.2Q_{in}$	50%	50%
$1.4Q_{in}$	49%	51%

Предложенные граничные условия вытекания в ПЛА и ЛЛА и алгоритм подбора параметров могут быть использованы и для расчета гемодинамики полностью одномерной моделью при условии, что 1D

модель кровотока сможет корректно моделировать течение крови в области ПКПС (данные исследования будут проводиться на следующих этапах проекта).

В качестве граничного условия на входе в аорту используется временной профиль потока в сечении 4 аорты (см. рис.3.1а), взятый из 4D FLOW MPT данных. Исходный профиль отмасштабирован на константу Q_{in}/Q_{aorta}^4 для того, чтобы обеспечить равенство втекающего и суммарного вытекающего из системы потока. Итоговый профиль потока, задаваемого в качестве граничного условия на входе в аорту, представлен на рис. 3.7.

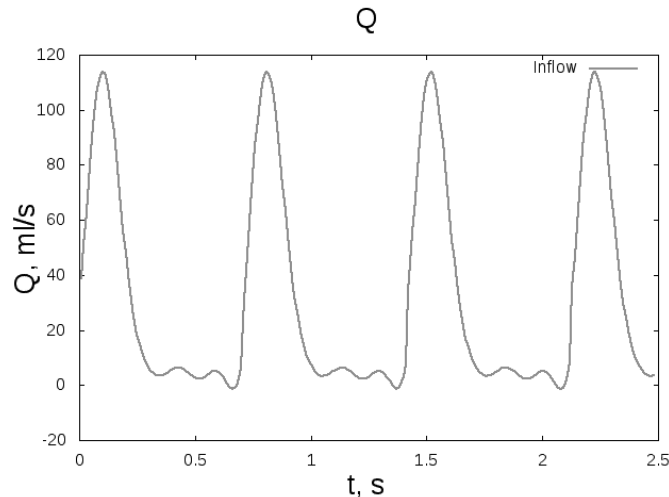


Рис. 3.7: Входящий поток в аорте.

1.3.7 Верификация методов усвоения 4D FLOW-данных MPT в модели кровообращения Фонтена

Как упоминалось ранее, предложенный в разделе 1.3.6 метод усвоения 4D FLOW-данных MPT исследования пациента в краевых условиях двухмасштабной 1D3D модели может применяться и для полностью 1D модели. Однако, включение области ПКПС в 1D модель гемодинамики проблематично в связи со сложным локальным течением и необходимостью учета углов и расстояний между сосудами в точке стыковки ВПВ, кондуита, ПЛА и ЛЛА. Разработка таких условий в точке стыковки сосудов требует отдельного исследования. В связи с этим, для верификации предложенных методов усвоения 4D FLOW-данных MPT исследования пациента в краевых условиях и персонализации модели, предложенных в разделах 1.3.6 и 1.3.5, используется двухмасштабная 1D3D модель. Такой подход обеспечивает корректный детальный расчет локальной гемодинамики в 3D области ПКПС, а также расчет глобальной гемодинамики в большом круге кровообращения.

Алгоритм численных расчетов двухмасштабной 1D3D моделью подробно описан в работе [14]. В ходе расчетов он позволяет скорректировать давление в легочном микроциркуляторном русле p_{out} , чтобы давление в области ПКПС было равно давлению, измеренному внутрисосудистым датчиком.

Расчет проводился для пациента, описанного в разделе 1.3.4, в положении лежа. Для него измерение давления в ПКПС внутрисосудистым датчиком не проводилось, поэтому мы предположили его равным 14 мм рт ст (типичное для пациентов с Фонтеновским кровообращением). В ходе итераций параметр p_{out} достиг значения 10.5 мм рт ст.

Результаты расчета давлений и осредненных по времени потоков в НПВ, ЛПА, ПЛА, ВПВ представлены в таблице 3.3. Распределение рассчитанных потоков (табл. 3.3) точь-в-точь соответствует 4D FLOW MPT данным в табл. 3.1. Давление в области ПКПС варьируется в районе 14 мм рт ст, как и ожидалось.

ТАБЛИЦА 3.3: Рассчитанные давления P_{av} (мм рт.ст.) и потоки Q_{av} (мл/с), осредненные по времени, в области ПКПС. $Q_{in} = Q_{IVC} + Q_{SVC}$ – суммарный поток втекающей в ПКПС крови, осредненный по времени.

Название сосуда	P_{av} мм рт ст	Q_{av} мл/с	Q_{av}/Q_{in}
ВПВ (IVC)	13.90	15.88	55.0%
НПВ (SVC)	13.88	13.01	45.0%
ЛЛА (LPA)	13.77	13.59	47.0%
ПЛА (RPA)	11.53	15.30	53.0%

Результаты расчетов показали, что пульсация в области ПКПС практически отсутствует, тогда как данные 4D FLOW MPT свидетельствуют об обратном. Основной причиной является постоянное давление легочного микрососудистого русла p_{out} в условиях Пуазейля (3.2). Выбор таких граничных условий кажется оправданным, поскольку давление, измеренное внутрисосудистым датчиком в области ПКПС, является практически постоянным у пациентов с кровообращением Фонтена. Истинность пульсации, на которую указывают измерения 4D FLOW MPT, является спорной и нуждается в верификации.

На рисунках 3.8 изображено распределение давления (а) и линии тока (b) в 3D области ПКПС. Линии тока соответствуют линиям тока пациента, визуализированным программой 4D FLOW MPT (см.рис.3.1с): большая часть крови из ВПВ течет в ПЛА, а из НПВ — в ЛЛА. Потоки из ВПВ и НПВ практически не смешиваются.

Показатели гемодинамики в артериях большого круга кровообращения также соответствуют ожидаемым физиологически корректным данным.

Таким образом, разработана двухмасштабная 1D3D модель кровообращения Фонтена конкретного пациента. 3D расчетная область ПКПС строится разработанным автоматизированным алгоритмом сегментации и построения сетки из КТ данных. Настройка 1D модели производится с учетом антропометрических измерений пациента, осредненных по времени данных 4D FLOW MPT. Постановка граничных условий производится на основе 4D FLOW MPT данных: параметры условий вытекания подбираются с учетом потоков, осредненных по времени, на входе в аорту задается отмасштабированный временной профиль потока крови пациента. Степень персонализации модели может быть увеличена при наличии измерений давления внутрисосудистым датчиком в области ПКПС, УЗИ исследований и тп.

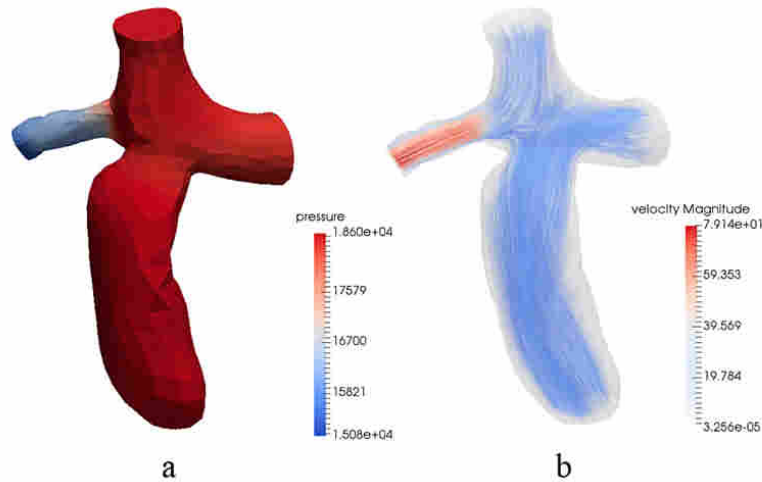


Рис. 3.8: Распределение давления (а) и линии тока крови (b) в 3D области ПКПС.

Построенная модель воспроизводит осредненные по времени потоки крови на границах области ПКПС, линии тока крови внутри области ПКПС, а также давление, измеренное внутрисосудистым датчиком или ожидаемое среднестатистическое.

Несмотря на всю привлекательность, 4D FLOW MPT данные должны использоваться с особой осторожностью для настройки математических моделей, поскольку подвержены зашумлению. В нашем случае для построения модели использовались только осредненные по времени данные и временной профиль потока в аорте, имеющий приемлемый шум 15%. В дальнейшем необходимы оптимизация протоколов исследования и верификация результатов.

Кроме того, условия Пуазейля (3.2) на границах вытекания могут влиять на правильность полученных результатов в виду постоянного давления легочного микрососудистого русла p_{out} . Численные результаты свидетельствуют об отсутствии пульсации в ПКПС, что противоречит данным 4D FLOW MPT. Для изучения данного вопроса требуется усложнение численной модели: добавление легочного круга кровообращения и модели левой части сердца. В этом случае полученная модель окажется замкнутой.

Литература

- [1] *Trusty P., Slesnick T., Wei Z. et al.* Fontan Surgical Planning: Previous Accomplishments, Current Challenges, and Future Directions // *J. of Cardiovasc. Trans. Res.* — 2018. — Vol. 11. — Pp. 133–144.
- [2] *de Zelicourt D., Kurtcuoglu V. et al.* Patient-Specific Surgical Planning, Where Do We Stand? The Example of the Fontan Procedure // *Ann Biomed Eng.* — 2016. — Vol. 44. — Pp. 174–186.
- [3] *Baretta A., Corsini C., Yang W. et al.* Modeling of Congenital Hearts Alliance (MOCHA) Investigators. Virtual surgeries in patients with congenital heart disease: a multi-scale modelling test case // *Philos Trans A Math Phys Eng Sci.* — 2011. — Vol. 369, no. 1954. — Pp. 4316–30.
- [4] *Marsden A., Bernstein A., Reddy V. et al.* Evaluation of a novel Y-shaped extracardiac Fontan baffle using computational fluid dynamics // *J Thorac Cardiovasc Surg.* — Vol. 137.
- [5] *Desai K., Haggerty C., Kanter K. et al.* Haemodynamic comparison of a novel flow-divider Optiflow geometry and a traditional total cavopulmonary connection // *Interact Cardiovasc Thorac Surg.* — 2013. — Vol. 17, no. 1. — Pp. 1–7.
- [6] Personalized Computational Hemodynamics. Models, Methods, and Applications for Vascular Surgery and Antitumor Therapy / Yu. Vassilevski, M. Olshanskii, S. Simakov et al. — Academic Press, 2020.
- [7] *Bertoglio C., Nuaez R., Galarce F. et al.* Relative pressure estimation from velocity measurements in blood flows: State-of-the-art and new approaches // *International Journal for Numerical Methods in Biomedical Engineering.* — 2017. — Vol. 34, no. 2. — P. 2925.
- [8] *Paul A. Yushkevich Joseph Piven Heather Cody Hazlett.* User-guided 3D active contour segmentation of anatomical structures: Significantly improved efficiency and reliability // *Neuroimage.* — 2006. — Vol. 31, no. 3. — Pp. 1116–28.
- [9] *Updegrove A., Wilson N., Merkow J. et al.* SimVascular: An Open Source Pipeline for Cardiovascular Simulation. Annals of biomedical engineering // *Ann Biomed Eng.* — 2017. — Vol. 45, no. 3. — P. 525–541.
- [10] *Dobroserdova T., Olshanskii M., Simakov S.* Multiscale coupling of compliant and rigid walls blood flow models // *Int. J. Numer. Meth. Fluids.* — 2016. — Vol. 82. — Pp. 799–817.

- [11] *Simakov S., Gamilov T., Soe Y.* Computational study of blood flow in lower extremities under intense physical load // *Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling.* — 2013. — Vol. 28, no. 5. — Pp. 485–504.
- [12] *Pennati G., Corsini C., Cosentino D. et. al.* Boundary conditions of patient-specific fluid dynamics modelling of cavopulmonary connections: possible adaptation of pulmonary resistances results in a critical issue for a virtual surgical planning // *Interface Focus.* — 2011. — Vol. 1, no. 3. — Pp. 297–307.
- [13] *Spilker RL, Feinstein JA, Parker DW et. al.* Morphometry-based impedance boundary conditions for patient-specific modeling of blood flow in pulmonary arteries // *Ann Biomed Eng.* — 2007. — Vol. 35, no. 4. — Pp. 546–59.
- [14] *Dobroserdova T., Vassilevski Yu, Simakov S. et. al.* Two-scale haemodynamic modelling for patients with Fontan circulation // *Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling.* — 2021. — Vol. 36, no. 5. — Pp. 267–278.

Задача 1.4. Персонализированные модели подсистем опорно-двигательного аппарата

Анализ имеющейся информации относительно анатомических и морфологических ориентиров для связок коленного сустава. Разработка и апробация алгоритма на примере медицинских КТ-изображений коленного сустава.

1.4.1 Анализ имеющейся информации относительно анатомических и морфологических ориентиров для связок коленного сустава

Связки и сухожилия являются важными элементами биомеханических моделей, поскольку непосредственно участвуют в процессе передачи силы от мышц к костям. Сложность автоматического детектирования связок и сухожилий обусловлена особенностями их отображения на медицинских изображениях. Несмотря на привлекательную визуализацию МРТ изображений, интенсивность этих структур является неравномерной и часто сходной с интенсивностями окружающих структур. Проблема различения границ связок и сухожилий и окружающих мягкотканых структур существует и при рассмотрении КТ изображений. В связи с этим традиционные биомеханические модели содержат некоторые упрощения: участки креплений мышц и связок к костям представляются в виде точек, сами мышцы и связки в виде отрезков или ломаных с концами в этих точках [1].

В настоящее время существует лишь небольшое количество автоматизированных алгоритмов, позволяющих детектировать некоторые связки или места их крепления, однако область применения этих алгоритмов ограничена. Автоматические и полуавтоматические алгоритмы сегментации передней и задней крестообразных связок предложены в работах [2], [3], [4]. Работа [5] использует статистические модели для поиска по КТ данным участков крепления связок и сухожилий в виде контуров на трехмерной поверхности кости. Оценка качества работы метода проводилась для четырех связок (ACL, PCL, MCL и LCL). Авторы работы отмечают, что предложенный алгоритм требует большей контрастности КТ изображений пациента и улучшения методов анализа интенсивностей вокселей. В работе [6] геометрические модели костей с детектированными в ручном режиме участками крепления мышц

трансформируются так, чтобы наилучшим образом соответствовать костям пациента. Была выявлена корреляция между формой участков крепления мышц и формой геометрической модели кости, однако эта гипотеза была проверена только для модели плеча.

Для разработки персонализированных алгоритмов детектирования участков креплений связок и сухожилий на поверхности кости в данной работе использовалась формализация поиска представляющих интерес анатомических ориентиров коленного сустава. Был проведен предварительный анализ анатомических ориентиров коленного сустава, и было выделено три основных подхода к обработке информации о представляющих интерес анатомических ориентирах коленного сустава: анализ качественных анатомических описаний, анализ количественных анатомических описаний и анализ кривизны поверхности костей.

Качественные анатомические описания, представленные в анатомических атласах [7],[8], могут быть использованы для создания алгоритмов детектирования точек крепления сухожилий и связок, если подразумевают единственный выбор их положения. Пример детектирования точки крепления с использованием этого подхода приведен в Алгоритме 1. Однако, анатомические описания могут быть неточными и подразумевать под участком крепления достаточно большую область. При этом наблюдаются отличия в изображениях данного крепления в различных иллюстративных источниках. Как правило, использование качественных анатомических описаний для детектирования участков крепления без использования дополнительной информации невозможно.

Примеры количественных анатомических описаний приводятся в работах [9], [10], [11], [12], [13]. Описания получены в результате исследований трупных материалов и рентгенограмм пациентов. Пример детектирования точки крепления с использованием этого подхода приведен в Алгоритме 5.

В качестве инструмента для поиска анатомических ориентиров также использовался анализ кривизны поверхности костей. Выпуклости и углубления на поверхности костей часто соответствуют местам крепления связок и сухожилий и могут служить ориентирами в алгоритмах детектирования точек крепления. В каждой точке поверхности кости рассматривается Гауссова кривизна, которая является произведением главных кривизн $K = \kappa_1 \cdot \kappa_2$ и может быть использована как характеристика поверхности. В частности, Гауссова кривизна выпуклостей и углублений кости положительна. Основные шаги алгоритма поиска выпуклостей и углублений следующие:

1. Генерация поверхностной сетки для костей.
2. Расчёт кривизны поверхности по поверхностной сетке.
3. Выбор локальных максимумов Гауссовой кривизны.

Первый этап алгоритма выполняется полуавтоматически. Поверхностная сетка генерируется в интерфейсе открытой программы ИТК SNAP по результатам сегментации костей. Качество полученной поверхностной сетки улучшается с использованием фильтра Triangle открытой программы Paraview.

Далее, библиотека Trimesh2, реализованная на языке C++, используется для расчёта главных кривизн участков поверхности κ_1 , κ_2 в каждой точке поверхностной триангуляции. На вход алгоритма задается параметр сглаживания. Он задаёт размер окрестности данной точки, по которой будет проводиться усреднение значений рассчитанных главных кривизн. Для того, чтобы отличать выпуклости на поверхности кости от углублений, рассматривается средняя кривизна $H = \frac{1}{2}(\kappa_1 + \kappa_2)$: если $H < 0$, то точка расположена в углублении, если $H > 0$, то точка принадлежит выпуклости. Следующие шаги используются для детектирования выпуклостей и углублений костей:

1. Расчёт главных кривизн в каждой точке поверхности.
2. Для каждой точки P_i поверхностной триангуляции рассматривается окрестность радиуса r : множество точек, число рёбер в кратчайшем пути до которых меньше либо равно r (рис. 4.1).
3. Если Гауссова кривизна K в точке P_i достигает своего максимального значения в окрестности радиуса r , то считается, что P_i принадлежит выпуклости ($H > 0$) или углублению ($H < 0$).

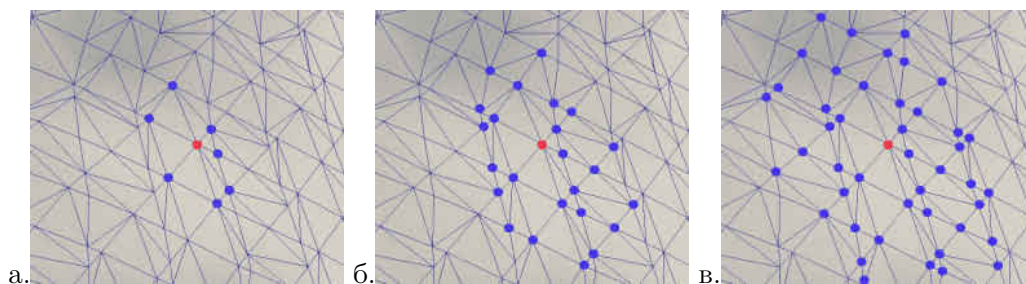


Рис. 4.1: Примеры окрестностей радиуса r для разных точек: $r = 1$ (а), $r = 2$ (б), $r = 3$ (в).

Для каждой точки крепления выбор параметров проводился эмпирически. Для автоматического детектирования углублений и выпуклостей на поверхности костей необходимо учитывать такие параметры, как размеры углубления или выпуклости, их положение и количество других углублений и выпуклостей в окрестности. Размер окрестности r определялся как число рёбер в кратчайшем пути (расстояние в смысле теории графов), т.е. определяется только приближенно, чтобы рассматривать локально Гауссову кривизну. Параметры значений радиуса окрестности r были выбраны для сеток с размерами ребра до 1.5 мм. Примеры детектирования точек крепления с использованием анализа кривизн поверхностей костей приведены в Алгоритмах 2,3,4.

Использование приведённых выше подходов позволяет создать алгоритмы максимально автоматического детектирования точек крепления мягкотканых стабилизирующих структур. Такие алгоритмы необходимы для создания персонализированной геометрической модели коленного сустава [14]. Прототипом такой модели может служить простейшая модель коленного сустава [15].

1.4.2 Разработка и апробация алгоритма на примере медицинских КТ-изображений коленного сустава

Апробация алгоритмов проводилась на 26 наборах КТ изображений различного разрешения, предоставленных Сеченовским университетом. Каждая последовательность содержит изображения правого и левого коленного сустава, таким образом, эксперименты проводились на 52 изображениях коленного сустава. Разработанные алгоритмы учитывают различия пространственного положения детектируемых структур медиальной и латеральной части для правого и левого колена. Размерности рассматриваемых изображений $512 \times 512 \times z$ вокселей, где $z \approx 300$. Всё множество КТ изображений может быть разделено на 2 подмножества: 13 изображений более высокого разрешения (пространственные размеры вокселей вдоль каждой оси 0.7 – 0.9 мм) и 13 изображений более низкого разрешения (пространственные размеры вокселей вдоль каждой оси 1.0 – 1.4 мм). В качестве входных данных для разработанных алгоритмов служат сегментации костей, сгенерированные при помощи алгоритмов из работ [14],[15]. Для каждого пациента сегментация содержит 8 меток (рис. 4.2).

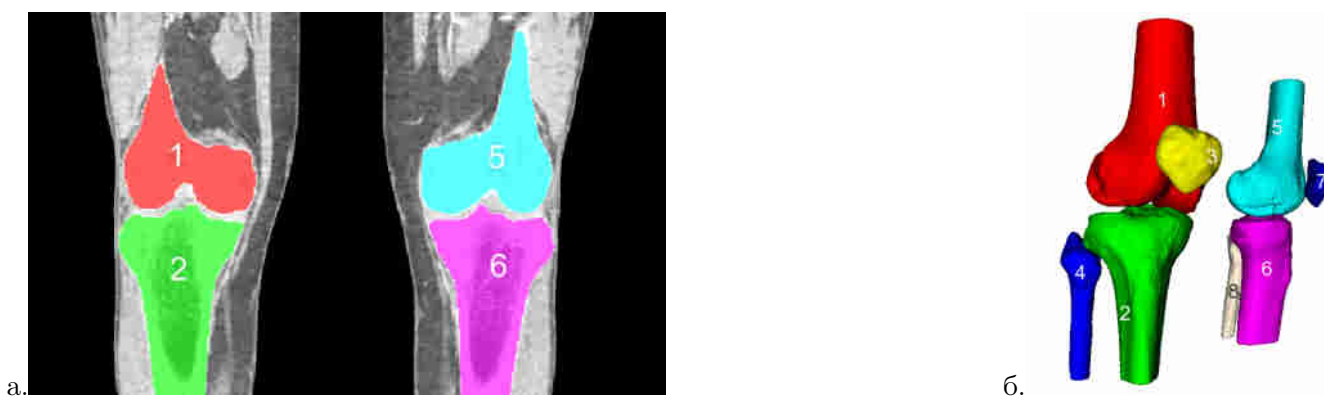


РИС. 4.2: Сегментация коленного сустава: корональный (фронтальный) срез (а), Трёхмерный вид (б), метки: фон 0, правая бедренная кость 1, правая большеберцовая кость 2, правый надколенник 3, правая малоберцовая кость 4, левая бедренная кость 5, левая большеберцовая кость 6, левый надколенник 7, левая малоберцовая кость 8

Сухожилие четырёхглавой мышцы бедра. Четырёхглавая мышца бедра состоит из четырёх отдельных мышц, прикрепляющихся к верхней части надколенника (рис. 4.3а). В алгоритме детектирования используется следующий факт: интенсивность сухожилий четырёхглавой мышцы бедра на КТ изображениях выше, чем интенсивность анатомических структур, смежных с верхней частью надколенника (Рисунок 4.3б). Для детектирования крепления используется

Алгоритм 1

1. Разбиение КТ изображения на подобласти размером $3 \times 3 \times 3$ вокселей, приписывание каждому вокселю средней по подобласти с центром в данном вокселе интенсивности.

- Выбор на КТ изображении вокселей коленной чашечки по меткам входного изображения (сегментации).
- Проведение операции “расширения” (dilation) надколенника и поиск вокселей z_{\max} и z_{\min} с максимальной и минимальной координатами по оси z .
- Поиск вокселя v с максимальной интенсивностью среди вокселей $z \in [z_{\max} - \frac{1}{6}d; z_{\max}]$, где $d = z_{\max} - z_{\min}$.

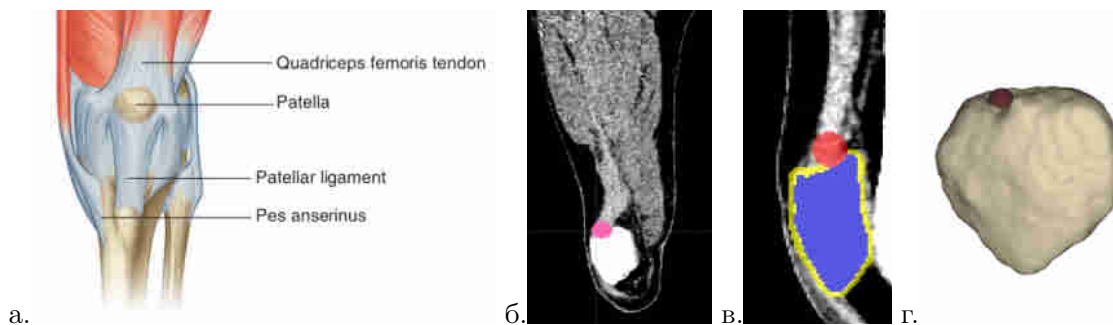


Рис. 4.3: Передний вид коленного сустава (а). Иллюстрация из [7]. Крепление четырёхглавой мышцы бедра отмечено розовой точкой (б). Надколенник (синий); воксели, добавленные при помощи операции расширения надколенника, являются областью поиска крепления четырёхглавой мышцы бедра (жёлтый); крепление четырёхглавой мышцы бедра (красный) (в). Крепление четырёхглавой мышцы бедра к надколеннику (трёхмерный вид) (г).

Сухожилие подколенной мышцы. Подколенная мышца крепится к передней части подколенной борозды на латеральной поверхности мыщелка бедренной кости. Эта особенность использовалась в алгоритме детектирования крепления сухожилия подколенной мышцы к бедренной кости.

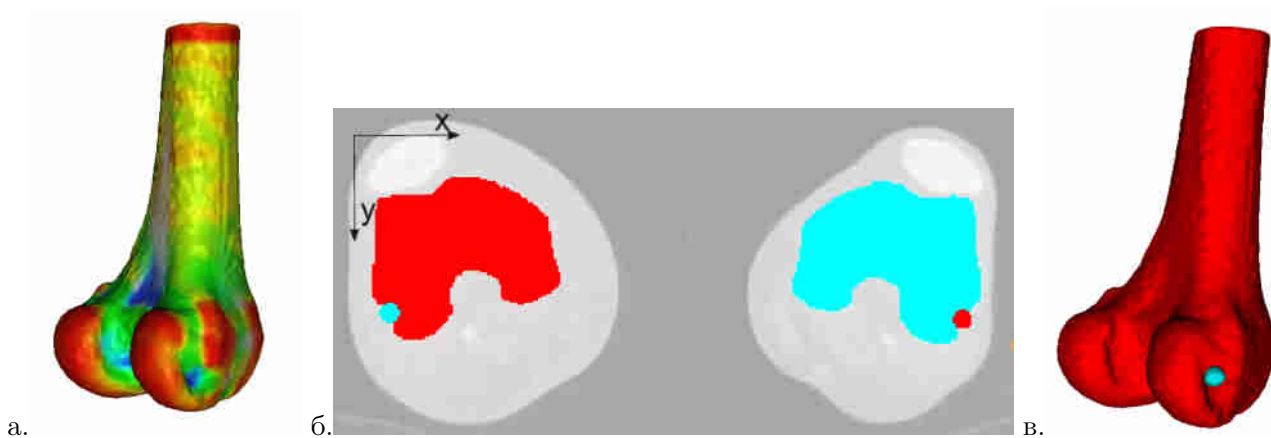


Рис. 4.4: Результаты расчета кривизны поверхности бедренной кости (а). Выбор точек с максимальным значением $x + y$ (или $x_{\max} - x + y$), в зависимости от кости (двумерное изображение) (б). Результаты детектирования крепления подколенной мышцы к бедренной кости (в).

Алгоритм 2

- Поиск кривизны поверхности бедренной кости с параметром сглаживания 4 (рис. 4.4а).

2. Выбор вокселей с минимальным средним значением кривизны по окрестности с радиусом 15.
3. Выбор из этих вокселей одного с максимальным значением $x + y$ или $x_{\max} - x + y$, в зависимости от того, правая или левая кость рассматривается (рис. 4.4б–4.4в).

Сухожилие двуглавой мышцы бедра. Место крепления сухожилия двуглавой мышцы бедра изображено на рисунке 4.5а. Алгоритм находит локальные максимумы кривизны поверхности малоберцовой кости и выбирает точку со второй по величине координатой z .

Алгоритм 3

1. Расчёт кривизны поверхности малоберцовой кости с параметром сглаживания 4.
2. Нахождение вокселей с максимальным значением кривизны в окрестности с радиусом 15.
3. Выбор вокселя со второй по величине координатой z .

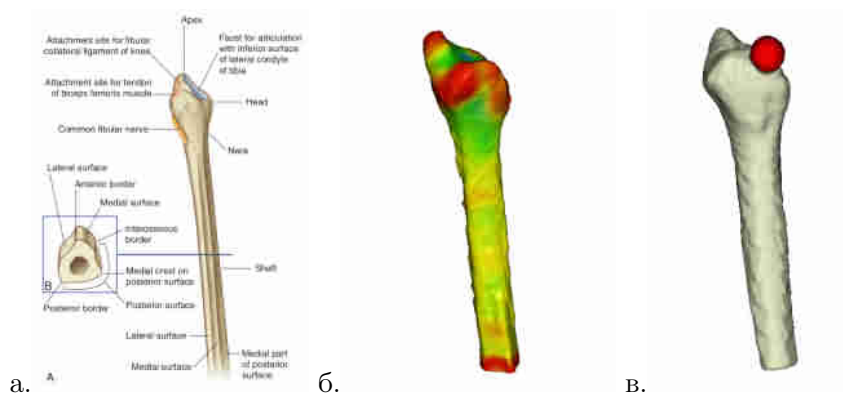


Рис. 4.5: Крепление сухожилия двуглавой мышцы бедра [7] (а). Результаты расчета кривизны поверхности малоберцовой кости (б). Результат детектирования сухожилия двуглавой мышцы бедра (в).

Латеральная коллатеральная связка прикрепляется к углублению латеральной поверхности в верхней части малоберцовой кости (рис. 4.5). Алгоритм поиска крепления латеральной коллатеральной связки похож на Алгоритм 3:

Алгоритм 4

1. Расчет кривизны поверхности малоберцовой кости с параметром сглаживания 4.
2. Поиск всех вокселей с минимальным значением средней кривизны в окрестности радиуса 20.
3. Выбор вокселя с максимальным значением координаты z .

Медиальная коллатеральная связка прикрепляется к надмыщелку бедренной кости, несколько ниже приводящего бугорка. Поскольку надмыщелок бедренной кости представляет из себя выпуклость, его можно детектировать, используя расчёт кривизны поверхности с подходящими параметрами и поиск локальных максимумов. Основная сложность состоит в выделении из всего множества локальных максимумов точки, соответствующей надмыщелку бедренной кости (рис. 4.6а). Для решения этой проблемы было принято во внимание соотношение между шириной бедренной кости и расстоянием от приводящего бугорка до суставной линии, приведённое в работе [13]. Основные измерения бедренной кости, используемые для вычисления соотношения, приведены на рис. 4.6б: суставная линия (JL), проходящая через самые нижние точки медиального и латерального мыщелка в коронарной плоскости, расстояние между приводящим бугорком и суставной линией (AJTL), ширина бедренной кости (FW). Согласно [13], существует корреляция между значениями расстояний FW и AJTL: среднее значение отношения AJTL/FW равно 0.543. Основные шаги для детектирования медиальной коллатеральной связки следующие:

Алгоритм 5

1. Найти JL и её внешнюю единичную нормаль \mathbf{n} .
2. Найти FW и вектор $\mathbf{v} = \mathbf{n} \cdot \text{FW} \cdot 0.543$.
3. Добавить вектор \mathbf{v} к самой дистальной точке медиального надмыщелка для получения примерного положения приводящего бугорка \tilde{a} .
4. Найти кривизну бедренной кости со сглаживающим параметром 8.
5. Выбрать точки с максимальным средним значением кривизны в окрестности с радиусом 5.
6. Выбрать точку, ближайшую к \tilde{a} .

Валидация алгоритмов. Для валидации разработанных алгоритмов было проведено сравнение статистических характеристик связок с литературными источниками. Полученные в ходе данной работы данные сравнивались со статистическими результатами измерений длин передней крестообразной связки (ACL), задней крестообразной связки (PCL), латеральной коллатеральной связки (LCL) и связки надколенника (PL) для 30 пациентов, приведенными в [16]. Точки креплений связок для каждого колена определялись как среднее между двумя-четырьмя крайними положениями на периферии участка крепления (переднее, заднее, медиальное, латеральное, дистальное и проксимальное).

Таблица 4.1 содержит длины связок ACL, PCL, LCL и PL в терминах расстояния между точками крепления, рассчитанное по 26 КТ изображениям коленного сустава более высокого разрешения. Длины анатомических структур рассчитывались как $L = \sqrt{(x_o - x_i)^2 + (y_o - y_i)^2 + (z_o - z_i)^2}$, где (x_o, y_o, z_o) и (x_i, y_i, z_i) декартовы координаты точек крепления. Если координаты точек крепления были рассчитаны в вокселях, как, например, в Алгоритме 1, то они конвертируются в декартову систему координат:



Рис. 4.6: Локальные максимумы поверхности бедренной кости: жёлтая точка соответствует приводящему бугорку, красная обозначает точку крепления медиальной коллатеральной связки (а). Передне-задняя плоскость рентгенограммы колена, демонстрирующая методику нахождения измерений бедренной кости для расчёта соотношения из [13]: суставная линия (JL), проходящая через самые нижние точки медиального и латерального мыщелка в коронарной плоскости, расстояние между приводящим бугорком и суставной линией (AJTL), ширина бедренной кости (FW), расстояние от малоберцовой кости до суставной линии (FJL), расстояние от медиального надмыщелка до суставной линии (MEJL), рисунок из [13] (б). Зелёной точкой обозначен приводящий бугорок, детектированный с использованием соотношения $AJTL/FW$ из [13], красная точка показывает найденное крепление медиально коллатеральной связки (в).

$(x, y, z) = (v_x s_x + o_x, v_y s_y + o_y, v_z s_z + o_z)$, где (v_x, v_y, v_z) — координаты в вокселях, (s_x, s_y, s_z) — пространственные размерности вокселя, и (o_x, o_y, o_z) — координаты начала изображения в декартовой системе координат.

Средняя длина связок ACL, PCL, PL была рассчитана по координатам точек крепления, найденным Алгоритмами 4-5 по КТ данным более высокого разрешения, хорошо коррелирует с данными, представленными в [16]. Стандартные отклонения для ACL, PCL и LCL сравнимы, стандартное отклонение для PL отличается в 2 раза. Средняя длина связки LCL, приведённая в [16], на 11мм больше, чем средняя длина LCL, рассчитанная по точками крепления с использованием алгоритмов 4-5. Стандартные отклонения сравнимы. Наличие этого систематического различия можно объяснить различиями в подходах к поиску длины связки. В данной работе измерялось расстояние исключительно между точками крепления. В случае большой площади области крепления, часть длины этой области может быть добавлена к длине связки. Согласно [17], средняя площадь крепления латеральной коллатеральной связки к бедренной кости составляет 0.48 см^2 (диапазон изменения $0.43 - 0.52$), средняя площадь крепления к малоберцовой кости составляет 0.43 см^2 (диапазон изменения $0.39 - 0.50$). Отличие значения средней длины на 11 мм может быть объяснено выбором конкретной точки крепления внутри участка крепления связки.

В ходе данной работы были проведены также эксперименты с КТ данными более низкого разрешения. Отличия значений средних длин от данных, представленных в работе [16], значительнее в сравнении с экспериментами на данных более высокого разрешения. Алгоритмы, основанные на анализе кривизны поверхности костей, являются чувствительными к разрешению входных данных и могут выдавать некорректные результаты на данных более низкого разрешения (Таблица 4.3). Это объясняется тем, что после восстановления поверхности по КТ данным более низкого разрешения возможно появление вычислительных ошибок, в частности, при расчёте кривизн. Большое количество некорректных

результатов для большеберцовой кости объясняется неправильным детектированием бугристости большеберцовой кости. Для данного алгоритма необходим подбор дополнительного набора параметров для входных данных более низкого разрешения.

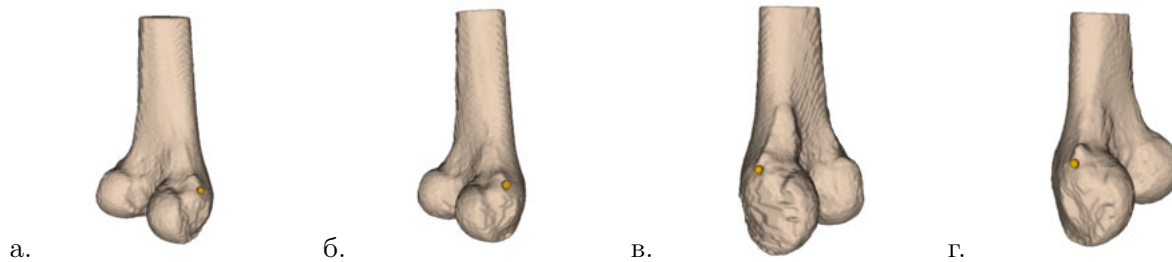


Рис. 4.7: Примеры детектированных точек крепления медиальной коллатеральной связки к большеберцовой кости.

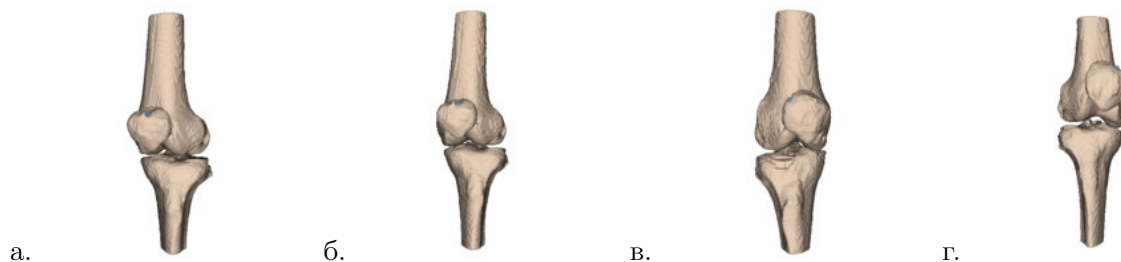


Рис. 4.8: Примеры детектированных точек крепления сухожилия четырёхглавой мышцы бедра к надколеннику.

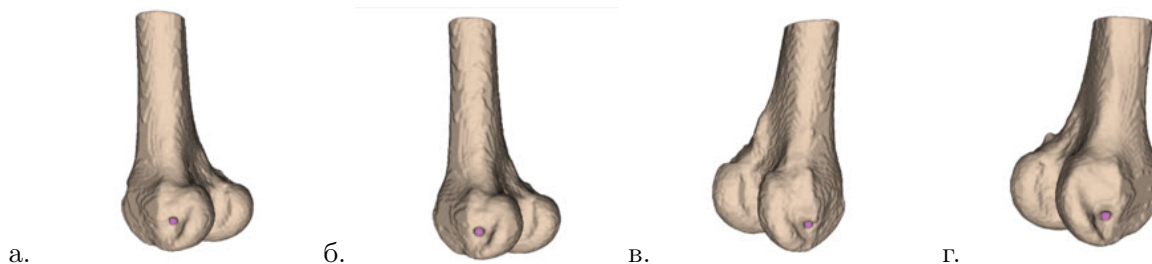


Рис. 4.9: Примеры детектированных точек крепления подколенной мышцы к большеберцовой кости.

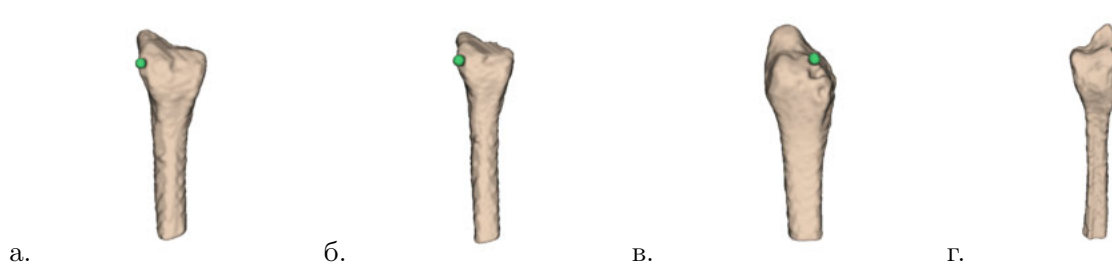


Рис. 4.10: Примеры детектированных точек крепления двуглавой мышцы бедра к малоберцовой кости.

Точность результатов сегментации для данных более высокого разрешения также оценивалась с использованием референтных обозначений точек креплений, предоставленных клиническими экспертами. Ошибки (расстояния между точками, найденными алгоритмом, и точками, отмеченными экспертом) были измерены для 208 точек: точки крепления связок ACL, PCL, PL, LCL для 26 коленных суставов (13 наборов данных). Средняя по всем точкам ошибка составила 12 мм, максимальная ошибка

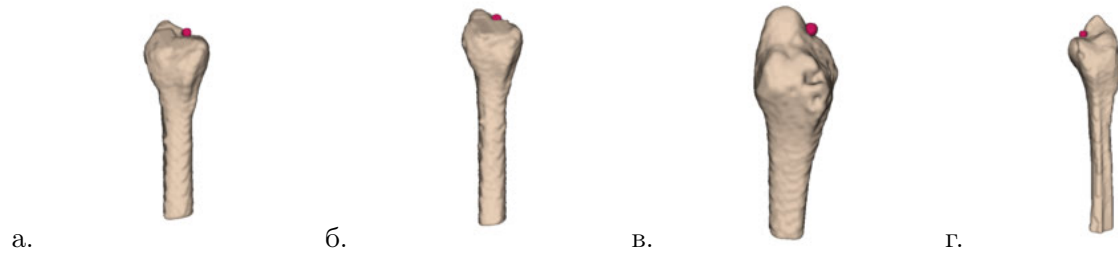


Рис. 4.11: Примеры детектированных точек крепления латеральной коллатеральной связки к малоберцовой кости.

Коленный сустав	ACL, мм	PCL, мм	PL, мм	LCL, мм
1п	32.288	33.247	63.985	49.555
1л	30.798	27.928	65.417	46.511
2п	31.669	37.154	65.042	43.557
2л	30.998	37.013	65.807	41.846
3п	32.288	33.138	63.983	49.118
3л	30.797	27.928	65.416	46.945
4п	32.346	33.128	63.985	49.555
4л	30.798	27.928	65.417	46.783
5п	30.211	34.477	60.436	43.665
5л	29.548	35.356	67.644	46.102
6п	33.487	28.101	54.897	49.849
6л	28.956	26.158	53.662	52.519
7п	32.424	32.489	79.91	51.788
7л	34.475	25.244	79.297	52.133
8п	31.203	38.831	79.356	50.875
8л	31.497	42.049	84.033	50.644
9п	32.424	32.489	79.91	51.788
9л	33.345	28.76	54.994	52.133
10п	46.839	52.155	83.579	51.98
10л	34.827	30.968	86.772	52.06
11п	21.886	28.074	65.568	38.679
11л	23.006	21.256	63.215	45.851
12п	32.389	33.373	53.889	36.016
12л	30.14	26.629	52.065	41.746
13п	31.577	25.518	48.734	37.816
13л	26.893	32.575	48.209	49.055

ТАБЛИЦА 4.1: Результаты измерений длин связок ACL, PCL, PL, и LCL по КТ данным более высокого разрешения

Структура	среднее, мм	SD, мм	min, мм	max, мм
ACL [16]	30.837	4.355	23.6	42.6
ACL измерено	31.427	4.328	21.886	46.839
PCL [16]	31.247	4.865	21.7	40.4
PCL измерено	31.999	6.286	21.256	52.155
PL [16]	63.907	5.973	54.5	76.7
PL измерено	68.585	14.403	48.209	86.772
LCL [16]	58.757	5.081	46.3	67.4
LCL измерено	47.253	4.857	36.016	52.519

ТАБЛИЦА 4.2: Сравнение статистических характеристик для связок ACL, PCL, PL, LCL (среднее значение, стандартное отклонение SD, минимальное и максимальное значение), полученных по найденным алгоритмами 4-5 точкам крепления, и представленных в работе [16] для КТ данных более высокого разрешения

Коленный сустав	ACL, мм	PCL, мм	PL, мм	LCL, мм
1п	31.154	37.788	62.398	41.864
1л	29.459	35.756	68.836	48.472
2п	28.802	37.363	64.385	40.096
2л	26.556	33.543	—	40.043
3п	37.892	44.727	66.836	53.868
3л	37.554	41.903	86.105	56.112
4п	27.033	35.422	—	42.9
4л	29.373	35.779	68.847	38.743
5п	27.823	39.159	63.117	40.509
5л	28.333	34.723	66.372	38.033
6п	37.616	35.147	73.956	59.376
6л	43.009	41.155	69.309	110.355
7п	31.139	31.768	—	63.149
7л	43.648	37.308	—	—
8п	39.994	55.396	—	57.415
8л	32.704	44.944	—	83.525
9п	39.346	43.461	—	61.961
9л	43.189	38.62	69.763	—
10п	36.998	36.759	—	87.088
10л	63.074	45.264	81.191	65.421
11п	28.855	32.284	—	49.413
11л	33.973	28.291	—	99.101
12п	33.572	40.326	68.881	97.56
12л	38.676	37.402	65.6	94.361
13п	37.196	33.279	65.678	49.948
13л	55.249	49.791	41.911	48.453

ТАБЛИЦА 4.3: Результаты измерений длин связок ACL, PCL, PL, и LCL по КТ данным более низкого разрешения, “—” означает некорректный результат

Структура	среднее, мм	SD, мм	min, мм	max, мм
ACL [16]	30.837	4.355	23.6	42.6
ACL измерено	36.239	8.624	26.556	63.074
PCL [16]	31.247	4.865	21.7	40.4
PCL измерено	38.745	5.939	28.291	55.396
PL [16]	63.907	5.973	54.5	76.7
PL измерено	67.699	9.334	41.911	86.105
LCL [16]	58.757	5.081	46.3	67.4
LCL измерено	53.319	13.968	38.033	87.088

Таблица 4.4: Сравнение статистических характеристик для связок ACL, PCL, PL, LCL (среднее значение, стандартное отклонение SD, минимальное и максимальное значение), полученных по найденным алгоритмами 4-5 точкам крепления, и представленных в работе [16] для КТ данных более низкого разрешения

23 мм. Наибольшие значения ошибки были получены для связок с относительно большими площадями участков креплений, например, ACL, PCL, PL. Длина крепления ACL к бедренной кости 17.9 ± 2.0 мм (среднее значение \pm SD) [18], крепление PCL к бедренной кости имеет длину более 20 мм в передне-заднем направлении [19].

Проведенные эксперименты показали, что разработанный алгоритм лучше работает на данных более высокого разрешения. Как правило, такие данные производятся на современных томографах при диагностике заболеваний коленного сустава. Разработанный подход может быть использован для автоматизации процесса создания персонализированной модели коленного сустава.

Литература

- [1] Image-based musculoskeletal modeling: Applications, advances, and future opportunities / Silvia S. Blemker, Deanna S. Asakawa, Garry E. Gold, Scott L. Delp // *Journal of Magnetic Resonance Imaging*. — 2007. — Vol. 25, no. 2. — Pp. 441–451. — URL: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/jmri.20805>.
- [2] Lee Hansang, Hong Helen, Kim Junmo. Anterior Cruciate Ligament Segmentation from Knee MR Images Using Graph Cuts with Geometric and Probabilistic Shape Constraints // *Computer Vision – ACCV 2012* / Ed. by Kyoung Mu Lee, Yasuyuki Matsushita, James M. Rehg, Zhanyi Hu. — Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2013. — Pp. 305–315.
- [3] Uozumi Yosuke, Nagamune Kouki, Mizuno Kiyonori. Computer-Aided Segmentation System of Posterior Cruciate Ligament in Knee Joint from CT and MRI Using Anatomical Information: A Pilot Study of System Configuration. — 2015. — 10. — Pp. 2295–2298.
- [4] Automated segmentation and T2-mapping of the posterior cruciate ligament from MRI of the knee: Data from the osteoarthritis initiative / Anthony Paproki, Katharine J. Wilson, Rachel K. Surowiec et al. // 2016 IEEE 13th International Symposium on Biomedical Imaging (ISBI). — 2016. — Pp. 424–427.
- [5] Segmentation of Bony Structures with Ligament Attachment Sites / Heiko Seim, Hans Lamecker, Markus Heller, Stefan Zachow // *Bildverarbeitung für die Medizin 2008* / Ed. by Thomas Tolxdorff, Jürgen Braun, Thomas M. Deserno et al. — Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2008. — Pp. 207–211.
- [6] Kaptein B.L., van der Helm F.C.T. Estimating muscle attachment contours by transforming geometrical bone models // *Journal of Biomechanics*. — 2004. — Vol. 37, no. 3. — Pp. 263–273.
- [7] Drake R., Vogl A.W., Mitchell A. *Gray's Anatomy for students*. 4th Edition. — Elsevier, 2019.
- [8] Привес М.Г., Лысенков Н.К. *Анатомия человека*. — Издательский дом СПбМАПО, 2006.
- [9] Morphology of the Insertions of the Superficial Medial Collateral Ligament and Posterior Oblique Ligament Using 3-Dimensional Computed Tomography: A Cadaveric Study / Takaaki Saigo, Goro Tajima, Shuhei Kikuchi et al. // *Arthroscopy: The Journal of Arthroscopic & Related Surgery*. — 2016. — 10. — Vol. 33.

- [10] Pes anserinus and anserine bursa: Anatomical study / Je-Hun Lee, Kyung-Jin Kim, Young-Gil Jeong et al. // *Anatomy & cell biology*. — 2014. — 06. — Vol. 47. — Pp. 127–31.
- [11] Morphology of the medial collateral ligament of the knee / Fang Liu, Bing Yue, Hemanth Gadikota et al. // *Journal of orthopaedic surgery and research*. — 2010. — 09. — Vol. 5. — P. 69.
- [12] The Anatomy of the Medial Part of the Knee / Robert LaPrade, Anders Engebretsen, Thuan Ly et al. // *The Journal of bone and joint surgery. American volume*. — 2007. — 10. — Vol. 89. — Pp. 2000–10.
- [13] The adductor tubercle: A reliable landmark for analysing the level of the femorotibial joint line / Francesco Iacono, Mirco Lo Presti, Danilo Bruni et al. // *Knee surgery, sports traumatology, arthroscopy : official journal of the ESSKA*. — 2012. — 06. — Vol. 21.
- [14] Automatic segmentation algorithms and personalized geometric modelling for a human knee / Victoria Yu. Salamatova, Alexandra S. Yurova, Yuri V. Vassilevski, Lin Wang // *Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling*. — 2019. — Vol. 34, no. 6. — Pp. 361–367. — URL: <https://doi.org/10.1515/rnam-2019-0031>.
- [15] Personalized Geometric Modeling of a Human Knee: Data, Algorithms, Outcomes / Alexandra Yurova, Victoria Salamatova, Yuri Vassilevski et al. — 2021. — 02. — Pp. 213–222.
- [16] Statistical analysis of knee ligament lengths / Bernard Clément, G Drouin, G Shorrock, P Gely // *Journal of biomechanics*. — 1989. — 02. — Vol. 22. — Pp. 767–74.
- [17] The Posterolateral Attachments of the Knee A Qualitative and Quantitative Morphologic Analysis of the Fibular Collateral Ligament, Popliteus Tendon, Popliteofibular Ligament, and Lateral Gastrocnemius Tendon* / Robert LaPrade, Thuan Ly, Fred Wentorf, Lars Engebretsen // *The American journal of sports medicine*. — 2003. — 11. — Vol. 31. — Pp. 854–60.
- [18] The Role of Fibers in the Femoral Attachment of the Anterior Cruciate Ligament in Resisting Tibial Displacement / Yasuyuki Kawaguchi, Eiji Kondo, Ryo Takeda et al. // *Arthroscopy: The Journal of Arthroscopic & Related Surgery*. — 2014. — 12. — Vol. 31.
- [19] Anatomy of the posterior cruciate ligament and the meniscofemoral ligaments. *Knee Surg Sports Traumatol Arthrosc* 14:257-263 (Review) / A Amis, Chinmay Gupte, Anthony Bull, A Edwards // *Knee surgery, sports traumatology, arthroscopy : official journal of the ESSKA*. — 2006. — 04. — Vol. 14. — Pp. 257–63.

2. Геофизика

Задача 2.1. Разработка негидростатической модели сжимаемой атмосферы для задач прогноза погоды и моделирования климата

Реализация процедур параллельного вычисления основных горизонтальных дифференциальных операторов (градиент, дивергенция, завихренность, лапласиан) 2-го и 4-го порядка аппроксимации с помощью ранее реализованной библиотеки параллельных вычислений на сетке кубическая сфера ParCS. Реализация упрощенной версии динамического блока (отсутствует рельеф поверхности, явная схема интегрирования по времени, эйлерова адвекция), испытание на общепринятых тестовых задачах (распространение гравитационной волны, теплый пузырек, плотностное течение). Параллельная реализация и проверка алгоритма генерации коррелированных по пространству и времени полей на сфере (AR1) в рамках существующей модели атмосферы ПЛАВ. Реализация возмущений вертикального компонента завихренности в модели ПЛАВ.

2.1.1 Построение конечно-разностных аппроксимаций основных дифференциальных операторов уравнений динамики атмосферы

Вычислительная сетка кубическая сфера для модели атмосферы. В области численного прогноза погоды и моделирования климата многие годы применялась регулярная широтно-долготная сетка на сфере. Недостаток такой сетки - сходимости меридианов к полюсам, что чрезмерно повышает разрешение в высоких широтах и ведет к жесткому ограничению на шаг по времени при использовании явных методов и медленной сходимости алгоритмов решения систем уравнений при использовании (полу-)явных методов. Практическое моделирование атмосферы на широтно-долготной сетке невозможно при шаге сетки на экваторе 10 км и менее [1].

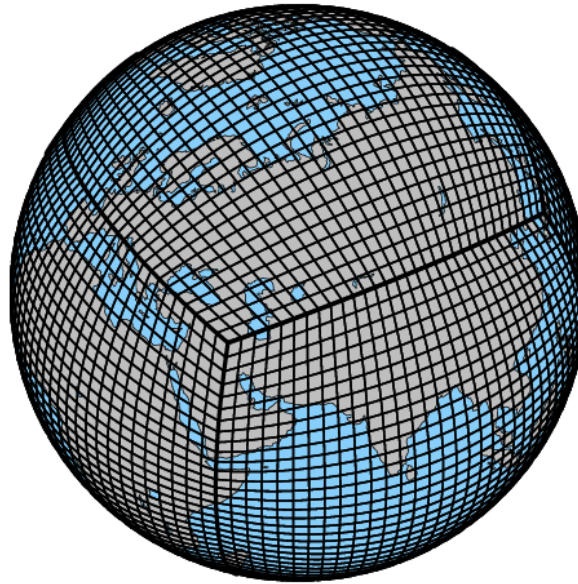


Рис. 1.1: Пример сетки кубическая сфера

Для реализации негидростатической модели сжимаемой атмосферы мы выбрали сетку типа кубическая сфера (см. например, [2]). Такая сетка получается путем центральной проекции равномерной сетки на гранях куба на вписанную сферу (Рис. 1.1). Фактически, такая сетка состоит из 6 отдельных криволинейных неортогональных сеток, стыкующихся на образах ребер куба. Координатные линии, при этом, испытывают излом. К достоинствам сетки кубическая сфера следует отнести высокую равномерность разрешения, логически прямоугольную структуру, которая позволяет эффективно программировать методы высокого порядка аппроксимации.

Устойчивость пространственной аппроксимации на примере линейных уравнений мелкой воды. Практически любую систему уравнений динамики атмосферы путем выбора соответствующего фонового состояния и линеаризации можно свести к линейной системе уравнений мелкой воды:

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} = -\nabla h, \quad (1.1a)$$

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -H_0 \nabla \cdot \vec{v}, \quad (1.1b)$$

где \vec{v} — вектор горизонтальной скорости ветра, h — возмущение глубины жидкости, H_0 — средняя глубина.

Важно, чтобы пространственные аппроксимации трехмерной системы уравнений динамики атмосферы, при сведении ее к случаю мелкой воды, были устойчивы. Добиться этого можно, если дискретные операторы дивергенции и градиента обладают аналогом свойства интегрирования по частям:

$$\int_{\Omega} (u \nabla h + h \nabla u) d\Omega = \oint_{\partial\Omega} u h dS. \quad (1.2)$$

В замкнутой области правая часть уравнения равна нулю, следовательно, от конечно-разностных операторов на сетке кубическая сфера требуется:

$$\mathbf{h}^T A_h D_u \mathbf{u} + \mathbf{u}^T A_u D_h \mathbf{h} = 0, \quad (1.3)$$

где \mathbf{h} , \mathbf{u} - представление h и u на сетке, A_h и A_u - квадратурные матрицы, D_h , D_u - сеточные операторы градиента и дивергенции. При выполнении свойства (1.3) сохраняется энергия (квадратичный инвариант):

$$E = \frac{1}{2} \mathbf{h}^T A_h \mathbf{h} + \frac{1}{2} \mathbf{u}^T A_u \mathbf{u}, \quad (1.4)$$

что гарантирует устойчивость численного решения.

Мы построили устойчивые аппроксимации по пространству на сетке кубическая сфера, применяя для аппроксимации дивергенции и градиента Summation By Parts (SBP) аппроксимации первых производных по пространству на каждой грани куба и метод Simultaneous Approximation Terms для сшивки на ребрах [3], [4].

Пример SBP-SAT метода в одномерном случае. Рассмотрим несмещенную сетку на единичном отрезке. Пусть D - матрица дифференцирования, A - симметричная, положительно определенная матрица масс (нормы, скалярного произведения). Предполагаем выполнение SBP свойства для матриц A и D :

$$AD = -D^T A + B, \quad (1.5)$$

где B

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (1.6)$$

Следствие (1.5) - для любых (подходящего размера) векторов \mathbf{u} , \mathbf{h}

$$\mathbf{u}^T AD\mathbf{h} + \mathbf{h}^T AD\mathbf{u} = \mathbf{u}^T B\mathbf{h} = -\mathbf{u}_1 \mathbf{h}_1 + \mathbf{u}_N \mathbf{h}_N, \quad (1.7)$$

что является аналогом интегрирования по частям (1.2).

В работе [3] доказано существования конечно-разностных SBP-операторов порядка аппроксимации $2p$ внутри отрезка, и p около границ с диагональной матрицей нормы A . Внутри отрезка такие операторы совпадают со стандартными центральными конечно-разностными формулами для аппроксимации первой производной с порядком $2p$. В $2p$ точках у границы отрезка применяются односторонние аппроксимации. Мы использовали формулы SBP операторов для несмещенной сетки с $p = 1, 2, 3$, приведенные в статье [4].

Для несмещенной сетки, состоящей из двух и более отрезков, соприкасающихся крайними точками, сшивка производится следующим образом: $\partial \mathbf{h} / \partial t$ и $\partial \mathbf{u} / \partial t$ вычисляются отдельно для каждого отрезка, затем в граничных точках берется сумма двух решений, взвешенная на элементы матрицы масс. Пусть A^L, A^R - матрицы масс левого и правого отрезков, \tilde{u}_N^L и \tilde{u}_1^R - решение с левого и правого отрезков в точке касания, тогда сшивка производится по формуле

$$u_N^L = u_1^R = \frac{A_{N,N}^L \tilde{u}_N^L + A_{1,1}^R \tilde{u}_1^R}{A_{N,N}^L + A_{1,1}^R}. \quad (1.8)$$

Нетрудно убедиться, что такая сшивка не изменяет значение полной энергии (1.4).

В случае разнесенной сетки по пространству значения одной из переменных u, h не определены на границе, поэтому аналог свойства интегрирования по частям записывается в виде

$$\mathbf{h}^T A_h D_u \mathbf{u} + \mathbf{h}^T (D_h)^T A_u \mathbf{u} = -u_1 R_1 \mathbf{h} + u_N R_N \mathbf{h}, \quad (1.9)$$

где R_1, R_N - операторы проекции \mathbf{h} на границы отрезка (рассматривается сетка, где переменная h смещена относительно границы, u - определена в граничных узлах).

В работе [5] построены SBP операторы на разнесенной сетке порядка аппроксимации $2p = 2, 4$ внутри области и p на границе, для которых оператор R - экстраполяция порядка аппроксимации p . Мы реализовали эти операторы.

В случае разнесенной сетки условия сшивки на границах реализуются с помощью SAT метода способом, описанным ниже. Рассмотрим одномерную систему уравнений мелкой воды на смещенной сетке на двух отрезках ("+" и "-"):

$$\frac{\partial u^+}{\partial t} = -D_h^+ h^+, \quad (1.10a)$$

$$\frac{\partial h^+}{\partial t} = -D_u^+ u^+, \quad (1.10b)$$

$$\frac{\partial u^-}{\partial t} = -D_h^- h^-, \quad (1.10c)$$

$$\frac{\partial h^-}{\partial t} = -D_u^- u^-, \quad (1.10d)$$

Точки скорости u_1^+ и u_N^- совпадают на границах отрезков, h -точки отнесены от границы на половину шага. Рассмотрим условия стыковки двух отрезков (отвлечемся от всех других граничных условий).

Для матриц D_u , D_h (+ и -) и матриц норм A_u , A_h выполняется SBP-соотношение:

$$A_h^- D_u^- + (D_h^-)^T A_u^- = Q^- = (R^-)^T, \quad (1.11)$$

$$A_h^+ D_u^+ + (D_h^+)^T A_u^+ = Q^+ = -(R^+)^T, \quad (1.12)$$

где R – операторы проекции (экстраполяции h на границу), например, такие для метода порядка 2-1:

$$R^+ = \begin{pmatrix} 3/2 & -1/2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & & \dots & & 0 \\ \dots & & \dots & & \dots \\ 0 & & \dots & & 0 \end{pmatrix},$$

$$R^+ h^+ = \left(\frac{3}{2} h_1^+ - \frac{1}{2} h_2^+ \right),$$

$$R^- = \begin{pmatrix} 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & -1/2 & 3/2 \end{pmatrix},$$

$$R^- h^- = \left(\frac{3}{2} h_N^- - \frac{1}{2} h_{N-1}^- \right).$$

Выведем выражение для производной полной энергии по времени

$$\frac{\partial \varepsilon^+}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \left(h^{+T} A_h^+ h^+ + u^{+T} A_u^- u^+ \right) = -h^{+T} A_h^+ D_u^+ u^+ - u^{+T} A_u^- D_h^+ h = h^{+T} R^{+T} u^+, \quad (1.13)$$

$$\frac{\partial \varepsilon^-}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \left(h^{-T} A_h^- h^- + u^{-T} A_u^- u^- \right) = -h^{-T} A_h^- D_u^- u^- - u^{-T} A_u^- D_h^- h = -h^{-T} R^{-T} u^-. \quad (1.14)$$

Для того, чтобы выполнялись законы сохранения (массы и энергии) нужно модифицировать исходную систему (1.10) следующим образом:

$$\frac{\partial u^+}{\partial t} = -D_h^+ h^+ - \frac{1}{2} A^{+-1} (e_1^T R^+ h^+ - e_N^T R^- h^-) e_1, \quad (1.15a)$$

$$\frac{\partial h^+}{\partial t} = -D_u^+ u^+ - \frac{1}{2} A_h^{+-1} R^{+T} (u_1^+ - u_N^-) e_1, \quad (1.15b)$$

$$\frac{\partial u^-}{\partial t} = -D_h^- h^- - \frac{1}{2} A^{-1} (e_1^T R^+ h^+ - e_N^T R^- h^-) e_N, \quad (1.15c)$$

$$\frac{\partial h^-}{\partial t} = -D_u^- u^- - \frac{1}{2} A_h^{-1} R^{-T} (u_1^+ - u_N^-) e_N. \quad (1.15d)$$

Величина $(e_1^T R^+ h^+ - e_N^T R^- h^-) = \tilde{h}_1^+ - \tilde{h}_N^-$ – разница проекций h на границу раздела. Отметим, что если решение устойчиво, SBP-операторы имеют порядок аппроксимации p на границах и изначально

$u_1^+ = u_N^-$, то величины $u_1^+ - u_N^-$, $\tilde{h}_1^+ - \tilde{h}_N^-$, дополнительно вводимые в уравнения, имеют порядок малости Δx^p .

SBP операторы градиента и дивергенции для двумерной и трехмерной криволинейных сеток. Одномерные SBP-SAT конечно-разностные методы обобщаются на двух и трехмерные криволинейные сетки с логически-прямоугольной структурой путем кронекеровского произведения одномерных операторов. SBP-свойства сохраняются, если матрицы масс одномерных операторов - диагональные. В случае применения разнесенных сеток требуются также операторы интерполяции из точек, в которых сохраняются компоненты скорости, в точки, где определено давление (высота поверхности в случае уравнений мелкой воды). Операторы интерполяции нужны для расчета контравариантных компонент градиента по его ковариантным компонентам [6]. Операторы интерполяции должны удовлетворять соотношениям

$$\mathbf{u}^T A_u P_u^h \mathbf{h} = \mathbf{h}^T A_h P_h^u \mathbf{u}, \quad (1.16)$$

то есть, скалярное произведения \mathbf{u} и \mathbf{h} должно не зависеть от точек в которых оно вычисляется. Мы построили такие операторы интерполяции порядка аппроксимации 4-2 (внутри области - у границы).

Список реализованных дискретизаций дифференциальных операторов. Мы реализовали процедуры вычисления дифференциальных и не дифференциальных конечно-разностных операторов, необходимых для реализации динамического блока трехмерной модели и в рамках библиотеки для параллельных вычислений на сетке кубическая сфера ParCS. Библиотека ParCS была разработана нами ранее в рамках завершившегося проекта РНФ 19-71-00160 [7]. В рамках текущего этапа проекта реализованы следующие операторы (дифференциальные и не дифференциальные):

- SBP градиент и дивергенция на несмещенной сетке порядков 2-1, 4-2, 6-3.
- SBP градиент и дивергенция на смещенной сетке типа «С» порядков 2-1, 4-2.
- SBP интерполяции между точками скорости и давления на смещенной сетке типа «С» порядков 2-1, 4-2.
- Аппроксимации силы Кориолиса на смещенной сетке типа «С» порядков 2-1, 4-2, сохраняющие и не сохраняющие полную энергию.
- Вертикальные производные на несмещенной сетке порядков 2-1, 4-2, 6-3 с нулевыми граничными условиями на вертикальную скорость.
- Вертикальные производные и интерполяции на разнесенной сетке Чарни-Филипса порядков 2-1, 4-2 с нулевыми граничными условиями на вертикальную скорость.

- Операторы эйлеровой адвекции скалярных и векторных полей на основе центральных и направленных разностей 1-го – 4-го порядков для разнесенных и не разнесенных сеток по вертикали и горизонтали.

Условия на стыках граней куба для адвективных операторов задаются с помощью интерполяции в виртуальные точки, выходящие за границу грани куба.

2.1.2 Реализация и тестирование первой версии динамического блока для негидростатической модели глобальной атмосферы

Описание динамического блока. Важнейшим компонентом модели атмосферы является динамический блок (ядро) – параллельный алгоритм численного решения уравнений гидротермодинамики для явлений, разрешаемых на сетке. В соответствии с планом работ по проекту мы реализовали версию динамического ядра без учета рельефа поверхности и с использованием явной схемы интегрирования по времени. Предназначение данной версии динамического блока – первичное тестирование пространственных аппроксимаций трехмерных уравнений динамики. В дальнейшем планируется введение ортографии (рельефа поверхности Земли) и расширение спектра используемых схем интегрирования по времени.

Мы выбрали систему уравнений Эйлера в переменных потенциальная температура - функция давления Экснера, без квазистатического приближения по вертикали:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\mathbf{v} \cdot \nabla u - C_p \theta \frac{\partial P}{\partial x} + F_{coriu}, \quad (1.17a)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = -\mathbf{v} \cdot \nabla v - C_p \theta \frac{\partial P}{\partial y} + F_{coriv}, \quad (1.17b)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} = -\mathbf{v} \cdot \nabla w - C_p \theta \frac{\partial P}{\partial z} - g + F_{coriw}, \quad (1.17c)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = -\mathbf{v} \cdot \nabla \theta, \quad (1.17d)$$

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\mathbf{v} \cdot \nabla P - \frac{R}{C_v} P \nabla \cdot \mathbf{v}, \quad (1.17e)$$

где $\mathbf{v} = (u, v, w)^T$ – вектор скорости ветра, θ – потенциальная температура, $P = (p/p_0)^\kappa$ – функция давления Экснера.

При конечно-разностной дискретизации системы уравнений в форме (1.17) на смещенной сетке типа «С» по горизонтали и Чарни-Филипса по вертикали получаются наилучшие дисперсионные характеристики распространения основных типов атмосферных волн [8].

Алгоритм решения системы (1.17) был реализован с помощью библиотеки ParCS, использовались конечно-разностные операторы, перечисленные выше. В качестве основного варианта рассматривается дискретизация на разнесенной сетке по горизонтали и вертикали. Для целей отладки и сравнения реализованы варианты на несмещенных сетках по вертикали и горизонтали.

Результаты тестирования

Эксперимент “Распространение инерционно-гравитационной волны”. В эксперименте возмущение потенциальной температуры амплитуды 1 К, с характерным горизонтальным масштабом 5 км накладывается на устойчиво стратифицированную атмосферу (частота Брента-Вяйсяля $N = 0.01 \text{ c}^{-1}$). Начальное возмущение локализовано на экваторе, на Гринвичском меридиане. От начального возмущения распространяются циркуляные волны. Радиус планеты уменьшен по сравнению с радиусом Земли в 125 раз, чтобы выделить негидростатические эффекты. Эффект Кориолиса отключен.

Решение разработанного динамического ядра на сетке с вертикальным и горизонтальным разрешением 1 км изображено на Рис. 1.2. На рисунке представлено вертикальное сечение поля возмущения потенциальной температуры через 3600 с моделирования. Решения разработанного динамического ядра хорошо согласуются с решениями других моделей, полученными в эксперименте проекта Dynamical Core Model Intercomparison Project-2012 [9]. При сравнении решений со средним потоком и без него можно отметить снижение амплитуды волны на заднем фронте (ветер на рисунке дует слева направо), что характерно для всех моделей.

Эксперимент “Подъем теплого пузырька”. В данном эксперименте моделируется подъем шарообразного пузырька теплого воздуха в нейтрально стратифицированной атмосфере $\theta = 300 \text{ K}$. Аномалия потенциальной температуры в центре пузырька – 10 К, радиус – 2 км. На Рис. 1.3 изображено вертикальное сечение поля потенциальной температуры численного решения разработанного динамического ядра с разрешением 200 м по вертикали и горизонтали. Динамическое ядро хорошо воспроизводит формирование грибовидной структуры в момент времени $t=400 \text{ c}$.

Эксперимент “Плотностное течение”. Этот эксперимент является адаптацией к сферической геометрии известного стандартного теста [10]. Рассматривается эволюция холодного пузырька воздуха (аномалии потенциальной температуры -15 К), опускающегося в нейтрально стратифицированной атмосфере и разбивающегося об Землю. Пузырек имеет полувысоту 2000 м, полуширину 4000 м, ширина пузырька в долготном направлении выбрана бесконечной, чтобы воспроизвести двумерную динамику (аномалия потенциальной температуры локализована вдоль экватора). Разработанный динамический блок воспроизводит узкий и быстрый поток плотного холодного воздуха и формирование вихрей при

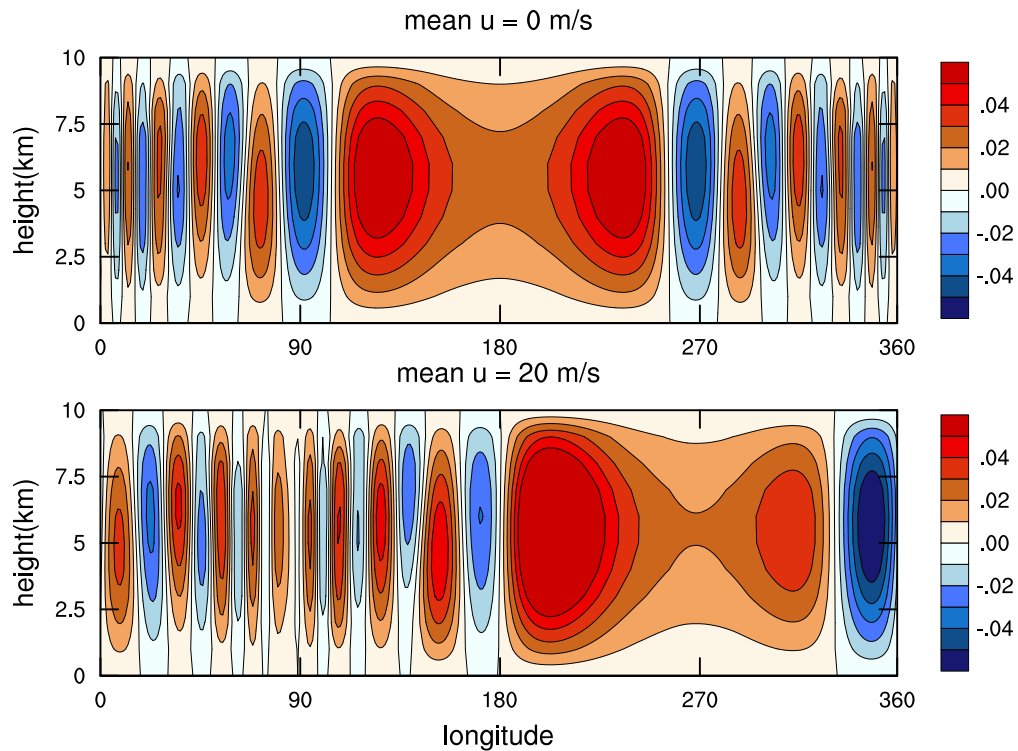


Рис. 1.2: Вертикальное сечение поля возмущения потенциальной температуры по экватору в эксперименте «Распространение гравитационной волны» через 3600 с моделирования. Сверху - в отсутствии среднего потока, снизу - средний поток со скоростью на экваторе 20 м/с.

столкновении пузырька с поверхностью. На Рис. 1.4 изображено вертикальное сечение поля потенциальной температуры в решении с разрешением 200 м по горизонтали и вертикали. Решение хорошо согласуется с моделью Английской метеослужбы [11].

Эксперимент “Геострофическое равновесие”. Рассматриваемый эксперимент [12] обобщает аналогичную задачу для моделей мелкой воды [13] на трехмерный случай. Течение типа твердое вращение с максимальной скоростью 20 м/с находится в устойчивом равновесии под действием силы градиента давления и силы Кориолиса и является стационарным решением системы уравнений динамики атмосферы. С целью увеличить роль негидростатических эффектов, мы уменьшили радиус Земли в 125 раз и в 125 раз увеличили скорость ее вращения. Ошибки численного решения и эффективные порядки сходимости в эксперименте после одного полного оборота (16000 с) приведены в Таблице 1.1.

Параллельная эффективность динамического ядра. Параллельная эффективность нового динамического ядра испытывалась на вычислительной системе CRAY XC-40 Росгидромета. Был проведен

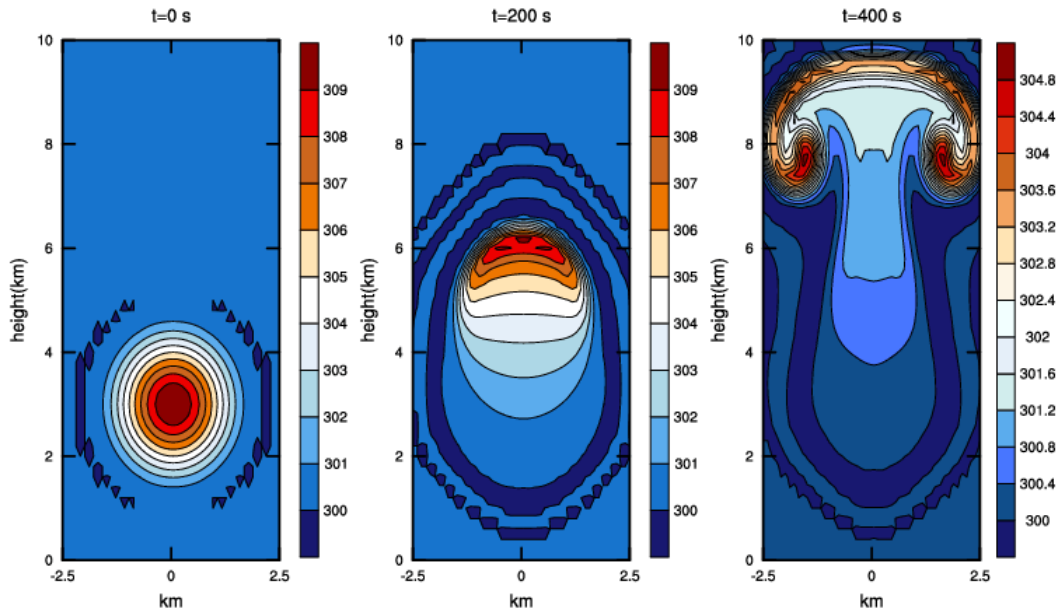


Рис. 1.3: Вертикальное сечение поля потенциальной температуры эксперименте «Подъем теплого пузыря».

Δx км	Δz км	N	Nlev	$\max w $ (м/с)	$\max P - P(t = 0) $
2,5	1,0	32	10	$1,8 \times 10^{-3}$	$1,6 \times 10^{-5}$
1,25	0,5	64	20	$3,2 \times 10^{-4}$	$1,4 \times 10^{-6}$
0.765	0,25	128	40	$7,7 \times 10^{-5}$	$1,19 \times 10^{-7}$
Порядок сходимости				2,3	3,1

Таблица 1.1: Максимальные ошибки полей вертикальной скорости и функции давления Экснера после одного полного оборота в эксперименте геострофическое равновесие.

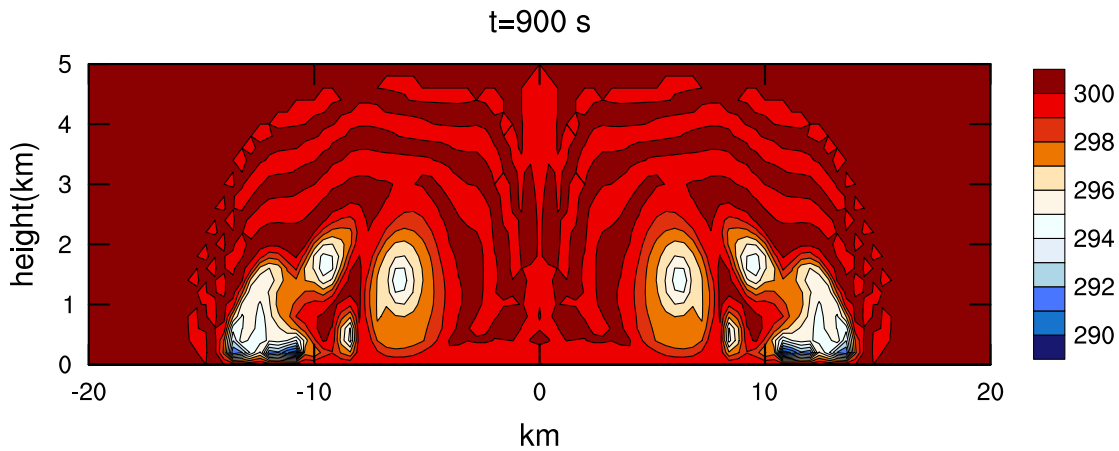


Рис. 1.4: Вертикальное сечение поля потенциальной температуры эксперименте плотностное течение.

эксперимент по исследованию сильной масштабируемости на сетке $6 \times 512 \times 512$, 30 уровней по вертикали (разрешение по горизонтали – 20 км, по вертикали – 300 м). Динамическое ядро масштабируется до 4032 процессорных ядер с эффективностью 70% (Рис. 1.5). Расчет на 4032 ядрах соответствует размеру подобласти одного MPI-процесса примерно 20×20 точек по горизонтали. По результатам эксперимента определены направления работы по повышению параллельной эффективности: оптимизация обменов в блоке интерполяции значений полей в «виртуальные точки» и применение технологии OpenMP в сочетании с MPI.

2.1.3 Развитие технологий ансамблевого моделирования

С помощью технологии параллельных вычислений MPI реализован генератор случайных двумерных полей, скоррелированных по времени и пространству.

Обозначим через $\tilde{\xi}_j$ невозмущенные значения параметров физических параметризаций, а возмущенные значения — через ξ_j . Для получения возмущенных значений используется логарифмически нормальное распределение

$$\xi_j = e^{\psi_j} \tilde{\xi}_j, \quad \psi_j \sim \mathcal{N}\left(-\frac{1}{2}\sigma_j^2, \sigma_j^2\right),$$

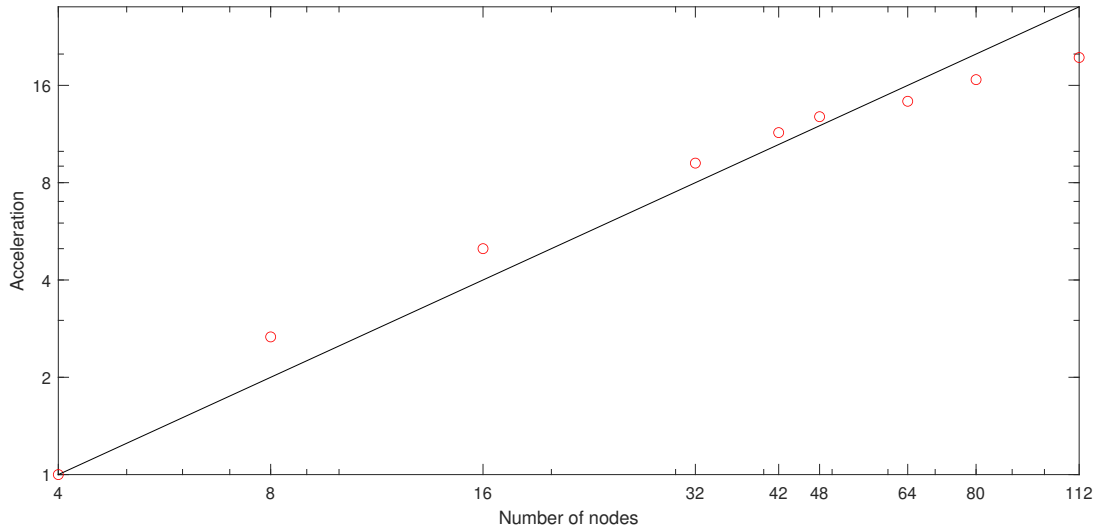


Рис. 1.5: Сильная масштабируемость негидростатического динамического ядра на сетке $6 \times 512 \times 512 \times 30$, по оси x – число узлов CRAY XC40, один узел – 36 ядер.

где ψ_j – случайное двумерное поле, значения которого имеют нормальное распределение с математическим ожиданием $E(\psi_j) = -\frac{1}{2}\sigma_j^2$ и стандартным отклонением σ_j . Такой выбор параметров распределения гарантирует, что $E(\xi_j) = E(\tilde{\xi}_j)$. Логарифмически нормальное распределение обеспечивает неотрицательность генерируемых величин. В зависимости от выбора параметра σ_j будет меняться эффективная ширина интервала, в который попадают значения ξ_j .

Для корреляции полей ψ_j по пространству используется фильтрация при помощи бигармонического оператора

$$\psi_{j(f)} = \psi_j - \nu \Delta^2 \psi_{j(f)}.$$

Здесь ψ_j – поле до фильтрации, $\psi_{j(f)}$ – поле после фильтрации, Δ^2 – матрица, возникающая в результате дискретизации бигармонического оператора на сфере, ν – коэффициент фильтрации. Коэффициент ν определяет пространственный радиус корреляции полученного поля, однако получить явную связь между этим коэффициентом и величиной радиуса корреляции не представляется возможным, поэтому коэффициент следует подбирать эмпирически. В глобальной модели ПЛАВ [14] используется значение коэффициента фильтрации $\nu = (c \cdot \Delta \lambda a)^4$, где $\Delta \lambda$ – шаг сетки по долготе в радианах, a – радиус Земли, c – некоторая константа.

Для получения скоррелированных по времени полей используется AR(1)-процесс

$$\psi_j^{n+1} = -\frac{1}{2}\sigma_j^2 \frac{\Delta t}{\tau_j} + \left(1 - \frac{\Delta t}{\tau_j}\right) \psi_j^n + \left[\frac{\Delta t}{\tau_j} \left(2 - \frac{\Delta t}{\tau_j}\right)\right]^{\frac{1}{2}} \varepsilon_j^n.$$

Здесь Δt – шаг по времени модели, τ_j – время декорреляции, ε_j^n – сгенерированное на данном шаге по времени случайное двумерное поле с распределением $\mathcal{N}(-\frac{1}{2}\sigma_j^2, \sigma_j^2)$ и заданным радиусом пространственной корреляции (отфильтрованное). Использование AR(1)-процесса, определенного выше,

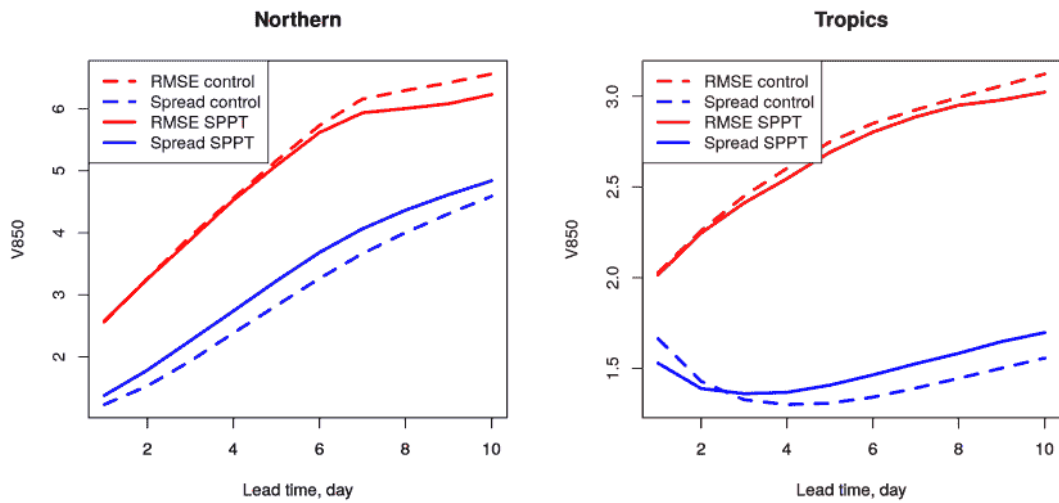


Рис. 1.6: Среднеквадратичная ошибка среднего по ансамблю прогноза (красный) и разброс ансамбля (синий) для контрольного эксперимента (пунктир) и эксперимента с возмущением тенденции завихренности (сплошная линия) в среднем за период 1-14 января 2021 года для меридиональной компоненты скорости ветра на уровне 850 гПа во внетропической части северного полушария (слева), в тропиках (справа)

гарантирует, что $E(\psi_j^n) = -\frac{1}{2}\sigma_j^2$ и $\sigma(\psi_j^n) = \sigma_j$.

Описанный выше алгоритм реализован в модели ПЛАВ [14]. Генерируемые двумерные случайные поля используются для возмущения вертикального компонента завихренности в модели ПЛАВ. Выполнены численные эксперименты по ансамблевому прогнозу в случае возмущения тенденции и без этого возмущения. Ансамбль прогнозов стартовал с начальных полей ансамблевой системы усвоения данных [15], [16], которые уже содержали разброс. Проведено сравнение разброса ансамбля и среднеквадратичской ошибки среднего ансамблевого прогноза для заблаговременностей от 24 до 240 часов с шагом 24 часа для скорости ветра на разных уровнях для ансамблевого среднесрочного прогноза с возмущением тенденции завихренности и без нее.

В результате анализа возмущений вертикального компонента завихренности была выбрана амплитуда $\sigma = 0,3$. На рисунке 1.6 представлены соответственно результаты сравнения разброса ансамбля и среднеквадратичской ошибки среднего ансамблевого прогноза для меридиональной компоненты скорости ветра на уровне 850 гПа во внетропической части северного полушария и в тропиках. Видно, что возмущение тенденции завихренности приближает разброс к среднеквадратичской ошибке среднего по ансамблю прогноза, таким образом, разработанный нами алгоритм работает и реализованный генератор можно применять и для других переменных.

Таким образом, в рамках данной задачи осуществляется разработка новой негидростатической модели сжимаемой атмосферы, а также развитие методов ансамблевого вероятностного прогнозирования погоды. На этапе 2021 года была создана библиотека для параллельного вычисления операторов

уравнений динамики атмосферы на сетке кубическая сфера. Реализованные операторы используют конечно-разностный SBP-SAT метод, который ранее не применялся в задачах моделирования атмосферы. Данные операторы использовались для реализации динамического ядра негидростатической модели сжимаемой атмосферы (на данном этапе без учета рельефа поверхности). Динамическое ядро испытано на ряде стандартных идеализированных численных экспериментов и показало точность соответствующую текущему мировому уровню. Динамическое ядро эффективно масштабируется как минимум до 4000 ядер, существует потенциал повышения параллельной эффективности. Методы вероятностного прогноза развивались в сочетании с апробированной технологией среднесрочного прогноза погоды на основе модели атмосферы ПЛАВ. Разработан новый параллельный генератор скоррелированных по пространству и времени случайных полей. Применение генератора для возмущения тенденции поля завихренности модели ПЛАВ позволило повысить разброс прогностического ансамбля и приблизить его к уровню ошибки среднего прогноза, что является необходимым условием для качественного вероятностного прогноза. Все цели этапа 2021-го года достигнуты.

Литература

- [1] Staniforth A., Thuburn J. Horizontal grids for global weather and climate prediction models: a review // *Quart. J. Roy. Met. Soc.* — 2012. — Vol. 138. — Pp. 1 – 26.
- [2] Rančić M., Purser R. J., Mesinger F. A global shallow-water model using an expanded spherical cube: Gnomonic versus conformal coordinates // *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society.* — 1996. — Vol. 122, no. 532. — Pp. 959–982. — URL: <https://rmets.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/qj.49712253209>.
- [3] Strand Bo. Summation by parts for finite difference approximations for d/dx // *Journal of Computational Physics.* — 1994. — Vol. 110. — Pp. 47–67.
- [4] Del Rey Fernández David C., Hicken Jason E., Zingg David W. Review of summation-by-parts operators with simultaneous approximation terms for the numerical solution of partial differential equations // *Computers & Fluids.* — 2014. — Vol. 95. — Pp. 171–196. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045793014000796>.
- [5] Gao Longfei, Keyes David. Explicit coupling of acoustic and elastic wave propagation in finite-difference simulations // *GEOPHYSICS.* — 2020. — Vol. 85, no. 5. — Pp. T293–T308.
- [6] O'Reilly Ossian, Petersson N. Anders. Energy conservative SBP discretizations of the acoustic wave equation in covariant form on staggered curvilinear grids // *Journal of Computational Physics.* — 2020. — Vol. 411. — P. 109386.
- [7] Shashkin Vladimir V., Goyman Gordey. Parallel Efficiency of Time-Integration Strategies for the Next Generation Global Weather Prediction Model // *Supercomputing - 6th Russian Supercomputing Days, RuSCDays 2020, Moscow, Russia, September 21-22, 2020, Revised Selected Papers* / Ed. by Vladimir V. Voevodin, Sergey Sobolev. — Vol. 1331 of *Communications in Computer and Information Science.* — Springer, 2020. — Pp. 285–296.
- [8] Thuburn John, Woollings T.J. Vertical discretizations for compressible Euler equation atmospheric models giving optimal representation of normal modes // *Journal of Computational Physics.* — 2005. — 03. — Vol. 203. — Pp. 386–404.
- [9] URL: <http://web.archive.org/web/20170212012614/https://earthsystemcog.org/projects/dcmip-2012/>.

- [10] Numerical solutions of a non-linear density current: A benchmark solution and comparisons / J. M. Straka, Robert B. Wilhelmson, Louis J. Wicker et al. // *International Journal for Numerical Methods in Fluids*. — 1993. — Vol. 17, no. 1. — Pp. 1–22.
- [11] An inherently mass-conserving iterative semi-implicit semi-Lagrangian discretization of the non-hydrostatic vertical-slice equations / Thomas Melvin, Mark Dubal, Nigel Wood et al. // *Quart. J. Roy. Met. Soc.* — 2010. — Vol. 136. — Pp. 799–814.
- [12] Idealized test cases for the dynamical cores of Atmospheric General Circulation Models / C. Jablonowski, P. H. Lauritzen, M. Taylor, R. D. Nair // *A proposal for the NCAR ASP 2008 summer colloquium*. — 2008. — URL: http://www.cgd.ucar.edu/cms/pel/asp2008/idealized_testcases.pdf.
- [13] A standard test set for numerical approximations to the shallow water equations in spherical geometry / D.L. Williamson, J.B. Drake, J.J. Hack et al. // *J. Comput. Phys.* — 1992. — Vol. 102. — Pp. 211–224.
- [14] Многомасштабная глобальная модель атмосферы ПЛАВ: результаты среднесрочных прогнозов погоды / М.А. Толстых, Р.Ю. Фадеев, В.В. Шашкин и др. // *Метеорология и Гидрология*. — 2018. — Т. 11. — С. 90–99.
- [15] Local ensemble transform Kalman filter data assimilation system for the global semi-Lagrangian atmospheric model / A. Shlyueva, M. Tolstykh, V. Mizyak, V. Rogurov // *Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling*. — 2013. — Vol. 28, no. 4. — Pp. 419–441.
- [16] *Mizyak V. G., Rogutov V. S., Alipova K. A.* Development of the new ensemble weather prediction system at the Hydrometcentre of Russia // *Journal of Physics: Conference Series*. — 2021. — Vol. 1740, no. 1. — Pp. 1–6.

Задача 2.2. Развитие вычислительных технологий для моделирования Мирового океана

Разработка новой версии модели динамики океана в z системе координат и реализация криволинейной системы координат на сфере с несимметрично-смещенными полюсами. Разработка программной реализации новой версии модели динамики океана на основе гибридного подхода MPI-OpenMP. Будут проведены эксперименты для оценки масштабируемости динамики океана для последующей оптимизации программного кода на различных вычислительных системах (суперкомпьютеры СКЦ МГУ и МСЦ РАН) в режимах высокого разрешения на небольшие времена интегрирования и в режиме промежуточного разрешения на большие времена интегрирования. Выбор набора параметризаций вертикального перемешивания и их проверка на доступных результатах вихреразрешающего (LES) моделирования и данных измерений. Реализация набора турбулентных замыканий в модели океана, в том числе, перспективных схем вертикального перемешивания, допускающих поддержание турбулентности при любой устойчивой стратификации.

2.2.1 Модель динамики океана в z системе координат

Разработана новая версия модели динамики океана в z системе координат. В модели рассматривается примитивная система трехмерных уравнений крупномасштабной гидротермодинамики океана в приближении Буссинеска и гидростатики, см. [1]. Уравнения включают параметризации горизонтального подсеточного переноса в виде операторов диффузии (с постоянными или зависящими от широты коэффициентами) и вертикального перемешивания, записанного с помощью градиентного приближения. В текущей версии модели используется упрощенное уравнение состояния, предложенное в работе [2]. На поверхности океана рассматривается линеаризованное кинематическое условие для вертикальной компоненты скорости.

Численная модель реализована в криволинейной ортогональной системе координат на сфере и допускает возможность расчетов как на регулярной широтно-долготной сетке, так и на сетках с несимметрично-смещенными полюсами. Используются двухполюсные сетки (см. рис. 2.1), построенные с помощью конформных отображений [3], с произвольным расположением полюсов и сетка, предложенная в работе [4] на основе полуаналитического преобразования, требующего численного интегрирования. В последнем случае сетка симметрична относительно экватора в низких широтах, совпадая с широтно-долготной сеткой в Южном полушарии. Предложен и реализован алгоритм построения сетки [4] на основе замены интегрирования вдоль координатных линий интегрированием функции одного переменного вдоль одного луча. Такой подход не требует дальнейшей интерполяции и привлечения разностных выражений для нахождения метрических коэффициентов.

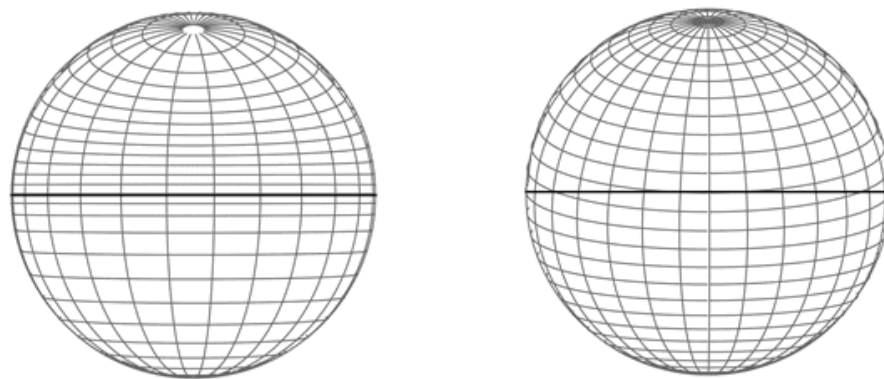


Рис. 2.1: Слева – вычислительная сетка симметричная относительно экватора [4], справа – двухполюсная сетка [3]. Показано Восточное полушарие, жирной линией отмечено положение географического экватора.

Для аппроксимации системы уравнений по пространству применяются конечно-разностные схемы второго порядка точности на разнесенной сетке (сетка "С" по классификации Аракавы). В отсутствие диссипативных членов аппроксимация консервативна и обеспечивает выполнение законов сохранения импульса и энергии в дискретной системе. Для интегрирования уравнений по времени используется полуявный метод, в котором баротропный градиент давления и вертикальная диффузия аппроксимируются неявным методом, а остальные члены (за исключением диссипативных) рассчитываются явной схемой Адамса-Башфорта третьего порядка точности, что обеспечивает устойчивость численной схемы (см., например, оценки в работе [5] для баротропной системы). Для решения эллиптического уравнения относительно отклонения уровня океана от невозмущенной поверхности применяется итерационный стабилизированный метод бисопряженных градиентов. Система линейных уравнений обладает диагональным преобладанием, в качестве предобуславливателя используется несколько итераций метода Якоби. Для переноса пассивных примесей в модели реализован набор монотонных схем до третьего порядка точности [6, 7].

Проведены численные эксперименты для верификации разработанной модели динамики океана в z системе координат. В частности, рассматривались задачи переноса скалярного поля в криволинейной системе координат на сфере [8] и выполнение геострофического баланса в дискретной системе уравнений [8, 9]. Отметим, что результаты показывают значимое уменьшение ошибки в воспроизведении переноса в низких широтах на сетке [4] симметричной относительно экватора, по сравнению с использованием двухполосной сетки [3].

2.2.2 Программная реализация

В рамках проекта разработана программная реализация модели на основе языка C/C++ и гибридного MPI-OpenMP подхода для расчета на параллельных вычислительных системах. Библиотека MPI используется для одномерной или двумерной (по горизонтальным координатам) декомпозиции сеточной области между MPI-процессами. Допускается возможность выделения нескольких OpenMP нитей на один MPI-процесс. Такой подход позволил перекрыть ряд вычислений и MPI обменов данными, в частности при численном решении эллиптического уравнения относительно отклонения уровня океана от невозмущенной поверхности.

Проведены вычислительные эксперименты для оценки времени счета и масштабируемости реализации динамики океана в z системе координат для последующей оптимизации программного кода. Эксперименты проводились на вычислительном кластере ИВМ РАН (Intel Xeon Gold 6230), суперкомпьютерах СКЦ МГУ (“Ломоносов-2”, Intel Xeon E5-2697 v3) и МСЦ РАН (МВС-10П ОП, Intel Xeon Gold 6248 R), а также на суперкомпьютере CSC “Mahti” (AMD Rome 7H12). Горизонтальное разрешение увеличивалось от 2 градусов до 1/16 градуса, а по вертикали задавалось от 20 до 64 уровней. На рисунке 2.2(a) приведено среднее время расчета полной системы уравнений на неделю модельного времени при “грубом” разрешении (2 градуса и 20 уровней) на вычислительных системах различной архитектуры в зависимости от числа задействованных ядер центрального процессора (CPU). Модель грубого разрешения позволяет ускорить расчеты при использовании до ~ 200 CPU ядер на всех системах. На рисунке 2.2(b) показана масштабируемость модели океана при увеличении горизонтального разрешения (от 1/4 до 1/16 градуса) и при 64 уровнях по вертикали на суперкомпьютере CSC “Mahti”, где одному узлу соответствует 128-ядерный процессор AMD Rome 7H12. Программная реализация при разрешении в 1/16 градуса показывает близкое к линейному ускорение до 16384 ядер. Ускорение модели преимущественно ограничено масштабируемостью реализации алгоритма численного решения двумерного эллиптического уравнения. Так для модели с разрешением в 1/16 градуса в расчетах на 64 и более узлах системы, доля решения системы линейных уравнений, возникающей при дискретизации уравнения на уровень, достигает не менее 60 % от общего времени вычислений.

Результаты численных экспериментов показывают возможность дальнейшей оптимизации разработанной программной реализации, в том числе: оптимизации использования кэш памяти и векторных

инструкций при расчете динамики океана на точных сетках при относительно небольшом числе задействованных вычислительных ядер; гибридной MPI-OpenMP реализации для более эффективного внутриузлового масштабирования кода, в особенности для NUMA архитектур; межузловых обменов данными в расчетах с разрешением более чем в $1/4$ градуса и использовании $10^3 - 10^4$ CPU ядер; реализации итерационных алгоритмов решения эллиптического уравнения на уровень.

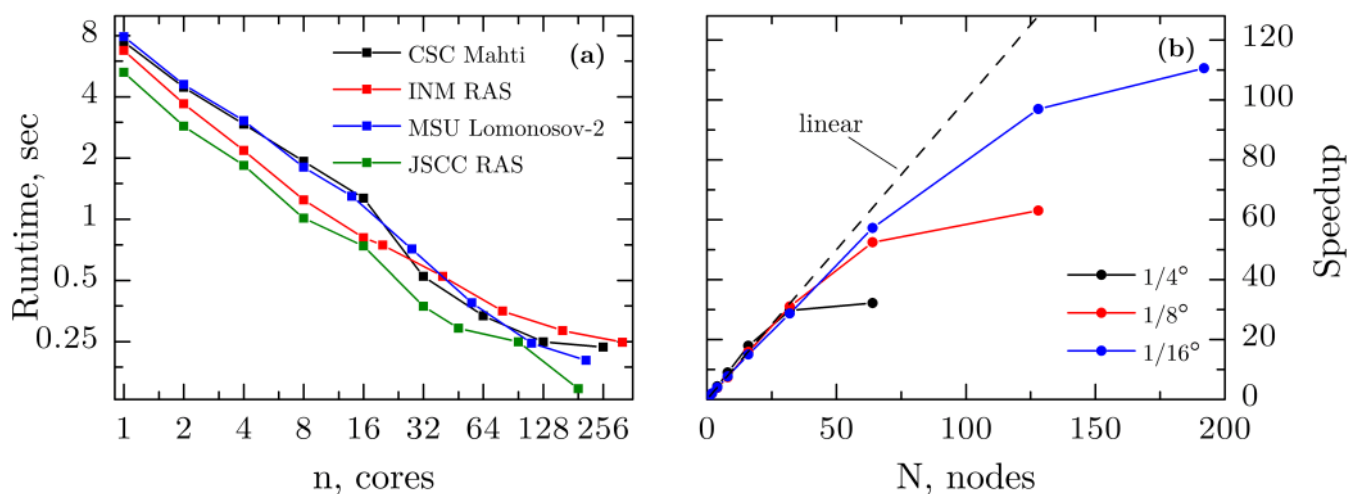


Рис. 2.2: (а) Время счета модели динамики океана при “грубом” разрешении (2 градуса по горизонтали и 20 уровней по вертикали) на суперкомпьютере CSC “Mahti”, вычислительном кластере ИВМ РАН, суперкомпьютере СКЦ МГУ “Ломоносов-2”, суперкомпьютере МСЦ РАН МВС-10П ОП; (б) масштабируемость модели при горизонтальном разрешении от $1/4$ до $1/16$ градуса и 64 уровнях по вертикали на суперкомпьютере “Mahti” в зависимости от числа задействованных вычислительных узлов, на каждом из которых установлен 128-ядерный процессор AMD Rome.

На 2022 г. в проекте запланирована разработка программной реализации динамики океана, блока переноса трассеров на графических процессорах с использованием гибридного подхода MPI-OpenMP-CUDA. На настоящем этапе проекта была разработана MPI-OpenMP-CUDA программная реализация двумерного переноса поля скаляров для графических процессоров (GPU) в криволинейной системе координат на сфере. Проведены предварительные эксперименты на суперкомпьютере СКЦ МГУ “Ломоносов-2” для сравнения времени счета на GPU и центральных процессорах для случая центрально-разностной аппроксимации уравнений переноса-диффузии второго порядка точности. На рисунке 2.3(а) показано ускорение реализации на GPU (Nvidia Tesla K40), по сравнению с временем счета на одном ядре центрального процессора (Intel Xeon E5-2697 v3) на сетках при горизонтальном разрешении от 1 до $1/16$ градуса. На рисунке 2.3(б) приведена масштабируемость программной реализации в зависимости от числа задействованных графических ускорителей.

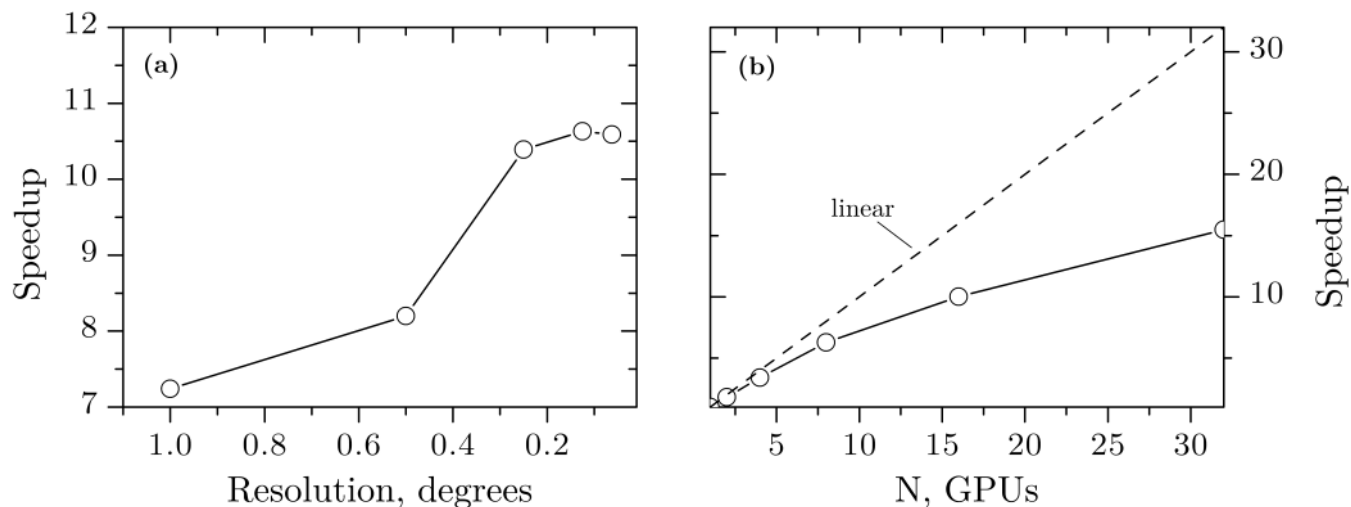


Рис. 2.3: (а) Ускорение GPU реализации, по сравнению с временем счета на одном CPU ядре; (б) Масштабируемость алгоритма двумерного переноса в зависимости от числа графических ускорителей для горизонтального разрешения в $1/8$ градуса.

2.2.3 Параметризации вертикального перемешивания

Процессы турбулентного обмена существенно влияют на динамику верхнего слоя океана, процессы переноса примесей и взаимодействие с атмосферой как на суточных, так и на сезонных и климатических масштабах. На сегодняшний день наибольшее развитие в моделях пограничного слоя атмосферы и океана получили турбулентные замыкания 2-го порядка, в которых рассматриваются прогностические уравнения для вторых одноточечных моментов гидродинамических полей, а моменты более высокого порядка, входящие в эти уравнения, параметризуются. Замыкания подобного типа были предложены для нейтрально стратифицированных течений относительно давно [10], однако они по-прежнему требуют уточнения для верного воспроизведения процессов турбулентного обмена в устойчиво-стратифицированных средах [11, 12]. В связи с вычислительными ограничениями в моделях общей циркуляции океана, как правило, используются замыкания первого порядка [1, 13].

В разрабатываемой в рамках проекта модели океана реализован набор параметризаций вертикального перемешивания различной сложности. В качестве базовой рассматривается двухпараметрическое $k - \varepsilon$ замыкание, включающее прогностические уравнения для кинетической энергии турбулентности k и скорости ее диссипации ε . Двухпараметрические схемы, в которых турбулентные коэффициенты вязкости и диффузии рассчитываются из соотношений подобия, позволяют воспроизвести основные особенности изменения температуры и солености в верхнем слое океана [14, 15]. Замыкание дополнено функциями устойчивости и параметризациями турбулентного числа Прандтля, полученными из замыканий второго порядка, в том числе допускающих поддержание турбулентности при любой устойчивости [16, 17]. Проведены численные эксперименты для проверки двухпараметрической модели и показана возможность воспроизведения вертикальной структуры устойчиво-стратифицированного пограничного слоя, конвективного перемешивания, а также скорости заглубления перемешанного слоя

под действием ветра. Для верификации результатов и задания параметров замыкания использовались данные прямого (DNS, Direct Numerical Simulation) и вихреразрешающего (LES, Large-Eddy Simulation) моделирования, полученные, в частности, с помощью DNS-, LES- модели, развиваемой в НИВЦ МГУ и ИВМ РАН (см., например, [18–20]), а также данные лабораторных экспериментов [21].

В работе [22] показано что двухпараметрические $k - \epsilon$ модели для устойчиво-стратифицированного пограничного слоя приближенно описывают релаксацию к безразмерным градиентам скорости и скаляров, согласованными с локальным обобщением теории подобия Монина-Обухова. Для параметризации вертикального перемешивания в модели океана было реализовано замыкание первого порядка, аппроксимирующее стационарные решения $k - \epsilon$ модели. При условии малости времени релаксации системы, по отношению к шагу дискретизации динамики океана по времени, введенное упрощение представляется достаточным приближением вычислительно затратных двухпараметрических замыканий. Турбулентный масштаб длины в замыкании первого порядка задается по данным прямого численного моделирования устойчиво-стратифицированной турбулентности [12, 18]. Численные эксперименты по воспроизведению заглужения перемешанного слоя под действием ветра (эксперимент Като-Филлипа) демонстрируют, что расчеты с замыканием первого порядка согласуются с известными результатами прямого численного моделирования [23] и лабораторных экспериментов [21], см. рисунок 2.4(a). Для возможности последующего сравнения с океанической компонентой климатической модели ИВМ РАН [13] набор параметризаций вертикального перемешивания был также дополнен эмпирическими замыканиями [24, 25], в которых используются постоянные коэффициенты турбулентной вязкости при нейтральной стратификации и определяются поправки на устойчивость среды в виде зависимостей от градиентного числа Ричардсона.

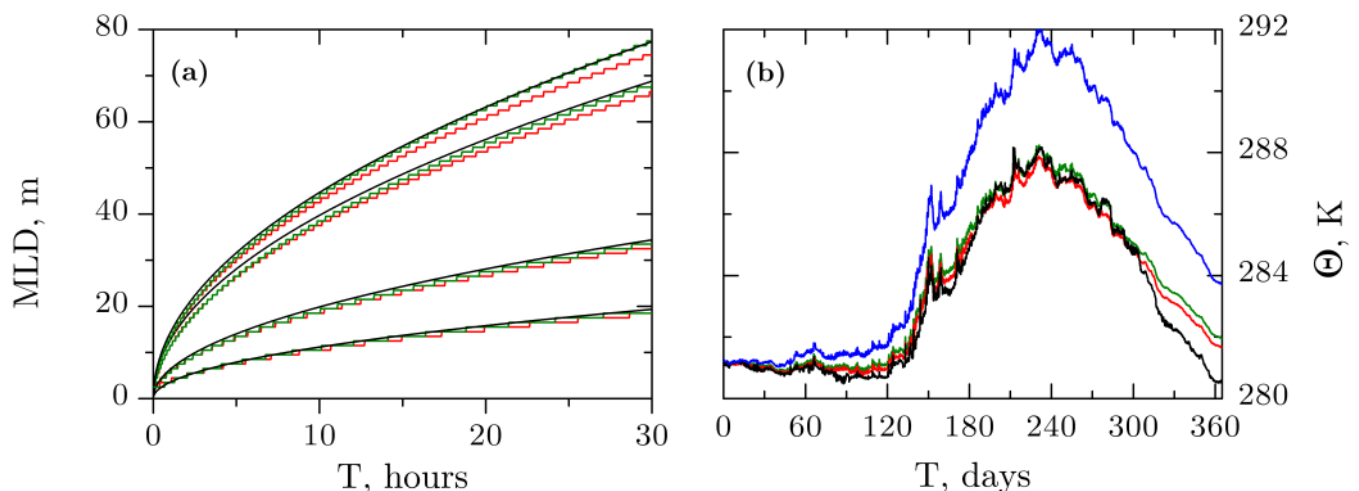


Рис. 2.4: (a) Толщина перемешанного слоя в эксперименте Като-Филлипа для различных значений потока импульса на поверхности и частоты плавучести начального распределения плотности, черная линия – аналитическая зависимость [21] по данным лабораторных экспериментов; (b) приповерхностная температура в северо-восточной части Тихого океана (50.1° N , 114.9° , Ocean Station Papa) за 2015 год по данным измерений (черная линия). Расчеты в одномерной (по вертикали) постановке приведены для двухпараметрической модели (красная линия); замыкания первого порядка, согласованного с $k - \epsilon$ параметризацией (зеленая линия); эмпирического замыкания [25] (синяя линия).

Проведены численные эксперименты в одномерной (по вертикали) постановке с использованием данных измерений в северо-восточной части Тихого океана с различными параметризациями вертикального перемешивания. Показано, что двухпараметрическая $k - \epsilon$ модель и согласованное с ней замыкание первого порядка позволяют воспроизвести изменение температуры в верхнем слое океана (рис. 2.4(b)). Напротив, использование эмпирических параметризаций [24, 25] приводит к значимым ошибкам в воспроизведении приповерхностной температуры, в оценках толщины перемешанного слоя и величины градиента температуры в термоклине.

Литература

- [1] Математическое моделирование Земной системы / Е.М. Володин, В.Я. Галин, А.С. Грицун et al. — М.: МАКС Пресс, 2016.
- [2] Defining a Simplified Yet "Realistic" Equation of State for Seawater / F. Roquet, G. Madec, L. Brodeau, J. Nycander // *J. Phys. Oceanogr.* — 2015. — Vol. 45. — Pp. 2564–2579.
- [3] *Murray R.J.* Explicit generation of orthogonal grids for ocean models // *J. Comp. Phys.* — Vol. 126, no. 2.
- [4] *Madec G., Imbard M.* A global ocean mesh to overcome the North Pole singularity // *Climate Dynamics.* — Vol. 12, no. 6.
- [5] *Walters R.A., Lane E.M., Hanert E.* Useful time-stepping methods for the Coriolis term in a shallow water model // *Ocean Modelling.* — Vol. 28, no. 1-3.
- [6] *Leveque R.J.* High-Resolution Conservative Algorithms for Advection in Incompressible Flow // *SIAM Journal on Numerical Analysis.* — 1996. — Vol. 33, no. 2. — Pp. 627–655.
- [7] *Holland W.R., Chow J.C. and Bryan F.O.* Application of a Third-Order Upwind Scheme in the NCAR Ocean Model // *J. Climate.* — 1998. — Vol. 11, no. 6. — Pp. 1487–1493.
- [8] A standard test set for numerical approximations to the shallow water equations in spherical geometry / D.L. Williamson, J.B. Drake, J.J. Hack et al. // *J. Comp. Phys.* — Vol. 102, no. 1.
- [9] *Galewsky J., Scott R.K., Polvani L.M.* An initial-value problem for testing numerical models of the global shallow-water equations // *Tellus.* — 2004. — Vol. 56A. — Pp. 429–440.
- [10] *Колмогоров А.Н.* Уравнения турбулентного движения несжимаемой жидкости // *Изв. АН ССР. Сер. Физ.* — 1942. — Vol. 6, no. 1-2. — Pp. 56–58.
- [11] Single-column model intercomparison for a stably stratified atmospheric boundary layer / J. Cuxart, A. Holtstg, R. Bearle et al. // *Bound.-Layer Meteorol.* — Vol. 118, no. 2.
- [12] Dissipation rate of turbulent kinetic energy in stably stratified sheared flows / S. Zilitinkevich, O. Druzhinin, A. Glazunov et al. // *Atmos. Chem. Phys.* — 2019. — Vol. 19. — Pp. 2489–2496.

- [13] Simulation of the present-day climate with the climate model INMCM5 / E.M. Volodin, E.V. Mortikov, S.V. Kostykin et al. // *Climate Dynamics*. — 2017. — Vol. 49. — Pp. 3715–3734.
- [14] Kantha L.H., Clayson C.A. An improved mixed layer model for geophysical applications // *J. Geophys. Res.* — 1994. — Vol. 99. — Pp. 25235–25266.
- [15] Reffray G., Bourdalle-Badie R., Calone C. Modelling turbulent vertical mixing sensitivity using a 1-D version of NEMO // *Geosci. Model Dev.* — 2015. — Vol. 8. — Pp. 69–86.
- [16] Островский Л.А., Троицкая Ю.И. Модель турбулентного переноса и динамика турбулентности в стратифицированном сдвиговом потоке // *Изв. АН СССР. Физика атмосферы и океана*. — 1987. — Vol. 23, no. 10. — Pp. 1031–1040.
- [17] A Hierarchy of Energy- and Flux-Budget (EFB) Turbulence Closure Models for Stably-Stratified Geophysical Flow / S.S. Zilitinkevich, T. Elperin, N. Kleeroin et al. // *Bound.-Layer Meteorol.* — 2013. — Vol. 146. — Pp. 341–373.
- [18] Mortikov E.V., Glazunov A.V., Lykosov V.N. Numerical study of plane Couette flow: turbulence statistics and the structure of pressure-strain correlations // *Russ. J. Numer. Analysis Math. Model.* — 2019. — Vol. 34, no. 2. — Pp. 119–132.
- [19] Kadantsev E., Mortikov E., Zilitinkevich S. The resistance law for stably stratified atmospheric planetary boundary layers // *Q.J.R. Meteorol. Soc.* — 2021. — Vol. 147, no. 737. — Pp. 2233–2243.
- [20] Tkachenko E., Debolskiy A., Mortikov E. Intercomparison of subgrid scale models in large-eddy simulation of sunset atmospheric boundary layer turbulence: computational aspects // *Lobachevskii Journal of Mathematics*. — Vol. 42, no. 7.
- [21] Price J.F. On the scaling of stress-driven entrainment experiments // *J. Fluid Mech.* — 1979. — Vol. 90. — Pp. 509–529.
- [22] О моделировании скорости диссипации кинетической энергии турбулентности / Е.В. Мортиков, А.В. Глазунов, А.В. Дебольский et al. // *Доклады Академии Наук*. — 2019. — Vol. 489, no. 4. — Pp. 414–418.
- [23] An improved mixed layer model for geophysical applications / H.J.J. Jonker, M. van Reeuwijk, P.P. Sullivan, E.G. Patton // *J. Fluid Mech.* — 2013. — Vol. 732. — Pp. 150–165.
- [24] Munk W.H., Anderson E.R. Notes on a theory of the thermocline // *J. Marine Res.* — 1948. — Vol. 7. — P. 276–295.
- [25] Pacanowski R., Philander S. Parameterization of vertical mixing in numerical models of tropical oceans // *J. Phys. Oceanogr.* — 1981. — Vol. 11. — Pp. 1443–1451.

Задача 2.3. Разработка эффективных вычислительных технологий для прогнозирования и диагноза состояния атмосферы в городской среде

Анализ и обобщение известных экспериментальных данных и результатов численного моделирования турбулентных течений в городской среде (в том числе, результатов LES-расчетов, проведенных ранее авторами проекта). Проведение дополнительных LES и DNS расчетов стратифицированных турбулентных течений в областях с идеализированной "городской" геометрией. Статистическая обработка данных вихререшающего моделирования. Проведение аналогичных расчетов с 3D RANS моделью. Сравнение результатов различных моделей и выявление дефектов моделей RANS, связанных с использованием распространенных замыканий.

2.3.1 Анализ публикаций по численному моделированию турбулентных течений над поверхностями городского типа и по сравнению таких расчетов с экспериментальными данными

Проведен анализ публикаций по численному моделированию турбулентных течений над поверхностями городского типа и по сравнению таких расчетов с экспериментальными данными. Дополнительно проанализированы данные LES-моделирования турбулентности в городской среде, полученные ранее авторами проекта [1–4]. Был сделан вывод о том, что экспериментальные данные о турбулентных течениях и о турбулентном переносе примесей, полученные при нейтральной стратификации (например, [5, 6]), успешно воспроизводятся при помощи LES и DNS-моделей (см., также, обзор в работе [7]), а LES-модель ИВМ РАН не уступает по эффективному пространственному разрешению и точности результатов численным моделям других авторов (например, [8], [9]; [10]). При этом, RANS-модели

турбулентных течений и турбулентного переноса примесей в среде городского типа очень чувствительны к выбору замыканий (см., например, [7]). Кроме того, модели RANS, используемые для расчетов городской турбулентности, далеко не всегда тщательно проверяются на данных лабораторных измерений или при помощи сравнения с результатами вихреразрешающего моделирования. Так, в обзорной статье [11] утверждается, что доля публикаций по LES-моделированию городской турбулентности не превышает 4% от суммарного количества статей, посвященных численному моделированию турбулентных течений в условия городской застройки.

LES-расчеты городского атмосферного пограничного слоя (АПС) при устойчивой стратификации, представлены в литературе недостаточно широко (помимо результатов авторов проекта [2, 3], такие вычисления проводились в работах [12–15]). Во всех этих расчетах были воспроизведены только режимы с относительно слабой устойчивостью. Препятствием для применения LES-моделей к исследованию устойчивого городского АПС являются сложности с постановкой численного эксперимента и необходимость в более продолжительных расчетах по сравнению со временем интегрирования моделей при нейтральной стратификации (см. [15]). При этом, наибольшие концентрации загрязняющих веществ вблизи поверхности достигаются при слабом ветре и в условиях температурной инверсии (см. обзорную статью [16] о влиянии морфологии городской среды и стратификации на перенос примесей). Это позволяет рассматривать устойчиво-стратифицированный городской АПС как один из наиболее важных случаев, подлежащих исследованию и параметризации.

На основании перечисленного выше, был сделан вывод о необходимости разработки новых способов постановки численных экспериментов с моделями LES и DNS и о целесообразности проведения серии расчетов по воспроизведению установившихся устойчиво-стратифицированных турбулентных течений над поверхностями городского типа. Кроме того, по мнению авторов проекта, необходима тщательная проверка турбулентных замыканий для RANS-моделей городской среды с точки зрения их способности корректно описывать турбулентный перенос скаляров наряду с воспроизведением самого среднего течения.

2.3.2 Трехмерная RANS модель турбулентного течения над поверхностью городского типа

В рамках проекта развивается трехмерная негидростатическая RANS численная модель для воспроизведения стратифицированных турбулентных течений в условия городской застройки. В качестве замыкания в модели используются двухпараметрические замыкания, в которых коэффициенты турбулентной вязкости K_m и диффузии K_h задаются соотношениями подобия:

$$K_m = S_m \frac{E_k^2}{\varepsilon}, \quad (3.1)$$

$$K_h = S_h \frac{E_k^2}{\varepsilon}, \quad (3.2)$$

где S_m и S_h – функции устойчивости. Кинетическая энергия турбулентности и скорость ее диссипации определяются из решения прогностических уравнений:

$$\frac{\partial E_k}{\partial t} + \frac{\partial u_i E_k}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{K_m}{\sigma_k} \frac{\partial E_k}{\partial x_i} = P + B - \varepsilon, \quad (3.3)$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial u_i \varepsilon}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{K_m}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} = \frac{\varepsilon}{E_k} (C_{1\varepsilon} P + C_{3\varepsilon} B - C_{2\varepsilon} \varepsilon), \quad (3.4)$$

где P – сдвиговая генерация энергии, B – генерация или потребление энергии плавучестью. Модель содержит ряд эмпирических констант $C_{i\varepsilon}$, $i = 1, 2, 3$, (см. [17]) и требует определения турбулентных чисел Шмидта σ_k и σ_ε . Отметим, что RANS модель позволяет использовать диагностическое соотношение для расчета скорости диссипации с помощью определения турбулентного масштаба длины l_T :

$$\varepsilon = \frac{E_k^{3/2}}{l_T}. \quad (3.5)$$

Например, для нейтрально стратифицированного течения над плоской поверхностью можно определить $l_T \sim \kappa z$. В модели используется приближение логарифмического слоя для задания граничных условий. В рамках проекта реализованы дополнительные модификации двухпараметрических замыканий, предложенные в литературе (см., например, [18, 19]) для задач обтекания нейтрально-стратифицированным турбулентным течением и основанные на введении эмпирических поправок в уравнениях относительно скорости диссипации ε или турбулентных масштабов (например, времени или длины), а также использовании нелинейных поправок для параметризации потока импульса.

Для аппроксимации по пространству на прямоугольных сетках применяются консервативные конечно-разностные схемы 2-го порядка точности [20]. Для повышения разрешения вблизи зданий допускается измельчение шага сетки вдоль каждой из координат. При интегрировании по времени используются полунявные схемы, а для решения разностного уравнения Пуассона – многосеточный метод.

Проведены численные эксперименты с трехмерной RANS моделью для воспроизведения турбулентного обтекания зданий, в конфигурациях, аналогичных постановкам с LES моделью. Эксперименты приводились как при нейтральной, так и при устойчивой стратификации. Результаты показывают значимую чувствительность к RANS параметризации турбулентных потоков импульса и тепла, в частности к выбору эмпирических параметров в уравнении для скорости диссипации кинетической энергии турбулентности. В случае стратифицированной турбулентности чувствительность к выбору RANS замыкания увеличивается.

2.3.3 LES- и RANS-моделирование нейтрально-стратифицированных турбулентных течений над поверхностью городского типа

Одним из важных блоков крупномасштабных моделей атмосферы являются RANS-модели АПС, описывающие подсеточный турбулентный перенос импульса и скалярных величин по вертикали. В большинстве современных прогностических и климатических моделей любая поверхность, в том числе и городская территория, рассматривается как шероховатая поверхность, совпадающая со сглаженным рельефом местности, а ее мелкомасштабные геометрические особенности (например высотные здания) учитываются только с точки зрения их интегрального воздействия на процессы турбулентного обмена между поверхностью в целом и вышележащей атмосферой. Вместе с тем, наряду с детализацией сеток моделей по горизонтали увеличивается и их вертикальное разрешение таким образом, что на характерную высоту городских зданий может приходиться уже несколько узлов. Возникает необходимость развития моделей RANS, учитывающих динамические и термические воздействия зданий и растительности на турбулентность в виде распределенного по вертикали форсинга и с привлечением специальных замыканий. В таких моделях приземный слой воздуха рассматривается как некоторая пористая среда, создающая объемное сопротивление среднему ветру и способная генерировать турбулентную кинетическую энергию при обтекании зданий.

Первые такие модели появились уже достаточно давно (см., например, [21]) и на настоящий момент насыщены параметризациями разнообразных физических процессов [22–26]. Эти модели в перспективе дадут возможность уточнять метеорологические характеристики внутри городской среды непосредственно у поверхности земли. Кроме того, важным стимулом для развития многослойных RANS-моделей является необходимость прогнозирования концентраций загрязняющих веществ, представленных газообразными примесями и взвесями частиц.

В рамках настоящего проекта мы проверяем работоспособность предлагаемых параметризаций для поверхностей с относительно маленькой плотностью заполнения объектами (на основании того, что при их включении в крупномасштабные прогностические модели, в первую очередь, придется учитывать воздействие самых высотных зданий, количество которых в городе ограничено). Кроме того, мы проверили, как предлагаемые параметризации сочетаются с турбулентным переносом скаляров. Эта задача представляется нам еще более актуальной, чем расчет среднего ветра и его дисперсии в городской среде, поскольку напрямую связана с возможностью прогнозирования концентраций загрязняющих веществ.

В работе [27] на данных LES, полученных из расчетов над массивом кубов, была откалибрована и проверена однопараметрическая $(K - l)$ многослойная модель, основанная на задании отдельных турбулентных масштабов длины внутри слоя шероховатостей: l_m – для вычисления коэффициентов турбулентной вязкости и диффузии ТКЭ и l_ϵ – для вычисления скорости диссипации турбулентной кинетической энергии.

Над слоем шероховатостей при больших числах Рейнольдса и при нейтральной стратификации профиль безразмерной средней скорости ветра можно приблизить логарифмической зависимостью:

$$\frac{U}{U_*} = \frac{1}{\kappa} \ln \left(\frac{z - D_u}{z_{0u}} \right), \quad (3.6)$$

где U_* – скорость трения ($U_* = |\tau_s|^{1/2}$; τ_s – нормированное на плотность воздуха среднее касательное напряжение трения о поверхность в целом); $\kappa \approx 0.4$ – постоянная Кармана; z_{0u} – параметр шероховатости, D_u – высота вытеснения.

Мы предлагаем новый способ построения турбулентного масштаба длины внутри слоя шероховатостей. Этот масштаб получен из размерностных соображений и включает всего один эмпирический коэффициент. Предлагается вычислять этот масштаб, не используя данные о геометрии городской поверхности, которые крайне сложно обобщить и выразить одним числом. Наша гипотеза состоит в том, что безразмерный параметр D_u/h , характеризующий турбулентные масштабы длины над "городским" слоем, характеризует и турбулентные масштабы длины внутри этого слоя, так как, по крайней мере, самые крупные турбулентные флуктуации очевидным образом не могут быть независимыми вне городской среды и внутри нее. Заметим, что параметры z_{0u} (параметр шероховатости поверхности в целом) и D_u (высота вытеснения) являются измеряемыми и могут быть получены по данным метеорологических наблюдений и пульсационных измерений потоков импульса над городской поверхностью.

Ниже представлены результаты численных расчетов с LES-моделью ИВМ РАН [28], которая ранее неоднократно проверялась на задачах моделирования турбулентности над поверхностями городского типа [1–4]. Расчеты выполнены в традиционной постановке, совпадающей, за исключением мелких деталей с расчетами, проведенными в работах [8, 9] и [27]. Помимо моделирования самого течения мы рассчитывали турбулентный перенос скаляра с источником на поверхности.

В качестве RANS-модели использовалась однопараметрическая $K - l$ модель, дополненная параметризацией объемного сопротивления и генерации ТКЭ. Для сравнения мы также приводим результаты расчетов с нашей RANS-моделью при подстановке в нее масштабов длины, предлагаемых в [27].

2.3.4 Постановка численных экспериментов

Здесь мы приводим результаты трех расчетов, выполненных на равносторонней сетке размером $512 \times 256 \times 128$ узлов. Расчеты *EXP1*, *EXP2* и *EXP3* (см., рис. 3.1а) различаются по геометрии и расположению объектов на нижней границе области (кубы и прямоугольные параллелепипеды, имитирующие здания). На этом рисунке: h и $h/2$ – высота объектов (на высоту h приходится 32 шага сетки Δ). Размер всей расчетной области составлял: $L_x \times L_y \times L_z = 16h \times 8h \times 4h$.

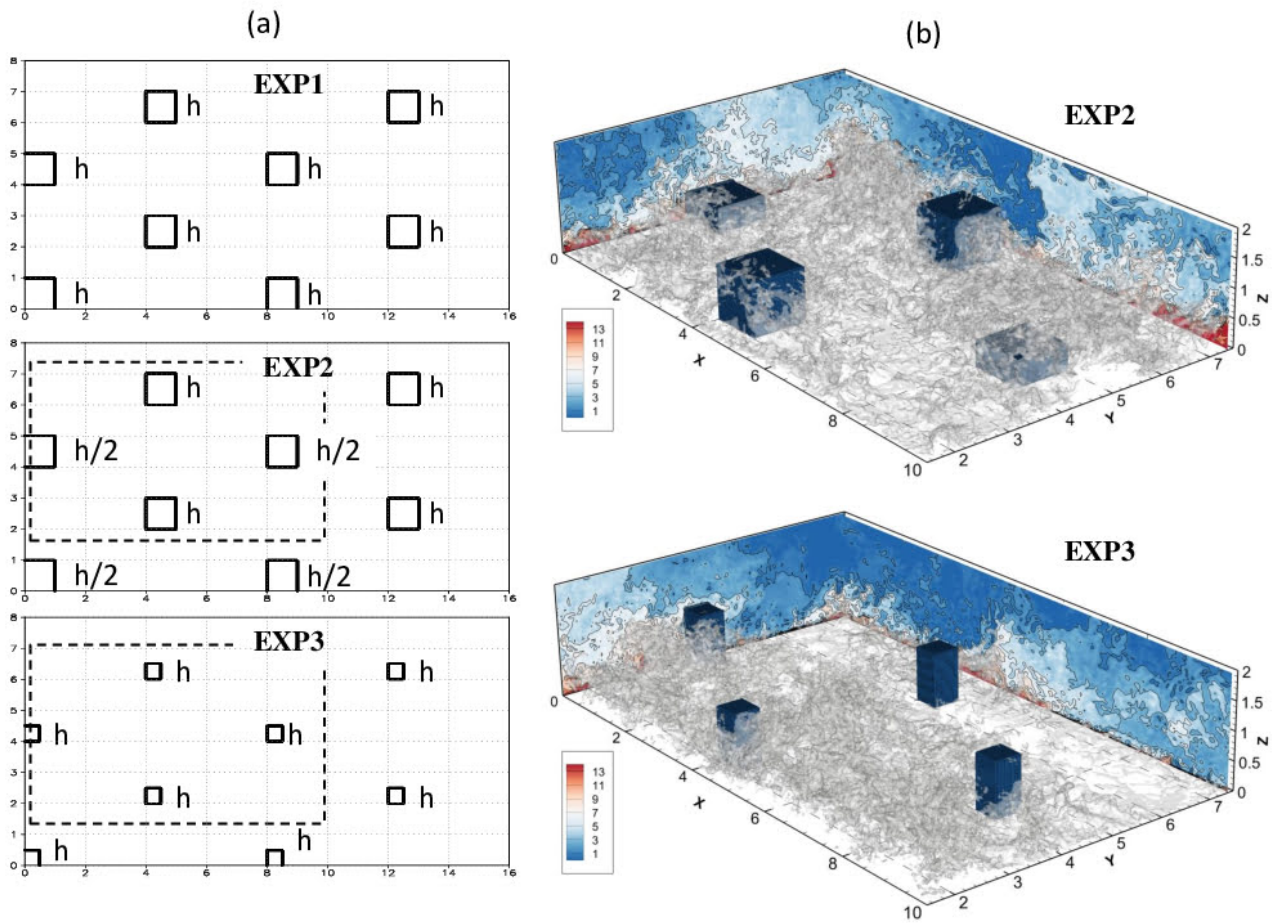


Рис. 3.1: (a) – конфигурация обтекаемых объектов; (b) – визуализация мгновенного состояния течения в EXP2 и EXP3 (фрагменты области, обведенные пунктиром); цветом на сечении показана нормированная концентрация примеси, переносимой турбулентным течением $(S - S_{top})/S_*$; изоповерхность – $(S - S_{top})/S_* = 7$.

Течение разгоняется под воздействием постоянного внешнего градиента давления $F_i^e = -dP/dx = U_*^2/(L_z - h)$, где U_* – заданное значение скорости трения на высоте h в равновесном состоянии. В правую часть уравнения эволюции концентрации скаляра \bar{s} добавляется дополнительный член, компенсирующий тренд средней концентрации, не зависящий от координат. Расчеты проводились сроком на 40 единиц безразмерного времени $\tilde{t} = L_z/U_*$, последние 10 единиц безразмерного времени использовались для осреднения результатов. Для нормировки профилей концентрации скаляра в представленных результатах используется турбулентный масштаб концентрации $S_* = \langle w's' \rangle_h / U_*$, где $\langle w's' \rangle_h$ – полный осредненный по времени и пространству поток скаляра в установившемся состоянии на высоте $z \approx h$.

На рис. 3.1b для демонстрации турбулентной природы течения изображена концентрация $(S - S_{top})/S_*$ (одно из мгновенных состояний) в экспериментах EXP2 и EXP3.

Условия проведения расчетов с одномерными RANS моделями идентичны условиям проведения численных экспериментов с LES.

2.3.5 Результаты LES

На рис. 3.2а изображена средняя скорость течения во всех трех расчетах. Пунктирными кривыми проведены аппроксимации профилей скорости логарифмическими зависимостями (3.6). Высоты вытеснения D_u и параметры шероховатости z_{0u} определялись путем минимизации среднеквадратичного отклонения аппроксимаций от рассчитанных в LES профилей в узлах сетки модели. Из рисунка 3.2а видно, что зависимостью (3.6) можно приблизить рассчитанную среднюю скорость. Данные о величинах параметров D_u и z_{0u} занесены в таблицу 3.1.

	z_{0u}/h	D_u/h
<i>EXP1</i>	2.2E-2	0.7
<i>EXP2</i>	1.76E-2	0.45
<i>EXP3</i>	1.83E-2	0.32

Таблица 3.1: Параметры шероховатости z_{0u} и высоты вытеснения D_u , определенные по рассчитанным средним профилям скорости при разных конфигурациях поверхности.

Безразмерные дефекты концентрации скаляра изображены на рис. 3.2b. На рис. 3.2с изображены потоки концентрации скаляра и импульса, нормированные на соответствующие турбулентные масштабы. Из рис. 3.2с видно, что во всех расчетах достигнуто равновесное состояние, при котором дивергенция средних потоков уравнивает постоянное внешнее воздействие: как для концентрации, так и для импульса потоки имеют линейный вид при $z/h > 1$. Обезразмеренный коэффициент объемного сопротивления $C_D h$ для разных расчетов изображен на рис. 3.2d. Этот коэффициент вычислен по данным LES из баланса средних сил в равновесном состоянии.

2.3.6 Турбулентный масштаб длины для RANS

Масштаб длины D_u (наряду с некоторым средним масштабом высоты зданий $\langle h \rangle$ и расстоянием до поверхности земли z) является одним из определяющих турбулентных масштабов длины, о чем свидетельствуют рассчитанные профили скорости (см. рис. 3.2), близкие к логарифмическим зависимостям (3.6). Действительно, при обезразмеривании градиента скорости с использованием масштаба длины $z' = z - D_u$ мы получаем значение близкое к константе: $\frac{dU}{dz} \frac{z-D_u}{U_*} \approx \frac{1}{\kappa}$, откуда и следует выражение (3.6). В свою очередь, это означает, что масштаб $z' = z - D_u$ характеризует пространственные спектры и коспектры турбулентных флуктуаций над городской средой (см. спектральный анализ таких турбулентных течений в работах [1] и [3]). Поскольку четкой границы между городским слоем и атмосферой над ним нет, мы вправе предположить, что спектральные характеристики турбулентности в двух этих слоях под воздействием возмущений от обтекаемых объектов меняются таким образом, что между ними можно установить подобие, используя масштабы длины D_u , $\langle h \rangle$ и z . При этом D_u выступает как масштаб длины, уже абсорбировавший в себя все геометрические параметры городской среды. В ряде случаев успешным приемом получить один обобщенный масштаб длины из нескольких

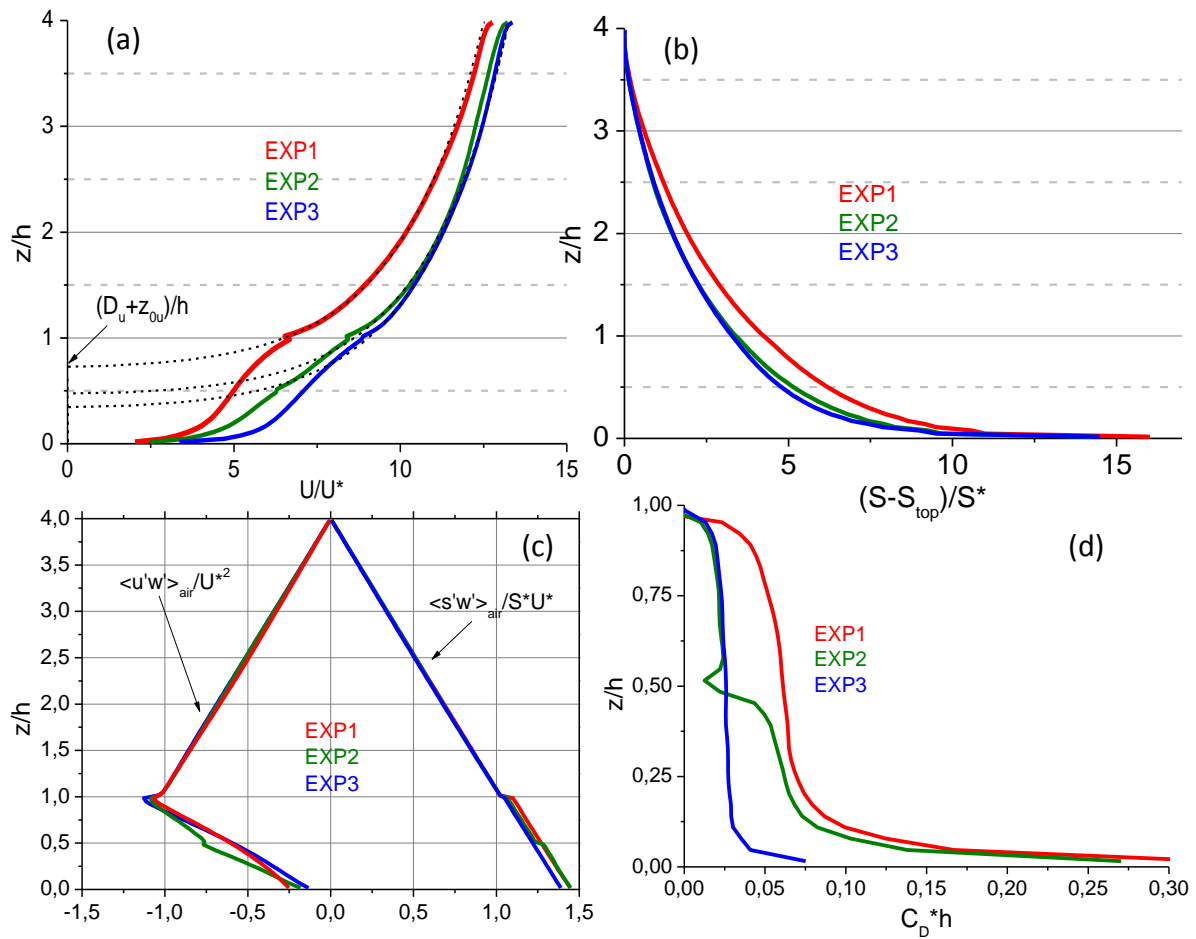


Рис. 3.2: Результаты расчета LES-модели в экспериментах EXP1, EXP2 и EXP3. (a) - нормированная скорость U/U^* , (b) - дефект концентрации скаляра $(S - S_{top})/S^* = 7$, (c) - нормированные потоки импульса и концентрации (осреднение по части области, занятой воздухом), (d) - нормированный коэффициент объемного сопротивления hC_D .

является обратная интерполяция масштабов с некоторыми весовыми коэффициентами. Воспользуемся следующей аппроксимацией:

$$\frac{1}{l_T} = \frac{1}{c_z z} + \frac{1}{c_D D_u}, \quad (3.7)$$

где c_z и c_D – неопределенные функции зависящие от двух безразмерных величин $z/\langle h \rangle$ и $\langle h \rangle/D_u$. Потребуем выполнения следующих свойств:

$$l_T \rightarrow \kappa z, \quad \text{при } z \rightarrow 0, \quad (3.8)$$

и

$$l_T = \kappa(\langle h \rangle - D_u), \quad \text{при } z = \langle h \rangle. \quad (3.9)$$

Ограничение (3.8) означает, что полученный нами масштаб длины должен переходить в обычный пристеночный турбулентный масштаб κz при приближении к поверхности земли, а ограничение (3.9)

обеспечивает непрерывность масштаба длины при переходе из “городского” слоя во внешнее течение над ним.

Условия (3.8) и (3.9) позволяют задать $c_z = \kappa$, а также накладывают ограничение на вид функции $c_D = c_D(z/\langle h \rangle, \langle h \rangle/D_u)$. Для вычисления l_T воспользуемся следующим линейным относительно $z' = (\langle h \rangle - z)/D_u$ выражением для c_D :

$$c_D = \kappa \left[\left(\frac{\langle h \rangle}{D_u} \right)^2 - \frac{\langle h \rangle}{D_u} \right] + c_1 z' f_1 \left(\frac{\langle h \rangle}{D_u} \right), \quad (3.10)$$

где c_1 константа, f_1 функция зависит только от одной переменной $\langle h \rangle/D_u$. Отметим, что в разложении (3.10) первый член определяется ограничением (3.9). Будем рассматривать случай $f_1 \equiv 1$, что позволяет получить выражение для l_T , содержащее всего одну константу c_1 . Зависимость турбулентного масштаба от высоты $z/\langle h \rangle$ при различных значениях c_1 приведена на рисунке 3.3. Функция (3.10) позволяет задать максимум в величине l_T на некоторой высоте от поверхности внутри застройки, $z < h$, и при этом соответствует полиному малой степени от аргументов $z/\langle h \rangle$ и $D_u/\langle h \rangle$.

Определение значений дополнительных параметров c_1 , и в общем случае функции f_1 , требует привлечения данных вихреразрешающего моделирования при различных параметрах застройки городской среды. Далее при задании l_T и сравнении RANS и LES расчетов для простоты будем считать, что $c_1 = 0.4$ (кривая выделена черным цветом на рис. 3.3).

2.3.7 Результаты RANS и их сравнение с данными LES

На рис. 3.4 представлены результаты расчетов при помощи RANS-моделей в сравнении с данными LES (черные кривые). В верхнем ряду рисунков приведены профили обезразмеренной скорости U/U_* , а в нижнем ряду – безразмерные дефекты концентрации скаляра $(S - S_{top})/S_*$. Синими кривыми изображены профили, вычисленные с применением турбулентного масштаба длины, описанного в разделе 2.3.6, а красными кривыми – профили, полученные по модели турбулентных масштабов, предложенной в работе [27]. Сплошными линиями нанесены результаты, полученные по полной модели баланса ТКЭ, включающей генерацию за счет сопротивления формы, а пунктирными кривыми – результаты расчетов, в которых этот член в уравнении баланса ТКЭ опущен. Рисунки расположены по столбцам, согласно геометрии поверхностей.

Вблизи поверхности земли градиенты скорости и скаляра при применении сконструированного нами масштаба растут по абсолютной величине, что является отражением верной асимптотики пристеночного течения. Внутри слоя $0 < z < h$ профили, вычисленные с применением предложенного масштаба l_T имеют правильную “изогнутую” форму, что отражает отсутствие избыточной турбулентной вязкости и диффузии. В большинстве случаев (кроме профиля скорости в EXP2) добавление дополнительной генерации ТКЭ, связанной с турбулентным обтеканием объектов, улучшает результаты моделирования.

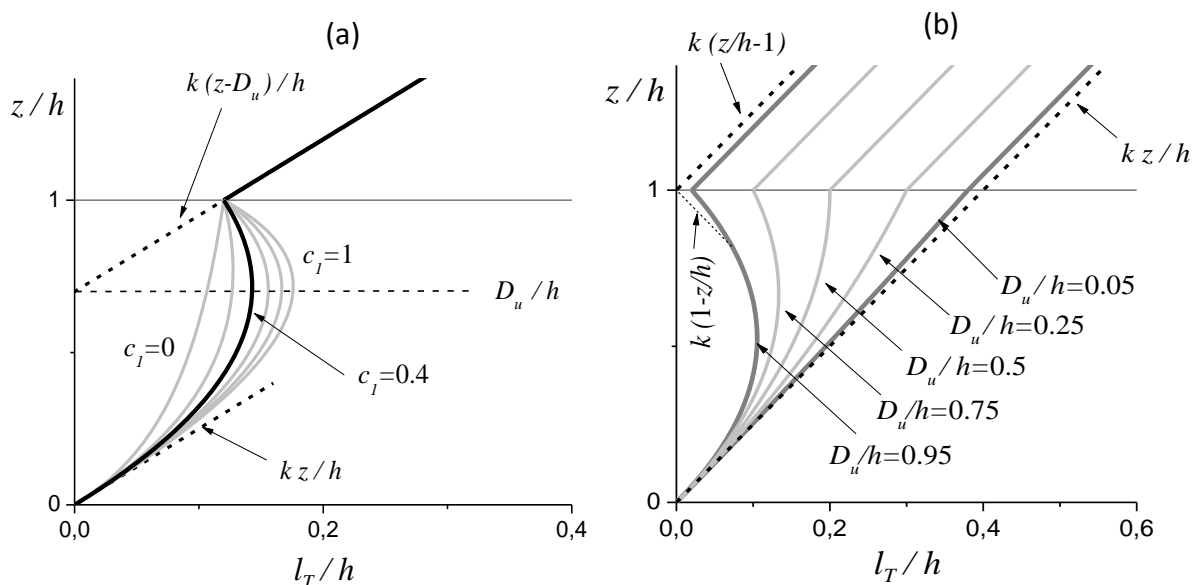


Рис. 3.3: (а) - Вариации турбулентного масштаба l_T (3.10) при изменениях параметра c_1 . Черным цветом выделена кривая при $c_1 = 0.4$. Все расчеты с RANS-моделью, представленные на рис. 3.4 выполнены при этом значении c_1 . (б) - Масштаб l_T при $c_1 = 0.4$ и различных значениях D_u ($l_T \rightarrow \kappa z$ при $D_u \rightarrow 0$).

В модели [27] все профили оказались излишне перемешанными внутри слоя $0 < z < h$, а пристеночной асимптотики вблизи земли не наблюдается. Эти же особенности видны и в оригинальной статье авторов (см. среднюю скорость на рис.12 и рис.14 из работы [27]). Отметим, что здесь мы предъявили более жесткие требования к моделям RANS, во-первых, протестировав их на сравнительно “неплотной застройке”, где дефекты турбулентного замыкания для скорости более заметны на фоне влияния объемного сопротивления, а во-вторых - рассмотрели перенос скаляра, для которого эта объемная сила отсутствует. Проявление асимптотик логарифмического слоя вблизи поверхности в результатах RANS расчетов позволяет надеяться, что при помощи такой модели возможно уточнение расчетов тепло- и влаго-обмена с поверхностью земли на городской территории, при вычислении которого правильный учет универсальных функций теории подобия Монина-Обухова имеет первостепенное значение.

Обе модели неправильно, причем почти одинаково, воспроизвели профиль скорости в EXP2. Поверхность, описываемая RANS, создает большее аэродинамическое сопротивление внешнему течению, чем явно представленная поверхность в расчетах с моделью LES. С точки зрения аппроксимаций (3.6) это

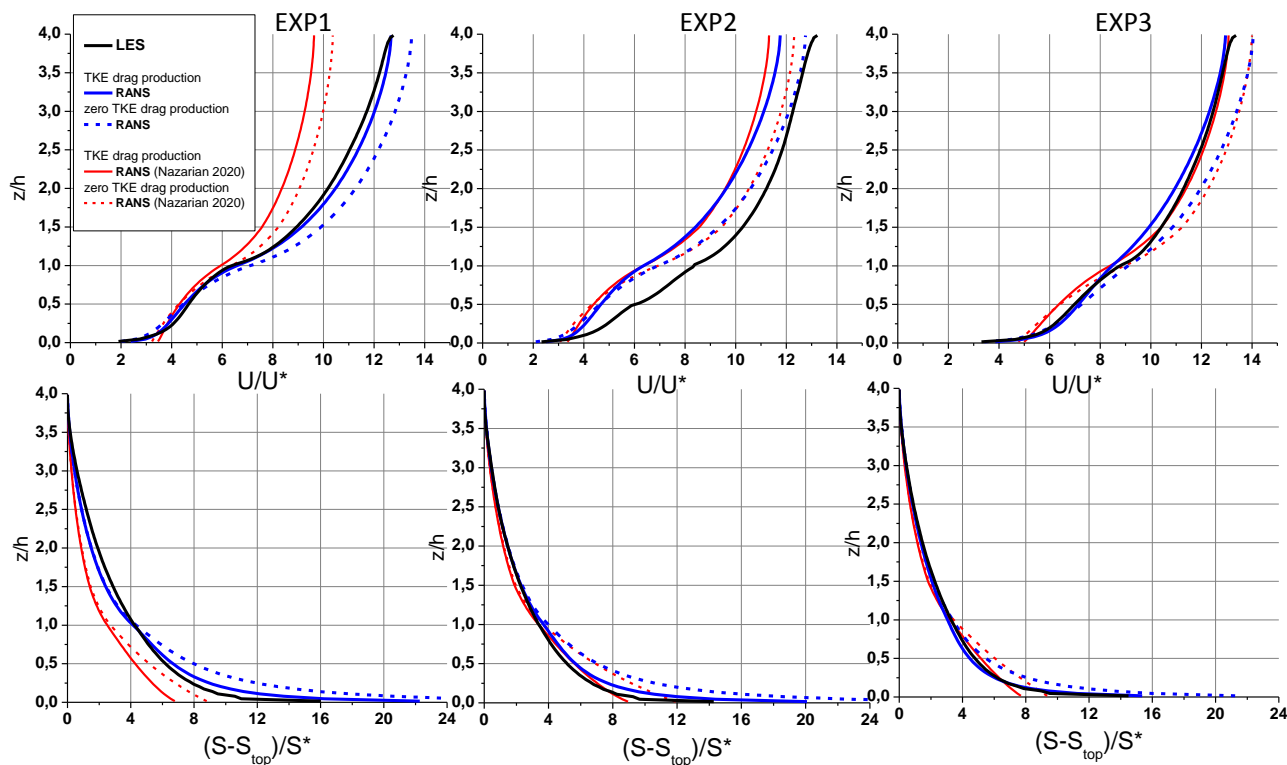


Рис. 3.4: Сравнение результатов LES и RANS. Черные кривые – результаты LES. Синие кривые – профили, вычисленные с применением турбулентного масштаба длины, изображенного на рис. 3.3; красные кривые – по модели турбулентных масштабов из работы [27]. Сплошные линии – RANS с генерацией ТКЭ за счет сопротивления формы; пунктирные линии – без генерации. Рисунки расположены по столбцам в соответствии с конфигурацией поверхности.

означает, что параметр шероховатости z_{0u} модельной поверхности оказался завышенным. Мы предполагаем, что данная проблема тоже может быть решена с привлечением размерностных соображений.

2.3.8 Заключительные замечания по результатам сравнения LES- и RANS- моделирования турбулентности в городской среде

Была предложена новая аппроксимация турбулентного масштаба длины для RANS-моделей. Эта аппроксимация построена из размерностных соображений и существенно ограничивает функциональный вид искомого масштаба. Основной гипотезой являлось предположение о том, что необходимый набор ключевых параметров, имеющих размерность длины, необходимых для обобщения геометрических характеристик городской застройки, содержится в спектральной структуре турбулентного течения над

“городским слоем”. Основным интегральным и измеримым параметром, отражающим воздействие геометрии поверхности в целом на пространственные спектры, является высота вытеснения D_u . Исходя из этой гипотезы, мы построили и проверили параметризацию, не прибегая к анализу геометрии объектов как таковых.

Предложенная параметризация позволяет производить простую настройку моделей RANS, не теряя физически обоснованные асимптотики вблизи поверхности земли и вблизи верхней границы “городского слоя”. Для более тщательной проверки и настройки модели требуется рассмотреть широкий диапазон конфигураций поверхности, для чего потребуются дополнительные вычислительные эксперименты с вихреразрешающими моделями турбулентных течений (LES и DNS).

Результаты различных моделей RANS сравнивались с данными LES-моделирования и между собой. Показано, что предлагаемая нами параметризация турбулентного масштаба на рассмотренных геометриях поверхности не уступает, а в некоторых случаях и превосходит по качеству параметризации, построенные на основе обобщения геометрических параметров городской среды.

На данном этапе при помощи моделей RANS были воспроизведены только нейтрально-стратифицированные течения, однако наибольший интерес представляют течения под воздействием сил плавуемости, характерные для атмосферного пограничного слоя, а также процессы тепло- и влагообмена с городской поверхностью. RANS-моделирование и параметризация стратифицированной турбулентности в городской среде запланированы на следующие этапы выполнения проекта.

Основные результаты данной части работ по проекту представлены в статье [29].

2.3.9 Дополнительные расчеты с вихреразрешающими моделями. Моделирование стратифицированных турбулентных течений над поверхностью городского типа

В ходе выполнения проекта проведена серия численных экспериментов с LES-моделью по воспроизведению установившихся устойчиво стратифицированных турбулентных течений над поверхностями городского типа. Расчеты выполнены для различных конфигураций обтекаемых объектов и при различной статической устойчивости. Получены следующие результаты:

- Предложен и опробован новый алгоритм проведения расчетов с трехмерными нестационарными моделями стратифицированной турбулентности над поверхностями сложной формы, предназначенный для получения равновесного состояния с заданными значениями определяющих параметров. Равновесное состояние достигается за счет вариаций по времени температуры поверхности в ходе расчета. Алгоритм применим как для LES-моделей, так и для прямого численного моделирования (DNS) и может существенно сократить вычислительные затраты при исследованиях турбулентного теплообмена с поверхностью.

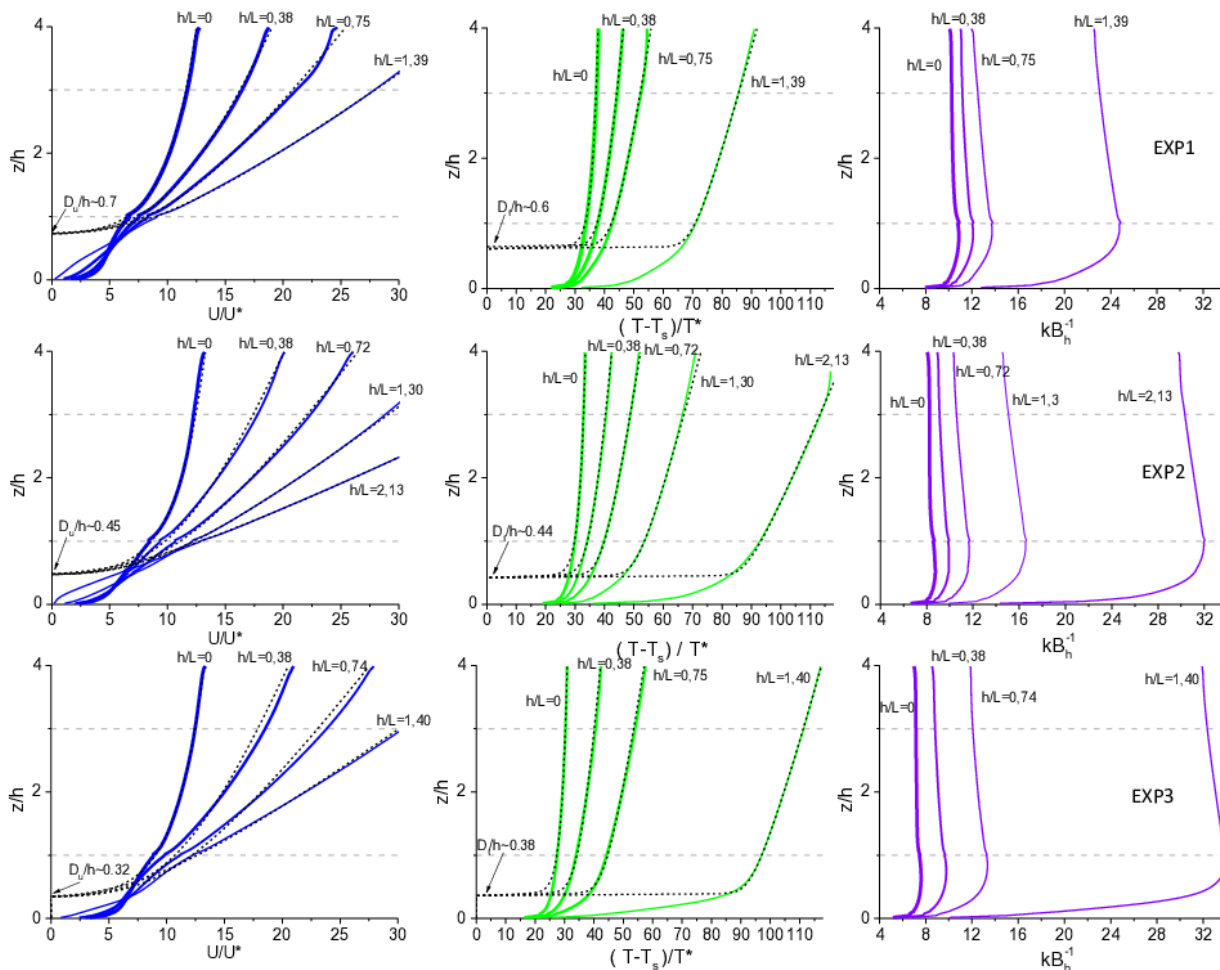


Рис. 3.5: Обезразмеренные профили скорости (слева) и дефекта температуры (по центру). Сплошные кривые – данные численных расчетов. Пунктирные кривые – результаты аппроксимации лог-линейными зависимостями. Справа – обратное число Стентона.

- Подтверждены выводы работ [2] и [3] о том, что аэродинамические свойства “городских” поверхностей не зависят от стратификации (в случае устойчивого АПС). При этом, мы расширили исследованный диапазон значений параметра устойчивости $\langle h \rangle / L$ ($\langle h \rangle$ – средняя высота элементов шероховатости, а L – масштаб Обухова) и провели численные эксперименты, в том числе, над поверхностью с низкой плотностью ее заполнения крупными объектами. Результаты свидетельствуют о том, что в рассмотренных случаях динамический параметр шероховатости z_{0u} определяется геометрическими характеристиками верхнего слоя обтекаемых объектов, а конфигурация объектов вблизи земли и динамика турбулентности в нижнем слое не оказывают существенного влияния на обмен импульсом между поверхностью в целом и внешним течением.

- Показано (см., рис. 3.5), что устойчивая стратификация при больших значениях параметра $\langle h \rangle / L$ вызывает более выраженное снижение эффективности теплообмена с поверхностью, чем это предсказывает теория подобия Момина-Обухова при неизменных свойствах поверхности. Формально этот эффект можно представить как значительное уменьшение термического параметра шероховатости z_{0t} (или увеличение обратного числа Стентона).

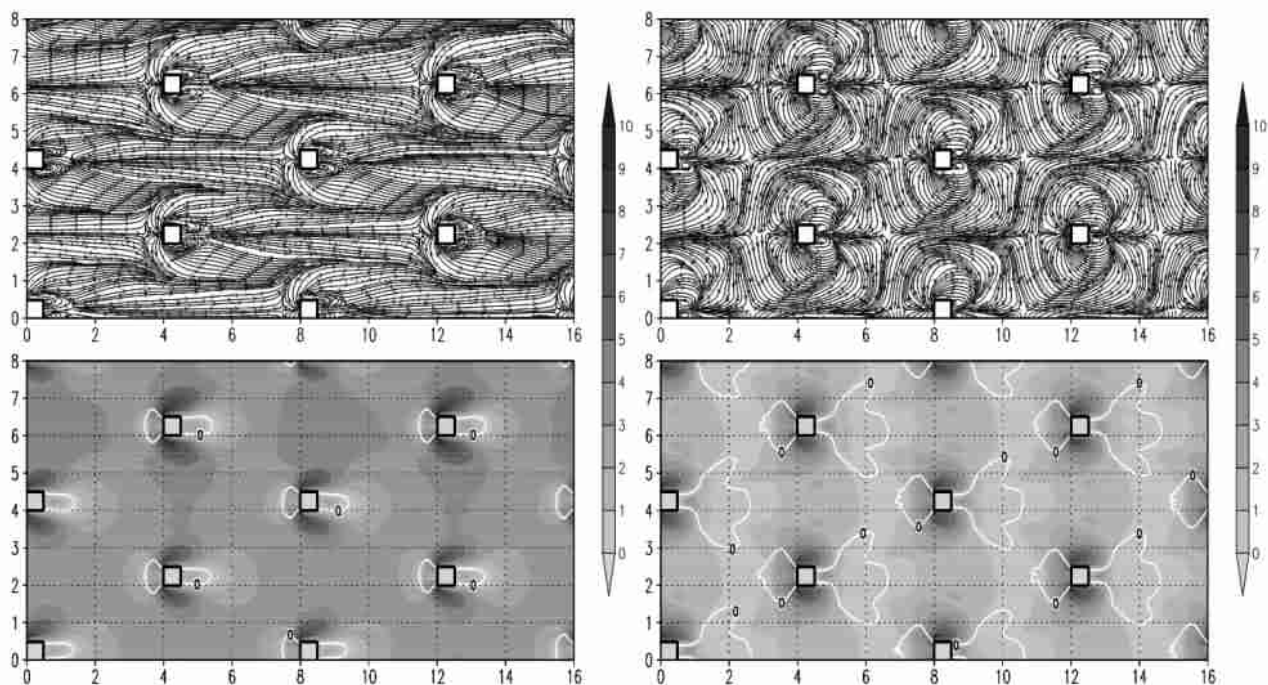


Рис. 3.6: Среднее течение у поверхности в EXP3 (слева - нейтральная стратификация; справа – устойчивая стратификация при $h/L = 1.4$);верху – линии тока, стрелки показывают направление течения; внизу модуль скорости (градациями серого цвета нанесены значения $|\langle \mathbf{u} \rangle_t|/U_*$); белой кривой обведены зоны рециркуляции, в которых средняя продольная скорость отрицательна.

- Обнаружено, что при устойчивой стратификации внутри слоя шероховатостей, вблизи земли существенно возрастает коэффициент объемного сопротивления C_D , что приводит к замедлению среднего течения. Мы связали этот эффект с перестройкой динамики турбулентного обтекания объектов и продемонстрировали, что при $\langle h \rangle / L > 1$ структура среднего течения вблизи земли существенно отличается от структуры течения при нейтральной стратификации (см. рис. 3.6).

Выявленные эффекты существенно влияют на турбулентную диффузию примесей внутри городской среды, а именно – будут приводить к существенному накоплению загрязняющих веществ у поверхности земли при устойчивой стратификации. Современные модели турбулентной диффузии учитывают этот эффект не полностью. Дополнительные исследования, в том числе поиск способов параметризации данного эффекта в рамках RANS-моделей запланированы на следующие этапы выполнения проекта.

По результатам этих исследований подготовлена статья [30].

Литература

- [1] *Glazunov A.V.* Numerical modeling of turbulent flows over an urban-type surface: Computations for neutral stratification // *Izv., Atmos. Oceanic Phys.* — 2014. — Vol. 50, no. 2. — Pp. 134–142.
- [2] *Glazunov A.V.* Numerical simulation of stably stratified turbulent flows over flat and urban surfaces // *Izv., Atmos. Oceanic Phys.* — 2014. — Vol. 50, no. 3. — Pp. 236–245.
- [3] *Glazunov A.V.* Numerical simulation of stably stratified turbulent flows over an urban surface: Spectra and scales and parameterization of temperature and wind-velocity profiles // *Izv., Atmos. Oceanic Phys.* — 2014. — Vol. 50, no. 4. — Pp. 356–368.
- [4] *Glazunov A.V.* Numerical simulation of turbulence and transport of fine particulate impurities in street canyons // *Numerical Methods and Programming.* — 2018. — Vol. 19. — Pp. 17–37.
- [5] *Cheng H., Castro I.P.* Near wall flow over urban-like roughness // *Bound.-Layer Meteorol.* — 2002. — Vol. 104, no. 2. — Pp. 229–259.
- [6] Physical modeling of flow field inside urban street canyons / *Xian-Xiang Li, Dennis YC Leung, Chun-Ho Liu, Kit Ming Lam* // *Journal of Applied Meteorology and Climatology.* — 2008. — Vol. 47, no. 7. — Pp. 2058–2067.
- [7] *Tominaga Yoshihide, Stathopoulos Ted.* CFD simulation of near-field pollutant dispersion in the urban environment: A review of current modeling techniques // *Atmospheric Environment.* — 2013. — Vol. 79. — Pp. 716–730.
- [8] Mean flow and turbulence statistics over groups of urban-like cubical obstacles / *O. Coceal, T.G. Thomas, I.P. Castro, S.E. Belcher* // *Bound.-Layer Meteorol.* — 2006. — Vol. 121, no. 3. — Pp. 491–519.
- [9] *Xie Z., Castro I.P.* LES and RANS for turbulent flow over arrays of wall-mounted obstacles // *Flow, Turbulence and Combustion.* — 2006. — Vol. 76, no. 3. — Pp. 291–312.
- [10] *Li Xian-Xiang, Liu Chun-Ho, Leung Dennis YC.* Large-eddy simulation of flow and pollutant dispersion in high-aspect-ratio urban street canyons with wall model // *Boundary-Layer Meteorology.* — 2008. — Vol. 129, no. 2. — Pp. 249–268.

- [11] A review on the CFD analysis of urban microclimate / Y Toparlar, Bert Blocken, Bino Maiheu, GJF Van Heijst // *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. — 2017. — Vol. 80. — Pp. 1613–1640.
- [12] Boppana VBL, Xie Z-T, Castro IP. Thermal stratification effects on flow over a generic urban canopy // *Boundary-layer meteorology*. — 2014. — Vol. 153, no. 1. — Pp. 141–162.
- [13] Tomas JM, Pourquie MJB, Jonker HJJ. Stable stratification effects on flow and pollutant dispersion in boundary layers entering a generic urban environment // *Boundary-Layer Meteorology*. — 2016. — Vol. 159, no. 2. — Pp. 221–239.
- [14] Shen Zhi, Cui Guixiang, Zhang Zhaoshun. Turbulent dispersion of pollutants in urban-type canopies under stable stratification conditions // *Atmospheric Environment*. — 2017. — Vol. 156. — Pp. 1–14.
- [15] Grylls T., Suter I., van Reeuwijk M. Steady-state large-eddy simulations of convective and stable urban boundary layers // *Bound.-Layer Meteorol.* — 2020. — Vol. 175, no. 3. — Pp. 309–341.
- [16] Review on pollutant dispersion in urban areas-part A: Effects of mechanical factors and urban morphology / Zhengtong Li, Tingzhen Ming, Shurong Liu et al. // *Building and Environment*. — 2021. — Vol. 190. — P. 107534.
- [17] О моделировании скорости диссипации кинетической энергии турбулентности / Е.В. Мортиков, А.В. Глазунов, А.В. Дебольский et al. // *Доклады Академии Наук*. — 2019. — Vol. 489, no. 4. — Pp. 414–418.
- [18] Menter F.R. Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications // *AIAA J.* — 1994. — Vol. 32, no. 8. — Pp. 1598–1605.
- [19] Wright N.G., Easom G.J. Non-linear k-epsilon turbulence model results for flow over a building at full-scale // *Appl. Math. Model.* — 2003. — Vol. 27. — Pp. 1013–1033.
- [20] Fully conservative higher order finite difference schemes for incompressible flows / Y. Morinishi, T.S. Lund, O.V. Vasilyev, P. Moin // *J. Comp. Phys.* — 1998. — Vol. 143. — Pp. 90–124.
- [21] Martilli A., Clappier A., Rotach M.W. An urban surface exchange parameterisation for mesoscale models // *Bound.-Layer Meteorol.* — 2002. — Vol. 104, no. 2. — Pp. 261–304.
- [22] Dupont S., Otte T.L., Ching J.K.S. Simulation of meteorological fields within and above urban and rural canopies with a mesoscale model // *Bound.-Layer Meteorol.* — 2004. — Vol. 113, no. 1. — Pp. 111–158.
- [23] Santiago J.L., Martilli A. A dynamic urban canopy parameterization for mesoscale models based on computational fluid dynamics Reynolds-averaged Navier–Stokes microscale simulations // *Bound.-Layer Meteorol.* — 2010. — Vol. 137, no. 3. — Pp. 417–439.
- [24] A multi-layer radiation model for urban neighbourhoods with trees / E.S. Krayenhoff, A. Christen, A. Martilli, T.R. Oke // *Bound.-Layer Meteorol.* — 2014. — Vol. 151, no. 1. — Pp. 139–178.

- [25] Parametrization of drag and turbulence for urban neighbourhoods with trees / E.S. Krayenhoff, J.-L. Santiago, A. Martilli et al. // *Bound.-Layer Meteorol.* — 2015. — Vol. 156, no. 2. — Pp. 157–189.
- [26] A multi-layer urban canopy meteorological model with trees (BEP-Tree): Street tree impacts on pedestrian-level climate / E.S. Krayenhoff, T. Jiang, A. Christen et al. // *Urban Climate.* — 2020. — Vol. 32. — P. 100590.
- [27] Nazarian N., Krayenhoff E.S., Martilli A. A one-dimensional model of turbulent flow through “urban” canopies (MLUCM v2. 0): updates based on large-eddy simulation // *Geosci. Model Dev.* — 2020. — Vol. 13, no. 3. — Pp. 937–953.
- [28] Large-eddy simulation and stochastic modeling of Lagrangian particles for footprint determination in the stable boundary layer / A. Glazunov, Ü. Rannik, V. Stepanenko et al. // *Geosci. Model Dev.* — 2016. — Vol. 9, no. 9. — Pp. 2925–2949.
- [29] Glazunov A., Debolskiy A., Mortikov E. Turbulent length scale for multilayer RANS model of urban canopy and its evaluation based on Large-Eddy Simulations // *Supercomputing Frontiers and Innovations*, to appear. — 2021.
- [30] Глазунов А.В., Мортиков Е.В., Дебольский А.В. О возможном механизме блокировки турбулентного теплообмена с поверхностью при сильной устойчивости // *Boundary Layer Meteorology*, submitted. — 2021.

Задача 2.4. Разработка модели динамики морского льда

Построение неравномерной триангуляции расчетной области Арктики со сгущением сетки в области с потенциально высокой сплоченностью льда, в узких проливах и у берега. Реализация конечно-элементной квази-монотонной схемы Тейлора-Галеркина с коррекцией потоков для численного решения уравнения переноса скаляров и ее тестирование. Реализация схемы численного интегрирования уравнения динамики (mEVP) и ее тестирование в связке с решателем уравнения переноса. Разработка эффективной системы интерполяции сеточных данных.

2.4.1 Триангуляция Арктического региона

Одна из существенных особенностей ледового покрова Северного Ледовитого океана – сильная неоднородность, когда достаточно протяженные области ровного льда разделяются узкими зонами с относительно низкой концентрацией льда (иногда это даже области открытой воды). При этом именно в этих областях происходит наиболее интенсивное разрушение льда (так называемое торошение), на которое тратится существенная часть кинетической энергии дрейфа льда. Поэтому так важно прямое или параметрическое описание этих особенностей. Образование областей интенсивного торошения льда приурочено зонам с большими значениями сдвига или дивергенции поля скорости (опыт расчетов Н.Г. Яковлева по моделям FEMAО [1] и FESOM [2]). Такие зоны наблюдаются, в частности, вблизи берегов. В численной модели динамики льда на берегу обычно задается условие прилипания, что и обеспечивает в случае генерального дрейфа вдоль берега большие значения сдвига скорости. Вполне естественное условие непротекания льда через береговой контур приводит к большой дивергенции в случае генерального дрейфа льда по нормали к берегу. Пространственные масштабы таких областей относительно невелики – физически это может быть масштаб среднего размера льдины, что для Центральной Арктики составляет примерно 300м [3].

Поскольку области больших значений дивергенции и сдвига скорости дрейфа льда априори известны – это области дивергенции и сдвига ветра, и области у берегов – можно поставить задачу оптимизации

построения сетки. В качестве первого приближения рассматривались только области у берега и в узких проливах, чтобы описать соответствующие пограничные слои, и области с высокой концентрацией льда. Очевидно, что в областях с низкой концентрацией льда процессы торошения не происходят, в таких областях движение льда подобно течению идеального газа, и можно использовать более грубую сетку.

Исходя из этих соображений был разработан набор процедур для построения сетки по информации о контуре берегов и априорных свойствах морского льда – сплоченности, толщине и скорости дрейфа. В качестве иллюстрации приводится построение сетки по данным о контуре берега и сплоченности льда для всего Северного Ледовитого океана и части северных морей. Очевидно, что этот набор процедур может быть применен для построения сетки в любом другом районе Мирового океана. Более того, в будущем нами рассматривается возможность динамического перестроения сетки в процессе решения.

В качестве расчетной области для модели морского льда выбран Арктический регион, находящийся выше 45 широты. Контур берегов взяты с помощью пакета GMT [4] из открытой базы данных GSHHG [5] береговой линии. В качестве отправной точки используется самое грубое доступное разрешение. Несмотря на это, как показала практика, в представленных контурах берега присутствуют несогласованности, выражающиеся в самопересечении отрезков границы берегов. Еще одним недостатком является присутствие узких заливов и смежных отрезков берега, образующих слишком острые углы. Для устранения этого недостатка применяется следующая методика сглаживания, которая преследует основную цель: можно удалять некоторые вершины в ломанной береговой линии, но нельзя их двигать. Данное требование является необходимым, во-первых, для написания автоматизированной программы сглаживания береговой линии для произвольного “плохого” контура, во-вторых, оставляет возможность добавления более детальной части ломанной берега из той же базы данных между существующими вершинами. Выполняется следующая процедура с несколькими заданными параметрами:

1. Если длина отрезка превышает заданную величину, то его конечная точка удаляется;
2. Если два смежных отрезка образуют угол, меньший наперед заданной величины, то вершина угла удаляется;
3. Зафиксируем вершину и натуральное число n . Если среди n следующих отрезков есть отрезок, приближенный к выбранной точке на расстояние, меньшее фиксированной величины, то этот отрезок и все предыдущие точки (вплоть до фиксированной точки) удаляются;
4. Каждый остров, состоящий из менее 5 отрезков удаляется.

Также на начальном этапе построения сетки были удалены устья рек, а расчетная область замыкалась по водной границе, проходящей вдоль 45 широты. После описанных модификаций, данные ломанной береговой линии подавались на вход процедуре построения квазиравномерной триангуляции пакета Ani-2D AFT [6], разработанного в ИВМ РАН. Результат работы процедуры представлен на рис. 4.1.

Квазиравномерная триангуляция имеет явный недостаток – в низких широтах льда практически не бывает, избыточное количество узлов в таких местах приводит к лишним вычислениям. Поэтому была применена процедура сгущения сетки в области с потенциально высокой сплоченностью льда. Для этого использовались данные по спутниковым измерениям за последние 10 лет [7] и специальный функционал пакета Ani-2D AFT, позволяющий задать желаемый локальный размер треугольника в конкретной точке. Граница льда с высокой и низкой сплоченностью является довольно резкой. Для того, чтобы сгладить границу, спутниковые данные по сплоченности льда в узлах прямоугольной сетки преобразовывались с помощью дискретного оператора Лапласа

$$a_{i,j}^{\text{new}} = a_{i,j} - \frac{a_{i-1,j} + a_{i+1,j} + a_{i,j-1} + a_{i,j+1} - 4a_{i,j}}{4}.$$

Минимальная возможная концентрация считается равной $a_{\min} = 0.05$. Максимальный размер треугольника задавался в 5 раз больше минимального $d_{\max} = 5d_{\min}$. Если $a(x, y)$ - значение билинейного интерполянта сплоченности в точке (x, y) , то желаемый размер треугольника в этой точке $d(x, y)$ вычисляется по формуле

$$d(x, y) = d_{\max} + \frac{d_{\min} - d_{\max}}{1 - a_{\min}} \cdot (a(x, y) - a_{\min}).$$

Результирующая сетка со сгущением в область с высокой потенциальной сплоченностью льда для $d_{\min} \approx 10$ км представлена на рис. 4.2.



Рис. 4.1: Квазиравномерная триангуляция



Рис. 4.2: Триангуляция со сгущением

Построенная расчетная сетка состоит из 329 670 узлов, 642 387 треугольников и 17 049 граничных ребер. Численные решения задач подобных размерностей требуют использования параллельной архитектуры суперкомпьютера.

Более подробно с описанным процессом построения триангуляции можно ознакомиться в работе [8].

2.4.2 Схемы переноса типа Тейлора-Галеркина

Одной из фундаментальных задач вычислительной физики является построение эффективной и точной схемы численного решения уравнения переноса. Не является исключением и задача переноса характеристик морского льда, снега и талых луж на поверхности снега и льда в разрабатываемой в ИВМ РАН конечно-элементной модели эволюции морского льда Северного Ледовитого океана.

Обычно большое внимание уделяется описанию кромки льда. Помимо этого, важна высокая точность при описании переноса различных категорий льда по толщине (массы и сплоченности льда в каждой категории), поскольку такие характеристики морского льда, как прочность, зависят от функции распределения льда по градациям толщины, а толщина – нелинейная функция массы и сплоченности. В свою очередь, прочность льда влияет на особенности дрейфа льда и на формирование участков открытой воды и торосов. Воспроизведение статистики доли открытой воды имеет важное значение для моделирования массо- и энергообмена между океаном и атмосферой, а воспроизведение статистики торосов важно для задач навигации. Кроме того, особенности поля дрейфа льда таковы, что скорость меняется на относительно небольших пространственных масштабах, фактически – на ширине третины, то есть на масштабах 10-1000м [9]. Спутниковые данные показывают наличие протяженных особенностей (LKF, Linear Kinematic Features), вдоль которых отмечаются высокие значения завихренности, сдвига и дивергенции скорости дрейфа [10]. Воспроизведение статистики LKF является одной из современных задач моделирования ледового покрова Арктики [11] и также накладывает высокие требования на качество схемы переноса. В работе рассматривается один класс схем переноса, используемый в рамках метода конечных элементов – схемы Тейлора-Галеркина, в том числе и с процедурой коррекции потоков. Именно такая схема используется в хорошо себя зарекомендовавшей модели FESIM 2.0 [2]. Между тем, FESIM 2.0 не дает пользователю возможность выбора более точных схем, таких, например, как двушаговые схемы Тейлора-Галеркина третьего и четвертого порядка по времени. Используемая в FESIM 2.0 схема с точки зрения устойчивости имеет ограничение по числу Куранта 0.6 (оценка получена для равномерной сетки и билинейных базисных функций [12]), при использовании сильно неравномерных сеток с локально-высоким пространственным разрешением это создает большие проблемы. В случае адаптивной триангуляции эта оценка должна проверяться. Представляется, что повышение предела устойчивости схемы переноса может иметь важное значение при использовании полной модели дрейфа морского льда в реальных задачах прогноза, когда время счета становится принципиальным. Задачей этапа была реализация и тестирование набора параллельных солверов для расчета 2D переноса на сфере (в том числе и в случае аквапланеты). Делается ревизия различных методов типа Тейлора-Галеркина для интегрирования уравнения переноса, записанного в дивергентном виде. Для построения сеток и программной реализации солверов использовались пакеты Ani2D, Ani3D [6] и INMOST [13], разработанные в ИВМ РАН. Код этих библиотек открыт и распространяется свободно. Для проверки различных схем использовался набор тестов переноса скаляра на сфере [14]. Особый интерес вызывает тест с дивергентным полем скорости, что характерно для морского льда. Важное значение имеет вычислительная эффективность схемы переноса, так как для морского льда,

аппроксимированного 5-ю категориями по толщине, с 5-ю уровнями по толщине, число переносимых двумерных полей составляет как минимум 50 (масса льда, сплоченность, профиль энтальпии льда по толщине, масса снега, температура поверхности, концентрация талых луж – все в каждой из категорий по толщине льда). Увеличение разрешения по толщине и по числу категорий увеличивает число переносимых полей. Таким образом, задача о переносе характеристик льда становится существенной с точки зрения вычислительных ресурсов. Ситуация еще более усложняется при описании биохимии морского льда – число переносимых двумерных полей может быть как минимум 200.

Временная дискретизация

Рассмотрим уравнение переноса скаляра в двумерном пространстве. Это уравнение выражает закон сохранения первого момента. Запишем уравнение переноса скаляра в потоковой форме. Переносимый скаляр m будем называть в дальнейшем массой.

$$\frac{\partial m}{\partial t} + \nabla \cdot (m\mathbf{u}) = 0. \quad (4.1)$$

Здесь \mathbf{u} – некоторое известное поле скоростей, которое зависит от времени и пространства. Рассмотрим различные явные временные дискретизации уравнения (4.1), основанные на разложении Тейлора. Выбор явных временных дискретизаций в конечно-элементных моделях льда обусловлен малой сложностью обращения массовой матрицы и возможностью применения классической версии метода коррекции потоков [15] для получения положительного глобально консервативного решения.

Одношаговый метод Тейлора-Галеркина 2-го порядка. С помощью разложения функции массы в ряд Тейлора и использования равенства (4.1) в предположении постоянного поля скорости \mathbf{u} в пределах шага временного интегрирования [12] получается метод Тейлора-Галеркина (TG2) второго порядка аппроксимации по времени:

$$m^{n+1} = m^n - \Delta t \nabla \cdot (m^n \mathbf{u}) + \frac{\Delta t^2}{2} \nabla \cdot (\mathbf{u} \nabla \cdot (m^n \mathbf{u})). \quad (4.2)$$

Последнее слагаемое в (4.2) можно трактовать как диффузию. Оператор диффузии не является отрицательно определенным в слабой постановке. Это означает, что данная схема не создает искусственную диссипацию.

Двухшаговый метод Тейлора-Галеркина 2-го порядка. Также рассматривается двухшаговая вариация стандартного метода Тейлора-Галеркина (4.2), которая записывается в виде [12]:

$$\begin{aligned} m^{n+\frac{1}{2}} &= m^n - \frac{\Delta t}{2} \nabla \cdot (m^n \mathbf{u}), \\ m^{n+1} &= m^n - \Delta t \nabla \cdot (m^{n+\frac{1}{2}} \mathbf{u}). \end{aligned} \quad (4.3)$$

Двухшаговый метод Тейлора-Галеркина 3-го и 4-го порядка. Рассмотрим двухшаговый метод вида

$$\begin{aligned} m^{n+\frac{1}{2}} &= m^n - \frac{1}{3} \Delta t \nabla \cdot (m^n \mathbf{u}) + \alpha \Delta t^2 \nabla \cdot [\mathbf{u} \nabla \cdot (m^n \mathbf{u})], \\ m^{n+1} &= m^n - \Delta t \nabla \cdot (m^n \mathbf{u}) + \frac{\Delta t^2}{2} \nabla \cdot [\mathbf{u} \nabla \cdot (m^{n+\frac{1}{2}} \mathbf{u})]. \end{aligned} \quad (4.4)$$

Подстановкой первого равенства (ТТГ3) во второе можно убедиться, что этот двухшаговый метод является аппроксимацией уравнения (4.1) с третьим порядком по времени при любом значении параметра α . В книге [12] приводятся рассуждения о том, что выбор $\alpha = \frac{1}{9}$ делает фазовую скорость двухшаговой схемы идентичной одношаговой и минимизирует амплитудную ошибку. Рассмотрим теперь двухшаговый метод вида

$$\begin{aligned} m^{n+\frac{1}{2}} &= m^n + \alpha \Delta t \nabla \cdot (m^n \mathbf{u}) + \beta \Delta t^2 \nabla \cdot [\mathbf{u} \nabla \cdot (m^n \mathbf{u})], \\ m^{n+1} &= m^n + \Delta t \nabla \cdot (m^{n+\frac{1}{2}} \mathbf{u}) + \gamma \Delta t^2 \nabla \cdot [\mathbf{u} \nabla \cdot (m^{n+\frac{1}{2}} \mathbf{u})]. \end{aligned} \quad (4.5)$$

В [12] показано, что выбор

$$\begin{aligned} \alpha &= 0.1409714, \\ \beta &= 0.1160538, \\ \gamma &= 0.3590284 \end{aligned}$$

дает аппроксимацию уравнения (4.1) четвертого порядка точности по времени.

Вычислительная сложность одной итерации двухшагового метода третьего (4.4) и четвертого (4.5) порядка больше по сравнению с одношаговым методом (4.2) в связи с необходимостью решения системы линейных уравнений с массовой матрицей дважды.

Метод коррекции потоков. Все схемы интегрирования хотя бы второго порядка аппроксимации по времени подвержены численным осцилляциям. В блоке динамики морского льда недопустимо появление отрицательных значений массы. Для того, чтобы бороться с этим недостатком, явные схемы дополняются коррекцией потоков [15].

Все описанные ранее схемы (4.2), (4.3), (4.4), (4.5) высокого порядка по времени после пространственной дискретизации принимают вид

$$\mathbf{M} \Delta \mathbf{m}^H = \mathbf{r}, \quad (4.6)$$

с массовой матрицей M , вектором правой части \mathbf{r} и вектором разности узловых значений массы $\Delta \mathbf{m}^H = \mathbf{m}^H - \mathbf{m}^n$. В дополнение к соответствующей схеме высокого порядка строится схема Лернера - схема первого порядка с лампированной массовой матрицей (M_L) и правой частью с искусственной диффузией

$$M_L \Delta \mathbf{m}^L = \mathbf{r} + c_d (M - M_L) \mathbf{m}^n. \quad (4.7)$$

Локальная разница решений по схеме высокого и низкого порядка определяет численные потоки, которые создает треугольный элемент. Затем решение по схеме низкого порядка в каждом узле корректируется с учетом потоков от смежных треугольников. Описанный метод обеспечивает выполнение условия $m_i^L \leq m_i^{n+1} \leq m_i^H$ в каждом узле расчетной сетки, где m_i^L, m_i^H — решение в i -ом узле, полученное по схемам низкого и высокого порядка, а m_i^{n+1} — решение, полученное с помощью коррекции потоков. Это гарантирует положительность массы, в случае положительности решения, полученного по схеме низкого порядка (в нашем случае выбор $c_d = 0.5$ обеспечил положительность). Однако, на практике возможны осцилляции небольшой амплитуды. Также метод коррекции потоков обладает свойством глобальной консервативности при наличии этого свойства у выбранной схемы высокого порядка.

Тесты схем переноса

В данной работе реализован набор численных экспериментов, описанный в [14]. Он включает в себя два типа начальных распределений и три типа реверсивных полей скорости. Первый тип рассматриваемого начального поля — Gaussian Hills (GH) — две бесконечно гладкие Гауссовы поверхности, расположенные симметрично относительно нулевого меридиана. Второй профиль — Slotted Cylinders (SC) — два разрывных профиля массы, также расположенные симметрично.

Также представлены два типа реверсивных бездивергентных и одно дивергентное поле скорости согласно [14]. В случае использования бездивергентных полей доступно точное решение, которое совпадает с начальным распределением массы, что позволяет количественно сравнить различные схемы численного интегрирования. Дивергентное поле используется для проверки выполнения свойства глобальной консервативности и положительности решения. Первое распределение реализует бездивергентную пару вихрей в западном и восточном полушарии (ND1). Второе распределение отличается от первого добавлением зональной компоненты скорости, которое переносит массу вдоль всей параллели за время интегрирования (ND2). Третье распределение — дивергентное поле скорости с накачкой массы к экватору (D).

В первом тесте реализовано распределение массы GH и двухвихревое бездивергентное поле скорости ND1. Проверялось свойство сходимости решения по шагу сетки. Зависимость ошибки решения в от размера треугольника расчетной сетки представлена на рис.4.3.

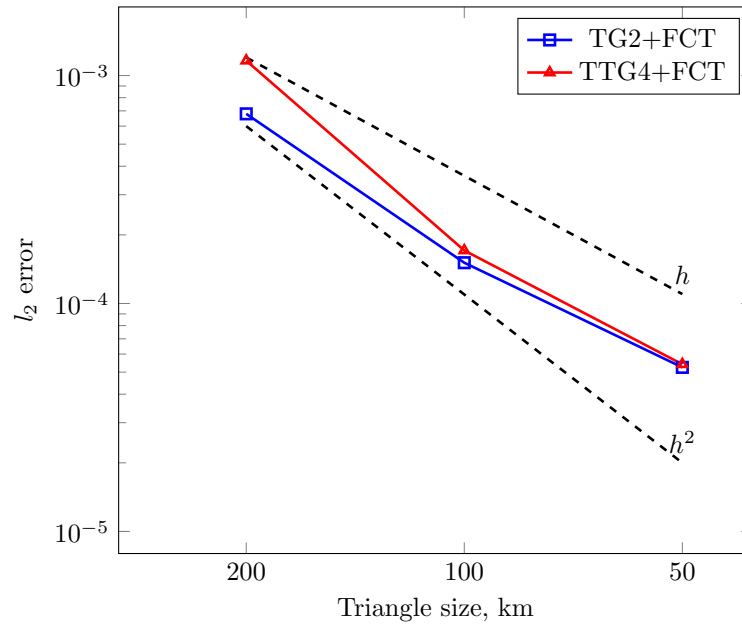


Рис. 4.3: GH+ND1, сходимость решения по шагу сетки.

Второй тест проводился в конфигурации SC+ND2. Зависимость ошибки разных временных схем в зависимости от числа Куранта представлена на рис. 4.4.

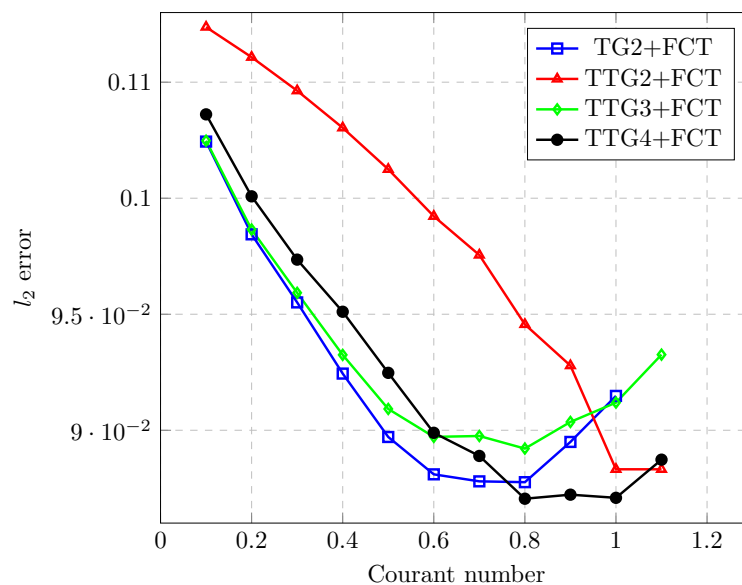


Рис. 4.4: SC + ND2, интегральные ошибки при разных числах Куранта.

Третий тест проводился в конфигурации SC+D, на нем проверялось выполнение свойство положительности схемы с коррекцией потоков. Эволюция минимального значения решения для схемы с коррекцией потоков и без представлена на рис.4.5.

Выводы

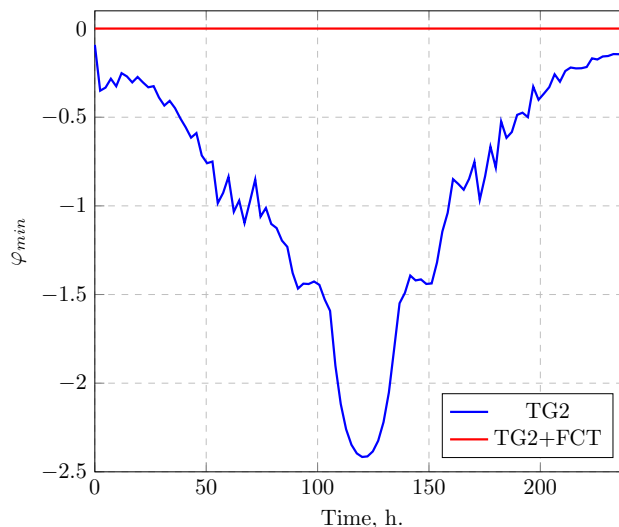


Рис. 4.5: SC + D, эволюция минимального значения массы.

По результатам проделанной работы можно сделать следующие выводы:

1. Использование процедуры коррекции потоков улучшает устойчивость схемы по времени и обеспечивает неотрицательность решения. Качественно решения выглядят более реалистично, отсутствуют осцилляции.
2. Схемы высокого порядка TTG3+FCT и TTG4+FCT демонстрируют лучшую устойчивость (при числах Куранта вплоть до 1.1-1.2), в то время как схема TG2+FCT теряет это свойство при числах Куранта, превосходящих 1. Схема TTG2+FCT более устойчива, чем TG2+FCT, однако значительно проигрывает в точности всем остальным при малых числах Куранта.
3. При малых числах Куранта все схемы дают сравнимый результат, за исключением TTG2+FCT, которая значительно менее точна. При числах Куранта, больших 0.7, схема TTG4+FCT дает самый точный результат. Схема TTG2+FCT сравнима по точности с TTG4+FCT при больших числах Куранта, однако менее устойчива.
4. Согласно проведенным численным экспериментам, можно рекомендовать использовать схему TG2+FCT при малых числах Куранта, меньших 0.5, как вычислительно наименее затратную. В случае возникновения больших чисел Куранта, больших 0.7, наиболее предпочтительна схема TTG4+FCT, как наиболее точная и устойчивая. Вычислительная сложность TTG4+FCT превосходит TG2+FCT, однако повышенная точность и надежность с точки зрения устойчивости оправдывает эти затраты. Такая ситуация реализуется на практике в случае достаточно мелких сеток или при сгущении сетки в области особенности решения или береговой линии.
5. Реализованный параллельный код имеет примерно линейную масштабируемость по числу процессоров, исследований при очень большом числе процессоров в данной работе не проводилось в силу того, что используемая сетка обладает невысоким разрешением по пространству. Возможно,

в реалистичных конфигурациях, при большом числе узлов, потребуется дополнительная оптимизация параллельного кода, однако это будет зависеть также от эффективности параллельной реализации блока расчетов скоростей дрейфа льда. На 128 процессорах код показал ускорение примерно 65.

6. При использовании пространственной аппроксимации стандартным методом Галеркина с линейными на треугольнике базисными и тестовыми функциями, на практике описанные методы дают сходимость по шагу сетки порядка $h^{1.8}$, что было продемонстрировано в этой работе.

Более подробно ознакомиться с постановкой задачи и полученными результатами можно в статье [16].

2.4.3 Метод численного решения уравнения баланса импульса (mEVP)

Наиболее сложным вопросом при решении задачи о дрейфе ледового покрова является выбор реологии и подбор эффективного численного метода. Последние года некоторым стандартом при численном моделировании крупномасштабного дрейфа морского льда была так называемая эллиптическая вязко-пластичная реология Хиблера [17], когда лед рассматривался как гранулированная двумерная среда, напряжения в которой можно описать по вязко-пластичному закону, причем пластичный режим течения физически соответствует процессу торошения льда (что в терминах двумерного течения означает увеличение его толщины).

Для решения задачи были предложен ряд численных методов, однако, как показала практика, из-за сильной нелинейности задачи фактически все достаточно точные методы сводились либо к вариантам метода Пикара, либо метода Ньютона, либо вариантам метода простой итерации. Немногочисленные теоретические исследования показали, что вязко-пластичная реология приводит к неустойчивости решения по Ляпунову ([18], [19]), что накладывает свои сложности как при численном решении, так и при сравнении с данными наблюдений. Появление высокоточных спутниковых данных по дрейфу льда поставило под сомнение справедливость реологии Хиблера, поскольку были выделены так называемые Линейные Кинематические особенности LKF ([10], рис.4.6), которые не воспроизводились в рамках традиционного вязко-пластичного подхода. Для преодоления кажущегося несоответствия были разработаны более физически обоснованные реологии морского льда – Упруго-Пластичная анизотропная ([20]) и Максвелловская упруго-хрупкая ([21]). Однако, как было показано, традиционная реология способна воспроизводить LKF при выполнении двух условий: точной схемы переноса, способной сохранять узкие области относительно низкой сплоченности льда, и точной схемы решения нелинейных уравнений дрейфа льда.

Поэтому при разработке динамического ядра мы остались в рамках приближения эллиптической вязко-пластичной реологии, тем более, что для этой задачи недавно был опубликован тест, который позволяет нам сделать вывод о качестве разработанной модели в сравнении с ведущими мировыми моделями типа CICE 5.0, LIM 3 ICON-O и FESIM 2.0 [11].

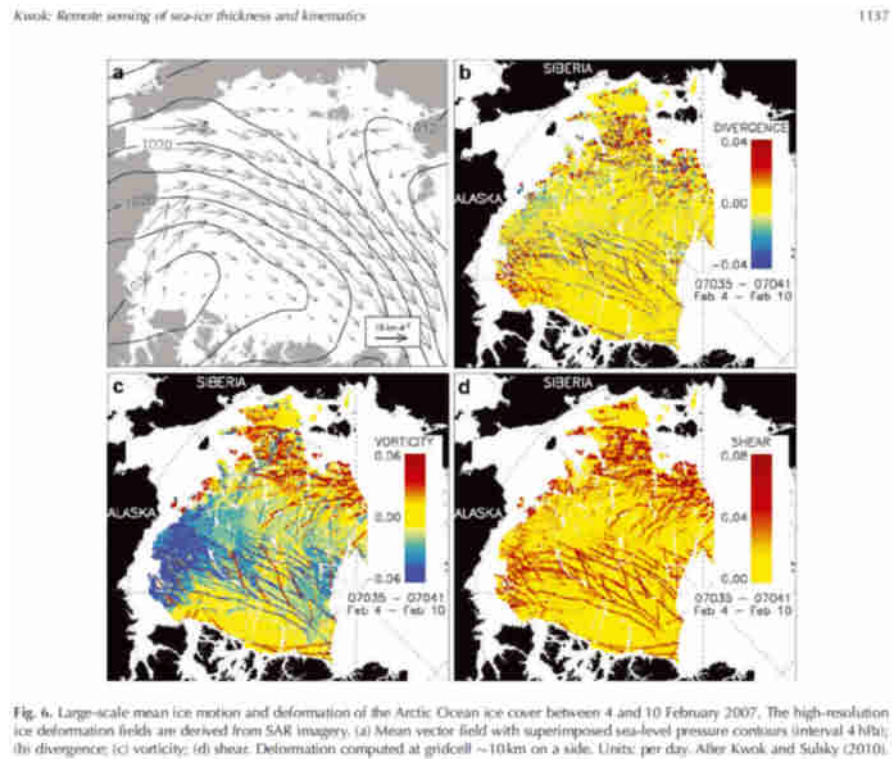


Рис. 4.6: Крупномасштабный средний дрейф льда и деформации между 4 и 10 февраля 2007. а) среднее векторное поле течений, наложенное на давление атмосферы на уровне моря; б) дивергенция; в) Завихренность; д) сдвиг ([10]).

На данный момент предложено множество методов численного интегрирования уравнений баланса импульса морского льда с вязко-пластичной реологией [22], [23] и их оптимизаций [24]. Наиболее распространен метод mEVP [23], который и лег в основание разрабатываемого динамического блока.

Система двумерной динамики морского льда с вязко-пластичной реологией представляет из себя закон баланса импульса и два уравнения переноса – сплоченности и массы льда [17]

$$\left\{ \begin{array}{l}
 m(\partial_t + f\mathbf{k} \times) \mathbf{u} = a\tau - C_d a \rho_0 (\mathbf{u} - \mathbf{u}_0) |\mathbf{u} - \mathbf{u}_0| + \mathbf{F} - mg \nabla H \\
 \tau = C_a \rho_a |\mathbf{u}_a| \mathbf{u}_a \\
 F_l = \frac{\partial \sigma_{kl}}{\partial x_k}, \quad l = 1, 2 \\
 \sigma_{kl}(\mathbf{u}) = \frac{P}{2(\Delta + \Delta_{min})} \left[(\dot{\epsilon}_d - \Delta) \delta_{kl} + \frac{1}{e^2} (2\dot{\epsilon}_{kl} - \dot{\epsilon}_d \delta_{kl}) \right] \\
 \sigma_{1(2)} = \sigma_{11} \pm \sigma_{22}, \quad \varepsilon_{1(2)} = \sigma_{11} \pm \sigma_{22} \\
 \dot{\epsilon}_{kl} = \frac{1}{2} (\partial_k u_l + \partial_l u_k); \quad \dot{\epsilon}_d = \dot{\epsilon}_{kk} = \dot{\epsilon}_{11} + \dot{\epsilon}_{22} \\
 \dot{\epsilon}_s = ((\dot{\epsilon}_{11} - \dot{\epsilon}_{22})^2 + 4\dot{\epsilon}_{12}^2)^{1/2}; \quad \Delta = (\dot{\epsilon}_d^2 + \frac{1}{e^2} \dot{\epsilon}_s^2)^{1/2} \\
 P_0 = p^* h e^{-C(1-a)}; \quad P = \frac{P_0 \Delta}{\Delta + \Delta_{min}} \\
 \partial_t a + \nabla \cdot (\mathbf{u}a) = 0, \quad a \leq 1 \\
 \partial_t m + \nabla \cdot (\mathbf{u}m) = 0 \\
 m = ah\rho,
 \end{array} \right. \quad (4.8)$$

где \mathbf{k} – единичный вертикальный вектор, f – параметр Кориолиса, m, a, h – масса, сплоченность и высота льда, $\mathbf{u}, \mathbf{u}_0, \mathbf{u}_a$ – скорости льда, воды и воздуха, ρ, ρ_0, ρ_a – плотности льда, воды и воздуха, σ_{ij} – компоненты тензора напряжений, $\dot{\epsilon}_{ij}$ – компоненты тензора скоростей деформации, $e = 2$ – параметр эллиптичности, ξ, η – объемные и сдвиговые вязкости, P – давление, H – уровень океана.

Суть mEVP-подхода [23] для решения уравнений динамики состоит в применении явной схемы Эйлера по времени отдельно по главным компонентам тензора напряжений и скоростям:

$$\begin{aligned}
 \alpha(\sigma_1^{p+1} - \sigma_1^p) &= \frac{P_0}{\Delta^p + \Delta_{min}} (\dot{\epsilon}_1^p - \Delta^p) - \sigma_1^p \\
 \alpha(\sigma_2^{p+1} - \sigma_2^p) &= \frac{P_0}{(\Delta^p + \Delta_{min}) \cdot e^2} \dot{\epsilon}_2^p - \sigma_2^p \\
 \alpha(\sigma_{12}^{p+1} - \sigma_{12}^p) &= \frac{P_0}{(\Delta^p + \Delta_{min}) \cdot e^2} \dot{\epsilon}_{12}^p - \sigma_{12}^p \\
 \beta(\mathbf{u}^{p+1} - \mathbf{u}^p) &= -\mathbf{u}^{p+1} + \mathbf{u}^n - \Delta t \mathbf{f} \times \mathbf{u}^{p+1} + \\
 &+ \frac{\Delta t}{m} [\mathbf{F}^{p+1} + a\tau + C_d a \rho_0 (\mathbf{u}_0^n - \mathbf{u}^{p+1}) |\mathbf{u}_0^p - \mathbf{u}^p| - mg \nabla H^n].
 \end{aligned} \quad (4.9)$$

Здесь индекс p соответствует локальной итерации, а n – номер глобального шага по времени. Главное преимущество такого подхода – отсутствие необходимости решать систему линейных уравнений на каждой итерации. Такое свойство получается за счет использования лампированной (диагонализированной матрицы, путем суммирования по строке) матрицы масс после применения метода Галеркина для пространственной аппроксимации.

Параллельный код, реализующий описанный mEVP метод, тестировался в связке с реализованными схемами переноса (для переноса массы и сплоченности льда) на простом тесте в квадратной модельной области [11]. Интерес данного теста заключается в том, что описанные форсинги возбуждают линейные

кинематические особенности (LKF, linear kinematic features). Результат работы программы в данной конфигурации представлен на рис. 4.7. На рисунке видны выделенные направления – это и есть LKF. LKF локализуются в областях с низкой сплоченностью морского льда и проявляются при высоком разрешении сетки. Подобные распределения получаются и в других известных мировых моделях морского льда, как показано в [11].

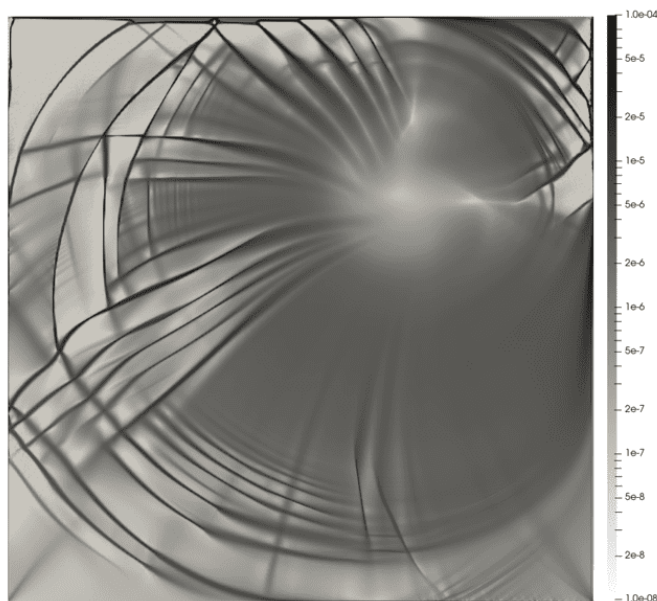


Рис. 4.7: Результат моделирования деформации сдвига в логарифмическом масштабе.

Полученные результаты свидетельствуют о достаточно высоком качестве модели, что, в частности, обеспечивается высоким качеством схемы переноса характеристик льда.

2.4.4 Эффективная система считывания и интерполяции сеточных данных

Для эффективной работы модели в качестве динамического блока в системе прогноза состояния морского льда необходимо иметь эффективную библиотеку процедур параллельного считывания и интерполяции геофизических данных измерений и прогноза (данных по состоянию атмосферы, морского льда и океана). Для имитации работы такой системы были выбраны данные прогноза системы ТОРАЗ. При этом выполненную работу можно рассматривать также как вариант динамического даунскейлинга (проекции на меньшие пространственные масштабы) результатов прогноза системы ТОРАЗ – либо любой другой системы.

Большинство геоданных распространяется в формате netCDF на прямоугольной сетке с несколькими уровнями. Функционал стандартной библиотеки netCDF допускает параллельное считывание из netCDF-файла и запись в него. Данные ТОРАЗ-4 располагаются на прямоугольной сетке в стереографической проекции. Каждый процессор считывает только необходимую ему часть прямоугольной

сетки, что оптимизирует дальнейшие вычисления по времени и используемой памяти. Результат параллельной билинейной интерполяции скалярных полей представлены на рис. 4.8 и рис. 4.9.

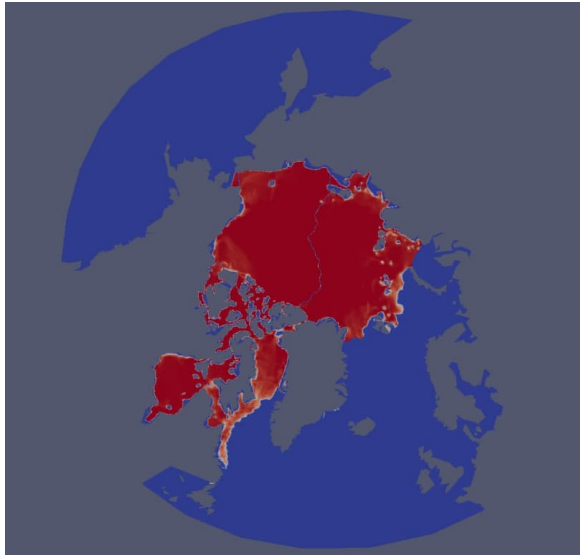


Рис. 4.8: Распределение сплоченности морского льда в 00:00 1 апреля 2020 г. по данным ТОРАЗ4, проинтерполированное на модельную сетку

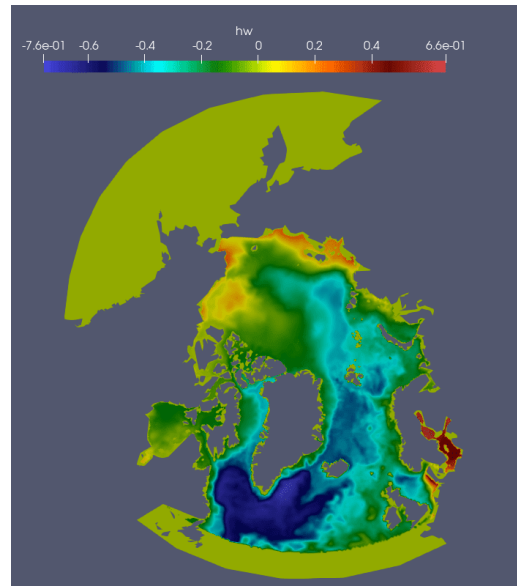


Рис. 4.9: Распределение уровня океана в 00:00 1 апреля 2020 г. по данным ТОРАЗ4, проинтерполированное на модельную сетку

Более подробно с системой считывания и интерполяции геоданных на модельную сетку можно ознакомиться в работе [8].

Литература

- [1] Hydrodynamical and biogeochemical spatiotemporal variability in the White Sea: A modeling study / Ilya Chernov, P. Lazzari, Alexey Tolstikov et al. // *Journal of Marine Systems*. — 2018. — 06. — Vol. 187. — Pp. 23–35.
- [2] Finite-Element Sea Ice Model (FESIM), version 2 / Sergey Danilov, Qiang Wang, Ralph Timmermann et al. // *Geoscientific Model Development*. — 2015. — 06. — Vol. 8.
- [3] Rothrock D., Thorndike A. Measuring the sea ice floe distribution // *Journal of Geophysical Research*. — 1984. — 08. — Vol. 89.
- [4] The Generic Mapping Tools Version 6 / Paul Wessel, Joaquim Luis, Leonardo Uieda et al. // *Geochemistry, Geophysics, Geosystems*. — 2019. — 09. — Vol. 20.
- [5] Wessel Paul, Smith Walter. A global, self-consistent, hierarchical, high-resolution shoreline database // *Journal of Geophysical Research*. — 1996. — 04. — Vol. 101. — Pp. 8741–8743.
- [6] Danilov Alexander. Unstructured tetrahedral mesh generation technology // *Computational Mathematics and Mathematical Physics*. — 2010. — 02. — Vol. 50. — Pp. 139–156.
- [7] NOAA/NSIDC Climate Data Record of Passive Microwave Sea Ice Concentration, Version 2 / W. Meier, F. Fetterer, Matthew Savoie et al. — 2013. — 01.
- [8] Petrov Sergey, Iakovlev Nikolay. The Optimized Finite Element Dynamical Core of the Arctic Ocean Sea Ice Model // *Mathematical Modeling and Supercomputer Technologies*. — 2021. — Pp. 389–400.
- [9] Marcq Sebastien, Weiss Jerome. Influence of sea ice lead-width distribution on turbulent heat transfer between the ocean and the atmosphere // *The Cryosphere*. — 2012. — 02. — Vol. 6. — Pp. 143–156.
- [10] Kwok Ronald, Deborah Sulsky. Arctic Ocean Sea Ice Thickness and Kinematics: Satellite Retrievals and Modeling // *Oceanography*. — 2010. — 12. — Vol. 23.
- [11] Mehlmann C., Danilov S., Losch M. et al. Simulating linear kinematic features in viscous-plastic sea ice models on quadrilateral and triangular grids. — 2021. — 03.
- [12] Quartapelle Luigi. Numerical solution of the incompressible Navier-Stokes equations. — Birkhäuser, 1993. — Vol. 113 of *International series of numerical mathematics*. — Pp. I–XII, 1–291.

- [13] INMOST parallel platform: Framework for numerical modeling / A.A. Danilov, Kirill Terekhov, Igor Konshin, Yuri Vassilevski // *Supercomputing Frontiers and Innovations*. — 2015. — 01. — Vol. 2. — Pp. 55–66.
- [14] Nair Ramachandran, Lauritzen Peter. A class of deformational flow test cases for linear transport problems on the sphere // *Journal of Computational Physics*. — 2010. — 11. — Vol. 229. — Pp. 8868–8887.
- [15] Finite element flux-corrected transport (FEM–FCT) for the euler and Navier–Stokes equations / Rainald Löhner, Ken Morgan, Jaime Peraire, Mehdi Vahdati // *International Journal for Numerical Methods in Fluids*. — Vol. 7, no. 10. — Pp. 1093–1109. — URL: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/flid.1650071007>.
- [16] Petrov Sergey S., Iakovlev Nikolay G. The suite of Taylor–Galerkin class schemes for ice transport on sphere implemented by the INMOST package // *Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling*. — 2021. — Vol. 36, no. 4. — Pp. 227–238. — URL: <https://doi.org/10.1515/rnam-2021-0019>.
- [17] III W. D. Hibler. A Dynamic Thermodynamic Sea Ice Model // *Journal of Physical Oceanography*. — 1979. — 07. — Vol. 9. — Pp. 815–846.
- [18] Gray J. M. N. T., Killworth Peter D. Stability of the Viscous-Plastic Sea Ice Rheology // *Journal of Physical Oceanography*. — 1995. — Vol. 25, no. 5. — Pp. 971 – 978. — URL: https://journals.ametsoc.org/view/journals/phoc/25/5/1520-0485_1995_025_0971_sotvps_2_0_co_2.xml.
- [19] Pritchard Robert S. Stability of sea ice dynamics models: Viscous-plastic rheology, replacement closure, and tensile cutoff // *Journal of Geophysical Research*. — 2005. — Vol. 110.
- [20] Tsamados Dr Michel, Feltham D., Wilchinsky A. Impact of a new anisotropic rheology on simulations of Arctic Sea ice // *Journal of Geophysical Research (Oceans)*. — 2013. — 01. — Vol. 118. — Pp. 91–107.
- [21] Bouillon Sylvain, Rampal Pierre. Presentation of the dynamical core of neXtSIM, a new sea ice model // *Ocean Modelling*. — 2015. — 04. — Vol. 91.
- [22] Hunke E., Dukowicz John. An Elastic Viscous Plastic Model for Sea Ice Dynamics // *Journal of Physical Oceanography*. — 1997. — 09. — Vol. 27. — Pp. 1849–.
- [23] The elastic-viscous-plastic method revisited / Sylvain Bouillon, Thierry Fichefet, Vincent Legat, Gervan Madec // *Ocean Modelling*. — 2013. — 11. — Vol. 71. — Pp. 2–12.
- [24] Kimmritz Madlen, Danilov Sergey, Losch Martin. The adaptive EVP method for solving the sea ice momentum equation // *Ocean Modelling*. — 2016. — 03. — Vol. 101.