

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 РФФИ 21-71-30023. Этап третий.

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

15 декабря 2023 г.

# Аннотация

Данный отчет посвящен результатам исследований в рамках третьего этапа (2023 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)

- Клинический сбор данных ПКТ, их статистическая обработка
- Расчет существующих индексов (FFR,iFR,CFR) с помощью усовершенствованной персонализированной редуцированной модели коронарного кровотока с краевыми условиями, усвоенными из ПКТ-данных
- Разработка нового ПКТ-индекса на основе обработанных медицинских данных и редуцированной модели коронарного кровотока
- Анализ воспроизводимости, чувствительности и специфичности существующих индексов (FFR,iFR,CFR) полученных в усовершенствованной персонализированной редуцированной модели коронарного кровотока с краевыми условиями, усвоенными из ПКТ-данных

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

- Валидация математической модели закрытия створок реконструированного клапана
- Усовершенствование численной модели деформации нелинейной тонкостенной структуры с учетом её изгибной жесткости и контактных взаимодействий: уменьшение времени расчета; робастность численных схем.
- Обзор работ по геометрическим характеристикам нормально функционирующего здорового аортального клапана
- Разработка геометрических критериев для оптимизации формы и размеров створок реконструированного клапана

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

- Разработка редуцированной модели кровотока, учитывающей персонализированные краевые условия и персонализированную геометрию расположения сосудов после операции Фонтена
- Валидация редуцированной модели кровотока

- 
- Разработка метода автоматизированного поиска наилучшей геометрии соединения сосудов на основе методов оптимизации и методов машинного обучения

#### Задача 1.4. Персонализированные модели подсистем опорно-двигательного аппарата

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

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

- Реализация расширенного набора численных методов решения системы уравнений гидротермодинамики атмосферы (полулагранжева аппроксимация адвективных слагаемых, полунявные методы интегрирования по времени с использованием эффективных и масштабируемых алгоритмов решения больших разреженных систем линейных уравнений).
- Тестирование различных сочетаний методов на широком спектре идеализированных задач (включая эксперимент "идеализированный тропический циклон").
- Реализация стохастически возмущенных полулагранжевых траекторий в модели атмосферы ПЛАВ.

#### Задача 2.2. Развитие вычислительных технологий для моделирования Мирового океана

- Программная реализация модели Мирового океана, допускающая возможность расчета динамики океана, блока переноса примесей, модели льда, а также операций ввода-вывода на отдельных группах MPI процессов.
- Разработка модели Мирового океана, включая блок динамики, набор физических параметризаций, модель морского льда для массивно-параллельных систем, включающих графические процессоры.
- Разработка программной компоненты каплера, обеспечивающего обмена данными между моделью атмосферы и океана и интерполяцию сеточных функций. Программная реализация возможности подключения модели океана к внешним моделям общей циркуляции атмосферы. Будет рассматриваться подключение к модели атмосферы, используемой в модели Земной системы INMCM.
- Разработка негидростатической версии модели динамики океана на основе общего программного кода. Тестирование негидростатической версии динамики в идеализированных постановках. В план работы добавлен пункт п.4, необходимый для достижения заявленных ранее результатов за 2023 год.

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

- Выбор, настройка и проверка стохастических моделей лагранжева переноса частиц с учетом выявленных дефектов. Проведение численного моделирования переноса трассеров и тяжелых частиц в городской среде с использованием стохастических параметризаций и моделей RANS.
- Включение в модели параметризаций воздействия растительности на турбулентность и перенос примесей, а также - процедур расчета теплового и радиационного баланса поверхностей.
- Адаптация построенных моделей к реалистичной геометрии городской среды.

Задача 2.4. Разработка модели динамики морского льда

- Реализация совместной модели динамики и термодинамики льда. Проведение тестовых расчетов и сравнение с данными ТОРАЗ-4.
- Реализация альтернативного динамического ядра с использованием треугольных CD-сеток (схемы переноса и солвер уравнения баланса импульса).
- Реализация адаптивного по параметру простой итерации аEVP солвера. Модификация граничных условий на береговом контуре (замена условия прилипания на условие скольжения с трением).
- Оптимизация локально-одномерной модели термодинамики льда для исполнения на графических процессорах с использованием библиотеки CUDA.

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

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

- Предложен новый ПКТ-индекс «изолированный FFR», позволяющий оценить гемодинамическую значимость стеноза и рассчитываемый как индекс FFR при отсутствии других стенозов и при здоровой перфузии. Преимуществом нового индекса является возможность оценки значимости стеноза без влияния сторонних факторов, поскольку затруднённая перфузия и другие стенозы искажают значение FFR. Его сопоставление с традиционным FFR позволяет сделать выводы о степени затруднения перфузии при отсутствии ПКТ исследований. Недостатком нового индекса является невозможность измерить его напрямую в большинстве случаев.
- Проведён анализ воспроизводимости, чувствительности и специфичности существующих индексов (FFR, iFR, CFR), рассчитанных с помощью разработанной модели кровотока. Чувствительность и специфичность индексов FFR, iFR и CFR составили, соответственно, 1.0 и 0.8 для FFR,

0.9 и 0.8 для iFR, 0.8 и 0.8 для CFR (при пороге 2.16). Воспроизводимость реально измеренных индексов оказалась высокой: средняя ошибка составила 3% при максимальной ошибке в 30% (на гемодинамически значимом стенозе сложной геометрии).

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

- Было показано превосходство метода инкрементального потенциала над рядом других численных схем в качестве квазистатического решателя с точки зрения сходимости и времени вычислений.
- Расчет показателей замыкательной функции аортального клапана в численном эксперименте удовлетворительно соотносится с измеренными в натурном эксперименте параметрами. Наиболее заметной является статистически значимая эквивалентность площади зон коаптации правой коронарной створки и некоронарной створкой, а также суммы площадей зон коаптации. Для центральной длины коаптации, которая является важным показателем адекватной функции аортального клапана, для двух из трёх створок не получено статистически значимых различий между расчетными и измеренными значениями. Также статистической значимости не достигло различие максимальной длины коаптации левой коронарной створки слева от центра, глубины провисания тел левой коронарной створки, некоронарной створки.
- Был проведен анализ различных параметров замыкательной функции аортального клапана и выбраны основные параметры: длина коаптации створок аортального клапана, центральная коаптация, эффективная высота створки, величина провисания (биллоунг), площадь эффективного отверстия регургитации. Определены их значения для нормального функционирования реконструированного клапана.
- Предложены геометрические критерии оптимизации, основанные на оценке коаптационных характеристик в норме: длина коаптации (не менее 6 мм), центральная коаптация (не менее 1.5 мм), эффективная высота створки (не менее 9 мм и не более 11 мм), величина провисания (биллоунг) (не более 1.4 мм), площадь эффективного отверстия регургитации (не более 0.1 см\*см)
- Были исследованы методы построения таблично заданных определяющих соотношений для описания механического поведения материала створок аортального клапана в рамках гиперупругой модели с использованием виртуальных экспериментов

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

- Разработана редуцированная модель кровотока для предсказательного моделирования операции Фонтена: движение крови в организме описывается 1D моделью глобального кровообращения, а в

области полного кава-пульмонального соединения – физически-информированной нейронной сетью. Предложенная модель может быть персонализирована на основе достоверных клинических данных, в частности, учитывать дооперационное расположение сосудов. Кроме того, модель обеспечивает постоперационные изменения граничных условий в области интереса.

- Для поиска наилучшей геометрии соединения сосудов при операции Фонтена сформулирована задача оптимального управления, которую предлагается решать автоматизированным методом Adam на основе гидродинамических расчетов разработанной редуцированной моделью глобального кровотока.

#### Задача 1.4. Персонализированные модели подсистем опорно-двигательного аппарата

- Предложена и реализована при помощи открытой платформы для биомеханического моделирования OpenSim архитектура модели совместного функционирования плечевого и шейного отделов. Были проведены эксперименты записи данных о движениях плеча и шеи, позволяющие провести масштабирование модели с учетом антропометрических особенностей испытуемого, а также реализовать воспроизведение этих движений в модели.
- Предложен общий алгоритм полуавтоматического выделения точек крепления связок и сухожилий плечевого сустава: установка точек креплений необходимых структур согласно автоматическому атласу; проведение масштабирования с учетом антропометрических данных конкретного пациента; автоматический пересчет положения точек крепления. В качестве основного инструмента для изучения антропометрии пациента на данном этапе предлагается использовать данные, полученные при помощи технологии захвата движения. Такой подход позволяет быстро получать корректные координаты точек крепления сухожилий для всех необходимых мышц.

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

- Реализация схем интегрирования по времени с неявной аппроксимацией слагаемых, описывающих распространение звуковых волн по горизонтали, позволило увеличить шаг интегрирования по времени в 3-5 раз по сравнению с реализованной ранее горизонтально-явной вертикально-неявной схемой интегрирования по времени. Время расчетов при этом сократилось до 1.5 раз. Наибольший эффект наблюдается при шаге сетки по горизонтали 20 км и менее.
- Использование численной схемы с полулагранжевым описанием адвекции позволяет увеличить шаг по времени до 10 раз по сравнению с вертикально-неявной схемой. Скорость расчетов повышается в 2-3 раза в зависимости от задачи.
- В рамках модельной задачи решения уравнения типа Гельмгольца показано, что реализованные методы решения систем линейных алгебраических уравнений эффективно масштабируются как

минимум до 6912 ядер при использовании сетки с размерностью  $6*1080*1080*30$ . При этом геометрический многосеточный метод в 2.5-3 раза быстрее стабилизированного метода бисопряженных градиентов.

- В идеализированных тестовых задачах все методы показывают близкие друг к другу результаты, соответствующие современному мировому уровню точности.
- Неявный полулагранжев метод в проведенных экспериментах показал наибольшую вычислительную эффективность. Однако, полулагранжев метод не сохраняет массу атмосферы, что ограничивает его применение в климатических задачах.
- Схемы интегрирования с неявной аппроксимацией слагаемых, отвечающих за горизонтальное распространение звуковых волн, эффективнее схем с неявностью только по вертикали.
- Показано статистически значимое повышение разброса ансамбля для заблаговременностей прогноза до 10 суток во всех регионах земного шара при стохастическом возмущении исходных точек полулагранжевых траекторий в модели ПЛАВ. При этом, изменение среднеквадратической ошибки средних по ансамблю прогнозов статистически незначимо. Такая ситуация соответствует более качественному описанию неопределенности прогноза без снижения его точности.

#### Задача 2.2. Развитие вычислительных технологий для моделирования Мирового океана

- На основе гибридного MPIOpenMPCUDA подхода разработана модель Мирового океана для расчетов на современных массивно-параллельных вычислительных системах, включающих графические процессоры. Выполнение вычислений на графических ускорителях поддерживается в блоках гидростатической динамики океана, переноса примесей, термодинамики морского льда и в программной реализации физических параметризаций. В модель Мирового океана с помощью библиотеки MPI внедрена возможность выполнения некоторых блоков (динамики океана, переноса примесей и т.д.) на отдельных группах параллельных процессов, что позволяет ускорить расчеты.
- Разработана негидростатическая версия модели динамики океана и проведена ее верификация в идеализированных постановках. Программная реализация как гидростатической модели, так и блока негидростатической динамики выполнена на основе общего программного кода с использованием MPI и OpenMP.
- Реализована возможность обмениваться информацией с блоком атмосферы модели Земной системы ИВМ РАН и блоком динамики льда через каплер.

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

- На основе результатов сравнения с данными LES уточнены стохастические лагранжевы модели переноса трассеров и тяжелых частиц. Разработана и протестирована перспективная программная реализация модели переноса частиц с использованием вычислений на графических процессорах.
- В модели RANS и LES включены параметризации воздействия растительности на турбулентность и перенос примесей и процедуры расчета теплового и радиационного баланса поверхности.
- Модели адаптированы к расчетам при реалистичной геометрии городской среды как в части численных реализаций, учитывающих соответствующие граничные условия, так и в части блока статистической "онлайн"-обработки данных моделирования турбулентности.
- На основе анализа серии расчетов вихреразрешающего моделирования изучено динамическое воздействие растительности на турбулентность в городском слое. Вычислены и проанализированы различные турбулентные масштабы длины, используемые для построения турбулентных замыканий в RANS. Выявлены характерные особенности изменения этих масштабов при динамическом воздействии растительности на турбулентное течение.
- Выявлены режимы обмена турбулентной кинетической энергией между городским слоем и слоем шероховатостей над ним, в том числе, при наличии растительности в ГС.
- Предложен и протестирован новый подход к вычислению аэродинамического сопротивления городского слоя, основанный на методах теории подобия. Новый подход протестирован как в априорных тестах с результатами LES, так и в расчетах с многослойной RANS-моделью. Результаты тестов показали значительное увеличение точности вычисления силы сопротивления при наличии растительности по сравнению со стандартными методами, применяемыми в многослойных моделях городской турбулентности.

#### Задача 2.4. Разработка модели динамики морского льда

- Сравнение совместной модели динамики-термодинамики с системой TOPAZ-4 показало высокое качество воспроизводимости линейных кинематических особенностей (ЛКО) с помощью совместной модели. Данный результат обусловлен возможностью сгущения расчётной триангуляции. Тестовые расчеты в модельных экспериментах показали, что детализация картины ЛКО значительно улучшается с увеличением пространственного разрешения. Аналогичное поведение наблюдается при расчетах с реалистичным внешним воздействием. Также качество термодинамического решателя было подтверждено долгосрочным климатическим расчетом в эксперименте CORE-II при исполнении в связке с климатической моделью ИВМ РАН.
- Был разработан программный код нового динамического ядра на треугольной сетке типа "CD". В качестве аппроксимации по пространству использовалась пара элементов: Круэзе-Равиар для скорости и постоянный на треугольнике - для скаляров. В результате увеличения количества



степеней свободы по скоростям на той же треугольной сетке наблюдается более детальная картина ЛКО, по сравнению с “А”-версией модели, что подтверждается результатами модельных экспериментов. Был реализован набор конечно-объемных схем переноса с монотонизатором высокого порядка по времени и пространству. В качестве схемы по времени для уравнения импульса реализован стабилизированный mEVP-подход.

- Реализован программный код адаптивной по параметру простой итерации aEVP-схемы для уравнения баланса импульса. Проведено сравнение со стандартной mEVP-схемой в модельном эксперименте, которое показало, что невязка убывает значительно быстрее в случае использования адаптивной схемы. Данный вывод позволяет значительно ускорить динамическое ядро за счет уменьшения числа итераций алгоритма. Также были предложены новые граничные условия для системы динамики морского льда. Сделаны соответствующие правки в код модели, позволяющие задать граничные условия скольжения. Граничные условия скольжения позволили получить более реалистичные поля скорости дрейфа.
- Была проведена работа по адаптации классов, из которых состоит C++ библиотека термодинамики, для исполнения на графических процессорах (GPU). Для этого в класс, отвечающий за хранение сеточных данных, был добавлен новый шаблонный параметр – тип памяти. Пользователь библиотеки теперь имеет возможность выбора необходимого типа памяти CPU (центральный процессор) или GPU. Результаты тестовых экспериментов продемонстрировали эквивалентность результата вне зависимости от типа используемой памяти, что свидетельствует о корректности программной реализации.

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. Perezhugin P.A., Glazunov A.V. Subgrid Parameterizations of Ocean Mesoscale Eddies Based on Germano Decomposition. *Journal of Advances in Modeling Earth Systems*, Volume 15, Issue 10 (2023 г.)  
<https://doi.org/10.1029/2023MS003771>
2. Vassilevski Y., Liogky A., Salamatova, V. How material and geometrical nonlinearity influences diastolic function of an idealized aortic valve. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, 35, 1581–1594 (2023). <https://doi.org/10.1007/s00161-022-01176-7>
3. Svobodov A.A., Kupryashov A.A., Dobroserdova T.K., Levchenko E.G., Tumanyan M.R. and Anderson A.G. A new approach to the interpretation of B-type natriuretic peptide concentration in children with congenital heart disease. *Journal of Laboratory Medicine*, vol. 47, no. 5, 2023, pp. 225-232.  
<https://doi.org/10.1515/labmed-2022-0150>
4. Tretyak I. D., Goyman G. S., Shashkin V. V. Multiresolution approximation for shallow water equations using summation-by-parts finite differences. *Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling*, vol. 38, no. 6, 2023, pp. 393-407. <https://doi.org/10.1515/rnam-2023-0030>

- 
5. Petrov S., Iakovlev N. SIMUG – finite element model of sea ice dynamics on triangular grid in local Cartesian basis. *Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling*, vol. 38, no. 3, 2023, pp. 145-160. <https://doi.org/10.1515/rnam-2023-0012>
  6. Salamatova V., Liogky A. Interpretable data-driven modeling of hyperelastic membranes. *International Journal for Numerical Methods in Biomedical Engineering*, Volume39, Issue 11 (2023 г.) <https://doi.org/10.1002/cnm.3757>
  7. Isaev A., Dobroserdova T. , Danilov A., Simakov S. Physically informed deep learning technique for estimating blood flow parameters in arterial bifurcations. *Lobachevskii Journal of Mathematics* (2024 г.)
  8. Konshin I., Terekhov K. and Vassilevski Yu. Strategies with algebraic multigrid method for coupled systems. *Lobachevskii Journal of Mathematics* (2024 г.)
  9. Yurova A.S., Tyagunova A.I., Loginov F.B., Vassilevski Y.V., Lychagin A.V., Kalinsky E.B., Larina E.V., Gorohova N.V., Devyatyarov K.A., Bogdanov O.N., Kovalenko I.B., Chesnokova K.V., Dergachev M.A., Mychka E.V., Kosuhin O.N. A new biomechanical model for knee pathologies analysis. *Сеченовский вестник* (2024 г.)
  10. Varentsov A.I., Imeev O.A., Glazunov A.V., Mortikov E.V., Stepanenko V.M. Numerical Simulation of Particulate Matter Transport in the Atmospheric Urban Boundary Layer Using the Lagrangian Approach: Physical Problems and Parallel Implementation. *Programming and Computer Software* (2023 г.) <https://doi.org/10.1134/S0361768823080248>
  11. Tolstykh M. A., Goyman G. S., Biryucheva E.O, Shashkin V. V., Fadeev R. Y. Reduced Precision Computations in the SL-AV Global Atmosphere Model. *Lecture Notes in Computer Science* (2023 г.)
  12. Vassilevski, Y., Gamilov, T., Danilov, A., Kopytov, G., Simakov, S. (2023). A Web-Based Non-invasive Estimation of Fractional Flow Reserve (FFR): Models, Algorithms, and Application in Diagnostics. In: Mondaini, R.P. (eds) *Trends in Biomathematics: Modeling Epidemiological, Neuronal, and Social Dynamics*. BIOMAT 2022. Springer, Cham. [https://doi.org/10.1007/978-3-031-33050-6\\_18](https://doi.org/10.1007/978-3-031-33050-6_18)

# Оглавление

<b>Аннотация</b>	<b>i</b>
<b>Оглавление</b>	<b>x</b>
<b>1. Биомеханика</b>	<b>2</b>
<b>Задача 1.1. Разработка неинвазивных методов диагностики ишемической болезни сердца (ИБС)</b>	<b>2</b>
1.1.1 Клинический сбор данных ПКТ, их статистическая обработка . . . . .	4
1.1.2 Расчет существующих индексов (FFR,iFR,CFR) с помощью усовершенствованной персонализированной редуцированной модели коронарного кровотока с краевыми условиями, усвоенными из ПКТ-данных . . . . .	5
1.1.3 Разработка нового ПКТ-индекса на основе обработанных медицинских данных и редуцированной модели коронарного кровотока . . . . .	7
1.1.4 Анализ воспроизводимости, чувствительности и специфичности существующих индексов (FFR,iFR,CFR), полученных в усовершенствованной персонализированной редуцированной модели коронарного кровотока с краевыми условиями, усвоенными из ПКТ-данных	10
<b>Задача 1.2. Виртуальный персонализированный раскрой створок аортального клапана при его реконструкции из аутоперикарда</b>	<b>15</b>
1.2.1 Валидация математической модели закрытия створок реконструированного клапана . . .	15
1.2.1.1 Натурные эксперименты на образце свиного корня аорты . . . . .	16
1.2.1.2 Разработка натурального эксперимента на искусственной эталонной модели с заданной геометрией и свойствами материала . . . . .	17
1.2.2 Усовершенствование численной модели деформации нелинейной тонкостенной структуры с учетом её изгибной жесткости и контактных взаимодействий: уменьшение времени расчета; робастность численных схем . . . . .	18
1.2.3 Обзор работ по геометрическим характеристикам нормально функционирующего здорового аортального клапана . . . . .	20
1.2.4 Разработка геометрических критериев для оптимизации формы и размеров створок реконструированного клапана . . . . .	21
<b>Задача 1.3. Предсказательное моделирование одножелудочковой коррекции врожденных пороков сердца у детей (операция Фонтена)</b>	<b>26</b>
1.3.1 Обзор редуцированных моделей кровотока, учитывающих геометрические особенности в точке стыковки сосудов . . . . .	26
1.3.2 Разработка архитектуры физически-информированной нейросети и ее обучение . . . . .	28

1.3.2.1	Генерация набора данных . . . . .	28
1.3.2.2	Архитектура физически информированной нейросети . . . . .	30
1.3.2.3	Обучение нейросети . . . . .	32
1.3.3	Разработка редуцированной модели кровотока, учитывающей персонализированные краевые условия и персонализированную геометрию расположения сосудов после операции Фонтена . . . . .	33
1.3.4	Валидация редуцированной модели кровотока . . . . .	35
1.3.5	Разработка метода автоматизированного поиска наилучшей геометрии соединения сосудов на основе методов оптимизации и методов машинного обучения . . . . .	36
<b>Задача 1.4. Персонализированные модели подсистем опорно-двигательного аппарата</b>		<b>45</b>
1.4.1	Построение модели совместного функционирования плечевого и шейного отделов . . . . .	45
1.4.1.1	Актуальность проблемы . . . . .	45
1.4.1.2	Ограничения . . . . .	46
1.4.1.3	Описание основных необходимых элементов модели . . . . .	46
1.4.1.4	Краткий обзор известных моделей . . . . .	47
1.4.1.5	Модификация основной модели . . . . .	51
1.4.1.6	Результаты . . . . .	52
1.4.2	Персонализация модели совместного функционирования плечевого и шейного отделов по данным захвата движения испытуемого . . . . .	53
1.4.2.1	Проведение экспериментов . . . . .	53
1.4.2.2	Масштабирование модели . . . . .	54
1.4.2.3	Результат . . . . .	55
<b>2. Геофизика</b>		<b>59</b>
<b>Задача 2.1. Разработка негидростатической модели сжимаемой атмосферы для задач прогноза погоды и моделирования климата</b>		<b>59</b>
2.1.1	Явно-неявная схема интегрирования по времени . . . . .	59
2.1.1.1	Явно-неявные методы интегрирования по времени, разделение оператора . . . . .	59
2.1.1.2	Решение нелинейной системы уравнений . . . . .	61
2.1.2	Масштабируемые алгоритмы решения систем линейных уравнений . . . . .	63
2.1.2.1	Описание реализованных методов решения СЛАУ . . . . .	63
2.1.2.1.1	Методы Крыловского типа . . . . .	63
2.1.2.1.2	Геометрический многосеточный алгоритм . . . . .	64
2.1.2.2	Исследование масштабируемости . . . . .	66
2.1.3	Полулагранжева схема интегрирования по времени . . . . .	68
2.1.4	Численные эксперименты с негидростатической моделью динамики атмосферы . . . . .	69
2.1.5	Стохастически возмущенные полулагранжевы траектории в модели атмосферы ПЛАВ . . . . .	70
<b>Задача 2.2. Развитие вычислительных технологий для моделирования Мирового океана</b>		<b>75</b>
2.2.1	Программная реализация модели Мирового океана, допускающая возможность расчета динамики океана, блока переноса примесей, модели льда, а также операций ввода-вывода на отдельных группах MPI процессов . . . . .	75

2.2.2	Разработка модели Мирового океана, включая блок динамики, набор физических параметризаций, модель морского льда для массивно-параллельных систем, включающих графические процессоры . . . . .	77
2.2.3	Разработка программной компоненты каплера, обеспечивающего обмена данными между моделью атмосферы и океана и интерполяцию сеточных функций. Программная реализация возможности подключения модели океана к внешним моделям общей циркуляции атмосферы. Будет рассматриваться подключение к модели атмосферы, используемой в модели Земной системы INMCM . . . . .	84
2.2.4	Разработка негидростатической версии модели динамики океана на основе общего программного кода. Тестирование негидростатической версии динамики в идеализированных постановках . . . . .	87
<b>Задача 2.3. Разработка эффективных вычислительных технологий для прогнозирования и диагноза состояния атмосферы в городской среде</b>		<b>93</b>
2.3.1	Выбор, настройка и проверка стохастических моделей лагранжева переноса частиц с учетом выявленных дефектов. Проведение численного моделирования переноса трассеров и тяжелых частиц в городской среде с использованием стохастических параметризаций и моделей RANS . . . . .	93
2.3.2	Включение в модели параметризаций воздействия растительности на турбулентность и перенос примесей . . . . .	97
2.3.3	Адаптация построенных моделей к реалистичной геометрии городской среды . . . . .	104
2.3.4	Процедуры расчета теплового и радиационного баланса поверхностей . . . . .	106
<b>Задача 2.4. Разработка модели динамики морского льда</b>		<b>110</b>
2.4.1	Реализация совместной модели динамики и термодинамики льда. Проведение тестовых расчетов и сравнение с данными ТОРАЗ-4 . . . . .	110
2.4.2	Реализация альтернативного динамического ядра с использованием треугольных CD-сеток (схемы переноса и солвер уравнения баланса импульса) . . . . .	112
2.4.2.1	Схемы переноса . . . . .	112
2.4.2.2	Уравнение баланса импульса . . . . .	113
2.4.2.3	Численные эксперименты . . . . .	114
2.4.3	Реализация адаптивного по параметру простой итерации аEVP солвера. Модификация граничных условий на береговом контуре (замена условия прилипания на условие скольжения с трением) . . . . .	114
2.4.3.1	Адаптивный по параметру простой итеции метод аEVP . . . . .	114
2.4.3.2	Граничные условия скольжения и трения . . . . .	116
2.4.4	Оптимизация локально-одномерной модели термодинамики льда для исполнения на графических процессорах с использованием библиотеки CUDA . . . . .	118

# 1. Биомеханика

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

- Клинический сбор данных ПКТ, их статистическая обработка.
- Расчет существующих индексов (FFR,iFR,CFR) с помощью усовершенствованной персонализированной редуцированной модели коронарного кровотока с краевыми условиями, усвоенными из ПКТ-данных.
- Разработка нового ПКТ-индекса на основе обработанных медицинских данных и редуцированной модели коронарного кровотока.
- Анализ воспроизводимости, чувствительности и специфичности существующих индексов (FFR,iFR,CFR), полученных в усовершенствованной персонализированной редуцированной модели коронарного кровотока с краевыми условиями, усвоенными из ПКТ-данных.

Список сокращений и основных медицинских терминов, используемых в Главе 1.1:

CFR	Coronary Flow Reserve - коронарный резерв кровотока
FFR	Fractional Flow Reserve – фракционный резерв кровотока
iFR	Instantaneous Wave-free Ratio – мгновенный волновой индекс (индекс свободной волны)
TPR	Transmural Perfusion Ratio – трансмуральный индекс перфузии
ВТК	Ветвь тупого края
Гиперемия	Расширение периферических сосудов, приводящее к повышению кровотока
ДА	Диагональная артерия
Дистальный	Находящийся ниже по течению
МСКТ	Мультиспиральная компьютерная томография
ОА	Огибающая артерия
ОИМ	Острый инфаркт миокарда
ОКС	Острый коронарный синдром
ПКА	Правая коронарная артерия
ПКТ	Перфузионная компьютерная томография
ПМЖВ	Передняя межжелудочковая ветвь
Проксимальный	Находящийся выше по течению
ЧКВ	Чрескожное коронарное вмешательство



### 1.1.1 Клинический сбор данных ПКТ, их статистическая обработка

В 2023 году был продолжен клинический сбор данных перфузионной компьютерной томографии миокарда и их статистическая обработка. На базе Института персонализированной кардиологии НЦМУ «Цифровой биодизайн и персонализированное здравоохранение» ФГАОУ ВО «ПМГМУ им. И.М.Сеченова» были собраны ПКТ данные ещё у 9-ти пациентов (в дополнение к собранным в прошлом году); кроме того, были собраны данные после ЧКВ у 6-ти пациентов. Все пациенты подписали информированное согласие на участие в исследовании. Произведено обезличивание, собраны демографические данные, анамнез заболевания, анамнез жизни, данные объективного осмотра (ЧСС, АД и т.д.).

Всего в исследование было включено 22 пациента, поступивших в отделение кардио-реанимации с диагнозом ОКС (острый коронарный синдром). Из них у 14 больных диагностирован ОИМ (острый инфаркт миокарда) с подъемом сегмента ST, у 3 больных — ОИМ без подъема сегмента ST, у 5 — нестабильная стенокардия. МСКТ проводили на 3-5-е сутки от развития ОКС. Диагноз ишемии миокарда по данным МСКТ основывался на визуализации дефекта перфузии у каждого больного в одной или нескольких из 6 стандартных зон левого желудочка: 1-перегородочной; 2-верхушечной; 3-передней; 4-боковой; 5-задней; 6-нижней. Для посегментного анализа использовали деление миокарда левого желудочка на 17 сегментов в соответствии с классификацией Американской коллегии кардиологов. Дефект перфузии оценивали визуально и количественно в артериальную фазу МСКТ.

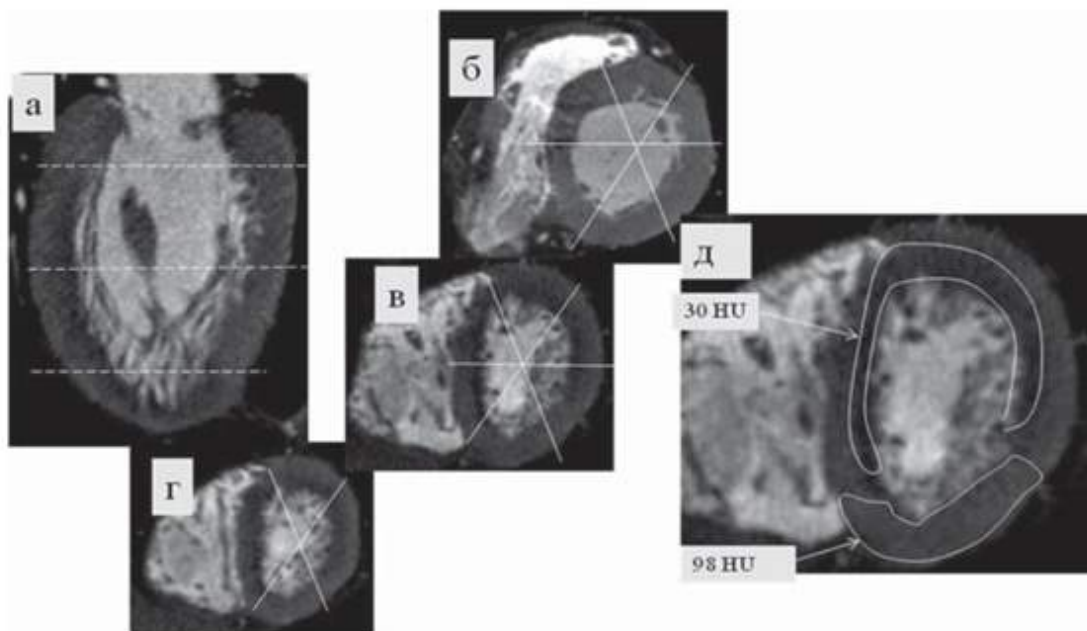


Рис. 1.1: Реконструкции МСКТ-изображений сердца больного ОИМ передней локализации

Для наглядной иллюстрации дефекта перфузии миокарда на рис. 1.1 показаны реконструкции КТ-изображения сердца, выполненные по длинной (а) и коротким осям на уровне базальных (б), средних (в), верхушечных (г) сегментов левого желудочка. Дефект перфузии миокарда выглядит как более темный участок низкой плотности по сравнению с расположенными рядом сегментами левого желудочка

(д), зоны дефекта перфузии и здорового миокарда обведены курсором с автоматическим определением плотности.

Параметры глобальной фракции выброса (ФВ) и объемов ЛЖ (конечный систолический объем и конечный диастолический объем) рассчитывались автоматически с помощью программного обеспечения, установленного на рабочей станции томографа.

### 1.1.2 Расчет существующих индексов (FFR,iFR,CFR) с помощью усовершенствованной персонализированной редуцированной модели коронарного кровотока с краевыми условиями, усвоенными из ПКТ-данных

Для расчёта индексов FFR,iFR,CFR использовалась персонализированная редуцированная модель коронарного кровотока с краевыми условиями, усвоенными из ПКТ-данных. Эта модель была разработана и описана на предыдущих этапах проекта. Приведём краткое описание математической модели. Течение крови представляется течением вязкой несжимаемой жидкост по эластичным трубкам [1].

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;  $\rho$  — плотность крови (предполагается постоянной и равной  $1 \text{ г/см}^3$ );  $k$  — индекс сосуда;  $S_k$  — площадь сечения сосуда;  $S_k^0$  — площадь поперечного сечения сосуда при нулевом давлении;  $u_k$  — скорость потока, осредненная по поперечному сечению;  $p_k$  — давление в сосуде, отсчитываемое от атмосферного;  $f_{fr}$  — сила вязкого трения; сила трения

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

где  $\mu$  — динамическая вязкость крови ( $4 \text{ мПа}\cdot\text{с}$ ).

Сеть сосудов состоит из аорты и коронарных артерий, структура которых извлекается из КТ снимков пациента. На входе в сеть сосудов задаётся сердечный выброс, который корректируется в соответствии с данными пациента. На выходе из сети сосудов устанавливается перепад давлений и гидродинамическое сопротивление:

$$R_k Q_k = p_k - p_v, \quad (1.4)$$

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

Для учёта затруднённой перфузии каждое значение сопротивления  $R_k$  умножается на коэффициент  $\alpha_k$ :

$$\alpha_k = \begin{cases} 1, & TPR \geq 1.4 \\ a + b \exp(c \cdot TPR_k), & TPR < 1.4, \end{cases} \quad (1.5)$$

где  $TPR_k$  — значение TPR соответствующей области миокарда. Коэффициенты  $a, b, c$  идентифицируются из соображений  $\alpha_k = 1$  при  $TPR_k = 1.4$  и  $\alpha_k = 4$  при  $TPR_k = 0.2$ . Значение  $\alpha_k = 2$  соответствует  $TPR_k = 0.6$ , что означает переходную область от серьёзных нарушений перфузии к критическим:

$$a = 2 + 2/\sqrt{3}, \quad b = \sqrt{\frac{(4-a)^3}{2-a}}, \quad c = 5 \ln \frac{4-a}{b}. \quad (1.6)$$

Поток крови при  $TPR < 0.2$  при подобной корректировке становится практически нулевым, что соответствует полному поражению ткани.

Благодаря разработанному на предыдущих этапах проекта алгоритму идентификации поражённых участков миокарда зоны миокарда индивидуализируются в зависимости от строения коронарных артерий. В каждой индивидуализированной зоне вычисляется значение TPR.

Предложенная модель позволяет вычислить ключевые гемодинамические индексы FFR, iFR и CFR. Приведём их краткое описание [2].

- Fractional Flow Reserve (FFR) — фракционный резерв кровотока. Является отношением среднего давления после стеноза к среднему аортальному давлению при гиперемии. FFR меняется в диапазоне от 0 до 1. Значение в 0.8 считается пороговым — стенозы с более низким FFR считаются гемодинамически значимыми и подлежат стентированию.
- Instantaneous wave-free ratio (iFR) — мгновенное волновое отношение. Вычисляется как отношение среднего давления после стеноза к среднему аортальному давлению во время периода свободной волны (в диастолу). Меняется от 0 до 1, значение 1.0 считается идеальным здоровым, пороговым значением считается 0.9.
- Coronary flow reserve (CFR) — резерв коронарного кровотока. Является отношением потока через артерию при гиперемии (при расширенных периферических сосудах) к потоку в покое. Обычно меняется от 1 до 5. Значения выше 3.0 считаются здоровыми. Значения ниже 2.0 соответствуют показанию к ЧКВ.

Был произведён расчёт гемодинамических индексов FFR, CFR, iFR для 11-ти пациентов и 27-ми стенозов, имеющих полный набор данных (КТ снимки до и после ЧКВ, ЧСС, ударный объём, давление и т.д.). Расчёт индексов производился с помощью усовершенствованной персонализированной редуцированной модели коронарного кровотока с краевыми условиями, усвоенными из ПКТ-данных. Сравнение вычисленных индексов FFR и iFR с измеренными значениями представлен в таблице 1.1.

Таблица 1.1: Вычисленные значения FFR, iFR, CFR. Сосуд — коронарная артерия, в которой был размещён стеноз; период — до или после ЧКВ было произведено инвазивное измерение индекса; индекс — тип индекса, который измерялся инвазивно; значение — значение инвазивно измеренного индекса; FFR/iFR/CFR — вычисленное с помощью модели кровотока значение индекса FFR/iFR/CFR

Пациент	Сосуд	Период	Индекс	Значение	FFR	iFR	CFR
1	ПМЖВ	до ЧКВ	FFR	0.43	0.41	0.72	2.16
2	ПМЖВ	до ЧКВ	FFR	0.81	0.8	0.81	2.18
3	ПМЖВ	до ЧКВ	FFR	0.58	0.58	0.69	1.91
		до ЧКВ	iFR	0.53			
4	ПКА	до ЧКВ	iFR	0.56	0.5	0.57	1.6
6	ПКА	до ЧКВ	FFR	0.94	0.93	0.95	2.68
	ВТК	до ЧКВ	FFR	0.74	0.75	0.91	2.42
		до ЧКВ	iFR	0.91			
8	ПМЖВ	до ЧКВ	FFR	0.77	0.77	0.86	2.14
	ДА	до ЧКВ	FFR	0.69	0.69	0.89	2.3
9	ВТК	до ЧКВ	iFR	0.74	0.64	0.74	1.9
10	ВТК	до ЧКВ	FFR	0.91	0.91	0.96	1.98
	ПКА	до ЧКВ	FFR	0.71	0.71	0.75	2.09
		после ЧКВ	FFR	0.98	0.98	0.99	2.92
11	ПМЖВ	до ЧКВ	FFR	0.52	0.52	0.66	1.66
		после ЧКВ	FFR	0.88	0.93	0.98	2.71
		до ЧКВ	FFR	0.4	0.41	0.66	1.5

### 1.1.3 Разработка нового ПКТ-индекса на основе обработанных медицинских данных и редуцированной модели коронарного кровотока

Существует большое количество гемодинамических индексов стенозов коронарных артерий, которые используются для оценки их значимости [3]. Все индексы обладают своими достоинствами и недостатками: FFR обладает высокой воспроизводимостью и его можно измерить с высокой точностью, но он требует вазодилататора; CFR требует измерения потока крови, что приводит к различным вариантам его измерения; iFR не требует вазодилататора. Одним из недостатков индексов является их чувствительность к другим факторам — окружающие стенозы, перфузия миокарда. При принятии решения о стентировании хирургу нужна информация о гемодинамической значимости конкретного стеноза, врач должен узнать вклад в гемодинамику конкретного участка сосудистой сети. Выделить этот вклад при наличии других стенозов, патологий и затруднённой перфузии может быть сложно.

Для решения этой проблемы предлагается индекс “изолированный FFR” —  $FFR_{isolated}$ . Это обычный индекс FFR, вычисленный с помощью модели коронарного кровотока в особых условиях:

1. Все окружающие стенозы устранены;
2. Состояние миокарда установлено соответствующим здоровой перфузии (значения  $TPR = 1$ ).

Данный индекс позволяет оценить гемодинамическую значимость стеноза без влияний сторонних факторов, искажающих значения давления дистально стенозу. В большинстве случаев  $FFR_{isolated}$  не будет отличаться от значения FFR. Однако, в ряде случаев он позволит поставить более точный диагноз.

Рассмотрим конкретный пример. На рис. 1.2 изображена структура коронарных артерий пациента. Белая линия обозначает ПМЖВ со стенозом 90% в её средней части. Значения TPR для областей миокарда, снабжаемых ПМЖВ, составляют от 0.89 до 0.93. Инвазивно измеренная FFR для этого стеноза составляет 0.81, что является неожиданно высоким значением для 90% стеноза и  $TPR < 0.95$ . Значение FFR не указывает на стеноз как гемодинамически значимый, но значения TPR показывают нарушение перфузии. Врач принял решение об установке стента в ПМЖВ, несмотря на высокое значение  $FFR > 0.8$ .

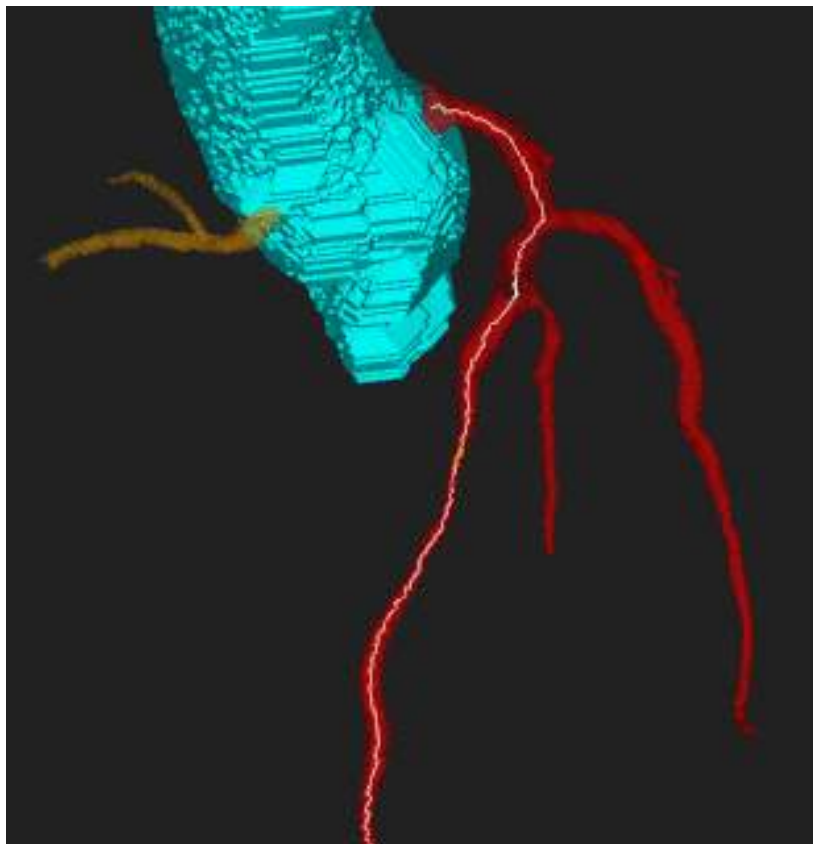


Рис. 1.2: Структура коронарных артерий пациента

Результаты численного моделирования представлены в таблицах 1.2 и 1.3. В них указаны вычисленные значения индексов до ЧКВ (до установки стента), сразу после ЧКВ и через несколько месяцев после

ЧКВ. Первые два случая использовали КТ-снимки пациента до операции, в третьем случае использовались КТ-снимки через 3 месяца после операции. В таблице 1.2 представлены показатели гемодинамики, рассчитанные с помощью вычисленных значений TPR участков миокарда. В первом случае расчетное значение FFR (0,8) очень близко к измеренному инвазивно измеренному (0,81). Значения iFR и CFR не измерялись. Величина FFR формально классифицирует стеноз как незначительный. Значения iFR и CFR классифицируют стеноз как значимый ( $iFR < 0,9$ ,  $CFR < 3,0$ ).

В таблице 1.3 показаны гемодинамические индексы, рассчитанные независимо от состояния перфузии (все значения TPR были установлены на 1.0) и в отсутствие других стенозов. В этом случае значения FFR, iFR и CFR классифицируют стеноз как значительный, значение FFR составляет 0.77. При этом CFR больше, чем в варианте с учётом всех стенозов и информации о перфузии.

Мы наблюдаем значительную разницу в расчетных значениях FFR и CFR перед ЧКВ в первом и втором вариантах. В обоих вариантах мы видим отличные значения FFR и iFR сразу после лечения. В обоих вариантах мы также наблюдаем промежуточные значения CFR. Второй подход дает более оптимистичные оценки. Обе модели дают одинаковые значения индексов в долгосрочной перспективе, что можно интерпретировать как возможное успешное выздоровление.

Таблица 1.2: Рассчитанные индексы стеноза ПМЖВ до и после лечения с использованием информации о перфузии миокарда.

Период	FFR	iFR	CFR
До ЧКВ	0.8	0.81	2.18
После ЧКВ	0.99	0.99	2.61
Долгосрочное состояние	0.98	0.99	3.07

Таблица 1.3: Рассчитанные индексы стеноза ПМЖВ до и после лечения с предположением о здоровой перфузии и без других стенозов.

Период	$FFR_{isolated}$	$iFR_{isolated}$	$CFR_{isolated}$
До ЧКВ	0.77	0.8	2.32
После ЧКВ	0.99	0.99	2.89
Долгосрочное состояние	0.98	0.99	3.07

В данном примере видно, что врач принял решение об операции несмотря на измеренное значение  $FFR = 0.81$ . На его решение повлияли результаты других обследований, а также опыт. Из таблицы 1.3, что  $FFR_{isolated}$  для стеноза составляет 0.77, что соответствует гемодинамически значимому стенозу и согласуется с решением врача о проведении ЧКВ. Значение FFR до ЧКВ в таблице 1.2 и измеренное значение FFR были искусственно завышено из-за других стенозов и проблем с перфузией. В отсутствие других обследований измеренное значение FFR может привести к неправильному диагнозу. Новый предложенный индекс позволяет избежать этой проблемы. К сожалению, новый индекс нельзя измерить напрямую, т.к. нельзя искусственно устранить все остальные стенозы и сделать миокард здоровым перед измерением FFR. Однако, использование моделей кровотока позволяет преодолеть эту проблему.

#### 1.1.4 Анализ воспроизводимости, чувствительности и специфичности существующих индексов (FFR, iFR, CFR), полученных в усовершенствованной персонализированной редуцированной модели коронарного кровотока с краевыми условиями, усвоенными из ПКТ-данных

Для анализа воспроизводимости вычисленных индексов проводилось сравнение вычисленных FFR и iFR с инвазивно измеренными (17 измерений). Измерения проводились как до, так и после проведения ЧКВ. Удалось установить высокую воспроизводимость индексов FFR и iFR, среднеквадратичная ошибка при измерении составила 0.04, средняя относительная ошибка — 3%. При этом максимальная ошибка составила 30%, она достигалась на гемодинамически значимом стенозе сложной геометрии и не повлияла на диагноз.

Для анализа чувствительности и специфичности все больные делились на две “истинные” группы в зависимости от инвазивно измеренных FFR и iFR: пациентов с гемодинамически значимыми стенозами (“больные”, positive) и пациентов с незначительными стенозами (“здоровые”, negative). После этого с помощью каждого вычисленного индекса проводилось разбиение пациентов на две “предсказанные” группы. Для каждого индекса строилась матрица ошибок, больные делились на правильно и неправильно диагностированных, и вычислялись значения чувствительности и специфичности [4].

Для вычисленного FFR брался порог 0.8. На рис. 1.3 представлена матрица ошибок для FFR. Чувствительность составила 1.0 и специфичность 0.8. Высокое значение чувствительности говорит о недостаточно многочисленной выборке пациентов. Точность составила 93% (отношение правильно продиагностированных случаев к общему числу случаев).

Для вычисленного iFR брался порог 0.9. На рис. 1.4 представлена матрица ошибок для iFR. Чувствительность составила 0.9 и специфичность 0.8. Точность составила 87% (отношение правильно продиагностированных случаев к общему числу случаев).

В отличие от FFR и iFR, подобрать порог для CFR сложнее, т.к. здоровое значение CFR может заметно меняться от пациента к пациенту. В различных источниках предлагают считать патологическими значения от 2.0 до 2.5 [5]. На рис. 1.5 представлена матрица ошибок для CFR при пороге 2.0. Чувствительность составила 0.5 и специфичность 0.9 при точности в 60%. Наиболее оптимальным порогом для нашего набора данных оказалось значение CFR в 2.16 (рис. 1.6). Для оптимального порога чувствительность составила 0.8 и специфичность 0.8 при точности в 80%.

Оптимальное пороговое значение CFR в 2.16 было определено с помощью ROC-анализа (рис. 1.7). При таком значении достигается наименьшее расстояние до точки (0.0,1.0) у ROC-кривой.



Рис. 1.3: Матрица ошибок для вычисленного FFR



Рис. 1.4: Матрица ошибок для вычисленного iFR

Анализ воспроизводимости, чувствительности и специфичности показал, что наилучшие показатели имеет вычисленный индекс FFR, а наихудшие – CFR. Индекс CFR гораздо меньше изучен ввиду сложности прямого и точного измерения потоков крови в сосудах, а также его пороговые значения не являются общепринятыми [5]. Дальнейшее повышение точности на данном наборе данных не имеет смысла. Погрешности в измерениях, нечёткие КТ-снимки и сложные геометрии стенозов вносят более высокую погрешность, чем предложенный метод. В дальнейшем планируется тестирование разработанной методики на большем количестве пациентов и стенозов для получения более точных и статистически значимых выводов.





Рис. 1.5: Матрица ошибок для вычисленного CFR при пороге 2.0



Рис. 1.6: Матрица ошибок для вычисленного CFR при пороге 2.16

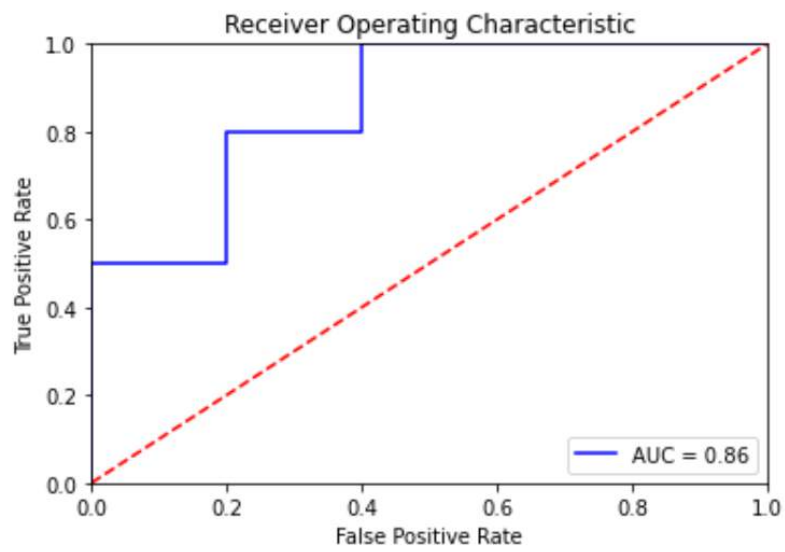


Рис. 1.7: ROC-кривая для вычисленного CFR

# Литература

- [1] Timur Gamilov, Fuyou Liang, Philipp Kopylov, Natalia Kuznetsova, Artem Rogov, and Sergey Simakov. Computational analysis of hemodynamic indices based on personalized identification of aortic pulse wave velocity by a neural network. *Mathematics*, 11(6), 2023. ISSN 2227-7390. doi: 10.3390/math11061358. URL <https://www.mdpi.com/2227-7390/11/6/1358>.
- [2] Sergey Simakov, Timur Gamilov, Fuyou Liang, and Philipp Kopylov. Computational analysis of haemodynamic indices in synthetic atherosclerotic coronary networks. *Mathematics*, 9(18), 2021. doi: 10.3390/math9182221.
- [3] Jos A.E. Spaan, Jan J. Piek, Julien I.E. Hoffman, and Maria Siebes. Physiological basis of clinically used coronary hemodynamic indices. *Circulation*, 113(3):446–455, 2006. doi: 10.1161/CIRCULATIONAHA.105.587196.
- [4] Tom Fawcett. An introduction to roc analysis. *Pattern Recognition Letters*, 27(8):861–874, 2006. ISSN 0167-8655. doi: <https://doi.org/10.1016/j.patrec.2005.10.010>. ROC Analysis in Pattern Recognition.
- [5] William F. Fearon. 14 - invasive testing. In James A. de Lemos and Torbjørn Omland, editors, *Chronic Coronary Artery Disease*, pages 194–203. Elsevier, 2018. ISBN 978-0-323-42880-4. doi: <https://doi.org/10.1016/B978-0-323-42880-4.00014-5>.

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

- Валидация математической модели закрытия створок реконструированного клапана.
- Усовершенствование численной модели деформации нелинейной тонкостенной структуры с учетом её изгибной жесткости и контактных взаимодействий: уменьшение времени расчета; робастность численных схем.
- Обзор работ по геометрическим характеристикам нормально функционирующего здорового аортального клапана.
- Разработка геометрических критериев для оптимизации формы и размеров створок реконструированного клапана.

## **1.2.1 Валидация математической модели закрытия створок реконструированного клапана**

Для валидации математической модели закрытия аортального клапана работы велись в двух направлениях:

1. Использование данных натуральных экспериментов на образце свиного корня аорты, проведенных на прошлом этапе;
2. Разработка натурального эксперимента на искусственной эталонной модели с заданной геометрией и свойствами материала.

### 1.2.1.1 Натурные эксперименты на образце свиного корня аорты

Протокол эксперимента и полученные данные о коаптационных характеристиках для 20 образцов свиного корня аорты приведены в отчете за прошлый отчетный период.

Математическая модель для нахождения диастолического состояния неостворок решалась в мембранном приближении [1]. Отметим, что время нахождения решения в мембранном приближении достаточно мало, что особенно важно в клинической практике [1–3]. Линии пришивания неостворок размечались кардиохирургом вручную в программе MeshLab (<https://www.meshlab.net/>) с помощью инструмента PickPoints на поверхности построенной треугольной сетки корня аорты с учётом особенностей анатомии и техники пришивания. Неостворки виртуально вшивались согласно алгоритму А.А.Лёгкого [4], предложенному на прошлом этапе работы в рамках проекта. Квазистатическая задача нелинейной теории упругости (неостворки под действием давления в 90 мм рт. ст.) решалась методом верхней релаксации. Полученные численные результаты обрабатывались, чтобы оценить соответствующие коаптационные характеристики: центральную коаптацию, эффективную высоту, величину биллоунга (провисание), длину коаптации, площадь коаптации.

Для статистической обработки данных первым этапом бы выполнен анализ нормальности распределения данных. Для этого для каждой выборки исследовались следующие показатели нормальности распределения:

- Косвенные: коэффициент асимметрии (Skewness) и его стандартная ошибка, эксцесс (Kurtosis) и его стандартная ошибка,
- Графические: частотная гистограмма и её соответствие кривой Gauss, ящичная диаграмма (Box plot), положение на ней медианы, её симметричность и наличие выбросов, нормально-вероятностный график (Q-Q plot),
- Расчётные: критерий Колмогорова–Смирнова и критерий Shapiro–Wilk. Второй является более предпочтительным для объёма выборки менее 60.

Вторым этапом проведены исследования статистических критериев различия: для выборок с признаками нормального распределения — параметрический t-тест Student, для выборок с распределением, отличным от нормального — непараметрический U-тест Wilcoxon–Mann–Whitney.

Третьим этапом проведён тест эквивалентности: TOST (two one-sided tests) для выборок с признаками нормального распределения, тест эквивалентности Wilcoxon–Mann–Whitney для выборок с распределением, отличным от нормального. Для всех исследований пороговый уровень статистической значимости принят за 5%.

Створка	Натурный эксперимент	Численный эксперимент	Статистически значимое различие	Статистически значимая эквивалентность
ЛКС	414,016 (360,602 - 451,689)	391,094 (332,338 - 449,515)	Нет (p = 0,499)	Нет
ПКС	419,268 (389,414 - 540,467)	437,043 (393,633 - 510,579)	Нет (p = 0,871)	Да
НКС	360,038 (323,622 - 403,839)	365,467 (319,21 - 413,053)	Нет (p = 0,646)	Да
сумма	1202,027 ± 246,240	1192,97 ± 242,054	Нет (p = 0,913)	Да (p = 0,038)

ТАБЛИЦА 2.1: Площадь зоны коаптации неостворок, измеренная в натурном эксперименте и рассчитанная в численном эксперименте (мм<sup>2</sup>). ЛКС – левая коронарная створка, ПКС - правая коронарная створка, НКС – некоронарная створка. Значения площади коаптации отдельных створок представлены в виде медианы и межквартильного размаха, сумма площадей – в виде средней арифметической и стандартного отклонения

Анализ нормальности распределения, статистических критериев различия проведён в программном пакете IBM SPSS Statistics 26 (IBM corporation, Армонк, Нью-Йорк, США). TOST проведён в программе Statgraphics 18 (Statgraphics Technologies Ink, Плейнс, Вирджиния, США), тест эквивалентности Wilcoxon–Mann–Whitney проведён в программе RStudio (RStudio, Бостон, Массачусетс, США) с пакетом EQUIVNONINF (S. Wellek, P. Ziegler).

Расчёт показателей замыкательной функции аортального клапана в численном эксперименте удовлетворительно соотносится с измеренными в натурном эксперименте параметрами. Наиболее заметной является статистически значимая эквивалентность площади зон коаптации правой коронарной створки с некоронарной створкой, а также суммы площадей зон коаптации (см. Таблицу 2.1). Данные параметры являются наиболее показательными, так как в меньшей степени зависят от погрешностей измерения, а также могут изменяться в более широких пределах, чем длины коаптации, эффективная высота и глубина провисания тел створок. Различие значений площади зоны коаптации левой коронарной не достигло статистической значимости. Для центральной длины коаптации, которая является важным показателем адекватной функции аортального клапана, для двух из трёх створок не получено статистически значимых различий между расчётными и измеренными значениями. Также статистической значимости не достигло различие максимальной длины коаптации левой коронарной створки слева от центра, глубины провисания тел левой коронарной створки, некоронарной створки.

### 1.2.1.2 Разработка натурального эксперимента на искусственной эталонной модели с заданной геометрией и свойствами материала

В качестве объекта для эксперимента с эталонным образцом корня аорты предложена силиконовая модель нормального корня аорты, повторяющая внутреннюю поверхность просвета аорты в диастолу желудочков.

В отличие от описанной ранее технологии 3D-печати модели корня аорты из эластичного материала [5], для повышения точности в воспроизведении анатомии корня аорты использована технология отливки модели из силикона. Для этого первым этапом проведено компьютерное моделирование формы для отливки силиконовой модели в инженерном программном пакете Fusion 360 (Autodesk, Inc., Милл-Валли, Калифорния, США). Также выполнено моделирование составного устройства для проведения

натурного эксперимента, которое позволит наполнять силиконовую модель корня аорты жидкостью под давлением, равным диастолическому (80 мм рт. ст.).

Для 3D-печати использован принтер на основе технологии FDM (fused deposition modeling) – моделирование методом послойного наплавления. В качестве материала использована пластиковая нить для 3D печати из полиэтилентерефталат-гликоля (PETG) (ПК «НИТ», Волгоград, Россия).

Внутри образца была выполнена неокуспидизация по стандартной методике Ozaki с использованием шаблонов-реplik с шаблонов OZAKI VRecS. Неостворки были вырезаны из экспандированного политетрафторэтилена (ePTFE) (Экофлон) толщиной 0,4 мм.

Были проведены опытные испытания по закрытию аортального клапана под давлением гидростатического столба воды и оценке коаптационных характеристик. Были получены неудовлетворительные результаты, в этой связи дальнейшие шаги будут направлены на дополнительную герметизацию аортального клапана или разработку метода удержания неостворок в диастолическом положении без использования воды.

### **1.2.2 Усовершенствование численной модели деформации нелинейной тонкостенной структуры с учетом её изгибной жесткости и контактных взаимодействий: уменьшение времени расчета; робастность численных схем**

При анализе литературы, посвящённой проблеме учёта контактных взаимодействий в тонкостенных структурах, нам удалось найти лишь ограниченное число работ, где предлагаются численные алгоритмы, пригодные для решения задачи квазистатического равновесия, а не только для решения динамических задач. Главная причина этого, на наш взгляд, заключается в том, что традиционные геометрические алгоритмы учёта контактов не приводят к состоянию равновесия, а вместо этого постоянно осциллируют, т.к. им не удаётся удовлетворить все ограничения сразу, например, см. [6, Discussion]. Перспективный для применения в задачах квазистатики алгоритм, который нам удалось найти, изложен в работах [7, 8]. Отличительными чертами данного метода, на который будем далее ссылаться как ИРС, является:

- сведение задачи об отыскании очередного приближения, удовлетворяющего внешним и внутренним силовым воздействиям, а также контактными условиям, к задаче безусловной минимизации нелинейной функции  $B_t(x)$  класса  $C^2$ , где  $t$  - номер итерации квазистатического солвера;
- введение ясного и естественного понятия толщины тонкостенной структуры в контактных взаимодействиях;

- чёткое описание алгоритма, позволяющего эффективно найти решение сформулированной задачи минимизации;
- применимость для неявных схем по времени и возможность использования больших шагов по времени.

На основе метода для устранения коллизий на произвольных линейных траекториях *RmContact*, продемонстрированного в отчёте прошлого года (2022г), нами также было сформулировано несколько алгоритмов решения задачи квазистатического равновесия, основанных на схеме предиктор-корректор, где в качестве корректора выступает *RmContact*. Отличие алгоритмов состоит только в виде предиктора:

- явная релаксация  $\mathbf{x}^{t+\frac{1}{2}} = \mathbf{x}^t + h^2 M^{-1}(\mathbf{f}_e^t + \mathbf{f}_i^t + \mathbf{f}_c^t)$
- полунеявная релаксация  $\mathbf{x}^{t+\frac{1}{2}} = \mathbf{x}^t + h^2 M^{-1}(\mathbf{f}_e^{t+\frac{1}{2}} + \mathbf{f}_i^{t+\frac{1}{2}} + \mathbf{f}_c^t)$
- неявная релаксация  $\mathbf{x}^{t+\frac{1}{2}} = \mathbf{x}^t + h^2 M^{-1}(\mathbf{f}_e^{t+\frac{1}{2}} + \mathbf{f}_i^{t+\frac{1}{2}} + \mathbf{f}_c^{t+\frac{1}{2}})$
- полуявная прямая схема  $0 = \mathbf{f}_e^{t+\frac{1}{2}} + \mathbf{f}_i^{t+\frac{1}{2}} + \mathbf{f}_c^t$
- неявная прямая схема  $0 = \mathbf{f}_e^{t+\frac{1}{2}} + \mathbf{f}_i^{t+\frac{1}{2}} + \mathbf{f}_c^{t+\frac{1}{2}}$ ,

где  $h^2$  – шаг релаксации (обозначение аналогично параметру времени в формулировке ИРС),  $M$  – матрица масс выбиралась единичной  $\mathbb{I}$ ,  $\mathbf{f}_e$  – внешние силы,  $\mathbf{f}_i$  – внутренние силы (мембранная упругость и изгибная жёсткость в случае оболочки),  $\mathbf{f}_c$  – силы контактного отталкивания. Отметим, что силы контактного отталкивания занимают особую роль, т.к. их вычисление является самой дорогостоящей частью предиктора, поскольку требует отыскания близких пар сеточных примитивов и вычисления расстояния между ними и ближайших точек.

Для всех рассмотренных алгоритмов, включая ИРС, в качестве критерия останова для квазистатического решения выбрано достаточное замедление изменения положения  $r^t = \frac{\|x^{t+1} - x^t\|}{\|x^1 - x^0\|} \leq \varepsilon = 10^{-4}$  тонкостенной структуры за итерацию солвера. Для решения соответствующих нелинейных алгебраических систем используется модифицированный метод Ньютона с линейным поиском.

В качестве тестовой задачи для сравнения разных методов был выбран второй тест, представленный в отчёте 2021-го года, про два сближающихся лепестка разных размеров. Шаг квазивремени  $h$  в методах релаксации и ИРС выбирался так, чтобы обеспечить наименьшее время до достижения сходимости. Мы рассмотрели как мембранную постановку, так и оболочечную. В качестве материала использовался неогуковский материал с жёсткостью  $\mu = 10^3$  кПа, толщина материала 0.4 мм, размеры лепестков соотносятся с размерами лепестков аортального клапана. Результаты представлены в таблице 2.2.

На основании представленных данных было принято решение перейти к использованию ИРС подхода при работе с контактными задачами.



	мембрана		оболочка	
метод	статус	время,с	статус	время,с
IPС	сходимость	104	сходимость	176
явная релаксация	стагнирует $r^t \approx 0.1$	3756	стагнирует $r^t \approx 0.1$	9870
полуневная релаксация	стагнирует $r^t \approx 0.07$	370	стагнирует $r^t \approx 0.04$	633
невная релаксация	стагнирует $r^t \approx 0.06$	1955	стагнирует $r^t \approx 0.04$	2399
полуявная прямая схема	стагнирует $r^t \approx 0.01$	518	разошёлся из-за скачка кривизны после первой итерации	-
невная прямая схема	разошёлся метод Ньютона	-	разошёлся из-за скачка кривизны после первой итерации	-

Таблица 2.2: Сравнение квазистатических решателей на задаче перехлёста двух лепестков. Время отражает время достижения сходимости, либо время ожидания до достижения сравнительно малопо-  
движного состояния.

### 1.2.3 Обзор работ по геометрическим характеристикам нормально функционирующего здорового аортального клапана

Оценка результатов некуспидизации аортального клапана базируется главным образом на замыкательной функции клапана. Параметры, характеризующие замыкательную функцию аортального клапана, могут быть определены с помощью ЭхоКГ или интраоперационно с помощью специальных инструментов. Данные параметры рекомендуется оценивать в диастолу, когда на створки клапана оказывается максимальное давление со стороны аорты, и замыкательная функция аортального клапана реализуется в полной мере [9].

Следующие геометрические характеристики замыкательной функции аортального клапана имеют ключевое значения и могут быть определены интраоперационно и эхокардиографически:

1. Длина коаптации створок аортального клапана — длина отрезка, соединяющего точку на свободном крае створки и точку на проксимальной границе зоны коаптации створки. При эхокардиографических исследованиях определяется центральная длина коаптации как длина отрезка, лежащего на срединной линии створки.
2. Наличие биллоунга — провисания тела створки ниже плоскости, проведённой через низшие точки линий прикрепления всех трёх створок аортального клапана [10].
3. Наличие пролапса — провисания свободного края створки на любом участке ниже вышеописанной плоскости, проведённой через низшие точки линий прикрепления всех трёх створок аортального клапана.
4. Расположение зоны коаптации по отношению к вентрикуло-аортальному соединению. Данный параметр объединяет в себе два предыдущих. А. Naverich et al. предложили классификацию для положения зоны коаптации по отношению к проксимальному краю синтетического протеза в

случае реимплантации аортального клапана в синтетический протез: тип А — коаптация на два и более миллиметра выше нижнего края протеза; тип В — на уровне нижнего края; тип С — на два и более миллиметра ниже нижнего края протеза [11].

5. Эффективная высота створки — расстояние между центром свободного края створки и низшей точкой линии прикрепления створки. Характеризует как длину коаптации, так и положение зоны коаптации по отношению к вентрикуло-аортальному соединению. Для интраоперационного определения данного параметра предложен специальный калипер MSS (Fehling Instruments GmbH) [12].
6. Площадь эффективного отверстия регургитации, EROA (effective regurgitant orifice area) — параметр, оцениваемый по эхокардиографическим данным. Рассматривается площадь образованного скруглённого треугольника, образованного свободными краями трёх створок. При оптимальных прочих параметрах, величина площади должна быть минимальна, чтобы уменьшить регургитацию (обратное течение крови).

В клинической практике критериями эффективности реконструктивного вмешательства на створках аортального клапана являются [10, 12–15]:

1. Длина коаптации  $> 4$  мм.
2. Эффективная высота створки  $> 9$  мм.
3. Зона коаптации выше вентрикуло-аортального соединения.
4. Отсутствие биллоунга.
5. Отсутствие пролапса.
6. Отсутствие резидуальной регургитации.

#### 1.2.4 Разработка геометрических критериев для оптимизации формы и размеров створок реконструированного клапана

В качестве геометрических критериев для оптимизации дизайна неостворок аортального клапана были выбраны следующие:

В рамках текущей работы модель оценивала следующие параметры коаптации клапана:

1. Закрытие клапана *isClose* — булево значение, которое указывает, закрыт ли клапан. Дополняется степенью закрытия  $\nu_{close} > 0$ , которая показывает близость клапана к закрытому состоянию и может быть использована, если клапан не закрывается.

2. Центральная коаптация  $c_H$ , это расстояние от высшей точки, где соприкасаются три створки клапана, до нижней относительно виртуального кольца (плоскость, содержащая низшие точки линий прикрепления всех трёх створок) (см. Рисунок 2.1).  
Оптимальным параметр считается, если  $c_H \geq 1.5$  мм.
3. Эффективная высота  $e_H$  является одним из основных показателей в клинической практике (см. Рисунок 2.1). Разница в эффективной высоте между разными створками является мерой разного положения свободных краёв. Другими словами при одинаковой эффективной высоте свободные края створок будут на одном уровне.  
Оптимальным параметр считается, если  $9 \text{ мм} \leq e_H \leq 11 \text{ мм}$ .
4. Длина коаптации  $l_{coapt}$  измеряется с помощью эхокардиографических исследований. Оптимальным параметр считается, если  $l_{coapt} \geq 6$  мм.
5. Величина биллоунга  $b_H$  (см. Рисунок 2.1) считается оптимальной, если  $b_H \leq 1.4$  мм.
6. Величина площади эффективного отверстия регургитации  $S_{coapt}$  считается оптимальной, если  $0 \text{ см}^2 \leq S_{coapt} \leq 0.1 \text{ см}^2$ .

При формировании функционала для оптимизации предлагается использовать все параметры за исключением площади коаптации. Оптимальными считаются граничные точки для  $c_H$ ,  $e_H$  и  $b_H$ , и за попадание вне допустимой области вводится экспоненциальный штраф по соответствующему параметру в зависимости от расстояния до граничной точки. В допустимой области функционал растёт линейно. Итоговый функционал, основанные на геометрических критериях имеет следующий вид:

$$f = f_{close} \cdot f_{c_H} \cdot f_{e_H} \cdot f_{l_{coapt}} \cdot f_{bil},$$

$$f_{close} = \begin{cases} 1, & \text{если isClose,} \\ e^{\nu_{close}}, & \text{иначе;} \end{cases} \quad f_{c_H} = \begin{cases} c_H - 0.5, & \text{если } c_H \geq 1.5, \\ e^{1.4 - c_H}, & \text{иначе;} \end{cases}$$

$$f_{e_H} = \begin{cases} e^{9 - c_H}, & \text{если } c_H < 9, \\ e^{c_H - 11}, & \text{если } c_H > 11, \\ 1, & \text{иначе;} \end{cases}$$

$$f_{l_{coapt}} = \begin{cases} l_{coapt} - 5, & \text{если } l_{coapt} \geq 6, \\ e^{6 - l_{coapt}}, & \text{иначе;} \end{cases} \quad f_{bil} = \begin{cases} 2.4 - b_H, & \text{если } b_H \leq 1.4, \\ e^{b_H - 1.4}, & \text{иначе.} \end{cases}$$

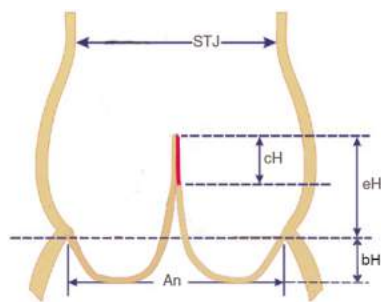


Рис. 2.1: Схематично показаны  $c_H$  — центральная коаптация,  $e_H$  — эффективная высота,  $b_H$  — билоуинг, вентрикуло-аортальное соединение (STJ) и аортальное кольцо  $A_n$

# Литература

- [1] Peter E Hammer, Peter C Chen, Pedro J del Nido, and Robert D Howe. Computational model of aortic valve surgical repair using grafted pericardium. *Journal of biomechanics*, 45(7):1199–1204, 2012.
- [2] Ferdinando Auricchio, Michele Conti, Anna Ferrara, Simone Morganti, and Alessandro Reali. Patient-specific simulation of a stentless aortic valve implant: the impact of fibres on leaflet performance. *Computer methods in biomechanics and biomedical engineering*, 17(3):277–285, 2014.
- [3] Wei Sun, Ajay Abad, and Michael S Sacks. Simulated bioprosthetic heart valve deformation under quasi-static loading. 2005.
- [4] Alexey A Liogky. Computational mimicking of surgical leaflet suturing for virtual aortic valve neocuspidization. *Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling*, 37(5):263–277, 2022.
- [5] Andrew IU Shearn, Maria Victoria Ordoñez, Filippo Rapetto, Massimo Caputo, and Giovanni Biglino. Rapid prototyping flexible aortic models aids sizing of valve leaflets and planning the ozaki repair. *Case Reports*, 2(8):1137–1140, 2020.
- [6] Sofien Bouaziz, Sebastian Martin, Tiantian Liu, Ladislav Kavan, and Mark Pauly. Projective dynamics: Fusing constraint projections for fast simulation. *ACM Trans. Graph.*, 33(4), jul 2014. ISSN 0730-0301. doi: 10.1145/2601097.2601116.
- [7] Minchen Li, Zachary Ferguson, Teseo Schneider, Timothy R Langlois, Denis Zorin, Daniele Panozzo, Chenfanfu Jiang, and Danny M Kaufman. Incremental potential contact: intersection-and inversion-free, large-deformation dynamics. *ACM Trans. Graph.*, 39(4):49, 2020.
- [8] Minchen Li, Danny M Kaufman, and Chenfanfu Jiang. Codimensional incremental potential contact. *arXiv preprint arXiv:2012.04457*, 2020.
- [9] Andreas Hagendorff, Arturo Evangelista, Wolfgang Fehske, and Hans-Joachim Schäfers. Improvement in the assessment of aortic valve and aortic aneurysm repair by 3-dimensional echocardiography. *JACC: Cardiovascular Imaging*, 12(11 Part 1):2225–2244, 2019.

- [10] Clare Ridley, Benjamin Sohmer, Prashanth Vallabhajosyula, and John GT Augoustides. Aortic leaflet billowing as a risk factor for repair failure after aortic valve repair. *Journal of Cardiothoracic and Vascular Anesthesia*, 31(3):1001–1006, 2017.
- [11] Klaus Pethig, Andrea Milz, Christian Hagl, Wolfgang Harringer, and Axel Haverich. Aortic valve reimplantation in ascending aortic aneurysm: risk factors for early valve failure. *The Annals of thoracic surgery*, 73(1):29–33, 2002.
- [12] Hans-Joachim Schäfers, Benjamin Bierbach, and Diana Aicher. A new approach to the assessment of aortic cusp geometry. *The Journal of thoracic and cardiovascular surgery*, 132(2):436–438, 2006.
- [13] Takashi Kunihara, Diana Aicher, Svetlana Rodionychева, Heinrich-Volker Groesdonk, Frank Langer, Fumihiro Sata, and Hans-Joachim Schäfers. Preoperative aortic root geometry and postoperative cusp configuration primarily determine long-term outcome after valve-preserving aortic root repair. *The Journal of thoracic and cardiovascular surgery*, 143(6):1389–1395, 2012.
- [14] Jean-Benoît Le Polain De Waroux, Anne-Catherine Pouleur, Annie Robert, Agnès Pasquet, Bernhard L Gerber, Philippe Noirhomme, Gébrine El Khoury, and Jean-Louis J Vanoverschelde. Mechanisms of recurrent aortic regurgitation after aortic valve repair: predictive value of intraoperative transesophageal echocardiography. *JACC: Cardiovascular Imaging*, 2(8):931–939, 2009.
- [15] Shunsuke Miyahara, Atsushi Omura, Toshihito Sakamoto, Yoshikatsu Nomura, Takeshi Inoue, Hitoshi Minami, Kenji Okada, and Yutaka Okita. Impact of postoperative cusp configuration on midterm durability after aortic root reimplantation. *The Journal of Heart Valve Disease*, 22(4):509–516, 2013.

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

-Разработка редуцированной модели кровотока, учитывающей персонализированные краевые условия и персонализированную геометрию расположения сосудов после операции Фонтена.

-Валидация редуцированной модели кровотока.

-Разработка метода автоматизированного поиска наилучшей геометрии соединения сосудов на основе методов оптимизации и методов машинного обучения.

## 1.3.1 Обзор редуцированных моделей кровотока, учитывающих геометрические особенности в точке стыковки сосудов

Пациентам со сложными врожденными пороками сердца, а именно, при наличии единственного желудочка, проводится паллиативная хирургическая коррекция в несколько этапов. На первом этапе в период новорожденности формируется системно-пульмональный шунт между аортой и легочной артерией, чтобы подготовить сосудистое русло к дальнейшим операциям (операция Норвуда). На втором этапе легочный ствол перевязывается, а верхняя полая вена подшивается к легочной артерии, образуя двунаправленный кава-пульмональный анастомоз (операция Глена). На третьем этапе нижняя полая вена также подшивается к легочной артерии (операция Фонтена), в результате чего образуется полное кава-пульмональное соединение (ПКПС).

Данная методика является эффективным методом хирургической коррекции. Однако, у многих пациентов в отдаленном периоде наблюдаются осложнения. Многие исследователи объясняют возникновение осложнений неэффективно сформированным полным кава-пульмональным соединением, способствующему неравномерному распределению потока крови из полых вен, а также печеночного кровотока в левую и правую легочные артерии, диссипации энергии, повышенному напряжению стенки сосуда. Для улучшения прогноза необходимо проводить персонализированные численные расчеты кровотока с целью поиска оптимальной конфигурации соединения сосудов. Оптимизировать необходимо как геометрию двунаправленного кава-пульмонального анастомоза, так и полного кава-пульмонального соединения. Численные расчеты гемодинамики могут проводиться 1D или 3D моделями.

При создании 1D модели течения крови в точках стыковки сосудов, как правило, требуют выполнения закона сохранения массы и еще одного закона. Есть работы, где в качестве второго закона предполагается непрерывность полного или статического давления [1]. Такой подход не учитывает потери энергии в точках стыковки сосудов. В масштабах сосудистого дерева данное упрощение может оказаться существенным, а перепад давления значимо недооцененным.

Коэффициент потери энергии может быть оценен эмпирически для Т-бифуркаций [2], но не для произвольной Y-бифуркации или стыковки сосудов с большим количеством соединяющихся сосудов. Например, данный подход успешно использовался при 1D расчете кровотока в стенозированном сосуде с установленным обводящим шунтом (шунт и аорта образовывали две Т-образные бифуркации со сходящимися и расходящимися потоками) [3]. Сравнение персонализированных численных результатов расчетов для 8 свиней с установленным аортальным шунтом и соответствующих фазово-контрастным МРТ исследований показало необходимость учета потерь энергии в точках стыковки аорты и шунта.

В работе [4] предложен метод оценки коэффициента потери энергии для трубопроводов. Предполагается, что стыковаться могут  $n$  трубок, в одной из которых (входящей) сосредоточена большая часть энергии потока. Коэффициент потери энергии вычисляется с учетом площади поперечных сечений, потоков и угла между входящей и исходящей трубами. Данный метод может быть обобщен на случай стыковки сосудов с любым углом, любым количеством соединяющихся веток и любого режима течения [5]. Для этого вводится входящий псевдососуд, позволяющий получить гладкое решение для пульсирующего разнонаправленного течения. Кроме того, учитывается обмен энергией между исходящими ветвями. Данный метод валидирован с помощью трехмерных CFD расчетов.

Помимо того, что традиционные условия сопряжения численных решений 1D уравнений гемодинамики в узлах не учитывают геометрические характеристики, также не учитываются и эластичные свойства стенок сосудов, способствующих продвижению крови по сосудам. В работе [6] новые условия сопряжения, лишённые данных недостатков, выводятся на основе асимптотического анализа 3D модели гемодинамики. В результате получают модифицированные условия Киргхоффа.



При оптимизации конфигурации полного кава-пульмонального соединения, как правило, используются трехмерные модели течения жидкости, основанные на уравнениях Навье-Стокса [7–10]. При локальных трехмерных расчетах для постановки граничных условий используются предоперационные данные, что не является корректным при прогнозировании исходов операции [4]. В связи с этим необходимо использование глобальных моделей кровообращения для обеспечения реалистичности расчетов. Двухмасштабные модели кровообращения подходят для решения поставленных задач [11], однако, вычисления оказываются довольно трудоемкими, поскольку включают трехмерные расчеты.

В рамках данного проекта разрабатывается новая редуцированная модель течения крови, где расчет в области кава-пульмонального соединения будет проводиться с помощью физически информированной нейросети.

### 1.3.2 Разработка архитектуры физически-информированной нейросети и ее обучение

В отчетном периоде была выполнена доработка нейросети, описывающей течение крови в области сосудистой бифуркации (область, образуемая делением сосуда на два), также рассматривались области стыковки четырех сосудов. Для бифуркаций был расширен набор данных для обучения и контроля качества, в функцию ошибки были добавлены два слагаемых, соответствующих выполнению закона сохранения массы и выполнению условия симметрии потока в симметричной бифуркации. Для областей стыковки четырех сосудов рассматривались случаи, когда все четыре сосуда лежат в одной плоскости. Был разработан генератор геометрических областей для расчетов, созданы геометрии в широком физиологическом диапазоне геометрических параметров, проведены расчеты с использованием стационарной 3D модели течения жидкости, сформирован массив данных и проведено обучение нейросети.

#### 1.3.2.1 Генерация набора данных

Цель построения нейронной сети - предсказание значений потоков на границах трехмерной области, исходя из геометрии и заданных давлений на границах втекания и вытекания. С этой целью мы применяем нейросетевой подход, в нашем случае математически формализованный как задача многомерной регрессии. Геометрия бифуркации и области стыковки четырех сосудов параметризуется с помощью углов соединения сосудов и их радиусов. Давления на границах втекания и вытекания используются в качестве граничных условий для стационарных уравнений Навье-Стокса в области с жесткими стенками.

Чтобы автоматизировать построение параметрических 3D-сеток для бифуркаций, мы разработали специальное программное обеспечение, основанное на библиотеке GMSH [12].

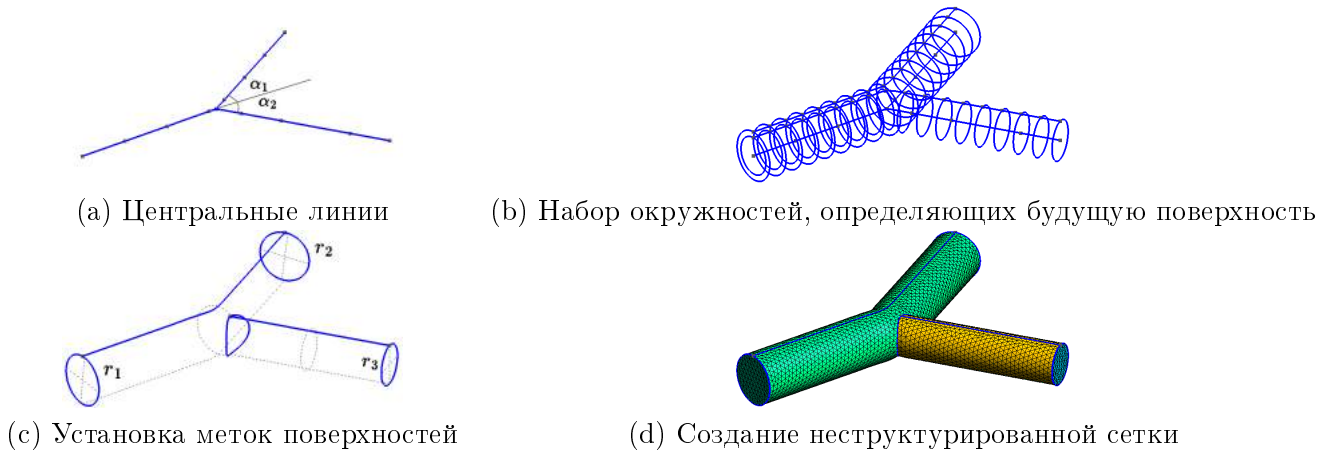


Рис. 3.1: Иллюстрация алгоритма генерации сетки для создания трехмерной геометрической модели и вычислительной области бифуркации.

Мы предполагаем, что все сосуды лежат в одной плоскости. В случае бифуркаций генератор принимает в качестве входных данных два угла между сосудами и их радиусы (см рис. 3.1a,3.1c). Мы предполагаем, что первый сегмент соответствует родительскому сосуду, а два других — дочерним. Вычислительная область определяется как объединение нескольких криволинейных труб, каждая из которых плавно соединяет родительский сегмент с дочерними. Для достижения плавных переходов сглаженная центральная линия строится с помощью В-сплайна пятой степени с контрольными точками, лежащими на родительском и дочернем сегментах (см. рис. 3.1a). На каждом В-сплайне вершины расположены с постоянным пространственным шагом, приблизительно равным половине диаметра трубы. В построенных вершинах вычисляется направление касательной к В-сплайну и в перпендикулярной плоскости устанавливается окружность с диаметром, соответствующим заданному отрезку. Набор окружностей определяет каркас будущей геометрии (см. рис. 3.1b). Поверхность итоговой геометрии параметризуется В-образным сплайном второй степени.

После объединения всех изогнутых фрагментов участки поверхности помечаются метками, соответствующими боковой поверхности, входящему участку и нескольким выходящим участкам (см рис. 3.1c). При построении неструктурированной сетки используется равномерный интервал между метками (см. рис. 3.1d). После построения применяется дополнительная оптимизация сетки из пакета Ani3D [13]. Оптимизация включает в себя перераспределение тетраэдров со всеми вершинами, лежащими на границе области. Это свойство способствует устойчивости численных методов при вычислении потока в бифуркации.

Геометрические модели и расчетные сетки для областей стыковки четырех сосудов строятся аналогичным образом. Примеры представлены на рис. 3.2.

При расчете гидродинамических параметров кровь предполагается вязкой несжимаемой жидкостью с вязкостью  $\nu = 0,04 \text{ см}^2\text{s}^{-1}$  и плотностью  $\rho = 1 \text{ г/см}^3$ . Трехмерная область бифуркации/стыковки четырех сосудов  $\Omega$  (см рис. 3.1d/3.2) с границей  $\partial\Omega$  состоит из жестких стенок  $\Gamma_0$ , входа/двух входов  $\Gamma_{in}$  и двух выходов  $\Gamma_{out}$ . Кровоток в области  $\Omega$  описывается стационарными трехмерными уравнениями



Рис. 3.2: Примеры расчетных сеток для областей стыковки четырех сосудов.

Навье-Стокса:

$$\begin{aligned}
 \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} - \nu \Delta \mathbf{u} + \nabla p &= \mathbf{0} && \text{in } \Omega, \\
 \operatorname{div} \mathbf{u} &= 0 \\
 \mathbf{u} &= \mathbf{0} && \text{on } \Gamma_0, \\
 \nu \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{n}} - p \mathbf{n} &= \mathbf{0} && \text{on } \Gamma_{in/out},
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

где  $p$  — давление,  $\mathbf{u}$  — векторное поле скорости,  $\mathbf{n}$  — вектор внешней нормали к боковой поверхности. Для неподвижной боковой стенки ставятся граничные условия прилипания и непротекания.

Для аппроксимации уравнений (3.1) используется метод конечных элементов Тейлора-Худа (P2/P1). Для решения полученной системы уравнений применяется мультифронтальный прямой метод, основанный на точной факторизации матрицы и реализованный с помощью программного обеспечения MUMPS [14]. В результате решения задачи находятся поля векторов скорости и давления в бифуркации. Потоки крови  $Q$  на границах  $\Gamma_{in/out}$  рассчитываются для дальнейшего обучения нейронной сети по формуле

$$Q = \int_{\Gamma_{in/out}} \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} ds. \tag{3.2}$$

### 1.3.2.2 Архитектура физически информированной нейросети

Рассмотрим структуру нейронной сети с прямой связью для прогнозирования значений входного и выходного потоков  $q_1$ ,  $q_2$  и  $q_3$  на основе геометрии бифуркации и значений давления  $p_1$ ,  $p_2$  и  $p_3$ .

Нейронные сети с прямой связью (FFNN) [15] образуют широко используемый класс. В FFNN исходные данные передаются напрямую от входов к выходам без обратной связи. Конкретная реализация FFNN состоит из последовательности слоев. Каждый слой содержит набор нейронов (см. рис. 3.3). Каждый

нейрон в слое соединен с нейронами из предыдущего и последующего слоев. Входные данные передаются по сети, и каждый нейрон выполняет операцию, основанную на его входных значениях, функции активации и весах соединений. Затем результат передается на следующий слой. Процесс повторяется до тех пор, пока не достигнет выходного слоя, который выдает окончательный результат.

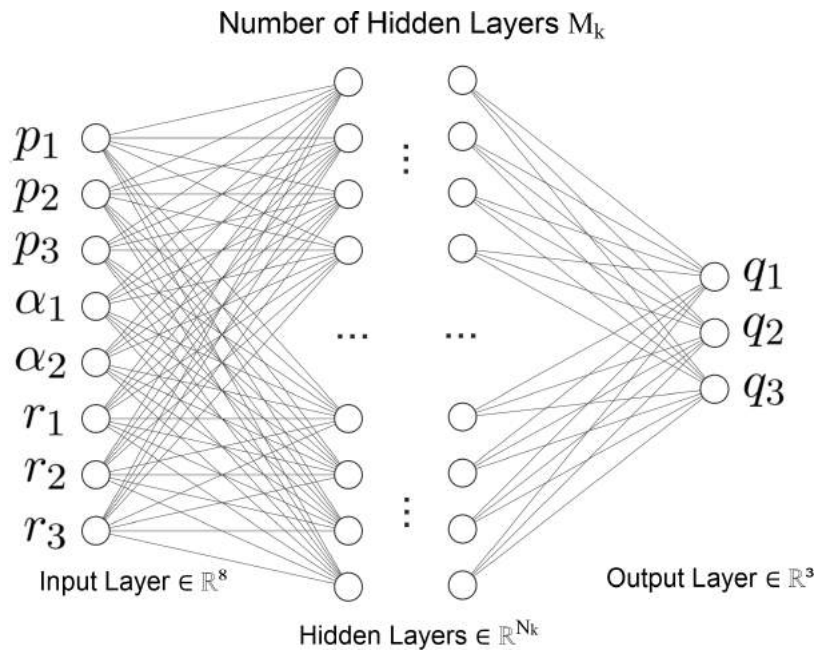


Рис. 3.3: Структура спроектированной нейронной сети с прямой связью.  $M_k$  — количество скрытых слоев,  $N_k$  — количество нейронов в скрытых слоях,  $k$  — индекс реализации FFNN.

Определение FFNN подразумевает установку количества слоев и нейронов, функции активации для каждого нейрона, функции потерь, которая зависит от весов соединений между нейронами, алгоритма отсева для возможного случайного отключения некоторых нейронов от сети, процедуры оптимизации для минимизации функции потерь относительно весов. Мы обсудим все эти составляющие ниже.

Для конкретной нейросети количество слоев и нейронов в каждом слое определяется в зависимости от задачи и доступных данных. Слишком маленькие FFNN дают плохое качество. Слишком большие FFNN дают высокое качество для известного набора данных и неудовлетворительное качество для новых данных (эффект переобучения).

Количество нейронов в первом слое равно количеству входных параметров (восемь). Количество нейронов в последнем слое равно количеству прогнозируемых параметров (три). Размер других (скрытых) слоев может быть определен различными способами. В нашем случае был осуществлен экспериментальный выбор подходящего размера за счет большого количества численных экспериментов. Изначально был задан явно избыточный размер FFNN с последующим удалением некоторых нейронов из сети на этапе обучения случайным образом [16]. Этот алгоритм позволяет избежать чрезмерной адаптации к входным данным и, таким образом, уменьшает перетренированность FFNN.

Перед передачей данных на следующий слой нейронная сеть применяет функцию активации к взвешенной сумме сигналов от нейронов предыдущего уровня. В нашей реализации использована сигмовидная

функция [17]

$$f(x) = (1 + e^{-x})^{-1}, \quad (3.3)$$

где  $x$  — сумма выходных сигналов от нейронов предыдущего слоя.

Основным вопросом при проектировании FFNN является выбор функции потерь (ошибок). Функция потерь является функцией двух переменных  $\text{Loss}(\mathbf{y}, \hat{\mathbf{y}})$ , где  $\mathbf{y}$  — вектор прогнозируемых значений и  $\hat{\mathbf{y}}$  — вектор истинных значений. Функция потерь должна быть неотрицательной и непрерывно-дифференцируемой [18].

Мы рассматриваем и сравниваем две функции ошибок: Функция потерь Хубера (HLF) [19] и физически регуляризованную функцию потерь (PRLF), которую мы также называем PINN (физически информированная нейронная сеть). HLF — это модификация стандартной функции среднеквадратичной ошибки (MSEF), которая является дифференцируемой и менее (линейно) чувствительной к выбросам.

$$\text{HLF}(\mathbf{y}, \hat{\mathbf{y}}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \begin{cases} \frac{1}{2}(y_i - \hat{y}_i)^2, & |y_i - \hat{y}_i| \leq \gamma \\ \gamma(|y_i - \hat{y}_i| - \frac{1}{2}\gamma), & \text{otherwise,} \end{cases} \quad (3.4)$$

где  $n$  — количество строк в наборе данных,  $y_i$  — прогнозируемые значения,  $\hat{y}_i$  — истинные значения,  $\gamma$  — предопределенный параметр. MSE можно рассматривать как частный случай HLF при  $\gamma \rightarrow \infty$ . PRLF определяется как

$$\text{PRLF}(\mathbf{y}, \hat{\mathbf{y}}) = \text{HLF}(\mathbf{y}, \hat{\mathbf{y}}) + \text{PhysLoss}(\mathbf{y}, \hat{\mathbf{y}}), \quad (3.5)$$

где PhysLoss — компонента, определяющая выполнение физических законов и принципов. Этот подход является физической регуляризацией, а нейронные сети, использующие этот подход, называются физически информированными нейронными сетями (PINN) [20].

Мы вводим две физические закономерности. Первая — условие сохранения массы

$$q_1 + q_2 + q_3 = 0. \quad (3.6)$$

Вторая — симметрия потока в геометрически симметричной бифуркации при равенстве давлений на выходах

$$\begin{cases} q_2 = q_3, \\ (p_2 - p_3)^2 + (r_2 - r_3)^2 + (l_2 - l_3)^2 + (\alpha_1 - \alpha_2)^2 = 0. \end{cases} \quad (3.7)$$

В итоге физическая компонента функции потерь определяется как

$$\begin{aligned} \text{PhysLoss} = & \frac{\xi}{n} \sum_{i=1}^n \{ (q_{1i} + q_{2i} + q_{3i})^2 + \\ & + \psi(q_{2i} - q_{3i})^2 \theta \left( (p_{2i} - p_{3i})^2 + (r_{2i} - r_{3i})^2 + (l_{2i} - l_{3i})^2 + (\alpha_{1i} - \alpha_{2i})^2 \right) \} \end{aligned} \quad (3.8)$$

где  $n$  — количество строк в наборе данных,  $\xi$  — вес компонента закона сохранения,  $\psi$  — вес компонента симметрии,  $q_{1i}, q_{2i}, q_{3i}$  — прогнозируемые значения  $i$ -го потока,  $p_{2i}, p_{3i}$  — давления на концах исходящих сосудов,  $r_{2i}, r_{3i}$  — радиусы исходящих сосудов,  $\alpha_{1i}, \alpha_{2i}$  — углы бифуркации, функция  $\theta(x)$  определяется как

$$\theta(x) = \begin{cases} 1, & x = 0, \\ 0, & x \neq 0. \end{cases} \quad (3.9)$$

Точность полученных результатов сравнивается путем функции относительной погрешности (REF)

$$\text{REF} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{|y_i - \hat{y}_i|}{\hat{y}_i}. \quad (3.10)$$

### 1.3.2.3 Обучение нейросети

Обучение FFNN основано на алгоритме обратного распространения ошибок [21], который позволяет оптимизировать параметры сети для минимизации ошибки прогнозирования. В нашей реализации весовые коэффициенты определяются с использованием метода оптимизации Adam (Adaptive Moment Estimation) [22]. Суть метода заключается в адаптивном изменении скорости обучения для каждого параметра на основе первого и второго моментов градиента функции потерь. Это обеспечивает быструю сходимость к оптимальному решению и уменьшает влияние шума в данных на обучение модели. Алгоритм Adam можно сформулировать следующим образом

$$\begin{cases} m_t = \beta_1 m_{t-1} + (1 - \beta_1) g_t, \\ v_t = \beta_2 v_{t-1} + (1 - \beta_2) g_t^2, \\ \hat{m}_t = \frac{m_t}{1 - \beta_1^t}, \\ \hat{v}_t = \frac{v_t}{1 - \beta_2^t}, \\ \theta_t = \theta_{t-1} - \alpha \frac{\hat{m}_t}{\sqrt{\hat{v}_t + \epsilon}}, \\ g_t = \nabla_{\theta_t} \mathcal{L}(\theta_t) = \left[ \frac{\partial \mathcal{L}(\theta_t)}{\partial \theta_{t1}}, \frac{\partial \mathcal{L}(\theta_t)}{\partial \theta_{t2}}, \dots, \frac{\partial \mathcal{L}(\theta_t)}{\partial \theta_{tn}} \right], \end{cases} \quad (3.11)$$

где  $t$  — номер итерации,  $\beta_1, \beta_2 \in [0, 1)$  — коэффициенты затухания для моментов, которые выбираются вручную,  $m_t$  и  $v_t$  — первый и второй моменты градиентов на итерации  $t$ , которые устанавливаются равными 0 на первой итерации,  $\hat{m}_t$  и  $\hat{v}_t$  — скорректированные значения моментов на итерации  $t$ ,  $\theta_t$  — вектор весов нейронной сети на итерации  $t$ ,  $g_t$  — градиент  $\theta_t$  относительно для функции потерь  $\mathcal{L}$ ,  $\alpha$  — скорость обучения, которая выбирается вручную и контролирует, насколько изменяются веса нейронной сети на каждой итерации,  $\epsilon$  — небольшое число для придания алгоритму численной устойчивости.

### 1.3.3 Разработка редуцированной модели кровотока, учитывающей персонализированные краевые условия и персонализированную геометрию расположения сосудов после операции Фонтена

Базовой редуцированной моделью является ранее разработанная и хорошо себя зарекомендовавшая во многих клинических приложениях сетевая динамическая 1D модель кровообращения [23]. Кровь считается вязкой несжимаемой жидкостью, сосуды — 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  $\bar{p} - p_{\text{ext}}$ :

$$\begin{cases} \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial(S\bar{u})}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial \bar{u}}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{u}^2/2 + \bar{p}/\rho)}{\partial x} = \psi(t, x, S, \bar{u}) \\ \bar{p} - p_{\text{ext}} = \rho_w c_w^2 f(\tilde{S}) \end{cases} \quad \text{for } x \in (0, b). \quad (3.12)$$

Здесь  $\psi(t, x, S, \bar{u})$  — внешние силы (например, сила трения, гравитация),  $p_{\text{ext}}$  — давление окружающих тканей,  $\tilde{S} = \hat{S}^{-1}S$ ,  $\hat{S}$  площадь сечения сосуда при нулевом трансмуральном давлении. Третье уравнение в (3.12) описывает эластичные свойства стенок сосудов,  $\rho_w$  — плотность стенки,  $c_w$  — скорость распространения малых возмущений в материале стенки сосуда, функция  $f$  определяется следующим образом [23]:

$$f(\tilde{S}) = \begin{cases} \exp(\tilde{S} - 1) - 1, & \tilde{S} > 1, \\ \ln \tilde{S}, & \tilde{S} \leq 1. \end{cases} \quad (3.13)$$

Начальные условия для модели:  $\bar{u}|_{t=0} = \bar{u}_0$ ,  $S|_{t=0} = S_0$ . Для решения гиперболической системы уравнений (3.12) 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 (3.12). Основное отличие состоит в том, что данные сосуды обладают некоторым эффективным гидродинамическим сопротивлением, значение которого подбирается так, чтобы разница давлений на концах этих сосудов соответствовала физиологически корректному артерио-венозному градиенту.

В точках стыковки сосудов, включая стыковку с виртуальными сосудами, предполагаются условия Пуазейля (3.14) и закон сохранения массы (3.15)

$$\bar{p}_k(S_k(t, \tilde{x}_k)) - p_{\text{node}}^l(t) = \varepsilon_k R_k^l S_k(t, \tilde{x}_k) \bar{u}_k(t, \tilde{x}_k), \quad k = k_1, k_2, \dots, k_M, \quad (3.14)$$

$$\sum_{k=k_1, k_2, \dots, k_M} \varepsilon_k S_k(t, \tilde{x}_k) \bar{u}_k(t, \tilde{x}_k) = 0, \quad (3.15)$$

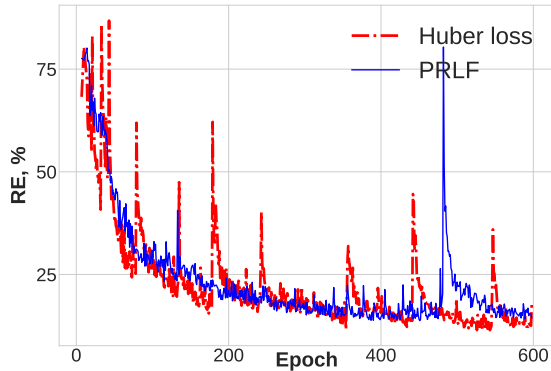
где  $l$  – номер узла стыковки,  $M$  – количество стыкующихся сосудов,  $k_1, k_2, \dots, k_M$  – номера стыкующихся сосудов,  $p_{node}^l(t)$  – давление в узле  $l$ ,  $R_k^l$  – гидродинамическое сопротивление между  $k$ -м сосудом и  $l$ -м узлом. Для сосудов, входящих в узел,  $\varepsilon_k = 1$ ,  $\tilde{x}_k = L_k$ , 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 (3.12), система (3.14)-(3.15) дополняется условием совместности для каждого сосуда в каждой точке стыковки сосудов. Подробное описание используемой модификации модели представлено, например, в монографии [23], авторами которой являются руководитель и участники настоящего проекта. Представленная модель глобального течения крови может быть замкнута 0D моделью сердца [23].

Течение крови в области интереса сложной геометрической формы, а именно, в полном кава-пульмональном соединении рассчитывается предварительно обученной нейронной сетью (см. раздел 1.3.2). Поскольку нейронная сеть в текущем варианте обучается на результатах трехмерных расчетов течения жидкости, то есть по сути заменяет 3D модель, для сопряжения 1D модели глобального кровообращения и нейронной сети используются такие же условия и алгоритм, как и в двухмасштабной 1D-3D модели [11]. 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 [24]. В связи с тем, что нейронная сеть обучается на расчетах трехмерной модели с жесткими стенками, отсутствие эластичности может быть скомпенсировано добавлением 0D модели (эластичного шара) на стыке 1D модели и нейросети. Алгоритм сопряжения подробно описывается в работе [25].

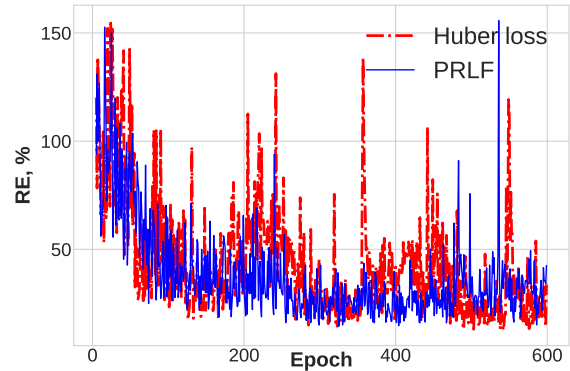
Персонализация разработанной редуцированной модели для конкретного пациента проводится на основе предоперационных клинических данных. В качестве графа сосудов предлагается использовать физиологически корректную сосудистую сеть, построенную на основе общих анатомических представлений с использованием среднестатистических размеров артерий и вен. Размеры сосудов конкретного пациента могут масштабироваться путем умножения на коэффициенты согласно росту и другим антропометрическим данным. Калибровка других параметров 1D модели (сопротивлений, скоростей распространения малых возмущений) может проводиться на основе данных ультразвукового исследования сосудов, назначаемого каждому пациенту перед операцией Фонтена [11]. Модель сердца также может быть настроена на основе имеющихся исследований УЗИ, КТ/МРТ, внутрисосудистого измерения давления [23]. Глобальная модель кровообращения позволяет учитывать коллатеральный кровоток, потоки через фенестрации, созданные на первом этапе хирургического вмешательства системно-легочные шунты и различные патологии, что является важным этапом персонализации модели.

Диаметры верхней, нижней полых вен и легочных артерий, углы в случае имеющихся соединений определяются на основе КТ/МРТ исследований с помощью полуавтоматического алгоритма сегментации медицинских данных, разработанного ранее участниками проекта, и передаются в нейронную сеть в качестве параметров.

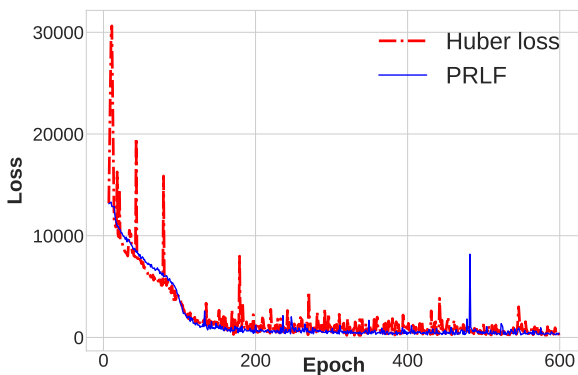




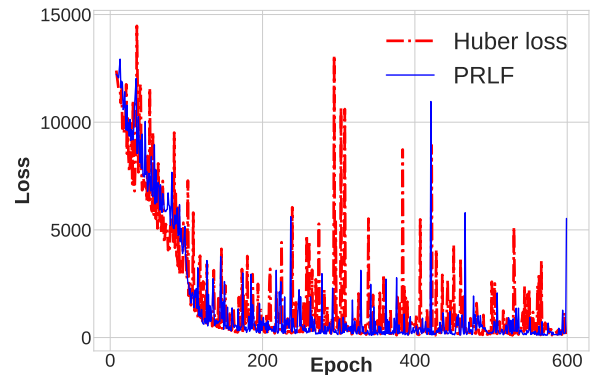
(а) Относительная погрешность при обучении



(б) Относительная погрешность на тесте



(в) Сравнение HLF и PRLF при обучении



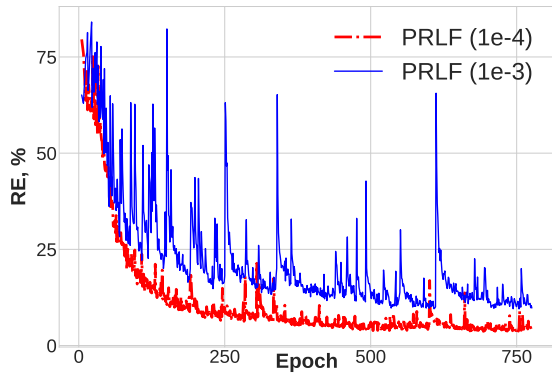
(д) Сравнение HLF и PRLF на тесте

Рис. 3.4: Сравнение сходимости классической FFNN с функцией потерь HLF и физически-информированной сети с функцией потерь PRLF.

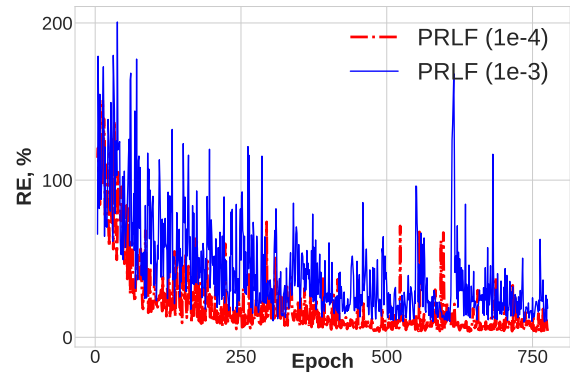
### 1.3.4 Валидация редуцированной модели кровотока

В первой серии валидационных вычислительных экспериментов продемонстрирована меньшая относительная погрешность и более высокая скорость сходимости нейросети FFNN с использованием функции потерь PRLF, чем классической FFNN с HLF. Рис. 3.4 демонстрирует процесс обучения нейронной сети. Во время обучения относительная погрешность FFNN на основе PRLF сопоставима с относительной погрешностью FFNN на основе HLF и демонстрирует меньшие колебания (см. рис. 3.4а). Начиная с 100-й итерации обучения, результаты, основанные как на PRLF, так и на HLF, демонстрируют резкое снижение абсолютного значения функции ошибки (см. рис. 3.4с). Абсолютное значение FFNN на основе PRLF меньше, чем в случае с HLF. Тестовый набор данных демонстрирует аналогичное поведение (см. рис. 3.4b,d).

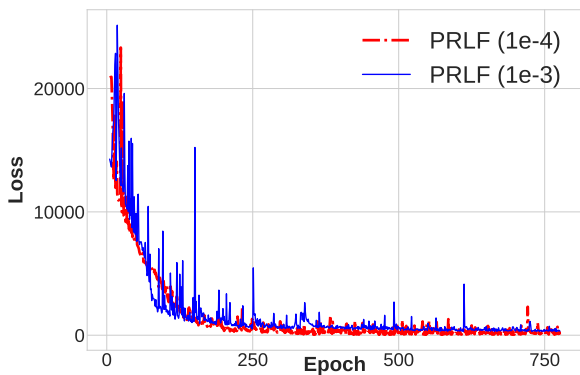
Во второй серии валидационных вычислительных экспериментов сравнивались скорости обучения (LR) двух идентичных нейросетей FFNN на основе функции потерь PRLF. Нейросеть FFNN с  $LR=10^{-3}$  была обучена за 3100 итераций, а с  $LR=10^{-4}$  — за 800 итераций. Второй случай продемонстрировал



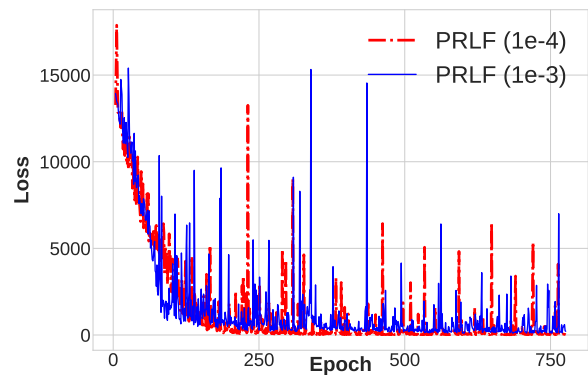
(a) Относительная погрешность при обучении



(b) Относительная погрешность на тесте



(c) Значения PRLF при обучении



(d) Значения PRLF на тесте

Рис. 3.5: Влияние порога относительной погрешности на сходимость FFNN с функцией потерь PRLF.

более быструю сходимость к меньшему значению функции ошибки по сравнению с первым. Рис. 3.5 демонстрирует эти результаты. Использование тестового набора данных подтверждает эти выводы (см. рис. 3.5b,d). FFNN с меньшей скоростью обучения достигла приемлемого значения относительной погрешности 4% на тестовом наборе (см. рис. 3.5b).

### 1.3.5 Разработка метода автоматизированного поиска наилучшей геометрии соединения сосудов на основе методов оптимизации и методов машинного обучения

При поиске оптимальной конфигурации, как правило, минимизируют потери энергии потока в кавапульмональном соединении, а также добиваются сбалансированного распределения печеночного и общего кровотока в правую и левую легочные артерии. В работе [10] показано, что распределение печеночного и суммарного кровотока между ПЛА и ЛЛА (правая и левая легочные артерии) чувствительно к углу между НПВ и ПЛА, но не к углу между НПВ и ВПВ. На величину диссипации энергии

главным образом влияет угол между НПВ и ВПВ (нижняя и верхняя полые вены), но не угол между НПВ и ПЛА. Увеличение двух упомянутых углов приводит к нахождению оптимальной конфигурации полного кава-пульмонального соединения. В работе [26] на основе анализа ангиограмм 17 пациентов показано, что для детей 3-6 лет кондуит диаметра 16-18 мм является оптимальными по толщине. При установке кондуита диаметром более 18 мм в фазу выдоха наблюдается обратное течение крови из верхней поллой вены и легочных артерий в нижнюю полую вену. С увеличением диаметра кондуита в нем образуются застойные зоны. Другие авторы [27] установили, что оптимальный размер кондуита определяется на основе актуального диаметра поллой вены и расстояния между НПВ и ПЛА. В работе [28] приводятся *in vitro* эксперименты по моделированию течения жидкости в стеклянных трубках и показано, что для минимизации диссипации энергии полном кава-пульмональном соединении необходим сдвиг НПВ и ВПВ друг относительно друга. Идеальное расстояние 1-1.5 венозных диаметра. Однако авторы [29] предположили, что эффективность сдвига НПВ относительно ВПВ зависит от размера сосудов (чем больше сосуды, тем эффективнее кровоток).

В работе [30] изучается влияние конфигурации полного кава-пульмонального соединения на гемодинамику у 108 пациентов. Геометрия сосудов каждого из них реконструируется из МРТ данных, проводится ее анализ: выделяются центральные линии, рассчитываются углы соединения и расстояние между ВПВ и кондуитом. Для каждого пациента была построена расчетная область и проведены численные 3D расчеты гемодинамики с целью вычисления потерь энергии и анализа сбалансированности распределения печеночного кровотока между ПЛА и ЛЛА. Оказалось, что потеря энергии обратно коррелирует с минимальным диаметром кондуита (или сформированного пути для кровотока), ПЛА и ЛЛА. Сердечный индекс (сердечный выброс, нормированный на площадь поверхности тела) коррелирует с минимальным диаметром сформированного во время операции Фонтена пути и отношением минимального к максимальному диаметрам ВПВ. Распределение печеночного кровотока коррелирует с расстоянием между ВПВ и кондуитом, распределением легочного кровотока, а также углом между сформированным путем кровотока и ВПВ.

Таким образом, анализ литературы показал, что при поиске оптимальной конфигурации полного кава-пульмонального соединения необходимо варьировать углы между кондуитом и ПЛА и кондуитом и ВПВ, диаметр кондуита, а также сдвиг кондуита относительно ВПВ. Кроме того, при поиске оптимальных конфигураций для конкретного пациента до начала хирургического лечения важно учитывать и возможные вариации угла между ВПВ и ПЛА.

Минимизируемые параметры:

1. легочные сопротивления  $R_{RP} = \frac{P_{RPA} - P_{atrium}}{Q_{RPA}}$ ,  $R_{LP} = \frac{P_{LPA} - P_{atrium}}{Q_{LPA}}$  и сопротивление ПКПС  $R_{TCPC} = \frac{P_{SVC} - P_0}{Q_{SVC}} + \frac{P_{IVC} - P_0}{Q_{IVC}} + \frac{P_{RPA} - P_0}{Q_{RPA}} + \frac{P_{LPA} - P_0}{Q_{LPA}}$  ( $F_1 = R_{RP} + R_{LP} + R_{TCPC}$ );
2. диссипация энергии ПКПС  $F_2 = E_{SVC} + E_{IVC} - E_{RPA} - E_{LPA}$ , где полная энергия в каждой из рассматриваемых точек  $E_{vessel} = P_{vessel} + \frac{\rho}{2} u_{vessel}^2$ ;
3. разность потоков в правое и левое легкие  $F_3 = \|Q_{RPA} - Q_{LPA}\|$ ,

где  $\rho$  — плотность крови;  $P_{vessel}$ ,  $Q_{vessel}$ ,  $u_{vessel}$  — давление, поток, скорость крови, осредненная по сечению, на границе области ПКПС в сосуде  $vessel$ ;  $P_{atrium}$  — давление в левом предсердии; SVC - ВПВ; IVC - НПВ ; RPA - ПЛА; LPA - ЛЛА. В данной постановке задачи не рассматривается распределение напряжения на стенку в области ПКПС в связи с тем, что непосредственно трехмерные расчеты не производятся.

Таким образом, задача оптимизации формулируется следующим образом: для ВПВ, ПЛА и ЛЛА с известными диаметрами найти диаметр кондуита и его точку крепления, углы соединения кондуита и ПЛА, кондуита и ВПВ, ВПВ и ПЛА, чтобы функционал  $F = F_1 + F_2^2 + F_3^2$  был минимальным. Граничные давления для области ПКПС могут быть заданными либо рассчитываться моделью глобального кровообращения (см. раздел 1.3.3).

Ограничения на области варьирования параметров накладываются особенностями анатомического строения рассматриваемой области и окружающих ее органов и тканей:

1. Длина участка правой легочной артерии, куда подшиваются ВПВ и кондуит, составляет примерно два диаметра ВПВ. Когда кондуит подшивается к ПЛА, он занимает практически всю длину между бифуркацией ПЛА и аортой, таким образом, выбор места анастомоза происходит практически однозначно. Поэтому возможность сдвига ВПВ относительно кондуита может быть реализована только при подшивании ВПВ к ПЛА на этапе формирования ДКПА. При этом, даже если на начальном этапе формирования ДКПА скоростные потоки крови оказываются не удовлетворительными, в последующем, при создании полного обхода, они могут быть оптимальными за счет добавления кровотока из нижней половины тела и снижения объема крови, притекающего из верхней половины тела. Таким образом, при оптимизации необходимо рассматривать такие сдвиги ВПВ относительно кондуита, чтобы длина отрезка ПЛА, соединенного с ВПВ и/или кондуитом не превышала двух диаметров ВПВ.
2. Углы соединения ВПВ с ПЛА и кондуита с ПЛА могут варьироваться в диапазоне [60:120] градусов. Анастомоз с большими или меньшими углами сложно реализовать на практике в силу анатомических ограничений.

Определение оптимальных значений предлагается проводить с использованием автоматизированного алгоритма Adam (см. п. 1.3.2.3).

# Литература

- [1] N. Stergiopoulos, DF. Young, and T.R. Rogge. Computer simulation of arterial flow with applications to arterial and aortic stenoses. *J Biomech.*, pages 1477–8, 1992. doi: 10.1016/0021-9290(92)90060-e.
- [2] A. Gardel. Les pertes de charge dans les écoulements au travers de branchments en te. *Bull Technique de la Suisse Romande*, 83(9):123–130, 1957.
- [3] BN Steele, J Wan, JP Ku, TJ Hughes, and CA Taylor. In vivo validation of a one-dimensional finite-element method for predicting blood flow in cardiovascular bypass grafts. *IEEE Trans Biomed Eng*, 50(6):649–56, 2003. doi: 10.1109/TBME.2003.812201.
- [4] MD Bassett, RJ Pearson, NP Fleming, and DE Winterbone. A multi-pipe junction model for onedimensional gas-dynamic simulations. *SAE Trans*, 112(3):565–583, 2003.
- [5] JP Mynard and K Valen-Sendstad. A unified method for estimating pressure losses at vascular junctions. *Int J Numer Method Biomed Eng.*, 31(7), 2015. doi: 10.1002/cnm.2717.
- [6] V. Kozlov and S. Nazarov. Transmission conditions in a one-dimensional model of bifurcating blood vessel with an elastic wall. *Zap. Nauchn. Sem.*, 438:138–177, 2015.
- [7] P. Trusty, T. Slesnick, and Z. et al. Wei. Fontan surgical planning: Previous accomplishments, current challenges, and future directions. *J. of Cardiovasc. Trans. Res.*, 11:133–144, 2018.
- [8] D. de Zelicourt and V. et al Kurtcuoglu. Patient-specific surgical planning, where do we stand? the example of the fontan procedure. *Ann Biomed Eng*, 44:174–186, 2016.
- [9] D. Siallagan, Y. Loke, L. Olivieri, and et al. Virtual surgical planning, flow simulation, and 3-dimensional electrospinning of patient-specific grafts to optimize fontan hemodynamics. *The Journal of Thoracic and Cardiovascular Surgery*, 155(4):1734–1742, 2018. doi: 10.1016/j.jtcvs.2017.11.068.
- [10] J. Ding, Y. Liu, and F. Wang. Influence of bypass angles on extracardiac fontan connections: a numerical study. *Int J Numer Method Biomed Eng*, 29(3):351–62, 2013. doi: 10.1002/cnm.2508.
- [11] T. Dobroserdova, Yu Vassilevski, and S. et. al Simakov. Two-scale haemodynamic modelling for patients with fontan circulation. *Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling*, 36(5):267–278, 2021.

- [12] C. Geuzaine and J.F. Remacle. Gmsh: A 3-d finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 79:1309 – 1331, 09 2009. doi: 10.1002/nme.2579.
- [13] Yu. Vassilevski and K. Lipnikov. An adaptive algorithm for quasioptimal mesh generation. *Comp. Math. Math. Phys*, 39:1468–1486, 01 1999.
- [14] Patrick R. Amestoy, Iain S. Duff, Jean-Yves L'Excellent, and Jacko Koster. A fully asynchronous multifrontal solver using distributed dynamic scheduling. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 23(1):15–41, 2001. doi: 10.1137/S0895479899358194.
- [15] G. Bebis and M. Georgiopoulos. Feed-forward neural networks. *IEEE Potentials*, 13(4):27–31, 1994. doi: 10.1109/45.329294.
- [16] N. Srivastava, G. Hinton, A. Krizhevsky, I. Sutskever, and R. Salakhutdinov. Dropout: A simple way to prevent neural networks from overfitting. *Journal of Machine Learning Research*, 15:1929–1958, 06 2014.
- [17] N. Sridhar. The generalized sigmoid activation function: Competitive supervised learning. *Information Sciences*, 99(1):69–82, 1997. ISSN 0020-0255. doi: [https://doi.org/10.1016/S0020-0255\(96\)00200-9](https://doi.org/10.1016/S0020-0255(96)00200-9). URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0020025596002009>.
- [18] I. Goodfellow, Y. Bengio, and A. Courville. *Deep Learning*. Adaptive computation and machine learning. MIT Press, 2016. ISBN 9780262035613. URL <https://books.google.co.in/books?id=Np9SDQAAQBAJ>.
- [19] P. Huber. Robust estimation of a location parameter. *Annals of Mathematical Statistics*, 35:492–518, 1964. URL <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:121252793>.
- [20] M.N. Amin and H. Meidani. Physics-informed regularization of deep neural networks. *J. Comput. Inf. Sci. Eng.*, 20, 2018. URL <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:203047559>.
- [21] R. Rojas. *The Backpropagation Algorithm*, pages 149–182. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 1996. ISBN 978-3-642-61068-4. doi: 10.1007/978-3-642-61068-4\_7. URL [https://doi.org/10.1007/978-3-642-61068-4\\_7](https://doi.org/10.1007/978-3-642-61068-4_7).
- [22] D. Kingma and Ba. J. Adam: A method for stochastic optimization. *CoRR*, abs/1412.6980, 2014. URL <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:6628106>.
- [23] Yu. Vassilevski, M. Olshanskii, S. Simakov, A. Kolobov, and A. Danilov. *Personalized Computational Hemodynamics. Models, Methods, and Applications for Vascular Surgery and Antitumor Therapy*. Academic Press, 2020.
- [24] A finite element solver and energy stable coupling for 3d and 1d fluid models. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 259:166–176, 2013. ISSN 0045-7825. doi: <https://doi.org/10.1016/j.cma.2013.03.018>.

- [25] T. Dobroserdova, M. Olshanskii, and S. Simakov. Multiscale coupling of compliant and rigid walls blood flow models. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 82:799–817, 2016.
- [26] K Itatani, K Miyaji, T Tomoyasu, and et al. Optimal conduit size of the extracardiac fontan operation based on energy loss and flow stagnation. *Ann Thorac Surg*, 88:565–72, 2009.
- [27] V Alexi-Meskishvili, S Ovroutski, P Ewert, and et al. Optimal conduit size for extracardiac fontan operation. *European Journal of Cardio-thoracic Surgery*, 18:690–695, 2000.
- [28] S Sharma, S Goudy, P Walker, and et al. In vitro flow experiments for determination of optimal geometry of total cavopulmonary connection for surgical repair of children with functional single ventricle. *J Am Coll Cardiol.*, 27(5):1264–9, 1996. doi: 10.1016/0735-1097(95)00598-6.
- [29] CG DeGroat, JD Carlton, CE Weinberg, and et al. Effect of vessel size on the flow efficiency of the total cavopulmonary connection: in vitro studies. *Pediatric Cardiology*, 23(2):171–177, 2002.
- [30] E Tang, M Restrepo, CM Haggerty, and et al. Geometric characterization of patient-specific total cavopulmonary connections and its relationship to hemodynamics. *JACC Cardiovasc Imaging*, 23(2): 215–24, 2014. doi: 10.1016/j.jcmg.2013.12.010.

# Задача 1.4. Персонализированные модели подсистем опорно-двигательного аппарата

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

## 1.4.1 Построение модели совместного функционирования плечевого и шейного отделов

### 1.4.1.1 Актуальность проблемы

Согласно Международной ассоциации по изучению боли (IASP), от 20% до 50% населения мира страдает от боли в шейных и плечевых суставах, а комбинация этих синдромов боли наблюдается в 10% случаев [1], [2]. Высокая распространенность (15–30%) болей в шейно-плечевом комплексе среди трудоспособного населения в возрасте от 30 до 50 лет создает значительную нагрузку на здравоохранительную систему и имеет важное социальное и экономическое значение [3], [4].

Биомеханика движений свободной верхней конечности тесно связана с работой осевого скелета. Имеются клинические свидетельства, указывающие на содружественное нормальное функционирование пояса верхних конечностей и шейного отдела позвоночника. В настоящее время эта гипотеза не является доказанной [5]. Проверка данной гипотезы имеет большую значимость для клинической практики, поскольку позволит развить методы лечения пациентов с заболеваниями шейно-плечевого отдела. При наличии сведений о вкладе каждой мышцы в реализацию движений, возможно вычислить распределение компенсаторной нагрузки при различных травмах и предложить способ лечения. Исследование работы мышц путём прямых измерений не является возможным. Дополнительным вспомогательным инструментом для исследований в данной области может служить биомеханическое моделирование. При наличии биомеханической модели с характеристиками, отражающими основные анатомические



особенности функционирования шейного и плечевого отделов, возможно провести расчёты вкладов мышц в движения головы и руки.

Основной целью работы на данном этапе является построение модели совместного нормального функционирования плечевого и шейного отделов.

### 1.4.1.2 Ограничения

Врачами-травматологами принято решение не включать связки в редуцированную модель, поэтому основное внимание на данном этапе уделяется заданию точек креплений сухожилий мышц. Процесс детектирования этих точек по данным компьютерной или магнитно-резонансной томографии является сложной задачей, поскольку крепление сухожилия может представлять из себя область большой площади и быть трудно отличимым от креплений других сухожилий на медицинских изображениях. Как правило, медицинские снимки в области плеча и шеи проводятся в областях локализации боли, в связи с чем детектирование точек креплений мышц вне этих областей реализовать по снимкам невозможно. В рамках данного исследования поиск точек креплений сухожилий осуществлялся в соответствии с данными анатомического атласа или заимствовался из других моделей. При масштабировании модели под антропометрические данные реального пациента координаты точек крепления автоматически корректируются. В качестве основного инструмента для получения данных об антропометрии пациента на данном этапе предлагается использовать данные, полученные при помощи технологии захвата движения. Такой подход позволяет быстро получать корректные координаты точек крепления сухожилий для всех необходимых мышц.

### 1.4.1.3 Описание основных необходимых элементов модели

**Кости** – твёрдые органы позвоночных животных. Кости пояса верхней конечности представлены лопаткой (*scapula*) и ключицей (*clavicle*). Среди костей свободной части верхней конечности в биомеханической модели будут реализованы плечевая (*humerus*), лучевая (*radius*) и локтевая (*ulna*) кости. К грудной клетке относятся рёбра (*ribs*, по 12 слева и справа) и грудина (*sternum*). Из позвоночного столба следует выделить 7 шейных позвонков (*cervical vertebrae*). К нему также относятся грудные (*lumbar*) и поясничные (*thoracic*) позвонки. Иллюстрации строения плечевого пояса и верхней конечности, а также шейного отдела приведены на рисунках 4.1 и 4.2.

Под **суставом** понимается подвижное соединение костей скелета. В модель совместного функционирования плечевого и шейного отделов необходимо встроить следующие суставы: грудино-ключичный (*sternoclavicular*), акромиально-ключичный / ключицы и плечевого отростка (*acromioclavicular*), плечевой (*shoulder*), локтевой (*elbow*).

**Мышцы** – органы, состоящие из мышечной ткани, способные сокращаться под действием нервных импульсов.

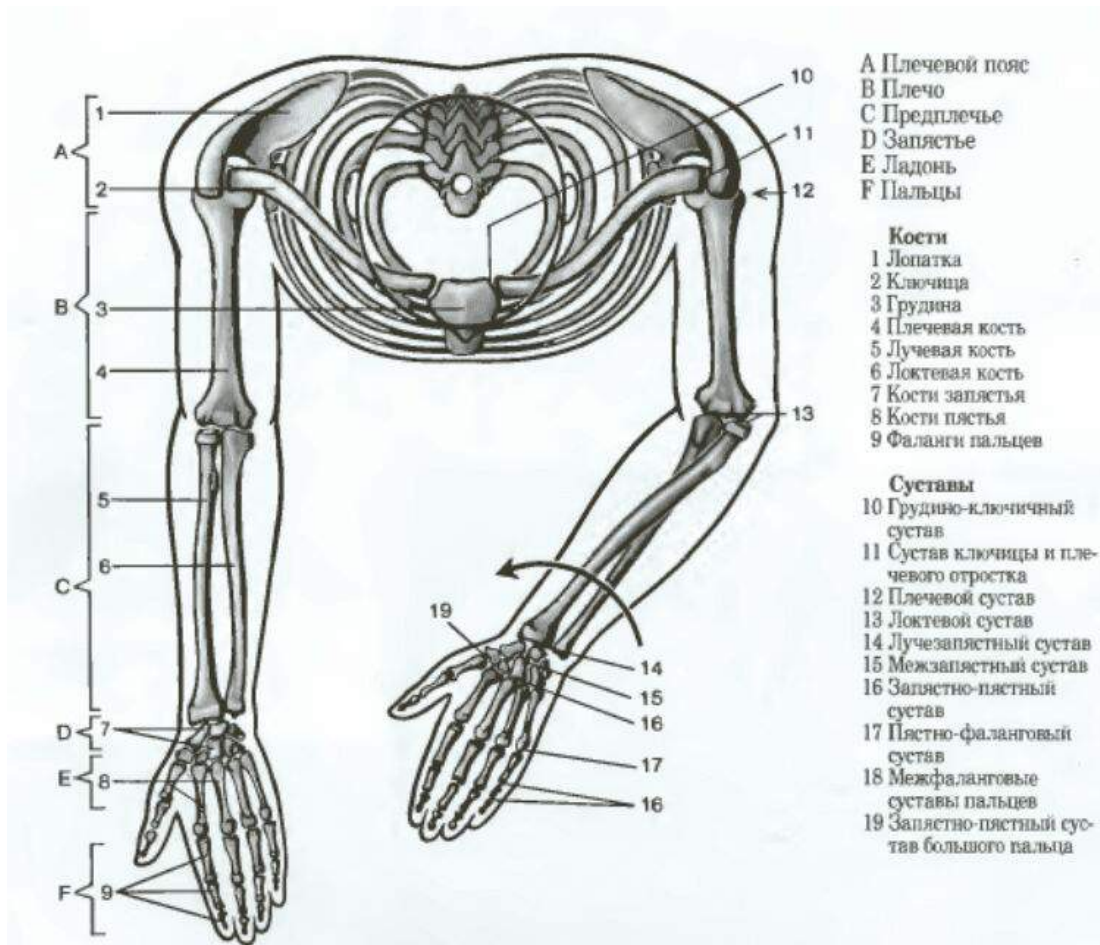


Рис. 4.1: Строение плечевого пояса и верхней конечности. Иллюстрация из [6].

Некоторые мышцы шеи и плеча проиллюстрированы на рисунках 4.3а,б.

#### 1.4.1.4 Краткий обзор известных моделей

В настоящее время в открытом доступе существуют биомеханические модели плечевого и шейного отделов. При построении модели совместного функционирования плечевого и шейного отделов за основу были взяты следующие модели:

1. Модель груднопоясничного отдела позвоночника и грудной клетки [8].

Данная модель была разработана для изучения распределения нагрузок между позвонками. Для исследуемой задачи она полезна детальностью проработки геометрии костей и мышц. Модель включает в себя подробное описание грудно-поясничного отдела позвоночника (от T1 до L5) и

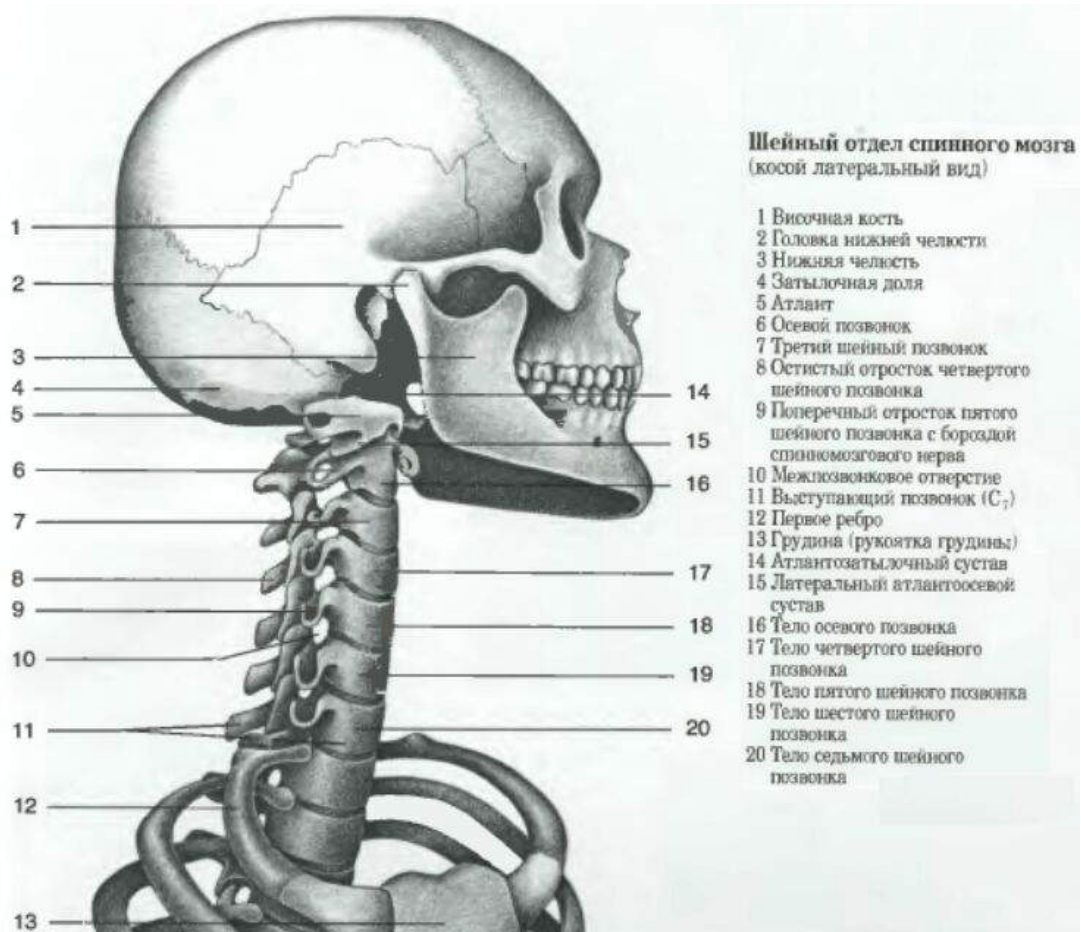


Рис. 4.2: Строение шейного отдела. Иллюстрация из [6].

грудную клетку с 24 рёбрами и грудиной. Голова, челюсть и шейные позвонки соединены в единое тело, что не позволяет моделировать шейные позвонки в отдельности. Верхние конечности прикреплены неподвижными суставами, поэтому изучать движение плеча моделью напрямую невозможно. Модель проверена для оценки спинной нагрузки и мышечного напряжения, результаты сравнены с измерениями *in-vivo* для междискового давления, позвоночного сжатия и данных электромиографии.

Модель проверена для оценки спинной нагрузки и мышечного напряжения, результаты сравнены с измерениями *in-vivo* для междискового давления, позвоночного сжатия и данных электромиографии.

## 2. Модель плеча [9].

Включает крупные мышцы грудной клетки и лопатки, а также задаёт кинематику последней. Отвечает на два главных вопроса. Во-первых, какую работу совершают лопаточно-грудные и плечевые мышцы во время пожимания плечами и поднятия руки. Во-вторых, какие движения лопатки контролируются крупными мышцами, например, трапециевидной и *Serratus Anterior*, во время этих движений плеча.

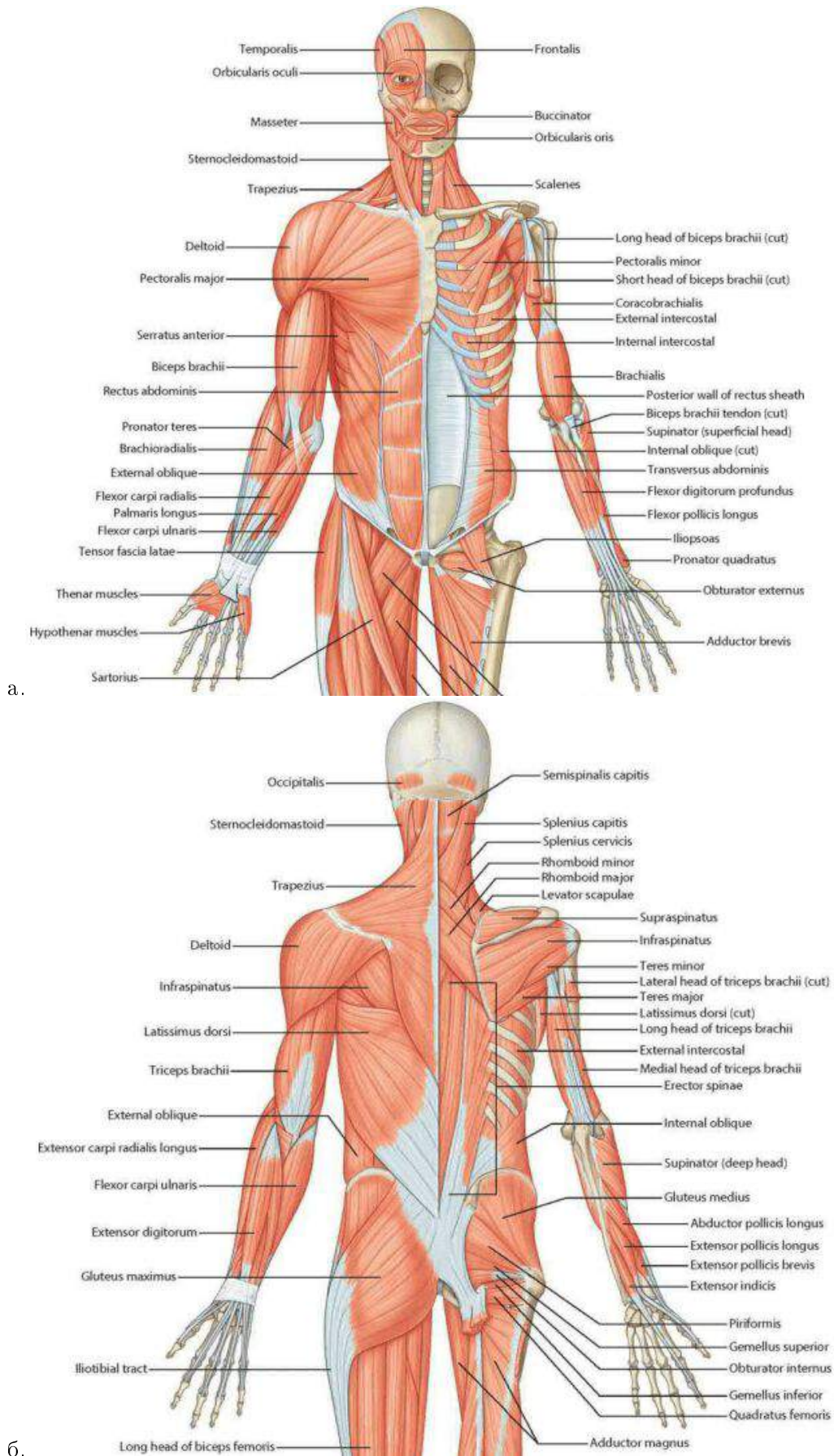


Рис. 4.3: Некоторые мышцы плеча. а. Вид спереди. б. Вид сзади. Иллюстрация из [7]

№	Название мышцы
1	Трапецевидная (Trapezius)
2	Передняя зубчатая (Serratus Anterior)
3	Ромбовидная (Rhomboides)
4	Мышца, поднимающая лопатку (Levator Scapulae)
5	Дельтовидная мышца (Deltoideus)
6	Большая круглая мышца (Teres major)
7	Подостная мышца (Infraspinatus)
8	Малая круглая мышца (Teres minor)
9	Подлопаточная мышца (Subscapularis)
10	Надостная мышца (Supraspinatus)
11	Грудино-ключично-сосцевидная мышца (Sternocleidomastoideus)
12	Грудино-подъязычная мышца (Sternohyoideus)
15	Лопаточно-подъязычная мышца (Omohyoideus)
16	Латеральная прямая мышца головы (Rectus capitis lateralis)
18	Большая задняя прямая мышца головы (Rectus capitis posterior major)
19	Малая задняя прямая мышца головы (Rectus capitis posterior minor)
20	Верхняя косая мышца головы (Obliquus capitis Superior)
21	Нижняя косая мышца головы (Obliquus capitis Inferior)
22	Задняя лестничная мышца (Scalenus posterior)
23	Средняя лестничная мышца (Scalenus medius)
25	Передняя лестничная мышца (Scalenus anterior)
26	Длиннейшая мышца шеи (Longissimus cervicis)
27	Длиннейшая мышца головы (Longissimus capitis)
28	Длинная мышца головы (Longus capitis)
29	Длинная мышца шеи (Longus colli)
30	Большая задняя прямая мышца головы (Rectus capitis posterior major)

Таблица 4.1: Мышцы, необходимые для модели совместного функционирования плеча и шеи.

Новаторством модели является движение условной точки лопатки по эллипсоиду вокруг грудной клетки. Модель позволяет задавать положение центра, а также линейных размеров этого эллипсоида. Такой подход путём снижения допустимых степеней свободы лопатки экономит вычислительные ресурсы и не сильно проигрывает в анатомичности.

Движение лопатки в рамках статьи параметризуется следующими обобщенными координатами:

- (a) Abduction/Adduction – углы приведения/отведения.
- (b) Elevation/Depression – углы подъёма/опускания.
- (c) Upward Rotation – вращение относительно оси Z.
- (d) Winging – угол подъёма края лопатки.

Ни рисунке 4.4 проиллюстрированы описанные степени свободы движения лопатки.

### 3. Модель шеи [10].

Данная модель разработана на основе предыдущих моделей шеи с целью добавления подъязычных мышц для уточнения сил сгибания / разгибания в верхнем отделе позвоночника. Добавление

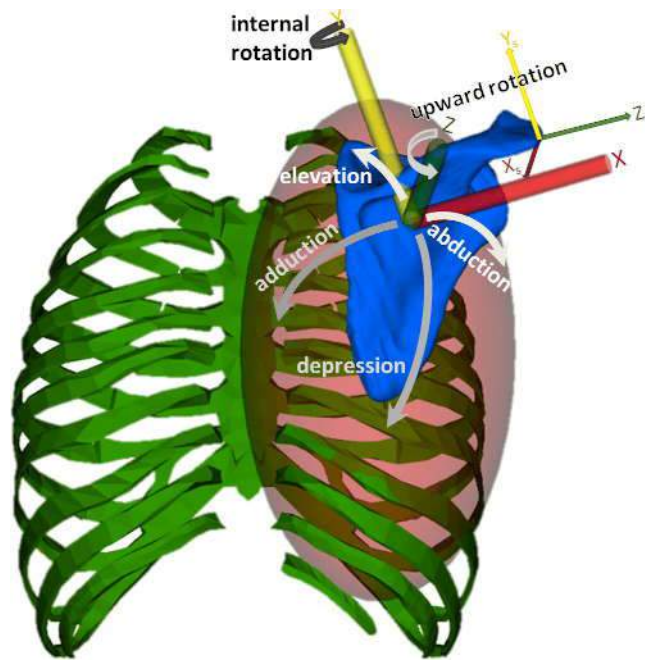


Рис. 4.4: Четыре моделируемые степени свободы сустава scapulothoracic

подъязычных мышц существенно улучшило силу сгибания и является первой в своём роде моделью с реалистичными значениями силы сгибания во всех направлениях.

#### 1.4.1.5 Модификация основной модели

1. В модели груднопоясничного отдела позвоночника и грудной клетки шейные позвонки C1-C7 объединены в единое тело, что не позволяет изучать их как отдельные тела. Позвонки были разделены с сохранением геометрии. Инерционные параметры тел заимствованы из модели шеи.
2. В модели груднопоясничного отдела позвоночника и грудной клетки реализовано упрощенное представление грудино-ключичного и акромиально-ключичного суставов, что не позволяет исследовать кинематику и динамику лопатки и ключицы. Оба сустава были перенесены из модели плеча и подбором параметров в графическом интерфейсе были найдены их оптимальные положения согласно анатомическому атласу. В дальнейшем их положение было уточнено аналогичными действиями на основании маркерных данных.
3. Из модели шеи были перенесены ограничения на взаимное движение шейных позвонков. Это позволило сократить количество допустимых степеней свободы шеи до 6.
4. Для повышения скорости вычислений были заблокированы все степени свободы, которые не относятся к изучаемым движениям: взаимное движение грудных и поясничных позвонков, кистей, ног.

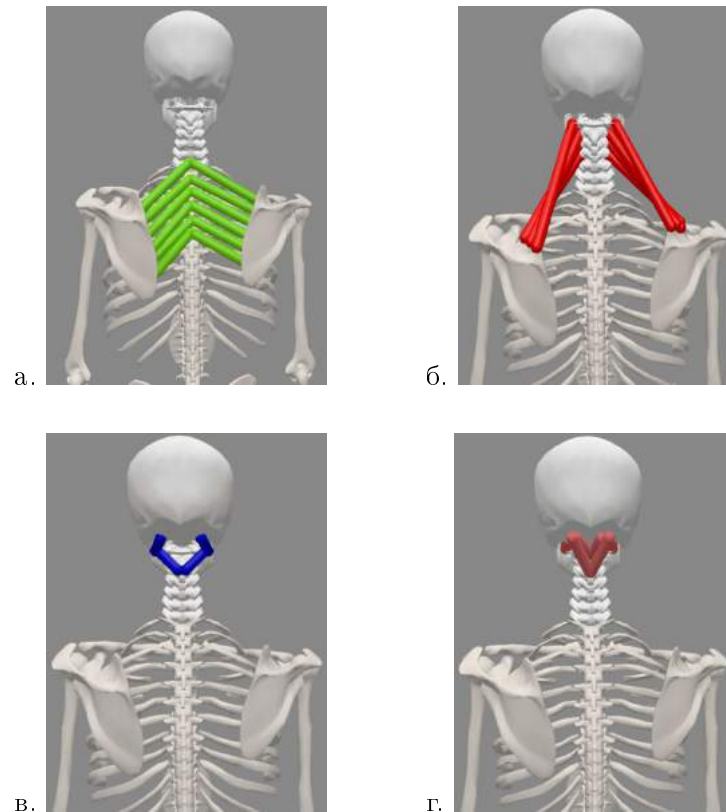


Рис. 4.5: Новые мышцы модели: а. Ромбовидная. б. Мышца, поднимающая лопатку. в. Косая мышца г. Задняя прямая мышца головы

5. В модель были добавлены новые мышцы: ромбовидная, мышца, поднимающая лопатку, косая мышца, задняя прямая мышцы головы.

#### 1.4.1.6 Результаты

Итоговая модель представлена на рисунке 4.6а,б. Настройка параметров модели проводилась таким образом, чтобы имитировать базовый постуральный тонус, т.е. минимальную, непрерывную активность мышц, необходимую для поддержания позы человека в положении стоя. Эта активность мышц существенна для обеспечения стабильности тела. Базовый постуральный тонус выражается в терминах параметров модели мышц, которые в модели представлены как набор волокон, присоединенных к сухожилию под углом  $\alpha$ . Мышечное волокно представлено в виде двух элементов: сократительного элемента и параллельного упругого элемента, последовательно соединенных с упругим сухожилием. Сократительный элемент и параллельный упругий элемент соответствуют активной и пассивной мышечной силе. На рисунке 4.5 продемонстрированы примеры новых мышц, добавленных в модель. Длина сухожилия в состоянии покоя и угол пенинтации для каждой мышцы определялись на основе параметров мышц в соответствующей начальной модели. Длина мышечного волокна в положении покоя была

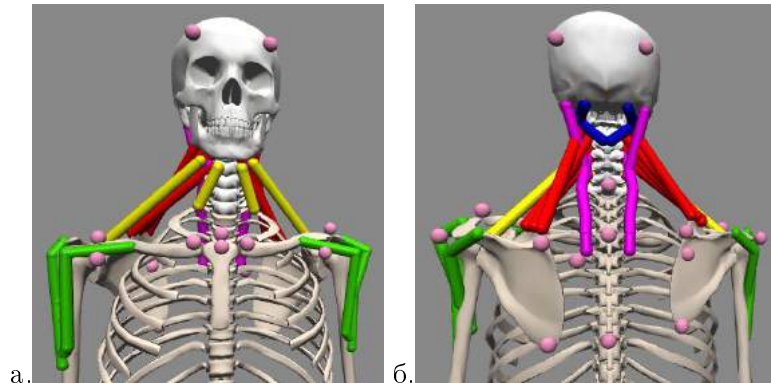


Рис. 4.6: Модель совместного функционирования плечевого и шейного отделов. а. Вид спереди. б. Вид сзади.

рассчитана как:

$$l^M = \frac{l^{MT} - l^T}{\cos\alpha} k,$$

где  $k$  – коэффициент, определяющий начальное напряжение мышц. Для мышц шеи  $k = 0.95$ , для остальных мышц  $k = 0.99$ . Настройка параметров проводилась автоматически с использованием библиотеки OpenSim для языка программирования Python.

## 1.4.2 Персонализация модели совместного функционирования плечевого и шейного отделов по данным захвата движения испытуемого

### 1.4.2.1 Проведение экспериментов

Для проведения исследования вкладов мышц в движения руки и шеи, были проведены эксперименты с использованием технологии захвата движения, по данным которого можно восстановить зависимость обобщённых координат модели от времени. Технология Motion Capture предполагает закрепление определённого набора датчиков на кожу и последующую видеосъёмку испытуемого с нескольких ракурсов. Частота измерений в данной работе составляет 100 Гц. В основу протокола эксперимента был положен стандартизированный протокол, рекомендованный к использованию Международным Биомеханическим Сообществом (ISB).

В ходе эксперимента производилась запись координат маркеров при движениях головы вправо-влево, вперёд-назад, вращениях. Также при поднятии/опускании, приведении/отведении, движении в траверсальной плоскости плеча правой руки, поднятии и опускании лопаток, вращении лопаток. Исследования на левой руке также были проведены, однако их качество оказалось недостаточным для использования в работе. В исследовании принимал участие здоровый молодой человек 25 лет массой 66 кг и



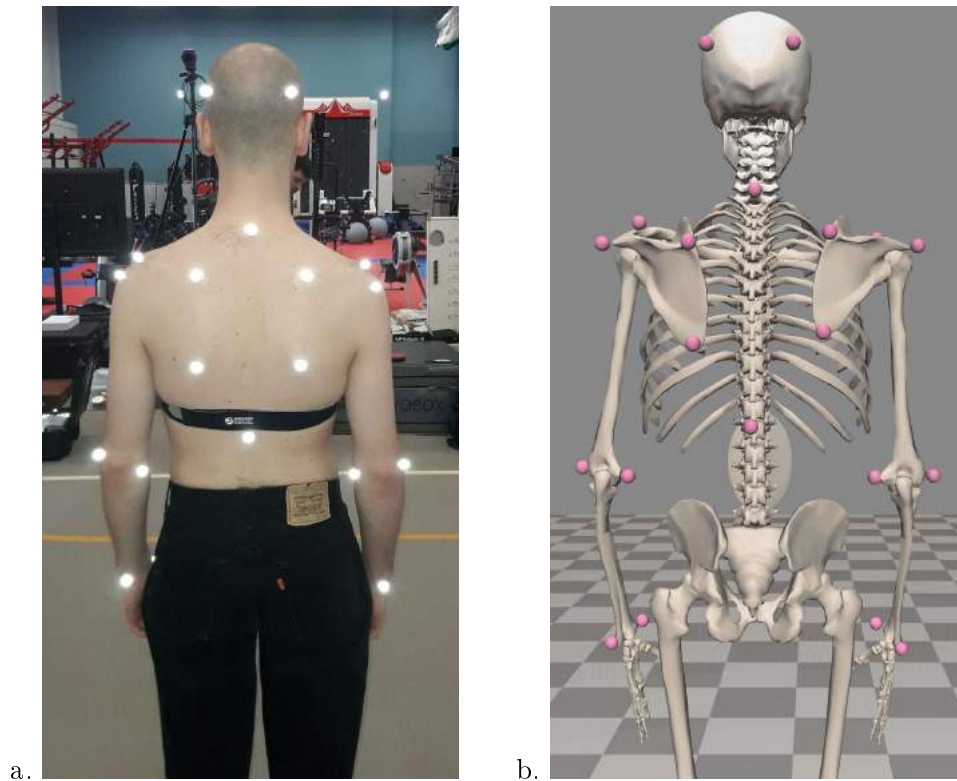


Рис. 4.7: а. Положение экспериментальных маркеров на спине испытуемого. б. Положение виртуальных маркеров модели.

ростом 180 см с анатомически выделяющейся лопаткой. Неотмасштабированная модель имеет тот же набор маркеров, что и экспериментальные маркеры. Экспериментальные маркеры и маркеры модели продемонстрированы на рисунке 4.7. Итогом эксперимента является зависимость координат каждого из маркеров от времени для каждого движения. Недостатком подхода является то, что в ряде случаев маркеры фиксируют движение кожи, а не изучаемых подкожных тел. На используемом оборудовании эта проблема не устранима.

#### 1.4.2.2 Масштабирование модели

Для корректной работы дальнейших алгоритмов было проведено масштабирование модели под антропометрические параметры испытуемого.

Каждое тело модели масштабируется вдоль осей  $X$ ,  $Y$ ,  $Z$  на некоторую величину, таким образом, чтобы модельные маркеры были максимально близки к экспериментальным. При этом происходит пропорциональный пересчёт масс, тензоров инерции и координат точек крепления мышц масштабированной модели по отношению к исходной.

Масштабирование основано на использовании расстояний по осям  $X$ ,  $Y$ ,  $Z$  между положениями пар маркеров, а также заданных вручную коэффициентов масштабирования. Обычно экспериментальные



Рис. 4.8: Исходная модель (слева) и модель после масштабирования (справа).

координаты маркеров получаются с использованием технологии Motion Capture. Собственные коэффициенты масштабирования можно подбирать вручную в графическом интерфейсе или определять на основе данных компьютерной томографии.

Для улучшения качества масштабирования в модель были добавлены дополнительные маркеры, в результате чего стало возможным находить пары маркеров, параллельные интересующим осям. Маркеры были добавлены автоматически и, как правило, были средним арифметическим координат уже имеющихся маркеров. Масштабирование производилось итеративно по заданным в ручном режиме через графический интерфейс коэффициентам с целью улучшения качества соответствия маркеров.

### 1.4.2.3 Результат

В ходе работы на данном этапе были получены следующие результаты:

1. На основе существующих в открытом доступе моделей была построена биомеханическая модель совместного функционирования плечевого и шейного отделов с использованием геометрий костей, доступных в библиотеке OpenSim. В модели содержатся 23 мышцы, реализованные в виде 142 мышечных компонент, а также суставы, необходимые для исследования вкладов мышц в движения шеи и плеча.
2. Была произведена запись движений шеи и плеча испытуемого (повороты и наклоны головы, сгибание/разгибание, отведение плеча) с использованием технологии захвата движения. Последующая обработка результатов экспериментов позволит реализовать аналогичные движения модели и провести анализ вкладов в работу по совершению этих движений.
3. С использованием данных о положениях маркеров на теле испытуемого в статичной позе, полученных при помощи технологии захвата движения, было проведено масштабирование базовой модели с учетом антропометрических данных испытуемого. Автоматически было произведено и

масштабирование координат точек крепления сухожилий. Качество масштабирования оценивается по среднеквадратичной ошибке отклонения маркеров модели от экспериментальных маркеров и максимальному отклонению в статичной позе. Разработчиками процедуры масштабирования в OpenSim предложены ограничения на значения ошибок при качественном реализации процедуры: среднеквадратичная маркерная ошибка не превышает 2 см, а максимальная – 4 см. Полученная среднеквадратичная ошибка  $< 1.5$  см, максимальная ошибка 3 см. Исходная и отмасштабированная модели продемонстрированы на рисунке [4.8](#).

# Литература

- [1] J. Simon, J. Gehret, G. Helber, et al. Is there a neck-shoulder syndrome? *Global Journal Of Anesthesia & Pain Medicine*, 1(1):1–5, 2019.
- [2] M. Pribicevic. The epidemiology of shoulder pain: A narrative review of the literature. 2012.
- [3] M. Peshkova, N. Kosheleva, A. Shpichka, P. Timashev, M. Lipina, E. Kalinsky, A. Lychagin, B. Di Matteo, G. Anzillotti, E. Kon, F. Ronzoni, V. Royuk, and V. Fomin. Gender-related aspects in osteoarthritis development and progression: a review. *International Journal of Molecular Sciences*, 23(5), 2022.
- [4] S. Safiri, A.A. Kolahi, D. Hoy, et al. Global, regional, and national burden of neck pain in the general population, 1990-2017: systematic analysis of the global burden of disease study 2017. *BMJ (Clinical research ed.)*, 368:m791, 2020.
- [5] E.B. Kalinsky, Leonid Slinyakov, Anatoly Chernyaev, Julia Goncharuk, and Aleksey Lychagin. Polymorphism of manifestations of the cervical-shoulder syndrome in patients with results of injuries of the shoulder joint and shoulder girdle. Clinical and statistical substantiation. *Medical news of the North Caucasus*, 14(23), 2019.
- [6] Ройен, Йокочи, Лютьен, and Дрекол. *Большой атлас по анатомии*. Внешсигма, 1997.
- [7] A. Mitchell, R. Drake, and A. Vogl. *Gray's Atlas of Anatomy*. Elsevier, 2020.
- [8] Alexander G Bruno, Mary L Bouxsein, and Dennis E Anderson. Development and validation of a musculoskeletal model of the fully articulated thoracolumbar spine and rib cage. *J Biomech Eng*, 137(8), 2015.
- [9] Ajay Seth, Meilin Dong, and et al. Muscle contributions to upper-extremity movement and work from a musculoskeletal model of the human shoulder. *Frontiers in Neurorobotics*, 13(90), 2019.
- [10] JD Mortensen, AN Vasavada, and AS Merryweather. The inclusion of hyoid muscles improves moment generating capacity and dynamic simulations in musculoskeletal models of the head and neck. *PLoS ONE*, 13(6), 2018.

## 2. Геофизика

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

- Реализация расширенного набора численных методов решения системы уравнений гидротермодинамики атмосферы (полулагранжева аппроксимация адвективных слагаемых, полунеявные методы интегрирования по времени с использованием эффективных и масштабируемых алгоритмов решения больших разреженных систем линейных уравнений).
- Тестирование различных сочетаний методов на широком спектре идеализированных задач (включая эксперимент “идеализированный тропический циклон”).
- Реализация стохастически возмущенных полулагранжевых траекторий в модели атмосферы ПЛАВ.

### **2.1.1 Явно-неявная схема интегрирования по времени**

#### **2.1.1.1 Явно-неявные методы интегрирования по времени, разделение оператора**

Для интегрирования уравнений динамики атмосферы по времени мы реализовали полунеявную схему (явно-неявную схему) на основе методов Рунге-Кутты с двойной таблицей Бутчера [1]. В методах такого класса подразумевается, что оператор модели разделен на часть, интегрируемую явно (по явной таблице Бутчера) и часть, которая интегрируется по диагонально неявному методу.

Разделение оператора является важным моментом, который определяет, какие физические процессы определяют ограничение на максимальный шаг по времени, при котором расчеты устойчивы. Выпишем уравнения динамики атмосферы с указанием применяемого разделения:

$$\frac{\partial \vec{v}_h}{\partial t} = \underbrace{-\vec{v}_h \cdot \nabla_\eta \circ \vec{v}_h - \dot{\eta} \frac{\partial \vec{v}_h}{\partial \eta}}_A \underbrace{- C_p \theta \nabla_\eta P - C_p \theta h_\eta^{-1} \nabla_\eta h \circ \frac{\partial P}{\partial \eta}}_B, \quad (1.1a)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} = \underbrace{-\vec{v}_h \cdot \nabla_\eta w - \dot{\eta} \frac{\partial w}{\partial \eta}}_A \underbrace{- h_\eta^{-1} C_p \theta \frac{\partial P}{\partial \eta}}_C - g, \quad (1.1b)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \underbrace{-\vec{v}_h \cdot \nabla_\eta \theta}_A \underbrace{- \dot{\eta} \frac{\partial \theta}{\partial \eta}}_D, \quad (1.1c)$$

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \underbrace{-\vec{v}_h \cdot \nabla_\eta P}_A \underbrace{- \dot{\eta} \frac{\partial P}{\partial \eta}}_D - \frac{R}{C_v} P J^{-1} \left( \underbrace{\nabla_\eta \cdot J \vec{v}_h}_B + \underbrace{\frac{\partial J \dot{\eta}}{\partial \eta}}_C \right), \quad (1.1d)$$

$$\dot{\eta} = h_\eta^{-1} (w - \vec{v}_h \cdot \nabla_\eta h), \quad (1.1e)$$

где  $\vec{v}_h$  – вектор горизонтальной скорости ветра,  $\nabla_\eta$  – оператор набла по горизонтальным координатам при постоянной вертикальной координате  $\eta$ ,  $\dot{\eta}$  – вертикальная контравариантная компонента вектора ветра,  $C_p$  – теплоемкость воздуха при постоянном давлении,  $\theta$  – потенциальная температура,  $P$  – функция давления Экснера,  $h$  – истинная высота над уровнем моря,  $h_\eta$  – производная высоты по вертикальной координате  $\eta$ ,  $R$  – газовая постоянная,  $C_v$  – теплоемкость воздуха при постоянном объеме,  $J$  – Якобиан криволинейной системы координат.

Слагаемые типа  $A$  описывают адвекцию (перенос ветром) переменных, слагаемые типа  $B$  описывают распространение звуковых волн по горизонтали, слагаемые типа  $C$  описывают распространение звуковых волн по вертикали. Слагаемые типа  $D$  соответствуют переносу термодинамических величин по вертикали и ответственны, в том числе, за гравитационные волны и увеличение амплитуды звуковых волн при распространении вверх.

В случае, если все слагаемые входят в часть оператора, интегрируемую явно, то наиболее жесткое ограничение на шаг по времени создаст распространение звуковых волн по вертикали (слагаемые типа  $C$ ),  $\Delta t < \Delta z_{min}/c_{sound} \approx 30 \text{ м}/343 \text{ мс}^{-1} \sim 0.1 \text{ с}$ . Слагаемые типа  $D$  создают ограничение на шаг по времени  $\Delta t \lesssim 100 \text{ с}$  не зависимо от величины шагов сетки, что связано с процессами распространения гравитационных волн.

В 2022 г была реализована схема интегрирования по времени с включением слагаемых типа  $C$  и  $D$  в часть оператора, интегрируемую неявно, что соответствует подходу, известному как *Horizontally-explicit vertically-implicit* [2]. Максимальный устойчивый шаг по времени в таких схемах ограничивался распространением звуковых волн по горизонтали (слагаемые типа  $B$ ),  $\Delta t < \Delta x/c_{sound}$ . Таким образом,

при шаге сетки по горизонтали  $\Delta x = 10$  км,  $\Delta t \lesssim 30$  с, при шаге сетки  $\Delta x = 100$  км,  $\Delta t \lesssim 300$  с. Заметим, что эти оценки завышены в 2-4 раза из-за проблемы неустойчивости мод с большой длиной волны по вертикали и малой по горизонтали в HEVI-схемах [3].

В 2023 году мы дополнили неявную часть оператора слагаемыми типа  $B$ , устранив таким образом ограничение на шаг по времени, связанное с распространением звуковых волн по вертикали. Теперь шаг по времени ограничивается только процессами адвекции (слагаемые типа  $A$ ). Для горизонтальной адвекции  $\Delta t < \Delta x/U_{max}$ , где  $U_{max} \approx 100$  м/с – максимальный горизонтальный ветер, т.е. шаг по времени ограничивается величиной от 100 с (при  $\Delta x = 10$  км) до 1000 с (при  $\Delta x = 100$  км). При высоком разрешении по горизонтали ( $\Delta x < 10$  км) максимальная вертикальная скорость может составлять величину порядка 1 м/с, что приведет к ограничению на шаг по времени, определяемому вертикальной адвекцией.

### 2.1.1.2 Решение нелинейной системы уравнений

Пусть оператор модели разделен на части  $A = A_{impl} + A_{expl}$ , и  $A_{impl}$  интегрируется по неявной схеме. Таким образом, на каждой стадии метода Рунге-Кутты необходимо решать уравнение  $(I - \tau A_{impl})\psi = R$ , где  $I$  – единичный оператор,  $\tau$  – шаг по времени,  $\psi = (\vec{v}_h, w, \theta, P)^T$  – вектор состояния модели,  $R$  – правая часть.

В случае реализованной нами схемы с неявностью для слагаемых типов  $B, C, D$  мы столкнулись с необходимостью решать систему

$$\vec{v}_h + \tau C_p \theta \nabla_\eta P + \tau C_p \theta h_\eta^{-1} \nabla_\eta h \circ \frac{\partial P}{\partial \eta} = \vec{R}_{\vec{v}_h}, \quad (1.2a)$$

$$w + \tau h_\eta^{-1} C_p \theta \frac{\partial P}{\partial \eta} + \tau g = R_w, \quad (1.2b)$$

$$\theta + \tau \dot{\eta} \frac{\partial \theta}{\partial \eta} = R_\theta, \quad (1.2c)$$

$$P + \tau \dot{\eta} \frac{\partial P}{\partial \eta} + \tau \frac{R}{C_v} P J^{-1} \left( \nabla_\eta \cdot J \vec{v}_h + \frac{\partial J \dot{\eta}}{\partial \eta} \right) = R_P, \quad (1.2d)$$

для которой мы реализовали метод Ньютона (здесь и далее имеется в виду, что дифференциальные операторы заменены конечно-разностными аппроксимациями, разработанными и реализованными нами ранее).



Пусть  $\mathcal{J}_{\psi_0}$  – линейризация оператора  $A_{impl}$  относительно состояния  $\psi_0$  (матрица Якоби). Тогда на каждой итерации метода Ньютона необходимо решать систему линейных алгебраических уравнений  $(I - \tau\mathcal{J}_{\psi_0})\delta\psi = R$  для поправки вектора состояния  $\delta\psi$ , что в нашем случае записывается как

$$\delta\vec{v}_h + \tau C_p \delta\theta \nabla_\eta P_0 + \tau C_p \theta_0 \nabla_\eta \delta P + \tau C_p \delta\theta h_\eta^{-1} \nabla_\eta h \circ \frac{\partial P_0}{\partial \eta} + \tau C_p \theta_0 h_\eta^{-1} \nabla_\eta h \circ \frac{\partial \delta P}{\partial \eta} = \vec{R}_{\vec{v}_h}, \quad (1.3a)$$

$$\delta w + \tau h_\eta^{-1} C_p \delta\theta \frac{\partial P_0}{\partial \eta} + \tau h_\eta^{-1} C_p \theta_0 \frac{\partial \delta P}{\partial \eta} = R_w, \quad (1.3b)$$

$$\delta\theta + \tau \delta\dot{\eta} \frac{\partial \theta_0}{\partial \eta} + \tau \dot{\eta}_0 \frac{\partial \delta\theta}{\partial \eta} = R_\theta, \quad (1.3c)$$

$$\delta P + \tau \delta\dot{\eta} \frac{\partial P_0}{\partial \eta} + \tau \dot{\eta}_0 \frac{\partial \delta P}{\partial \eta} + \tau J^{-1} \frac{R}{C_v} \left[ P_0 \left( \nabla_\eta \cdot J \delta\vec{v}_h + \frac{\partial J \delta\dot{\eta}}{\partial \eta} \right) + \delta P \left( \nabla_\eta \cdot J \vec{v}_{h0} + \frac{\partial J \dot{\eta}_0}{\partial \eta} \right) \right] = R_P. \quad (1.3d)$$

Для ускорения и упрощения решения мы упростили матрицу Якоби на основе соображений о физической значимости отдельных слагаемых аналогично [4]. Система уравнений с упрощенной матрицей Якоби выглядит следующим образом:

$$\delta\vec{v}_h + \tau C_p \theta_0 \nabla_\eta \delta P + \tau C_p \theta_0 h_\eta^{-1} \nabla_\eta h \circ \frac{\partial \delta P}{\partial \eta} = \vec{R}_{\vec{v}_h}, \quad (1.4a)$$

$$\delta w + \tau h_\eta^{-1} C_p \delta\theta \frac{\partial P_0}{\partial \eta} + \tau h_\eta^{-1} C_p \theta_0 \frac{\partial \delta P}{\partial \eta} = R_w, \quad (1.4b)$$

$$\delta\theta + \tau h_\eta^{-1} \delta w \frac{\partial \theta_0}{\partial \eta} = R_\theta, \quad (1.4c)$$

$$\delta P + \tau h_\eta^{-1} \delta w \frac{\partial P_0}{\partial \eta} + \tau J^{-1} \frac{R}{C_v} P_0 \left( \nabla_\eta \cdot J \delta\vec{v}_h + \frac{\partial J \delta\dot{\eta}}{\partial \eta} \right) = R_P. \quad (1.4d)$$

Заметим, что при решении этой системы мы не заменяем величины  $\theta_0$ ,  $P_0$ , относительно которых была проведена линейризация оператора,  $A_{impl}$  профилями стандартной атмосферы, как это делается в [4] и других работах для упрощения решения. Численные эксперименты подтвердили что наш подход положительно сказывается на скорости сходимости метода Ньютона.

Систему уравнений (1.4) можно свести к одному уравнению эллиптического типа (уравнению Гельмгольца):

$$\delta P - \tau^2 W^{-1} h_\eta^{-2} C_p \theta_0 \frac{\partial \delta P}{\partial \eta} - \tau^2 \frac{R}{C_v} P_0 \operatorname{div} (C_p \theta_0 Q^{-1} \operatorname{grad} P) = R_H, \quad (1.5)$$

где  $\operatorname{div}$ ,  $\operatorname{grad}$  – трехмерные дискретные операторы дивергенции и градиента, а матрицы

$$W = \operatorname{diag} \left( 1 - \tau^2 h_\eta^{-2} C_p \frac{\partial \theta_0}{\partial \eta} \frac{\partial P_0}{\partial \eta} \right), \quad (1.6)$$

$$Q = \begin{pmatrix} I_{\vec{v}_h} & \\ & W \end{pmatrix}. \quad (1.7)$$

Уравнение Гельмгольца (1.5) решается итеративными алгоритмами, описанными далее. Важным является то, что при использовании аппроксимации по вертикали 2-го порядка точности, вертикальная часть оператора Гельмгольца представляется в каждой колонке ячеек сетки как трехдиагональная матрица и может быть использована в качестве предобуславливателя полного уравнения.

## 2.1.2 Масштабируемые алгоритмы решения систем линейных уравнений

Основные вычислительные затраты при использовании полунеявных методов интегрирования по времени связаны с необходимостью решения системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) типа сеточного уравнения Гельмгольца (1.5) с большой разреженной матрицей на каждом шаге по времени модели. При использовании высокого пространственного разрешения, количество неизвестных этой системы может достигать значений порядка  $\mathcal{O}(10^{10})$ . Учитывая временные ограничения, связанные с оперативными рамками для численного прогноза погоды (обычно, не более 15 минут для прогноза на 24 часа), задачи такого масштаба могут быть решены только с использованием массивно-параллельных систем. Таким образом, оправданность использования полунеявного подхода во многом зависит от численной и параллельной эффективности процедуры решения возникающих СЛАУ. При этом, чтобы добиться максимальной производительности при решении СЛАУ, важно не только выбрать оптимальный алгоритм, но и принять во внимание как можно больше особенностей задачи при его реализации [5]. Поэтому в глобальных моделях динамики атмосферы типично использовать собственные реализации алгоритмов [6–8] даже при наличии универсальных библиотечных аналогов.

### 2.1.2.1 Описание реализованных методов решения СЛАУ

Далее приводится описание реализованных в рамках отчетного периода алгоритмов решения больших разреженных систем линейных алгебраических уравнений, возникающих при решении уравнений гидротермодинамики атмосферы.

#### 2.1.2.1.1 Методы Крыловского типа

В рамках методов Крыловского типа, итерационный поиск приближенного решения системы линейных уравнений  $Ax = b$  производится в подпространстве

$$K_m = \text{span}\{b, Ab, A^2b, \dots, A^{m-1}b\}, \quad (1.8)$$

где  $K_m$  –  $m$ -мерное подпространство Крылова. В рамках отчетного периода были реализованы два метода из данного семейства алгоритмов: метод сопряженных градиентов (CG) и стабилизированный метод бисопряженных градиентов (BiCGstab). Метод сопряженных градиентов позволяет решать

СЛАУ с симметричными положительно-определенными матрицами системы. Стабилизированный метод бисопряженных градиентов является более универсальным и применим для невырожденных матриц общего вида. Главные преимущества методов Крыловского типа – высокая скорость сходимости и отсутствие необходимости для явного доступа к элементам матрицы системы и их хранения (так называемые *matrix-free* методы), для работы алгоритма требуются только результаты умножения матрицы системы на вектор. Одним из основных недостатков методов этого типа является необходимость выполнения глобальных коммуникаций между параллельными процессами для вычисления скалярных произведений и норм векторов на каждой итерации метода. Это потенциально ограничивает масштабируемость и эффективность этих методов при использовании массово-параллельных системах.

Для данных методов также реализована возможность использования левого предобуславливателя (решение эквивалентной системы уравнений  $P^{-1}Ax = P^{-1}b$ ).

### 2.1.2.1.2 Геометрический многосеточный алгоритм

Геометрический многосеточный метод [9, 10] является одним из наиболее эффективных методов для решения систем линейных алгебраических уравнений, возникающих вследствие дискретизации уравнений в частных производных эллиптического типа. Этот алгоритм позволяет решать плохо обусловленные системы уравнений за время, пропорциональное количеству неизвестных в системе, и при этом не требует выполнения глобальных операций (скалярных произведений), что позволяет эффективно использовать этот метод на массивно-параллельных вычислительных системах.

Многосеточные методы основаны на следующей основной идее: если нам удалось построить алгоритм, который позволяет эффективно подавить мелкомасштабную часть ошибки (так называемый оператор сглаживания), то дальнейшее уточнение решения можно производить на более грубой сетке, что требует выполнения меньшего количества арифметических операций. Более того, гладкая функция ошибки при переходе на более грубую сетку вновь приобретает мелкомасштабную часть, которая может быть эффективно исключена при помощи применения оператора сглаживания уже на грубой сетке. Пользуясь описанной выше логикой, введем в рассмотрение так называемый двухсеточный алгоритм:

- **Предсглаживание ошибки.** Для системы уравнений  $A_h u_h = f_h$ , возникающей в результате пространственной и временной аппроксимации уравнений на исходной сетке модели производится  $\nu_{pre}$  итераций предсглаживания, то есть применяется метод, который позволяет исключить высокочастотную компоненту ошибки. В качестве оператора сглаживания используются итерации блочного взвешенного метода Якоби вида

$$u_h^{k+1} = u_h^k + \omega (D_h + A_h^z)^{-1} (f_h - A_h u_h^k), \quad k = 1, \dots, \nu_{pre}. \quad (1.9)$$

Здесь  $D_h$  – диагональная часть матрицы  $A_h$ ,  $A_h^z$  – часть матрицы  $A_h$ , полученная в результате аппроксимации исходных уравнений вдоль вертикального направления,  $\omega$  – предзаданный коэффициент (обычно используется  $\omega = \frac{4}{5}$ ). Для решения возникающих систем уравнений с матрицей  $(D_h + A_h^z)$  используется метод прогонки. Решение этой системы уравнений не требует выполнения параллельных обменов, так как в модели используется декомпозиция расчетной области по MPI-процессам только в горизонтальном направлении.

- **Коррекция на грубой сетке.** Так как ошибка решения  $e_h = u_h - u_h^{\nu_{pre}}$  является гладкой функцией, решение системы уравнений  $A_h e_h = r_h$ , где  $r_h = f_h A_h u_h^{\nu_{pre}}$ , можно производить на более грубой сетке. Пусть горизонтальные координаты узлов исходной сетки на панели кубической сферы заданы как

$$\alpha_i^h = -\pi/4 + (i - 1/2)h, \quad \beta_j^h = -\pi/4 + (j - 1/2)h, \quad h = 2\pi/n, \quad i, j = 1, \dots, n, \quad (1.10)$$

где  $n$  – количество узлов сетки вдоль грани куба. Введем в рассмотрение грубую сетку (сгрубление производится только в горизонтальном направлении) заданную координатами:

$$\alpha_i^{2h} = -\pi/4 + (i - 1/2)2h, \quad \beta_j^{2h} = -\pi/4 + (j - 1/2)2h, \quad i, j = 1, \dots, n/2. \quad (1.11)$$

Также введем в рассмотрение оператор сгрубления  $R$ , переводящий сеточную функцию с исходной на грубую сетку, и оператор продолжения  $P$ , переводящий сеточную функцию с грубой на исходную сетку. Сформулируем задачу поиска  $e_h$  на грубой сетке:

$$A_{2h} e_{2h} = R r_h, \quad e_{2h} = A_{2h}^{-1} R r_h, \quad (1.12)$$

здесь  $A_{2h}$  – аппроксимация исходного уравнения в частных производных на грубой сетке. В качестве оператора сгрубления в рамках данной работы используется осреднение по объему грубой ячейки сетки:

$$\psi_{i,j}^{2h} = \frac{1}{4J_{i,j}^{2h}} \left( J_{2i,2j}^h \psi_{2i,2j}^h + J_{2i+1,2j}^h \psi_{2i+1,2j}^h + J_{2i,2j+1}^h \psi_{2i,2j+1}^h + J_{2i+1,2j+1}^h \psi_{2i+1,2j+1}^h \right), \quad (1.13)$$

где  $J_{i,j}^h, J_{i,j}^{2h}$  – значения Якобиана горизонтальной системы координат в узлах мелкой и грубой сетки. В качестве оператора продолжения используется комбинация билинейной интерполяции во внутренних узлах сетки и кусочно-постоянной интерполяции для граничных узлов панели кубической сферы.

- **Уточнение решения на исходной сетке.** Производится коррекция решения системы на исходной сетке  $\tilde{u}_h = u_h^{\nu_{pre}} + P e_{2h}$ .
- **Постсглаживание ошибки.** Для исключения высокочастотной компоненты ошибки, которая могла возникнуть в результате применения оператора продолжения выполняется  $\nu_{post}$  итераций сглаживания ошибки (итерации постсглаживания).

Рекурсивное применение двухсеточного метода для решения возникающих на грубых сетках уравнений приводит к многосеточному алгоритму с V-циклом. На самой грубой сетке многосеточного метода матрица системы, как правило, хорошо обусловлена и решение может быть получено при помощи нескольких итераций взвешенного блочного метода Якоби, описанного выше, с  $\omega = 1$ .

### 2.1.2.2 Исследование масштабируемости

Исследование масштабируемости реализованных алгоритмов проводится с использованием двух вариантов вычислительных сеток:  $216 \times 216 \times 6 \times 30$  и  $1080 \times 1080 \times 6 \times 30$ . Горизонтальное пространственное разрешение этих сеток приблизительно 50 и 10 километров, соответственно, количество вертикальных уровней – 30.

В качестве модельной задачи рассматривается уравнение типа Гельмгольца (1.5), возникающее в результате применения неявной аппроксимации по времени, описанной в разделе (2.1.1), и пространственной аппроксимации с использованием конечно-разностных формул суммирования по частям порядка 2–1 на сетке с разнесением типа "С" по горизонтали. Параметры уравнений подобраны таким образом, чтобы характерное число Куранта распространения звуковых волн в горизонтальном направлении было равно 2 для обоих рассматриваемых сеток. В качестве критерия остановки использовалось падение относительной нормы невязки в  $10^4$  раз.

Тестовые запуски проводились на вычислительной системе Cray-XC40 Главного вычислительного центра Росгидромета. Эта система использует интерконнект Cray ARIES, каждый вычислительный узел состоит из двух процессоров Intel Xeon E2697v4 с 18 ядрами, то есть 36 процессорных ядер на узле. Для тестовых запусков доступно 192 узла (6912 ядер) данной системы. Сравнивается среднее время решения уравнения Гельмгольца при различном количестве используемых процессорных ядер для многосеточного метода и стабилизированного метода бисопряженных градиентов. Для стабилизированного метода бисопряженных градиентов в качестве предобуславливателя используется часть системы, описывающая связь переменных в вертикальном направлении. Для решения систем уравнений, связанных с предобуславливателем, используется метод прогонки.

Результаты замеров приведены на рисунках 1.1, 1.2. Из рисунков видно, что для всех конфигураций сетки и чисел используемых ядер геометрический многосеточный метод в 2.5 – 3 раза быстрее, чем стабилизированный метод бисопряженных градиентов. Для сетки с горизонтальным разрешением 50 км для обоих методов наблюдается ускорение вплоть до 2916 ядер. Параллельная эффективность при использовании 2916 ядер приблизительно равна 60%. Оба метода ускоряются и при использовании большего количества ядер, но при этом параллельная эффективность падает ниже 50%. При использовании сетки  $1080 \times 1080 \times 6 \times 30$  наблюдается ускорение обоих методов по меньшей мере до 6912 ядер. Мы считаем, что в этой конфигурации можно надеяться на эффективное использование порядка 30 тысяч ядер, но для тестирования было доступно только 6912 ядер.

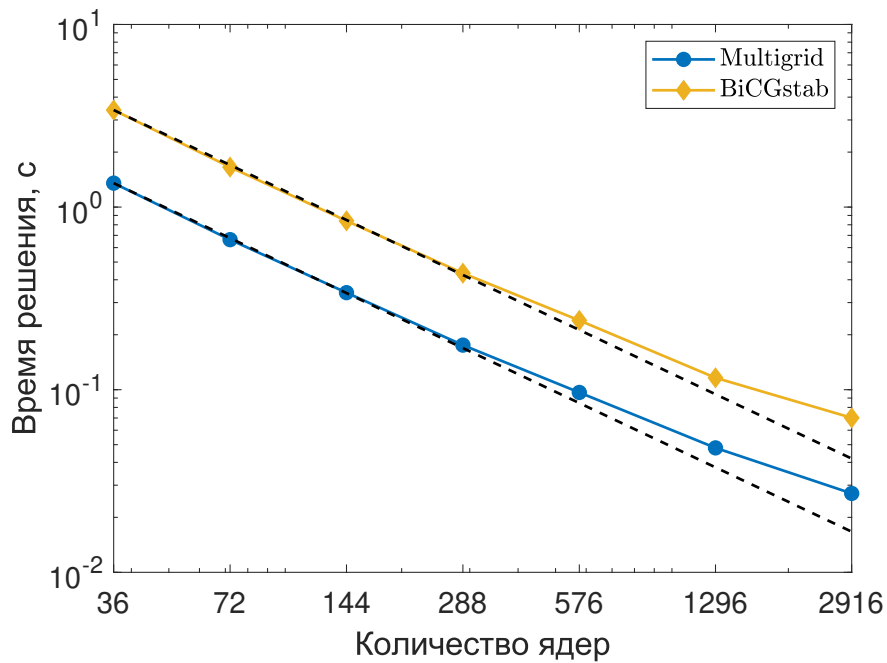


Рис. 1.1: Среднее время решения уравнения Гельмгольца в зависимости от количества используемых процессорных ядер для геометрического многосеточного метода (голубая линия) и стабилизированного метода бисопряженных градиентов (оранжевая линия) на сетке  $216 \times 216 \times 6 \times 30$ . Пунктирными линиями изображено линейное ускорение.

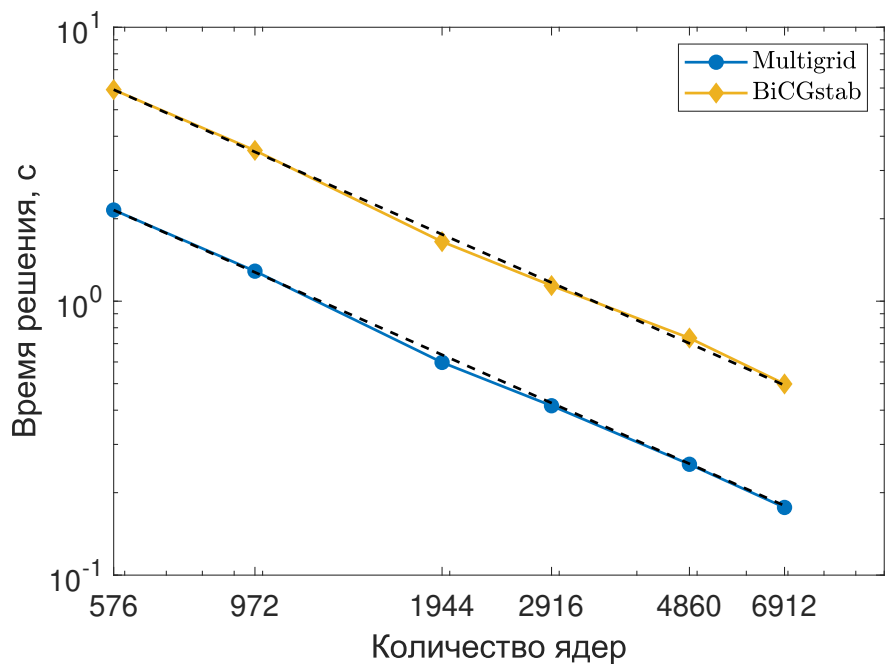


Рис. 1.2: Среднее время решения уравнения Гельмгольца в зависимости от количества используемых процессорных ядер для геометрического многосеточного метода (голубая линия) и стабилизированного метода бисопряженных градиентов (оранжевая линия) на сетке  $1080 \times 1080 \times 6 \times 30$ . Пунктирными линиями изображено линейное ускорение.

### 2.1.3 Полулагранжева схема интегрирования по времени

Максимальный шаг по времени при котором возможен устойчивый расчет по явно-неявной схеме, описанной в разделе 2.1.1, ограничен условием Куранта для процесса переноса. Можно обойти это ограничение, применив полулагранжеву формулировку [11] для адвективных слагаемых – слагаемых типа  $A$  и  $D$  в системе (1.1). Перенесем эти слагаемые в левую часть уравнений и объединим с  $\partial\psi/\partial t$ , в результате получим систему уравнений в виде

$$\frac{d\psi}{dt} = A(\psi), \quad (1.14)$$

где  $d/dt$  – материальная или лагранжева производная (производная по времени вдоль траекторий лагранжевых частиц).

Предположим, нам известно, что лагранжева частицы, находящиеся в момент времени  $t^{n+1}$  точках модельной сетки  $\vec{x}^i$ , в предыдущий момент времени  $t^n$  находились в точках  $\vec{x}_*^i$ . Тогда, для нахождения  $\psi^{n+1}$  можно использовать схему Кранка-Николсон вдоль траекторий частиц:

$$\psi^{n+1} = \psi_*^n + \frac{\Delta t}{2} (A(\psi^{n+1}) + A(\psi^n)_*), \quad (1.15)$$

где величины, помеченные индексом \*, соответствуют значениям в начальных точках траекторий  $\vec{x}_*^i$  и вычисляются путем интерполяции из точек сетки.

В силу того, что схема Кранка-Николсон абсолютно устойчивая (для операторов  $A$  с мнимыми собственными числами, что характерно для уравнений динамики атмосферы), устойчивость схемы (1.15) определяется способом вычисления начальных точек траекторий. Мы реализовали неявный итеративный квази-неявный подход, аналогичный [4]:

$$\vec{x}_{*(k)} = \vec{x} - \frac{\Delta t}{2} (\vec{v}^{n+1(k-1)} + \vec{v}_{*(k-1)}^n) \quad (1.16a)$$

$$\psi^{n+1(k)} = \psi_{*(k)}^n + \frac{\Delta t}{2} (A(\psi^{n+1(k)}) + A(\psi^n)_{*(k)}), \quad (1.16b)$$

где  $\psi^{n+1(k)}$  –  $k$ -ое приближение к решению на слое по времени  $n+1$ ,  $\vec{v}^{n+1(k)}$  – ветер из  $\psi^{n+1(k)}$ , индекс  $*(k)$  обозначает интерполяцию в точки  $\vec{x}_{*(k)}$ ,  $v^{n+1}(0) = v^n$ . Геометрические аппроксимации, необходимые для решения уравнения (1.16a) на сфере, приведены, например, в [12]. Нелинейная система уравнений типа  $\psi^{n+1} - \frac{\Delta t}{2} A(\psi^{n+1}) = \psi_*^n + \frac{\Delta t}{2} A(\psi^n)_*$  решается способом, описанным в разделе 2.1.1, значения переменных в начальных точках траекторий находятся с помощью трикубической интерполяции, для минимизации обменов между MPI-процессами вычисления организованы согласно масштабируемому алгоритму [13].

Метод	$\Delta x$	$\Delta t$	время вычисления шага	лет расчета / сутки
Горизонтально-явный	100 км	240 с	0.045 с	14,3
Явно-неявный	100 км	600 с	0.12 с	13,6
Полулагранжев	100 км	1800 с	0.27 с	18,6
Горизонтально-явный	10 км	10 с	0.045 с	0,6
Явно-неявный	10 км	60 с	0.15 с	1,1
Полулагранжев	10 км	180 с	0.32 с	1,5

ТАБЛИЦА 1.1: Скорость вычислений в эксперименте «Бароклинная неустойчивость» на сетке кубическая сфера размерностью 6x100x100 и 30 уровней по вертикали при использовании 360 ядер кластера ИВМ РАН. Шаг  $\Delta x = 10$  соответствует радиусу Земли, уменьшенному в 10 раз.

## 2.1.4 Численные эксперименты с негидростатической моделью динамики атмосферы

Мы проверили негидростатическую модель динамики атмосферы (все три подхода к интегрированию по времени – горизонтально-явный вертикально-неявный, явно-неявный, полулагранжев) на идеализированных задачах «Распространение гравитационной волны», «Обтекание горы Шара», «Волны Россби, возбужденные орографией», «Бароклинная неустойчивость», «Тропический циклон», входивших в разные годы в протокол тестирования международного проекта по сравнению динамических блоков моделей атмосферы (DCMIP - Dynamical Core Model Intercomparison Project) [14], [14], [15].

Численные решения модели с использованием разных подходов к интегрированию по времени близки друг к другу и соответствуют современному уровню точности для этих задач. Вычислительная эффективность, однако, разная. Данные о скорости вычислений в эксперименте «Бароклинная неустойчивость» приведены в Таблице 1.1. Полулагранжев метод оказывается самым быстрым как при шаге по горизонтали 100 км, так и при шаге 10 км (эксперимент с уменьшенным радиусом Земли). Отметим непропорциональное уменьшение шага по времени горизонтально-явного вертикально-неявного метода при уменьшении шага по пространству со 100 км до 10 км, что является проявлением проблемы неустойчивости для мод с большой длинной волны по вертикали и малой по горизонтали.

На рисунке 1.3 представлены поля давления на уровне моря и меридионального ветра в эксперименте «Тропический циклон» по решению полулагранжевой схемы на 10-ый день интегрирования. На сетке с горизонтальным разрешением около 100 км (или  $1^\circ$  на экваторе,  $6 \times 90 \times 60$ ) и 30 уровнями по вертикали модель воспроизводит усиление циклона за счет конденсации водяного пара, однако глубина минимума давления и амплитуда ветра сильно снижена. При горизонтальном разрешении около 50 км (или  $0.5^\circ$  на экваторе,  $6 \times 180 \times 180$ ) усиление циклона выражено значительно сильнее, значение минимума давления, максимальных ветров и трек циклона (не показано) близки к решениям моделей, участвовавших в сравнении DCMIP2016 [16].



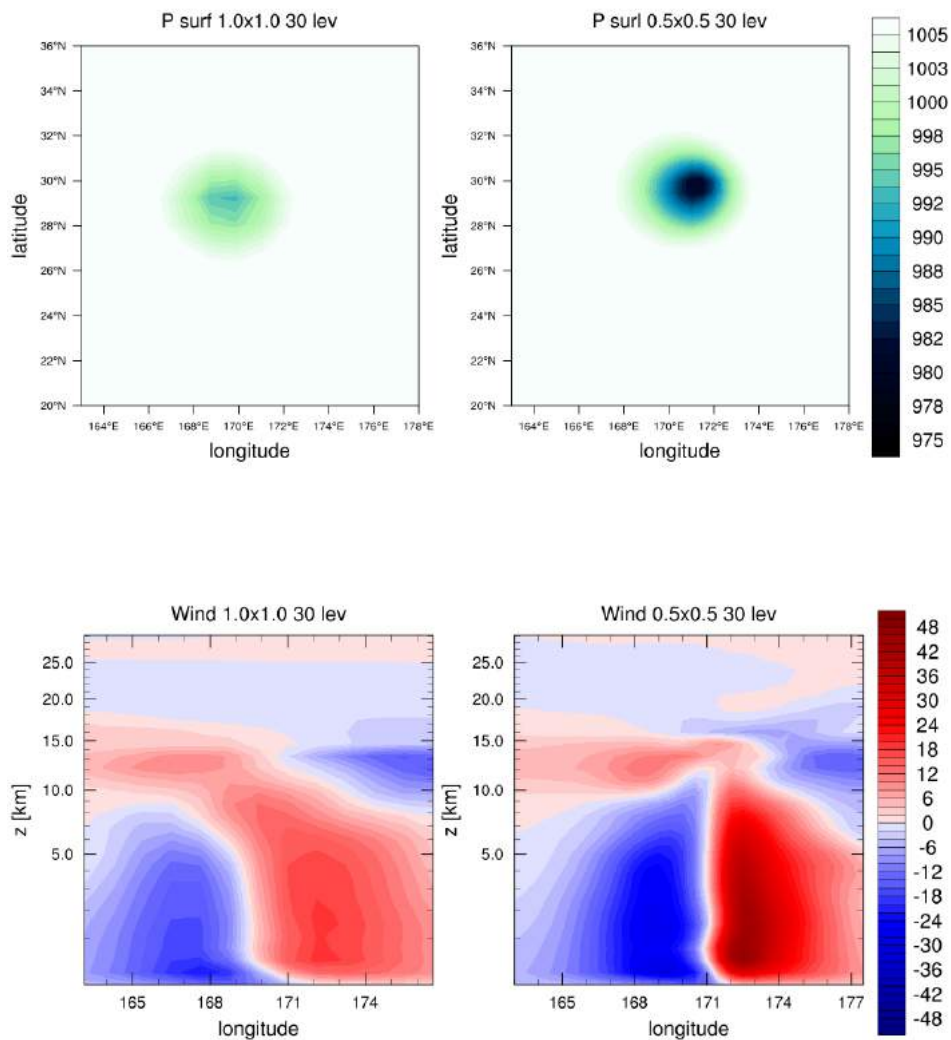


Рис. 1.3: Эксперименте «Тропический циклон», поля давления на уровне моря (сверху) и меридионального ветра (снизу, сечение долгота-высота через центр циклона) через 10 дней интегрирования. Численные решения полулагранжевой схемы на сетке с разрешением около  $1^\circ \times 1^\circ$  (100 км) и  $0.5^\circ \times 0.5^\circ$  (50 км)

### 2.1.5 Стохастически возмущенные полулагранжевы траектории в модели атмосферы ПЛАВ

Данный раздел посвящен учету неопределенностей, возникающих при аппроксимация адвективных слагаемых уравнений. Первый источник неопределенности кроется в итерационном методе для определения исходных точек полулагранжевых траекторий, второй – в методе интерполяции. Поскольку интерполяционный метод, как правило, имеет порядок точности выше, чем метод определения положения исходной точки траектории, имеет смысл учитывать неопределенности при вычислении координат исходных точек.

Рассматриваемая версия модели ПЛАВ20 [12] имеет горизонтальное разрешение  $0,225^\circ$  по долготе; переменное разрешение по широте – от  $0,24^\circ$  во внетропической части Южного полушария до  $0,16^\circ$  в средних широтах Северного полушария. Вертикальное разрешение модели: 51 вертикальный уровень, верхняя граница модели – 5 гПа.

В модели ПЛАВ при решении уравнения адвекции применяется полулагранжев метод, предложенный в работе [17] и описанный в [18].

Стохастические возмущения исходных точек в модели ПЛАВ реализованы на основе алгоритма, предложенного в Европейском центре среднесрочных прогнозов погоды (ЕЦСПП). Отличие состоит в способе внесения возмущений: в модели ПЛАВ, в отличие от модели ЕЦСПП, предлагается возмущать не долготу, широту и вертикальную координату, а полусуммы скоростей в конечной точке и предварительного значения в исходной точке траектории в узлах сетки модели, которые мы обозначим как  $(u_m, v_m)$ . Возмущенные значения скоростей обозначим  $(u_m^*, v_m^*)$  и будем вычислять по формулам:

$$u_m^* = u_m (1 + (\xi_u - 1)W(\eta_m)), \quad (1.17)$$

$$v_m^* = v_m (1 + (\xi_v - 1)W(\eta_m)). \quad (1.18)$$

Здесь  $\xi_i$  – набор случайных величин, таких, что  $\xi_i \sim \mathcal{N}(1, \sigma_i^2)$ ,  $i = \{u, v\}$ , где  $\sigma_i$  – разброс  $i$ -ой случайной величины,  $W(\eta_m)$  – весовая функция для уменьшения амплитуды возмущений вблизи поверхности Земли и в стратосфере,  $\eta_m$  – вертикальная координата.

Случайные возмущения для метода стохастического возмущения исходных точек полулагранжевых траекторий получаются тем же генератором, что и для алгоритмов стохастического возмущения тенденций и параметров параметризаций [19]. Возмущения генерируются в сеточном пространстве, и для каждой случайной величины предусмотрена настройка амплитуды возмущения, радиуса корреляции по пространству и времени декорреляции. Также в коде модели ПЛАВ можно установить требуемый тип распределения для каждой случайной величины (нормальное или логнормальное распределение) и задать значение математического ожидания (как правило, 0 или 1).

В модели ПЛАВ реализован и устойчиво работает описанный выше алгоритм. Исследован отклик модели ПЛАВ20 на стохастическое возмущение исходных точек полулагранжевых траекторий. В численных экспериментах сравнивались разброс ансамбля и среднеквадратическая ошибка среднего по ансамблю прогноза для заблаговременностей от 24 до 240 часов с шагом 24 часа для ансамблей из 40 прогнозов в среднем за период 15–24 мая 2023 года в версии новой ансамблевой системы со стохастическими возмущениями исходных точек и без них. Верификация ансамблевых прогнозов производилась для температуры, геопотенциала, зональной и меридиональной компонент скорости ветра на уровнях 850, 500 и 250 гПа, а также для давления на уровне моря в трёх регионах Земного шара: внетропическая часть Северного полушария ( $20^\circ - 90^\circ$  с. ш.), тропики ( $20^\circ$  ю. ш. –  $20^\circ$  с. ш.), внетропическая часть южного полушария ( $20^\circ - 90^\circ$  ю. ш.). Для разброса ансамбля и среднеквадратической ошибки

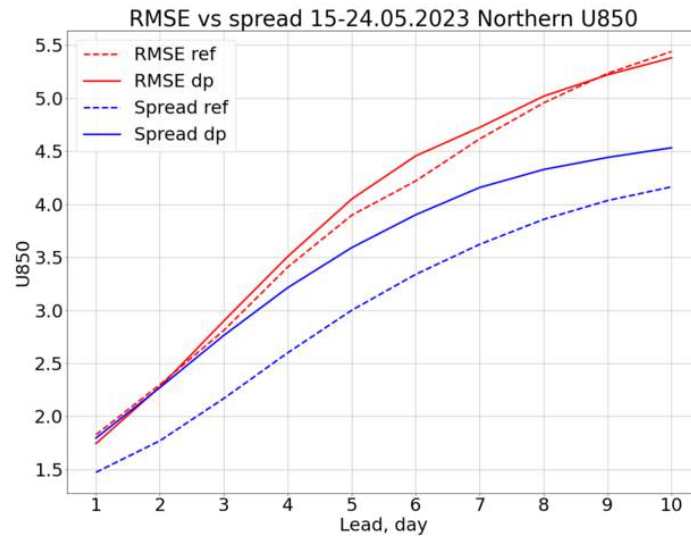


Рис. 1.4: Среднеквадратическая ошибка среднего по ансамблю прогноза (красный) и разброс ансамбля (синий) для контрольного эксперимента (пунктир) и эксперимента со стохастическим возмущением исходных точек полулагранжевых траекторий (сплошная линия) в среднем за период 15-24 мая 2023 года для зональной компоненты скорости ветра на уровне 850 гПа во внетропической части северного полушария

среднего по ансамблю прогноза было проведено исследование статистической значимости полученных результатов, использовался критерий Стьюдента для парных выборок с уровнем значимости 95 %.

Показано статистически значимое повышение разброса ансамбля для заблаговременностей прогноза от 24 до 240 часов с шагом 24 часа для всех верифицируемых переменных на всех уровнях во всех регионах земного шара при стохастическом возмущении исходных точек полулагранжевых траекторий. При этом изменение среднеквадратической ошибки средних по ансамблю прогнозов статистически незначимо. Результаты сравнения среднеквадратической ошибки среднего по ансамблю прогноза и разброса ансамбля для зональной компоненты скорости ветра на уровне 850 гПа во внетропической части северного полушария показаны на рисунке 1.4.

# Литература

- [1] Uri M. Ascher, Steven J. Ruuth, and Raymond J. Spiteri. Implicit-explicit runge-kutta methods for time-dependent partial differential equations. *Appl. Numer. Math.*, 25(2–3):151–167, 1997. ISSN 0168-9274. doi: 10.1016/S0168-9274(97)00056-1. URL [https://doi.org/10.1016/S0168-9274\(97\)00056-1](https://doi.org/10.1016/S0168-9274(97)00056-1).
- [2] D. J. Gardner, J. E. Guerra, F. P. Hamon, D. R. Reynolds, P. A. Ullrich, and C. S. Woodward. Implicit–explicit (imex) runge–kutta methods for non-hydrostatic atmospheric models. *Geoscientific Model Development*, 11(4):1497–1515, 2018. doi: 10.5194/gmd-11-1497-2018. URL <https://www.geosci-model-dev.net/11/1497/2018/>.
- [3] A Steyer, C. J Vogl, M. Taylor, and O. Guba. Efficient imex runge-kutta methods for nonhydrostatic dynamics. *ArXiv*, 2019. doi: 10.48550/arXiv.1906.07219.
- [4] T. Davies, M. Cullen, A. Malcolm, M. Mawson, A. Staniforth, A. White, and N. Wood. A new dynamical core for the Met Office’s global and regional modelling of the atmosphere. *Quart. J.Roy. Met.Soc.*, 131: 1759–1782, 2005. doi: 10.1256/qj.04.101.
- [5] Eike H Müller and Robert Scheichl. Massively parallel solvers for elliptic partial differential equations in numerical weather and climate prediction. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 140 (685):2608–2624, 2014.
- [6] Christopher Maynard, Thomas Melvin, and Eike Hermann Müller. Multigrid preconditioners for the mixed finite element dynamical core of the lfrc atmospheric model. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 146(733):3917–3936, 2020.
- [7] Sean Buckeridge and Robert Scheichl. Parallel geometric multigrid for global weather prediction. *Numerical Linear Algebra with Applications*, 17(2-3):325–342, 2010.
- [8] Willem Deconinck, Peter Bauer, Michail Diamantakis, Mats Hamrud, Christian Kühnlein, Pedro Maciel, Gianmarco Mengaldo, Tiago Quintino, Baudouin Raoult, Piotr K. Smolarkiewicz, and Nils P. Wedi. Atlas : A library for numerical weather prediction and climate modelling. *Computer Physics Communications*, 220:188 – 204, 2017. ISSN 0010-4655. doi: <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2017.07.006>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010465517302138>.
- [9] Радий Петрович Федоренко. Релаксационный метод решения разностных эллиптических уравнений. *Журнал вычислительной математики и математической физики*, 1(5):922–927, 1961.

- [10] Ulrich Trottenberg, Cornelius W Oosterlee, and Anton Schuller. *Multigrid*. Elsevier, 2000.
- [11] A. Staniforth and J. Côté. Semi-Lagrangian integration schemes for atmospheric models – a review. *Mon. Wea. Rev.*, 119:2206–2223, 1991. doi: 10.1175/1520-0493(1991)119<2206:SLISFA>2.0.CO;2.
- [12] M. Tolstykh, V. Shashkin, R. Fadeev, and G. Goyman. Vorticity-divergence semi-lagrangian global atmospheric model SL-AV20: dynamical core. *Geoscientific Model Development*, 10(5):1961–1983, 2017. doi: 10.5194/gmd-10-1961-2017. URL <https://www.geosci-model-dev.net/10/1961/2017/>.
- [13] J.B. White III and J.J. Dongarra. High-performance high-resolution tracer transport on a sphere. *J. Comput. Phys.*, 230:6778 – 6799, 2011. doi: 10.1016/j.jcp.2011.05.008.
- [14] P. A. Ullrich, C. Jablonowski, J. Kent, P. H. Lauritzen, R. D. Nair, and M. A. Taylor. Dynamical core model intercomparison project (dcmip) test case document. 2012. URL [http://earthsystemcog.org/site\\_media/docs/DCMIP-TestCaseDocument\\_v1.7.pdf](http://earthsystemcog.org/site_media/docs/DCMIP-TestCaseDocument_v1.7.pdf).
- [15] P. A. Ullrich, C. Jablonowski, J. Kent, P. H. Lauritzen, R. Nair, K. A. Reed, C. M. Zarzycki, D. M. Hall, D. Dazlich, R. Heikes, C. Konor, D. Randall, T. Dubos, Y. Meurdesoif, X. Chen, L. Harris, C. Kühnlein, V. Lee, A. Qaddouri, C. Girard, M. Giorgetta, D. Reinert, J. Klemp, S.-H. Park, W. Skamarock, H. Miura, T. Ohno, R. Yoshida, R. Walko, A. Reinecke, and K. Viner. Dcmip2016: a review of non-hydrostatic dynamical core design and intercomparison of participating models. *Geoscientific Model Development*, 10(12):4477–4509, 2017. doi: 10.5194/gmd-10-4477-2017. URL <https://gmd.copernicus.org/articles/10/4477/2017/>.
- [16] J. L. Willson, K. A. Reed, C. Jablonowski, J. Kent, P. H. Lauritzen, R. Nair, M. A. Taylor, P. A. Ullrich, C. M. Zarzycki, D. M. Hall, D. Dazlich, R. Heikes, C. Konor, D. Randall, T. Dubos, Y. Meurdesoif, X. Chen, L. Harris, C. Kühnlein, V. Lee, A. Qaddouri, C. Girard, M. Giorgetta, D. Reinert, H. Miura, T. Ohno, and R. Yoshida. Dcmip2016: the tropical cyclone test case. *Geoscientific Model Development Discussions*, 2023:1–27, 2023. doi: 10.5194/gmd-2023-87. URL <https://gmd.copernicus.org/preprints/gmd-2023-87/>.
- [17] M. Rochas. *ARPEGE Documentation, Part 2, Chapter 6*. Météo-France, Toulouse, France, 1990.
- [18] C. Temperton, M. Hortal, and A. Simmons. A two-time-level semi-Lagrangian spectral global model. *Quart. J. Roy. Met. Soc.*, 127:111–129, 2001. doi: 10.1002/qj.49712757107.
- [19] K. A. Alipova, G. S. Goyman, M. A. Tolstykh, V. G. Mizyak, and V. S. Rogutov. Stochastic perturbation of tendencies and parameters of parameterizations in the global ensemble prediction system based on the sl-av model. *Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling*, 37(6):331–347, 2022. doi: 10.1515/rnam-2022-0027.

## Задача 2.2. Развитие вычислительных технологий для моделирования Мирового океана

- Программная реализация модели Мирового океана, допускающая возможность расчета динамики океана, блока переноса примесей, модели льда, а также операций ввода-вывода на отдельных группах MPI процессов.
- Разработка модели Мирового океана, включая блок динамики, набор физических параметризаций, модель морского льда для массивно-параллельных систем, включающих графические процессоры.
- Разработка программной компоненты каплера, обеспечивающего обмена данными между моделью атмосферы и океана и интерполяцию сеточных функций. Программная реализация возможности подключения модели океана к внешним моделям общей циркуляции атмосферы. Будет рассматриваться подключение к модели атмосферы, используемой в модели Земной системы INMCM.
- Разработка негидростатической версии модели динамики океана на основе общего программного кода. Тестирование негидростатической версии динамики в идеализированных постановках.

### 2.2.1 Программная реализация модели Мирового океана, допускающая возможность расчета динамики океана, блока переноса примесей, модели льда, а также операций ввода-вывода на отдельных группах MPI процессов

В модель Мирового океана внедрена возможность исполнения части расчетных блоков (динамики океана, переноса примесей, расчета термодинамики льда и т.д.) на отдельных группах параллельных процессов. Так программная реализация позволяет выполнять вычисления в блоке динамике и расчеты

переноса примесей на разных группах MPI процессов. Такой подход позволяет ускорить реализацию переноса примесей за счет независимого от блока динамики выполнения вычислений, однако, требует дополнительных обменов данными между процессами, в частности, пересылки трехмерных полей – вектора скорости и коэффициентов турбулентной диффузии. В численных экспериментах получено, что выполнение вычислений в блоке переноса примесей на отдельной группе MPI процессов оказывается эффективным при переносе даже нескольких трассеров. Отметим, что данный результат связан с тем, что обмены данными удается перекрыть с выполнением вычислений в блоке динамики на следующем шаге по времени.

Реализованная технология также поддерживает выполнение операций ввода-вывода на отдельной группе MPI процессов. В данном случае ”расчетный” блок модели (блок динамики или блок переноса примесей) при необходимости записи полей во внешнюю память отправляет данные группе MPI процессов, которая предназначена исключительно для работы с файловой системой. Подобный режим позволяет уменьшить общее время работы модели, поскольку во многих случаях время выполнения межпроцессорных обменов значительно меньше времени выполнения операций ввода-вывода, требующих обращений к файловой системе. При этом основная группа процессов может сразу продолжить выполнение вычислений и расчет значений полей на следующих шагах по времени.

Отметим, что разработанная программная реализация, допускающая выполнение блоков модели на отдельных группах параллельных процессов, поддерживает ансамблевые расчеты, а также осреднение полей по ансамблю реализаций на этапе счета модели. Такой подход исключает необходимость хранения набора трехмерных полей большого объема для последующей обработки и может быть также использован для калибровки эмпирических параметризаций в модели.

Для модели льда реализована возможность запуска на отдельных группах MPI-процессов с передачей данных через каплер, реализующий протоколы обменов информацией, принятые при разработке модели Земной системы ИВМ РАН (МЗС ИВМ РАН). Это позволяет значительно упростить процесс замены текущего ледового блока модели океана альтернативными. Использование унифицированного протокола предоставляет возможность разрабатываемой модели Мирового океана использовать любой из вариантов блоков ледовой динамики модели МЗС РАН, при этом модель МЗС РАН может использовать любой из ледовых блоков, подключенных к разрабатываемой модели.

Возможность переиспользования блоков одной модели в рамках другой модели значительно упрощает разработку. Помимо этого, появляется возможность улучшить результаты моделирования во время ансамблевых расчетов с этими моделями за счет увеличения разброса прогностических траекторий из-за применения различных блоков динамики. Расширение круга использования динамических блоков за счет включения в разные модели приводит к повышению их качества за счет проведения с ними более широкого круга расчетов, а также за счет создания конкуренции между наборами блоков различных моделей, которые до этого напрямую конкурировать не могли, являясь неотчуждаемыми частями динамики полных моделей.

## 2.2.2 Разработка модели Мирового океана, включая блок динамики, набор физических параметризаций, модель морского льда для массивно-параллельных систем, включающих графические процессоры

В рамках проекта разработана модель Мирового океана для массивно-параллельных вычислительных систем, включающих графические ускорители. Программная реализация модели основана на использовании гибридного MPI/OpenMP/CUDA подхода, что позволяет проводить расчеты на большей части современных архитектур массивно-параллельных вычислительных систем и суперкомпьютерах, включающих сопроцессоры и ускорители (GPU, Graphics Processing Unit, и процессоров на базе архитектуры Intel Xeon Phi).

На данном этапе программная реализация модели для массивно-параллельных вычислительных систем имеет следующую структуру. Библиотека MPI используется для одномерной или двумерной декомпозиции (по горизонтальным сеточным координатам) вычислительной области между параллельными процессами. Для выполнения обменов данными между MPI процессами вычислительная сетка дополняется добавочными сечениями, состоящими из фиктивных узлов, ширина которых, как правило, определяется шириной шаблона конечно-разностных аппроксимаций. При реализации итерационных методов допускается увеличение ширины добавочных сечений, что позволяет выполнить несколько итераций без обменов данными между MPI процессами за счет дополнительных вычислений. Вычислительные и коммуникационные процедуры модели поддерживают выполнение в параллельной области OpenMP, где используется поддержка "oghran" директив в интерфейсе OpenMP – допускается, что директивы синхронизации и распределения работы могут не входить в лексический контекст параллельной области. Такой подход позволяет минимизировать число точек синхронизации нитей. Гибридный подход MPI-OpenMP также применяется для перекрытия вычислений и обменов данными между MPI процессами.

Программная реализация на графических процессорах предполагает наличие двух уровней параллелизма в программе: распределение данных между отдельными графическими процессорами и внутренний параллелизм отдельных устройств, состоящих из большого числа вычислительных ядер. Библиотека MPI используется для организации обменов данными между устройствами, а для организации вычислений на графических процессорах применяется технология программирования CUDA [1]. Каждый MPI-процесс связывается с отдельным графическим процессором. Для организации вычислений в рамках CUDA используется следующая структура: нити группируются в блоки, которые составляют вычислительную сетку. Такой подход позволяет в программном коде распределять расчеты между всей совокупностью нитей, при этом сам механизм соответствия нити конкретному вычислительному ядру на уровне кода не требует явного описания. Пространственные аппроксимации описываются в виде функций, где каждая нить вычисляет значение сеточного оператора в отдельных узлах или наборе узлов сетки. Одной из проблем при реализации итерационных алгоритмов на графических процессорах



является большое число точек синхронизации, сокращающих вычисления, которые можно провести с данными в быстрой памяти GPU (регистры, разделяемая память или кэш). В методе бисопряженных градиентов, используемого для решения уравнения Гельмгольца, операции по возможности совмещаются в функциях, выполняемых на графических процессорах. В процедурах чтения-записи данных и процедурах для межпроцессорных обменов выполняется копирование между оперативной памятью и памятью графического устройства. Отметим, что современные реализации программного интерфейса MPI (Message Passing Interface) пока не приспособлены к эффективному обмену данными между графическими устройствами. Для этого были разработаны специализированные технологии передачи данных на параллельных вычислительных системах, такие как NCCL (NVIDIA Collective Communication Library) и IPC (Inter-Process Communication). Так, например, в работе [2] получено, что для сообщений размером 4МБ использование IPC может позволить уменьшить задержку двусторонней и односторонней связи между GPU на 79% и 74% соответственно, а также увеличить пропускную способность в 4 раза.

На текущем этапе проекта выполнение вычислений на графических процессорах поддерживается как в блоке гидростатической динамики Мирового океана, так и в блоке физических параметризаций. В модуле динамики рассматривается система трехмерных уравнений крупномасштабной гидротермодинамики океана в приближении Буссинеска и гидростатики. В модели используется криволинейная ортогональная система координат на сфере при несимметричном смещении полюсов во внерасчетную область [3, 4]. На поверхности океана задается линеаризованное кинематическое условие для вертикальной компоненты скорости. Для решения двумерного эллиптического уравнения относительно отклонения уровня океана от невозмущенной поверхности применяется итерационный стабилизированный метод бисопряженных градиентов [5]. Система линейных уравнений обладает диагональным преобладанием, и в качестве предобуславливателя достаточно нескольких итераций метода Якоби. Реализация на графических ускорителях также поддерживает набор монотонных схем для переноса пассивных примесей, см., например, [6–8].

В модели океана используются параметризации горизонтального подсеточного переноса и вертикального перемешивания на основе градиентного приближения. Для описания процессов вертикального перемешивания поддерживаются как вычислительно простые схемы первого порядка, так и двухпараметрические модели [9–11], где рассматриваются прогностические уравнения на кинетическую энергию турбулентности и скорость ее диссипации. Для параметризации горизонтального подсеточного переноса используются операторы горизонтальной диффузии, в которых возможно задание эмпирических и постоянных по времени коэффициентов или их расчет по модели Смагоринского [12] для двумерной жидкости. Операторы диффузии второго порядка могут быть также дополнены бигармоническим оператором, который более эффективно подавляет высокочастотные гармоники и в меньшей степени влияет на крупномасштабную компоненту решения. Набор физических параметризаций, допускающий выполнение на графических процессорах, также включает противогradientные поправки для конвективного перемешивания, алгоритм изонейтральной диффузии для переноса скалярных полей и блок приземного слоя для расчета потоков импульса и тепла над поверхностью океана.

На GPU была также реализована модель термодинамики морского льда [13], где каждая нить (в рамках технологии CUDA) выполняет вычисления для одной ячейки модельной сетки независимо. Отметим, что данный подход позволяет задействовать вычислительные устройства лишь частично на грубых сетках, характерных для климатических расчетов, и требует дальнейшей оптимизации.

Проведена верификация реализации модели на графических ускорителях в постановках, использованных для тестирования модели океана при счете на центральных процессорах на прошлых этапах проекта: в идеализированных экспериментах (например, в тестах на выполнение геострофического баланса в дискретной системе уравнений) и в полной конфигурации модели.

Для оценки эффективности и масштабируемости программной реализации, времени счета модели Мирового океана на графических ускорителях проведены вычислительные эксперименты на суперкомпьютере СКЦ МГУ "Ломоносов-2" (Nvidia Tesla K40, Nvidia Tesla P100, Nvidia Tesla V100). На рисунке 2.1 показано ускорение на архитектуре Volta, по сравнению с расчетами на одном 14-ядерном процессоре (Intel Xeon E5-2697 v3), в зависимости от разрешения модели океана. В расчетах на центральном процессоре использовался гибридный MPI-OpenMP подход.

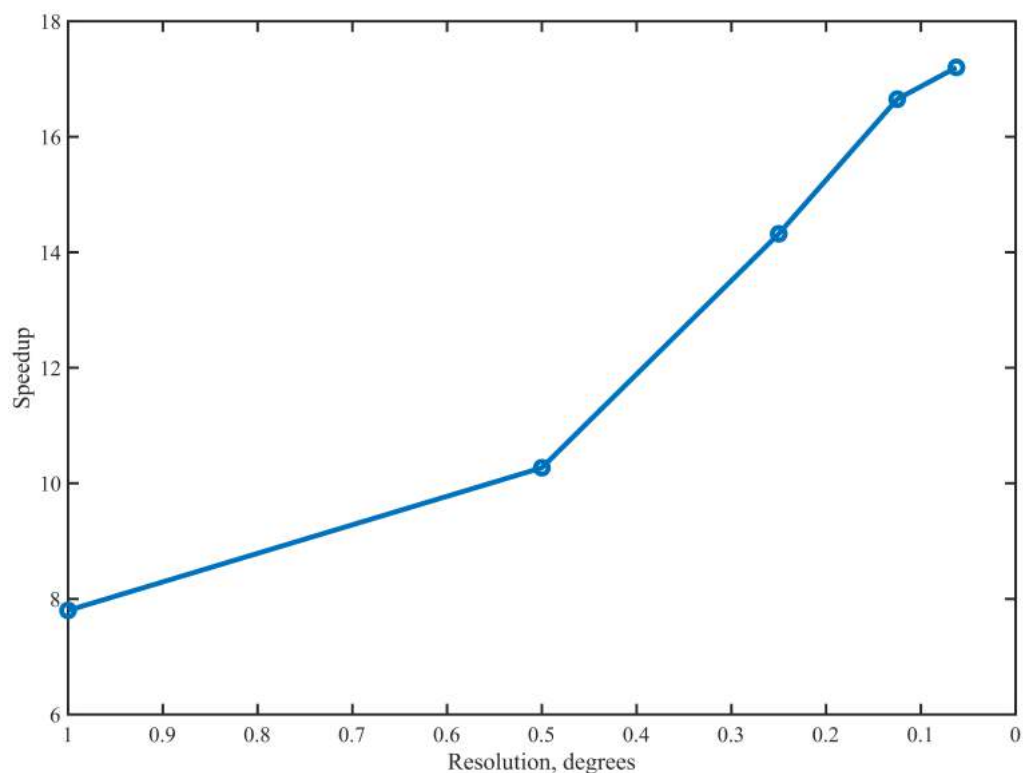


Рис. 2.1: Ускорение программной реализации модели Мирового океана при выполнении вычислений на архитектуре GPU (Nvidia Volta), по сравнению с временем счета на одном 14-ядерном процессоре (Intel Xeon E5-2697 v3), в зависимости от шага сетки.

Для ускорения вычислений на графических процессорах в модель Мирового океана был внедрен ряд оптимизаций алгоритмов переноса примеси. Рассматривались следующие численные схемы для решения уравнения переноса: схемы upwind первого (UW) и третьего (UW3) порядка точности, центрально-разностная схема 2-го порядка точности, записанная в дивергентной (DIV) и кососимметричной (SKEW)

формах, схема Лакса–Вендроффа с ограничителем потока (LAX) [6] и алгоритм Flux-Corrected Transport (FCT) [14].

Для оптимизации реализаций схем переноса использовались следующие подходы (подробное описание приведено в работе [8]):

- *shared memory* – разделяемая память
- *kernel fusion* – слияние cuda-ядер
- *scalar fusion* – объединение массивов концентраций скаляров в единый вектор памяти  $\Phi$  (далее описаны детали реализации для двумерной задачи, поскольку они легко обобщаются на случай трехмерной задачи). Этот метод был реализован двумя способами в зависимости от размещения памяти  $k$ -ой примеси в  $\Phi$ :

1.  $[k][x][y]$  порядок:  $\varphi_k[m] = \Phi[k \cdot N_g + m]$ ,

2.  $[x][y][k]$  порядок:  $\varphi_k[m] = \Phi[m \cdot N_c + k]$ ,

где порядок задан для  $k$ -го вещества,  $k = 1, \dots, N_c$ , и  $m$ -го индекса ячейки вычислительной сетки (сетка состоит из  $N_g = N_x \cdot N_y$  ячеек),  $m = 1, \dots, N_g$ ,  $\varphi_k$  – массив, используемый для хранения значений концентрации  $k$ -го вещества.

В численных экспериментах рассматривалась постановка задачи переноса, описанная в работе [8]. На рисунке 2.2 показаны результаты ускорения двумерной модели при переносе вычислений на графические процессоры без применения техник оптимизации. Получено, что расчеты переноса пассивной примеси, выполненные на одном процессоре Nvidia A100, оказываются быстрее максимум в 80 раз по сравнению с одним CPU-ядром Intel Xeon Gold 6240 (под CPU-ядром подразумевается физическое ядро процессора), см. рисунок 2.2а, и максимум в 6 раз по сравнению с одним узлом из 18 ядер CPU, см. рисунок 2.2б, на точных сетках, в то время как для тестов на грубых сетках наблюдаются противоположные результаты: и ядро CPU, и узел оказались более эффективны, чем один GPU. Для трехмерной модели расчеты на A100 в среднем в 30 раз быстрее одного ядра CPU и в среднем в 2.5 раза быстрее одного узла CPU в тестах с высоким разрешением. Для сеток с грубым разрешением результаты аналогичны 2D случаю.

Получено, что оптимизация, основанная на использовании разделяемой памяти (*shared memory*) графических устройств, не обеспечивает значительного ускорения и может даже увеличить время моделирования переноса как на V100, так и на A100 GPU. В случае трехмерной модели наблюдается схожая зависимость. Эти результаты согласуются с выводами в работе [15], где данный подход был использован для оптимизации алгоритма фильтрации изображений с наблюдаемым снижением производительности на 20% на графических процессорах архитектур Volta и Ampere.

Подход *kernel fusion* был применен к численному алгоритму решения уравнения переноса при использовании схем адвекции DIV, SKEW и UW3 с явной по времени схемой Адамса-Бэшфорта третьего порядка точности. Для двумерной модели оптимизация повысила скорость вычислений для всех тестируемых разрешений, за исключением схемы UW3 на V100 с замедлением реализации вплоть до 20% на самой точной сетке ( $\Delta_{\lambda,\theta} = 0.2^\circ$ , где  $\Delta_{\lambda,\theta}$  – горизонтальное разрешение). Для трехмерного случая использование *kernel fusion* обеспечило в лучшем случае незначительный выигрыш, а в среднем оказалось неэффективным.

Результаты оптимизации вычислений за счет использования *scalar fusion* подхода для  $N_c = 15$  показаны на рисунке 2.3. В данном случае этот подход как для двух-, так и для трехмерной модели обеспечил ускорение во всех проведенных экспериментах. Для двумерной модели оптимизация дала ускорение примерно в 5 раз на V100 (рисунок 2.3b) и примерно в 9 раз на A100 (рисунок 2.3a) на самой грубой сетке. Ускорение уменьшается с увеличением горизонтального разрешения для всех реализованных схем адвекции, так что время вычислений становится близким к времени выполнения для базовой реализации при  $\Delta_{\lambda,\theta} = 0.2^\circ$ . Среднее ускорение в 1.5 раза достигается в тестах с грубым разрешением на V100 и A100 для трехмерного случая. В отличие от двумерного случая, зависимость ускорения от разрешения не одинакова для всех схем адвекции.

Рисунок 2.4 демонстрирует ускорение реализации  $[x][y][k]$  по сравнению с  $[k][x][y]$  для тестов двумерной модели в случае схем DIV и UW3. Для обеих схем мы видим, что ускорение достигает своего предела в экспериментах с высоким разрешением. Максимальное достигнутое ускорение составило 1.5 раза для DIV и 1.4 раза для UW3 на V100.

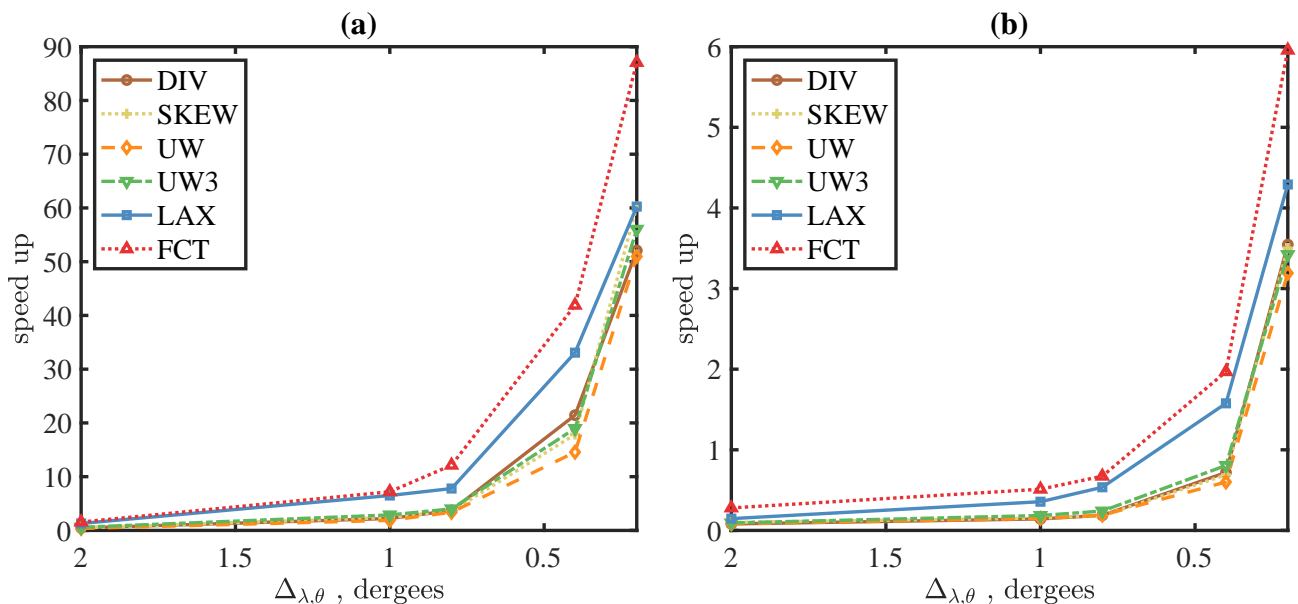


Рис. 2.2: Ускорение выполнения расчетов переноса примеси на A100 GPU по отношению к CPU-ядру (a) и по отношению к CPU-узлу (b) в зависимости от схемы и горизонтального разрешения  $\Delta_{\lambda,\theta}$  для двумерной модели.

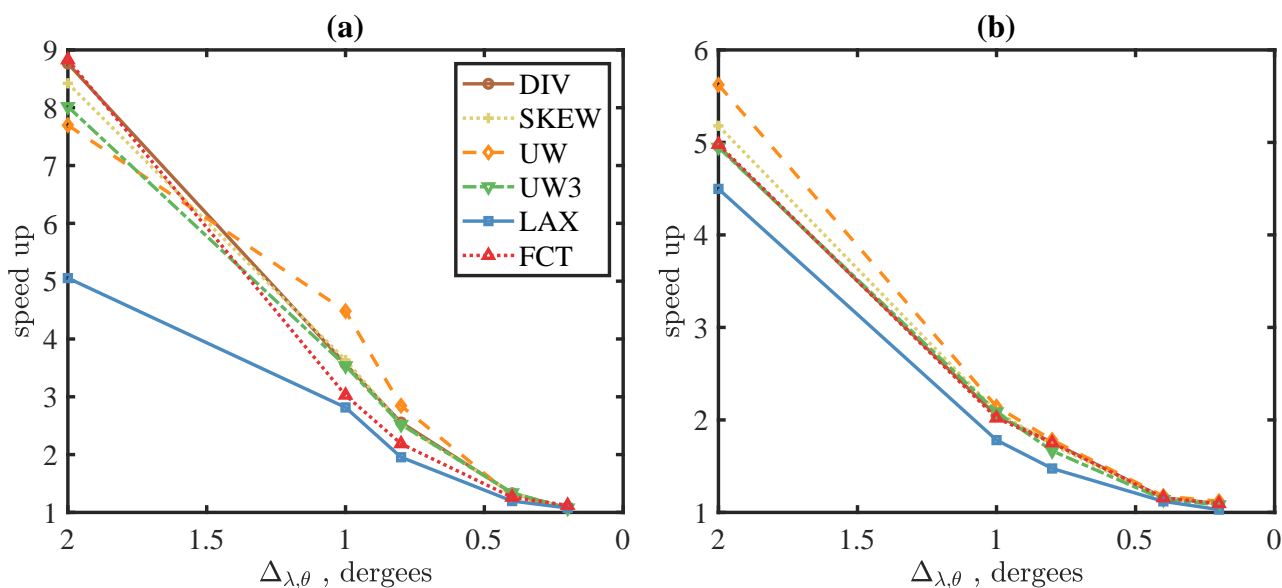


Рис. 2.3: Ускорение метода scalar fusion по отношению к базовой реализации для двумерной модели на A100 (a) и V100 (b) GPUs.

Как уже ранее упоминалось, при вычислениях на нескольких GPU появляются дополнительные накладные расходы, вызванные копированием данных с памяти GPU на CPU и обратно при выполнении MPI-обменов. В связи с этим были проведены тесты по передаче данных напрямую между GPU с помощью технологии NCCL [16], когда необходимо произвести обмен между процессами, находящимися на разных узлах. В случае, когда обмен проводится между процессами на одном вычислительном узле, была использована технология IPC [17].

На рисунке 2.5 показано ускорение выполнения обмена данными при использовании IPC (рис. 2.5a) и NCCL (рис. 2.5b) по отношению к базовой реализации посредством библиотеки MPI. Тесты проводились на двумерной MPI-сетке для 4 процессов, где каждый обменивался данными со всеми своими соседями.

Показано, что для обмена между GPU, находящимися на одном узле, во всех случаях использование IPC намного эффективнее MPI, а максимальное ускорение достигает около 40 раз для сообщений размера 1МБ. В случае, когда графические карты расположены на разных узлах, зависимость иная: для сообщений размером менее 0.26МБ базовая MPI-реализация выполняет обмены быстрее, однако, для сообщений большего размера использование NCCL оказывается эффективнее – наблюдается ускорение в 2.5 раза для сообщений размера 1МБ.

Можно выделить следующие результаты оптимизации схем переноса примесей в модели океана на графических процессорах. Численные эксперименты для оценки производительности показывают, что для двумерного случая базовая реализация на одном GPU до 80 раз быстрее, чем вычисления на одном CPU, и время выполнения расчетов на одном графическом процессоре сопоставимо с расчетами на 18

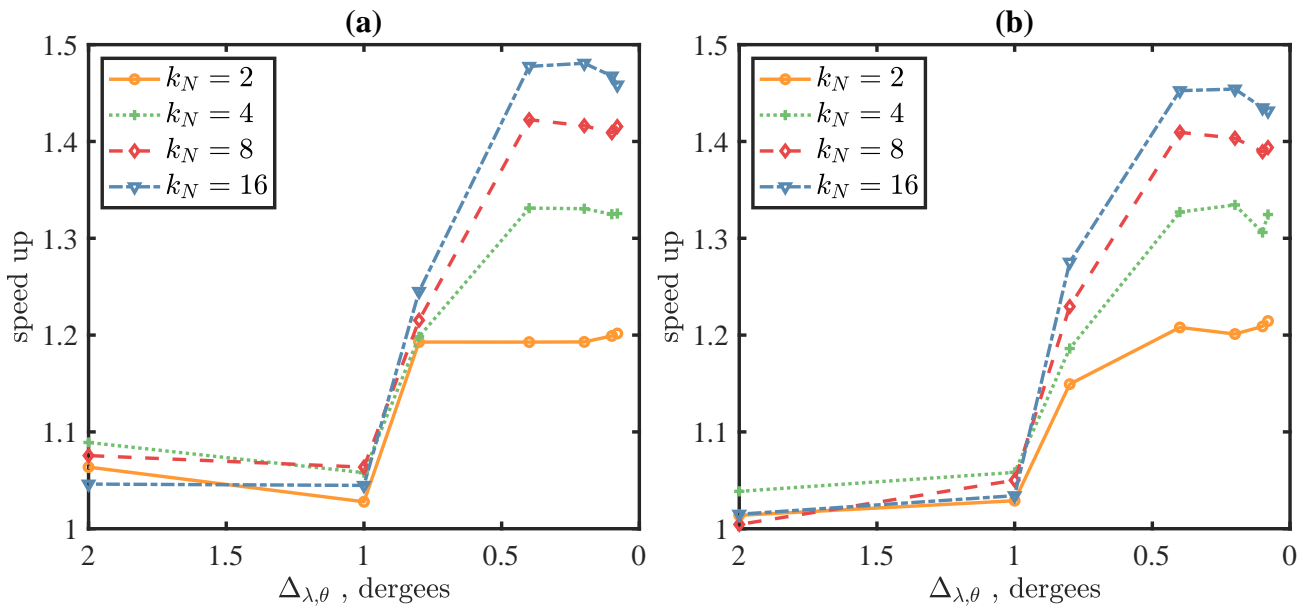


Рис. 2.4: Ускорение метода scalar fusion с переупорядочиванием по отношению к базовой реализации в случае двумерной модели для схем DIV (a) и UW3 (b) на V100 GPU.

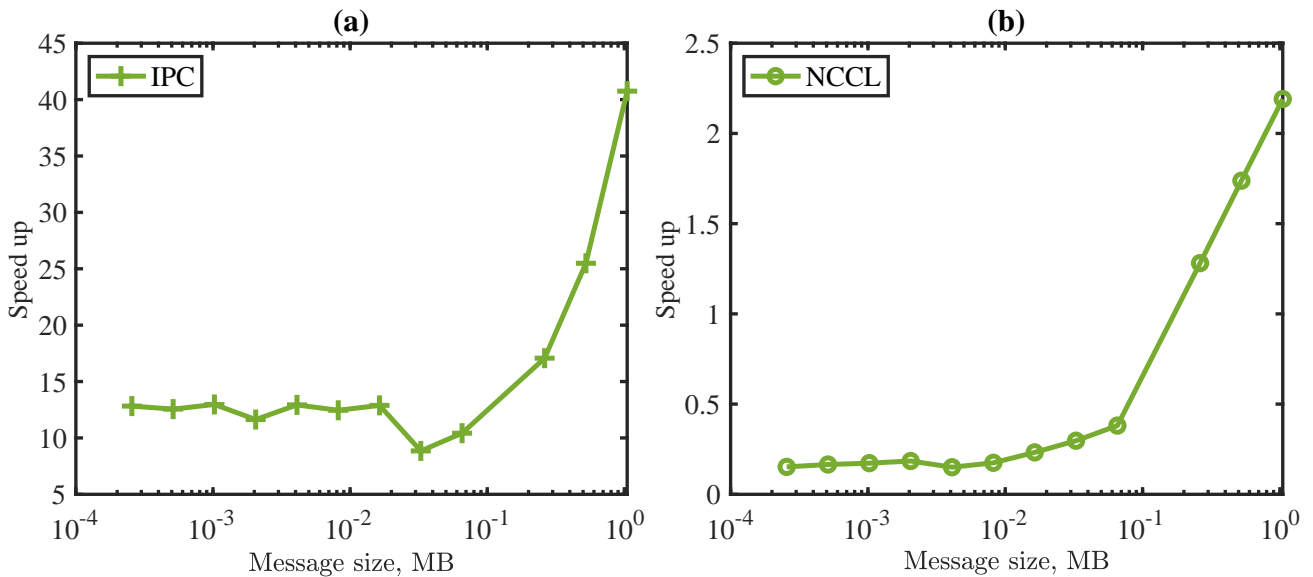


Рис. 2.5: Ускорение реализации обмена с применением IPC (a) и NCCL (b) на V100 GPU в зависимости от размера пересылаемого сообщения.

ядрах центрального процессора на мелких сетках, в отличие от экспериментов с грубым разрешением, где расчеты на CPU-узле оказались эффективнее.

Показано, что использование разделяемой памяти для реализации схем адвекции не дает значительного ускорения, а результаты применения *kernel fusion* показывают, что данный метод не всегда является эффективным.

В случае оптимизации *scalar fusion* показано, что прямой подход к объединению расчета переноса

скаляров повысил эффективность реализации во всех проведенных тестах. Для двумерной модели метод обеспечил ускорение примерно в 5 раз на V100 и примерно в 9 раз на A100 на самой грубой сетке. Более того, можно повысить эффективность метода *scalar fusion* для экспериментов с высоким разрешением, переупорядочив расположение массивов скаляров (вместо подхода  $[k][x][y]$  используется  $[x][y][k]$ ) в едином непрерывном пространстве памяти. *Scalar fusion* с переупорядочиванием обеспечил увеличение скорости примерно в 1.5 раза на V100 по сравнению с прямым методом для двумерного случая при проведении экспериментов на точных сетках для схем DIV и UW3.

В результате проведенных тестов по ускорению выполнения обмена данными напрямую между GPU получено, что использование IPC ускоряет обмен во всех экспериментах (максимальное ускорение  $\approx 40$  раз для сообщений размером 1МБ). Применение NCCL позволяет получить выигрыш в скорости проведения обмена только в случае сообщений размером более 0.26МБ (максимальное ускорение  $\approx 2.5$  раза для сообщений размером 1МБ).

Планируется, что данные подходы к оптимизации программного кода будут использованы в дальнейшем для ускорения вычислений в блоке динамики Мирового океана.

### **2.2.3 Разработка программной компоненты каплера, обеспечивающего обмена данными между моделью атмосферы и океана и интерполяцию сеточных функций. Программная реализация возможности подключения модели океана к внешним моделям общей циркуляции атмосферы. Будет рассматриваться подключение к модели атмосферы, используемой в модели Земной системы INMCM**

В рамках проекта разработана программная компонента каплера, обеспечивающего обмена данными между моделью атмосферы и океана и интерполяцию сеточных функций. Было реализовано подключение модели океана к атмосферной компоненте МЗС ИВМ РАН.

Каплеры применяются в моделях Земной системы для эффективной организации взаимодействия между модельными компонентами. Для разных моделей такими компонентами могут являться блоки динамики атмосферы, океана, морского льда, деятельного слоя суши, биохимии и другие. В настоящее время существуют и развиваются различные программные пакеты каплеров для совместного моделирования, применяемые в различных глобальных моделях Земной системы. Например, система FMS [18] интегрирована в модель GFDL Climate model; система Jcup применяется в модели MIROC [19]; для модели ICON разработана система YAC [20]; системы OASIS [21] и ESMF [22] используются более чем одной моделью.

Так как одной из целей разработки данной модели Мирового океана является интеграция с моделью Земной системы ИВМ РАН (МЗС ИВМ РАН) [23], в качестве протокола межмодульных обменов был использован протокол обменов МЗС ИВМ РАН. Это позволяет уменьшить сложность подключения модели океана к совместной модели за счет того, что с точки зрения совместной модели разрабатываемая модель океана является одним из типовых модулей верхнего уровня с общим протоколом обменов информацией. Схема типового модуля верхнего уровня модели МЗС ИВМ РАН представлена на рисунке 2.6.

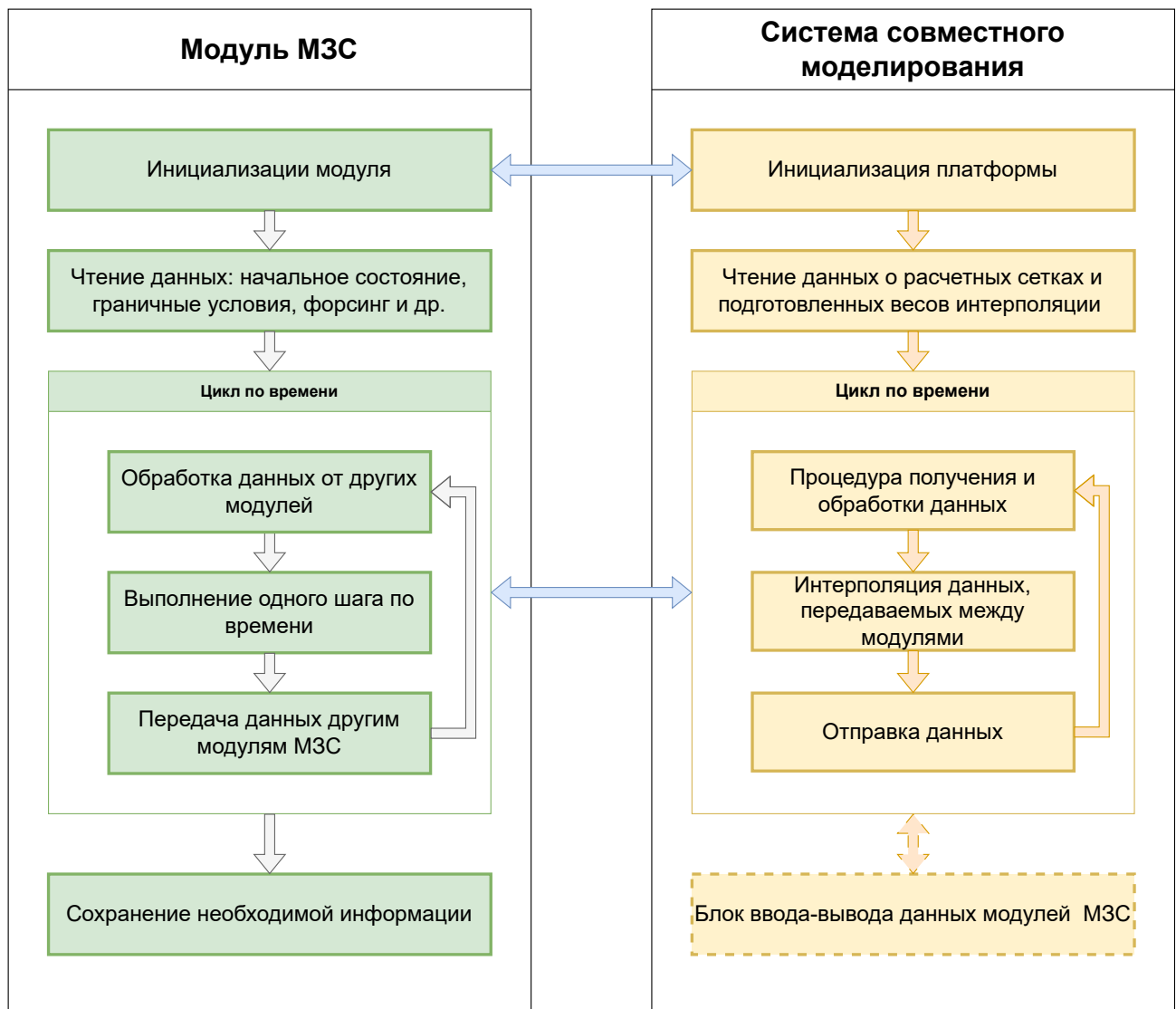


Рис. 2.6: Блок-схема модуля верхнего уровня, подключенного к МЗС ИВМ РАН

В рамках данного проекта были реализованы C++ интерфейсы для процедур программной библиотеки системы совместного моделирования МЗС ИВМ РАН, реализованной на языке Фортран. В саму библиотеку были добавлены отсутствовавшие методы, предназначенные для работы с типами данных C++.



Для выполнения интерполяции сеточных функций использовалась встроенная в библиотеку возможность расширения набора методов интерполяции собственными методами. Реализованный метод использовал веса интерполяции, предварительно рассчитанные по координатам узлов исходной и целевой сеток с помощью Python-скрипта, использовавшем библиотеку *xESMF*. Данная библиотека располагает широким набором методов интерполяции между различными типами сеток, покрывающих поверхность сферы, в том числе возможностью учета периодичности по координатным осям сетки.

На рисунке 2.7 приведено поле поверхностной температуры атмосферы атмосферного блока МЗС ИВМ РАН, которое затем было передано в разрабатываемую модель океана через каплер. Во время передачи оно было отображено на двухполярную сетку океана с использованием предрасчитанных весов, соответствующих билинейной интерполяции с учетом периодических граничных условий сферической расчетной области. Результат интерполяции представлен на рисунке 2.8.

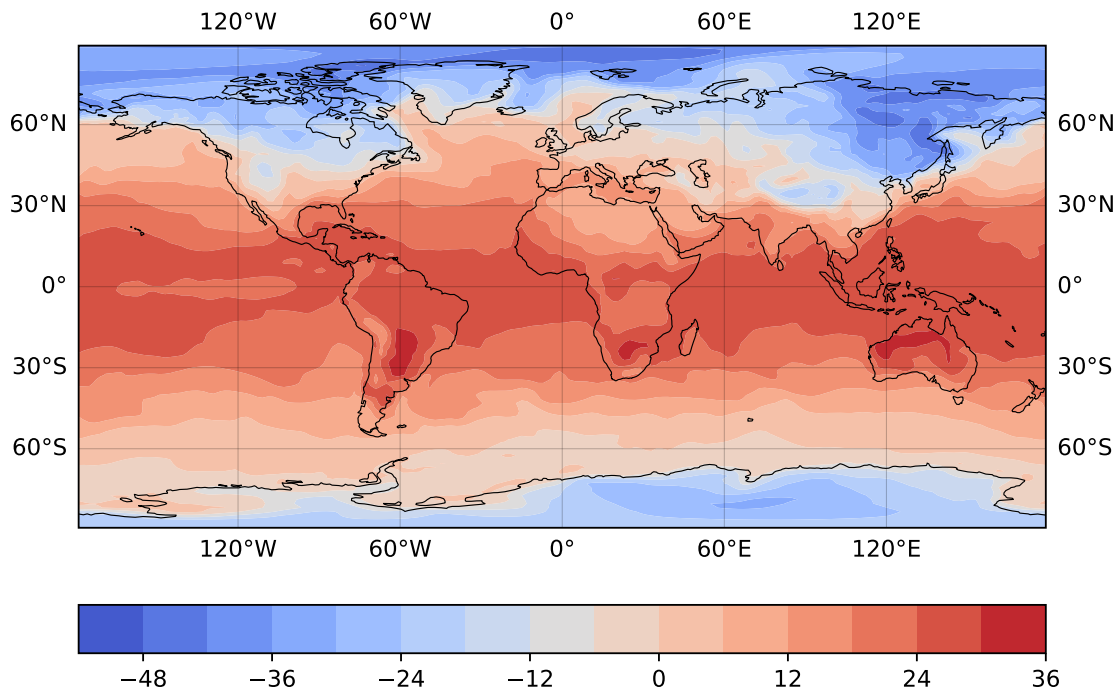


Рис. 2.7: Поверхностная температура атмосферы в МЗС ИВМ РАН

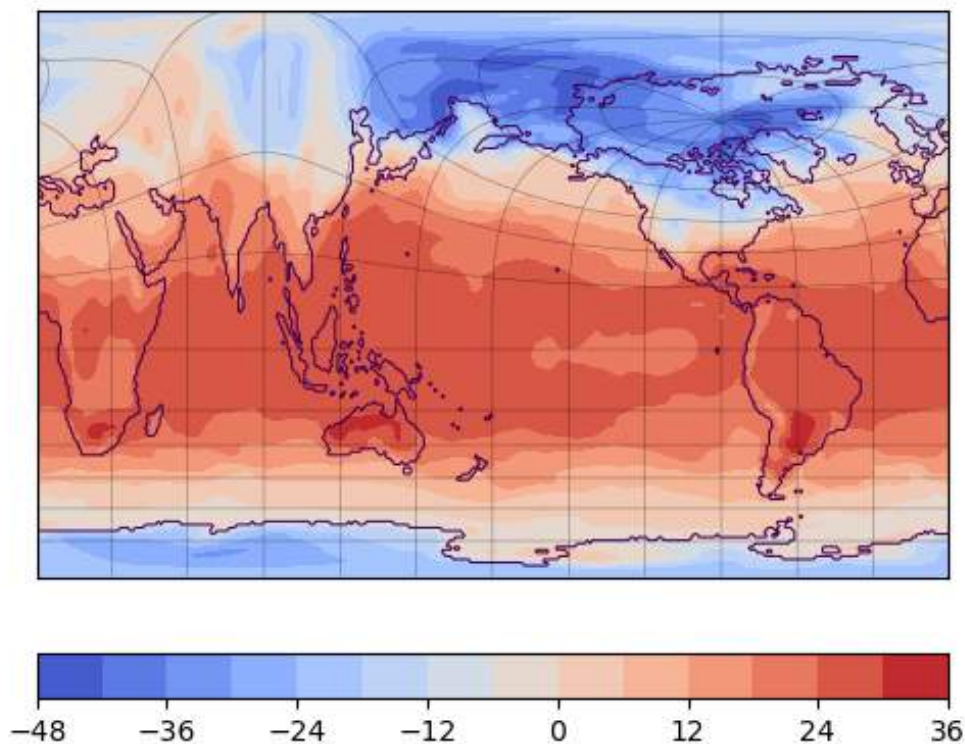


Рис. 2.8: Поверхностная температура атмосферы, полученная разрабатываемой моделью океана из МЗС ИВМ РАН через каплер (линии постоянных широт и долгот отстоят друг от друга на  $15^\circ$  и  $30^\circ$  соответственно)

#### 2.2.4 Разработка негидростатической версии модели динамики океана на основе общего программного кода. Тестирование негидростатической версии динамики в идеализированных постановках

В рамках проекта разработана негидростатическая модель динамики океана. В качестве базовой реализации использовалась гидростатическая версия модели, разработанная на прошлых этапах проекта.

В негидростатической версии модели океана рассматривается разложение поля давления на баротропную, бароклинную и негидростатическую составляющие. В блоке динамики используются консервативные конечно-разностные схемы второго порядка точности для аппроксимации по пространству на сетках с разнесенным способом задания зависимых переменных в ячейках (сетка “С” по классификации Аракавы [24]). Численная аппроксимация по пространству обеспечивает выполнение разностных законов сохранения первых и вторых моментов системы.

Для интегрирования системы уравнений по времени используется метод дробных шагов [25], модифицированный с учетом наличия свободной поверхности [26, 27]. На первом шаге интегрирования из уравнений движения определяются промежуточные значения компонент скорости течения, в том числе рассматривается и полное уравнение для вертикальной компоненты скорости. В правой части

уравнений движения учитывается градиент негидростатической компоненты давления, найденный на предыдущем шаге по времени. Здесь для аппроксимации по времени используется полунявный 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. На следующем шаге решается уравнение относительно отклонения уровня океана от невозмущенной поверхности, полученное с учетом уравнения неразрывности и кинематического условия на свободной поверхности. На заключительном шаге вычисляется поправка к негидростатической компоненте давления, обеспечивающая выполнение уравнения неразрывности для поля скорости на новом шаге по времени.

Для решения трехмерного разностного уравнения Пуассона для поправки к негидростатическому давлению используется предобусловленный стабилизированный метод бисопряженных градиентов. Геометрический многосеточный метод с  $V$  циклом применяется в качестве предобуславливателя. Огрубление исходной сетки в многосеточном подходе строится на основе алгоритма, описанного в статье [28]. На каждой сетке выполняется несколько итераций сглаживания методом последовательной верхней релаксации для красно-черного упорядочивания узлов. Операторы проекции на грубую сетку и продолжения на точную сетку соответствуют билинейной интерполяции, согласованной с введенным оператором осреднения в пространственной дискретизации.

Использование геометрического многосеточного метода в качестве предобуславливателя представляет ряд известных трудностей при реализации алгоритма на системах с распределенной памятью. Огрубление сетки приводит к уменьшению как вычислений, так и объема пересылаемых сообщений. На наиболее грубых сетках время инициализации сообщений становится существенным. В программной реализации многосеточного метода используется следующий подход – при достаточно малом размере огрубленной сетки данные группируются на кратных процессах. Тогда часть процессов остается незадействованной, однако на других процессах увеличивается объем вычислений и пересылаемых сообщений, что оправдывает дополнительные расходы и приводит к ускорению выполнения алгоритма. При выполнении итераций сглаживания при красно-черном упорядочивании узлов сетки применяются подходы к оптимизации (рассмотренные, например, в работах [29, 30]) в виде объединения циклов для красных и черных точек, что увеличивает быстродействие за счет более эффективного использования данных в кэш-памяти.

Для тестирования негидростатической версии динамики океана использовался набор экспериментов, предложенный в работе [27] для модели FVCOM (Finite Volume Coastal Ocean Model). В идеализированных постановках по воспроизведению поверхностных волн наблюдается хорошее согласие с известными данными моделирования. Для верификации модели также рассматривалось развитие неустойчивости в потоке, требующее для верного описания учета негидростатической компоненты давления [31]. В эксперименте, в начальный момент времени, жидкость разделена на две части, имеющие различную плотность. На рисунке 2.9 приведено распределение плотности в начальные и последующие моменты при развитии неустойчивости типа Кельвина-Гельмгольца и перемешивании жидкости.

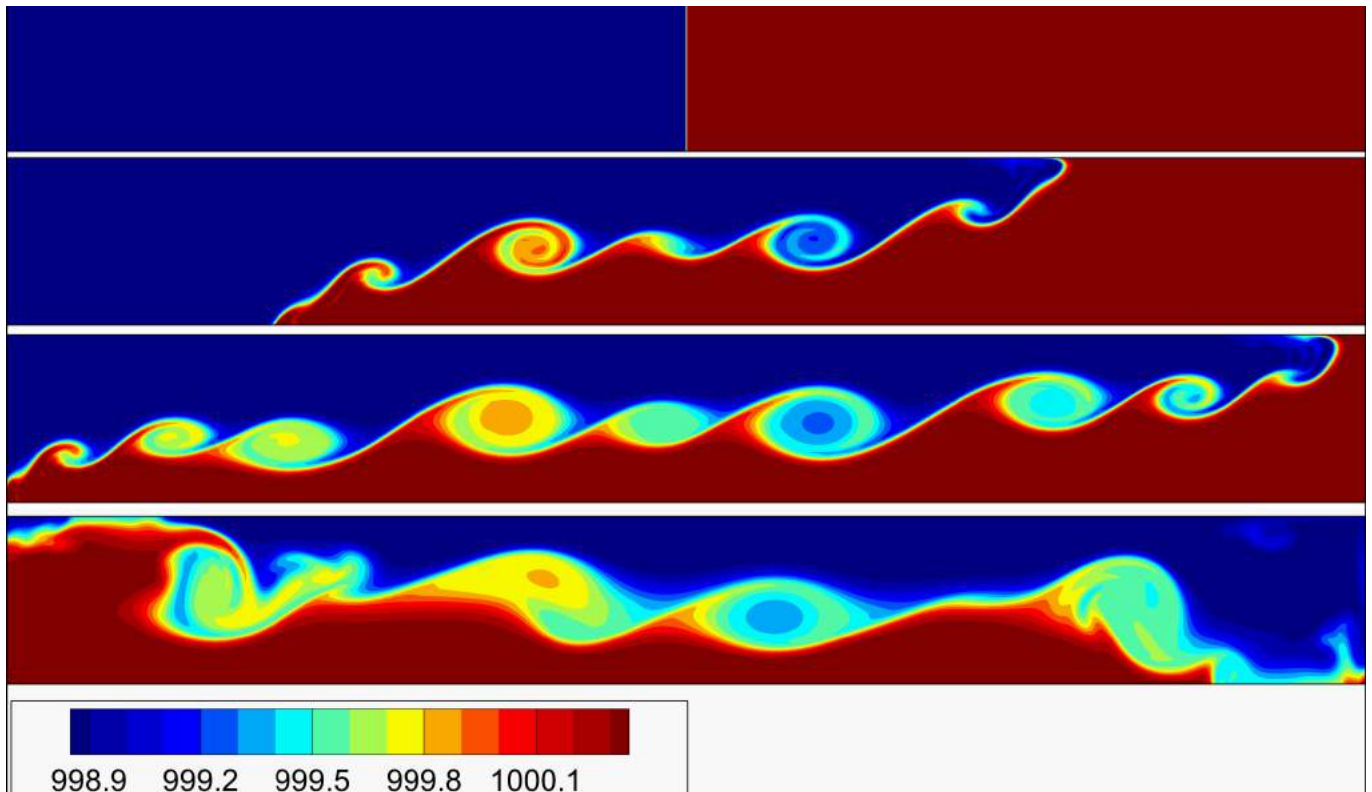


Рис. 2.9: Распределение плотности ( $\text{кг}/\text{м}^3$ ) в начальный и последующие моменты времени в негидростатической версии модели. Приведено поле в вертикальном сечении области при условии проскальзывания на нижней стенке.

Программная реализация как гидростатической модели, так и блока негидростатической динамики выполнена на основе общего программного кода на языке программирования C/C++ с использованием MPI и OpenMP. Такой подход позволяет использовать ряд реализованных ранее параметризаций (например, вертикальной и горизонтальной диффузии), вспомогательные процедуры для конфигурирования модели, выполнения операций чтения/записи файлов, межпроцессорных обменов и т.д. в негидростатической версии модели динамики океана. Использование общего программного кода позволит также унифицировать постановку численных экспериментов и упростит сопоставление результатов расчетов.

# Литература

- [1] А.В. Боресков, А.А. Харламов, Н.Д. Марковский, Д.Н. Микушин, Е.В. Мортиков, А.А. Мыльцев, Н.А. Сахарных, and В.А. Фролов. *Параллельные вычисления на GPU. Архитектура и программная модель CUDA: учебное пособие*. М.: Изд-во Московского университета, 2012.
- [2] S. Potluri, H. Wang, D. Bureddy, A.K. Singh, C. Rosales, and D.K. Panda. Optimizing mpi communication on multi-gpu systems using cuda inter-process communication. In *2012 IEEE 26th International Parallel and Distributed Processing Symposium Workshops & PhD Forum*, pages 1848–1857, 2012. doi: 10.1109/IPDPSW.2012.228.
- [3] R.J. Murray. Explicit generation of orthogonal grids for ocean models. *J. Comp. Phys.*, 126(2):251–273, 1996.
- [4] G. Madec and M. Imbard. A global ocean mesh to overcome the north pole singularity. *Climate Dynamics*, 12(6):381–388, 1996.
- [5] H.A. van der Vorst. Bi-cgstab: A fast and smoothly converging variant of bi-cg for the solution of nonsymmetric linear systems. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 13(2):631–644, 1992. doi: 10.1137/0913035. URL <https://doi.org/10.1137/0913035>.
- [6] R.J. Leveque. High-resolution conservative algorithms for advection in incompressible flow. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 33(2):627–655, 1996.
- [7] W.R. Holland and F.O. Chow, J.C. and Bryan. Application of a third-order upwind scheme in the near ocean model. *J. Climate*, 11(6):1487–1493, 1998.
- [8] E.M. Gaschuk, A.A. Ezhkova, V.A. Onoprienko, A.V. Debolskiy, and E.V. Mortikov. Passive tracer transport in ocean modeling: Implementation on gpus, efficiency and optimizations. *Lobachevskii Journal of Mathematics*, 44(8):3040–3058, 2023. doi: 10.1134/S1995080223080152.
- [9] Е.В. Мортиков, А.В. Глазунов, А.В. Дебольский, В.Н. Лыкосов, and С.С. Зилитинкевич. О моделировании скорости диссипации кинетической энергии турбулентности. *Доклады Академии Наук*, 489(4):414–418, 2019.

- [10] E. Kadantsev, E. Mortikov, A. Glazunov, N. Kleeorin, and I. Rogachevskii. On dissipation time scales of the basic second-order moments: the effect on the energy and flux-budget (efb) turbulence closure for stably stratified turbulence, 2023.
- [11] S.S. Zilitinkevich, T. Elperin, N. Kleeorin, I. Rogachevskii, and I. Esau. A hierarchy of energy- and flux-budget (efb) turbulence closure models for stably-stratified geophysical flow. *Bound.-Layer Meteorol.*, 146:341–373, 2013.
- [12] J. Smagorinsky. General circulation experiments with the primitive equations i: The basic experiment. *Monthly Weather Review*, 91(3):99–164, 1963.
- [13] A.J. Semtner. *A Model for the Thermodynamic Growth of Sea Ice in Numerical Investigation of Climate*. RAND Corporation, Santa Monica, CA, 1975.
- [14] S.T. Zalesak. Fully multidimensional flux-corrected transport algorithms for fluids. *J. Comp. Phys.*, 31:335–362, 1979.
- [15] J. Gambrych. Influence of optimization techniques on software performance for subsequent generations of cuda architecture. In *2021 IEEE Intl Conf on Parallel & Distributed Processing with Applications, Big Data & Cloud Computing, Sustainable Computing & Communications, Social Computing & Networking (ISPA/BDCloud/SocialCom/SustainCom)*, pages 1002–1009, 2021. doi: 10.1109/ISPA-BDCloud-SocialCom-SustainCom52081.2021.00140.
- [16] NVIDIA Corporation. Nvidia collective communication library (nccl) documentation, 2020. URL <https://docs.nvidia.com/deeplearning/nccl/user-guide/docs/index.html>.
- [17] NVIDIA Corporation. Cuda runtime api, 2023. URL [https://docs.nvidia.com/cuda/cuda-runtime-api/group\\_\\_CUDA\\_\\_DEVICE.html](https://docs.nvidia.com/cuda/cuda-runtime-api/group__CUDA__DEVICE.html).
- [18] V Balaji. Fms: the gfdl flexible modeling system. *Princeton, NJ*, 67, 2004.
- [19] Takashi Arakawa, Takahiro Inoue, Hisashi Yashiro, and Masaki Satoh. Coupling library jcup3: its philosophy and application. *Progress in Earth and Planetary Science*, 7(1):1–17, 2020.
- [20] Moritz Hanke, René Redler, Teresa Holfeld, and Maxim Yastremsky. Yac 1.2. 0: new aspects for coupling software in earth system modelling. *Geoscientific Model Development*, 9(8):2755–2769, 2016.
- [21] S Valcke. The oasis3 coupler: A european climate modelling community software. *Geoscientific Model Development*, 6(2):373–388, 2013.
- [22] Chris Hill, Cecelia DeLuca, Max Suarez, ARLINDO Da Silva, et al. The architecture of the earth system modeling framework. *Computing in Science & Engineering*, 6(1):18–28, 2004.
- [23] EM Volodin, EV Mortikov, SV Kostykin, V Ya Galin, VN Lykossov, AS Gritsun, NA Diansky, AV Gusev, and NG Iakovlev. Simulation of the present-day climate with the climate model inmcm5. *Climate dynamics*, 49:3715–3734, 2017.

- [24] A. Arakawa and V.R. Lamb. Computational design of the basic dynamical processes of the UCLA general circulation model. *Methods in Computational Physics: Advances in Research and Applications*, 17:173–265, 1977. doi: <https://doi.org/10.1016%2FB978-0-12-460817-7.50009-4>.
- [25] D.L. Brown, R. Cortez, and M.L. Minion. Accurate projection methods for the incompressible navier–stokes equations. *Journal of Computational Physics*, 168(2):464–499, 2001. ISSN 0021-9991. doi: <https://doi.org/10.1006/jcph.2001.6715>. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999101967154>.
- [26] Y. Kanarska, A. Shchepetkin, and J.C. McWilliams. Algorithm for non-hydrostatic dynamics in the regional oceanic modeling system. *Ocean Modelling*, 18(3):143–174, 2007. ISSN 1463-5003. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ocemod.2007.04.001>. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1463500307000443>.
- [27] Lai Z., Chen C., Cowles G.W., and Beardsley R.C. A nonhydrostatic version of fvcom: 1. validation experiments. *Journal of Geophysical Research: Oceans*, 115(C11), 2010. doi: <https://doi.org/10.1029/2009JC005525>. URL <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2009JC005525>.
- [28] J. Larsson, F.S. Lien, and E. Yee. Conditional semicoarsening multigrid algorithm for the poisson equation on anisotropic grids. *Journal of Computational Physics*, 208(1):368–383, 2005. ISSN 0021-9991. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2005.02.020>. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999105001166>.
- [29] DeLong M.A. *SOR as a Preconditioner*. PhD thesis, University of Virginia, USA, 1997.
- [30] C. Weiß. *Data locality optimizations for multigrid methods on structured grids*. PhD thesis, Technical University Munich, Germany, 2001. URL <http://mediatum.ub.tum.de/node?id=601706>.
- [31] C. Härter, E. Meiburg, and F. Necker. Analysis and direct numerical simulation of the flow at a gravity-current head. part 1. flow topology and front speed for slip and no-slip boundaries. *Journal of Fluid Mechanics*, 418:189–212, 2000. doi: 10.1017/S0022112000001221.

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

## 2.3.1 Выбор, настройка и проверка стохастических моделей лагранжева переноса частиц с учетом выявленных дефектов. Проведение численного моделирования переноса трассеров и тяжелых частиц в городской среде с использованием стохастических параметризаций и моделей RANS

Была разработана, протестирована и оптимизирована перспективная программная реализация лагранжевой стохастической модели, представленная в работе [1]. Модель тестировалась и уточнялась как с точки зрения адекватности воспроизведения физики процессов переноса частиц в городской среде (для чего использовались данные LES расчетов), так и с точки зрения эффективности ее программной реализации на параллельных вычислительных системах различной архитектуры.

В основе рассматриваемой модели лагранжева переноса частиц лежат уравнения движения, по которым рассчитываются положение и скорость каждой отдельной моделируемой частицы:

$$\begin{aligned} d\mathbf{x}_p &= \mathbf{u}_p dt, \\ \frac{d\mathbf{u}_p}{dt} &= \frac{\mathbf{g}(\rho_p - \rho)}{\rho_p} + \mathbf{F}_D, \end{aligned} \quad (3.1)$$

где  $\mathbf{u}_p$  – скорость частицы;  $\mathbf{x}_p$  – ее координата;  $\rho_p$  и  $\rho$  плотность материала частиц и плотность воздуха, соответственно;  $\mathbf{F}_D = C_d(\mathbf{u} - \mathbf{u}_p)$  – сила, действующая на частицу со стороны среды, где  $C_d$  –



коэффициент сопротивления, вычисляемый с учетом числа Рейнольдса частицы;  $\mathbf{u}$  – невозмущенная скорость течения вблизи частицы. Частицы рассматриваются как материальные точки, не меняющие скорость жидкости, эффектами памяти (эффектами взаимодействия частиц с возмущениями скорости течения на предшествующем участке траектории) и вращения частиц пренебрегается.

Влияние турбулентности на движение частиц учитывается путём представления скорости течения в виде суммы:

$$\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} + \mathbf{u}' \quad (3.2)$$

Здесь,  $\bar{\mathbf{u}}$ , в зависимости от применяемой гидродинамической модели, обозначает либо среднюю скорость в RANS-моделях  $\bar{\mathbf{u}} \equiv \langle \mathbf{u} \rangle$ , где  $\langle \cdot \rangle$  осреднение по ансамблю состояний, либо разрешаемую явно составляющую скорости в LES-моделях, где  $\bar{\mathbf{u}} \equiv F(\mathbf{u})$  - поле скорости, полученное в результате применения оператора пространственной фильтрации  $F$ ;  $\mathbf{u}'$  - отклонения скорости от значений  $\bar{\mathbf{u}}$  вследствие турбулентных пульсаций, неразрешаемых моделями явно.

Компонента скорости  $\bar{\mathbf{u}}$  рассчитывается гидродинамическими моделями или задаётся аналитически, а компонента  $\mathbf{u}'$  учитывается при переносе частиц при помощи стохастических турбулентных параметризаций.

Реализованы стохастические модели нулевого и первого порядков (лагранжевы стохастические модели, ЛСМ). В модели 0-го порядка (модель случайных смещений), турбулентные пульсации скорости течения в позициях частиц рассчитываются следующим образом:

$$u_i'^{(p)} = \frac{\partial K_{si}^{(p)}}{\partial x_i} + \frac{\sqrt{2K_{si}^{(p)}} \xi_i^p}{dt} \quad (3.3)$$

Здесь:  $K_{si}^{(p)}$  – интерполяция коэффициента турбулентной диффузии в позицию частицы;  $\xi_i^p$  – случайный гауссов шум с единичной дисперсией. Для RANS-моделей коэффициенты диффузии в разных горизонтальных направлениях считались равными  $K_{sj} = K_{s3}(\sigma_j^4/\sigma_3^4)$ , где  $\sigma_i^2 = \langle u_i'^2 \rangle$  – дисперсия соответствующей компоненты скорости, а  $K_{s3}$  – эффективный коэффициент турбулентной диффузии в вертикальном направлении (см. тесты стохастических моделей, приведенные в работе [2]).

Реализован набор стохастических моделей первого порядка, простейшей из которых является модель переноса частиц изотропной турбулентностью, которая для учета неравенства дисперсий компонент скорости между собой была модифицирована следующим образом:

$$du_i'^p = -\frac{u_i'^p}{T_L^i} dt + \sqrt{C_0 \varepsilon} \xi_i^p, \quad (3.4)$$

где  $du_i'^p$  – приращение компоненты скорости частицы за счет турбулентных пульсаций воздуха;  $T_L^i = 2\sigma_i^2/C_0\varepsilon$  – лагранжевы времена декорреляции, различные для трех пространственных направлений и зависящие от дисперсии соответствующей компоненты скорости течения  $\sigma_i^2$ ;  $\varepsilon$  – скорость диссипации турбулентной кинетической энергии в позиции частицы;  $C_0$  – универсальная константа Колмогорова

для структурной функции второго рода лагранжевой скорости. Помимо этого, реализованы и протестированы для турбулентности в городской среде стохастические модели первого порядка, построенные с применением “условия хорошего перемешивания” Томсона [3] (см. описание различных стохастических моделей для RANS и LES в работе [2]).

Кроме того, в данной модели лагранжева переноса частиц присутствуют параметризации столкновения с твёрдыми поверхностями зданий и осаждения на них, учёта распада частиц с ограниченным временем жизни, осаждения на растительности. Численно уравнения движения в модели решаются при помощи схемы Кранка-Николсон для скорости и координаты частицы. Вместе различные блоки модели образуют основной цикл, запускающийся после инициализации модели (см. рис.3.1) и реализованный в программном коде на языке C++.

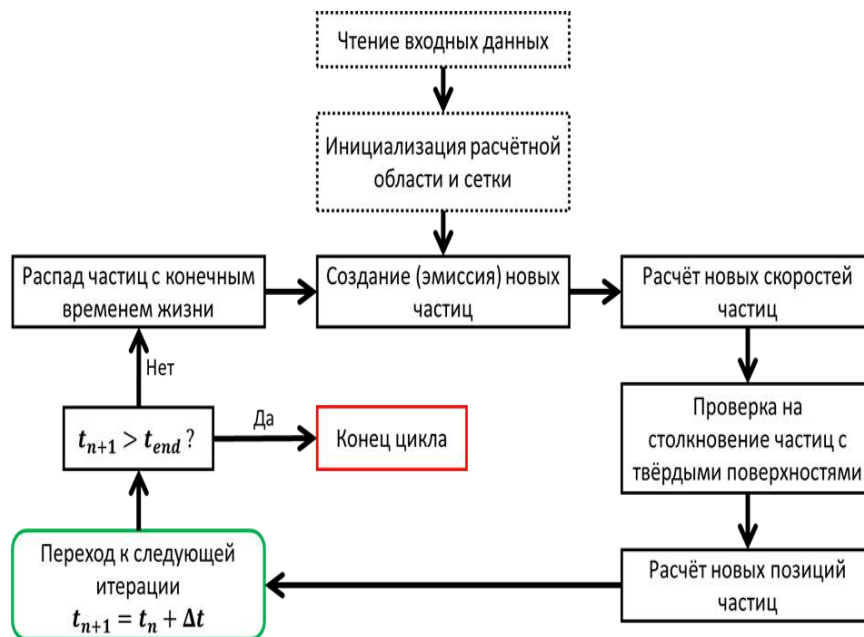


Рис. 3.1: Схема алгоритма модели лагранжева переноса частиц.

Модель была оптимизирована для параллельных расчетов большого количества частиц. В частности, производилась оптимизация доступа к памяти, для чего был переработан алгоритм индексации массивов (многомерные массивы были заменены на упорядоченные определенным образом одномерные векторы). Это позволило сократить время выполнения последовательных операций на 12-27% в зависимости от конфигурации эксперимента. Полученное ускорение достигается за счет более эффективного использования кэш-памяти и векторизации вычислений. Для распараллеливания вычислений использовались технологии OpenMP, MPI и CUDA. Результаты сравнения производительности представлены на рис. 3.2.

Использование OpenMP позволило получить ускорение в 4 раза на 14 процессах (рис. 3.2а). Дальнейшее повышение скорости работы с данной технологией ограничено максимальным числом вычислительных

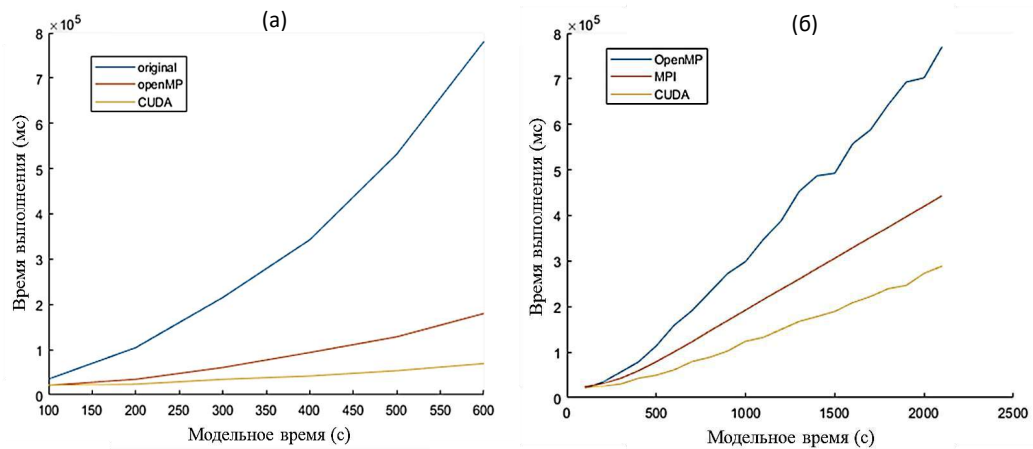


Рис. 3.2: Сравнение производительности последовательной и параллельных версий версии программной реализации в терминах времени выполнения модельного расчёта, (а) – с последовательной версией на коротком эксперименте, (б) – без последовательной версии на длинном эксперименте.

элементов (процессорных ядер) в пределах одного физического процессора или узла кластера с общей памятью. Версия модели с OpenMP может быть оптимальна для использования в системах с одним узлом процессоров с общей памятью.

Версия модели с использованием технологии MPI позволила получить ускорение примерно в 8 раз относительно последовательной версии модели. Версия с MPI имеет потенциал дальнейшего увеличения производительности модели при увеличении числа процессоров и может использоваться на суперкомпьютерных системах. Данная версия может быть оптимальна для решения задач с высокой вычислительной стоимостью, однако имеет более высокие требования к используемым вычислительным системам, в частности требует больших объемов оперативной памяти при увеличении количества переносимых частиц.

Версия модели с распараллеливанием на графических процессорах показала наибольший прирост эффективности – до 16 раз относительно последовательной версии программы (см., рис. 3.2б). Использование технологии CUDA в разработанной модели имеет наибольший потенциал среди рассмотренных технологий. Недостатком данного подхода является то, что высокопроизводительные параллельные вычислительные системы, поддерживающие данную технологию, пока еще недостаточно распространены. Кроме того, возникает проблема совместимости этой версии модели лагранжева переноса с кодами гидродинамических моделей, написанных на традиционных языках программирования.

### 2.3.2 Включение в модели параметризаций воздействия растительности на турбулентность и перенос примесей

Динамика турбулентных течений в городском слое (ГС) при наличии растительности была исследована с точки зрения последующей параметризации турбулентных процессов в многослойных RANS-моделях ГС. Использовалась модель LES ИВМ РАН, в которой крупные объекты (здания) были представлены явным образом, а воздействие растительности (деревьев) учитывалось путем введения дополнительного объемного сопротивления. Проведена серия расчетов с идеализированными конфигурациями городского слоя с тем, чтобы выявить наиболее характерные особенности турбулентности в городской среде при наличии растительности. Выявлены тенденции, касающиеся влияния растительности в ГС на сопротивление формы зданий и на турбулентные масштабы длины, используемые в турбулентных замыканиях RANS-моделей городской среды. Предложен и протестирован новый подход к расчету сопротивления формы зданий при наличии растительности в ГС. Многослойная RANS-модель городского слоя была модифицирована при помощи предложенного метода расчета силы сопротивления.

#### I. Расчеты турбулентных течений в ГС при наличии растительности (деревьев); Постановка численных экспериментов с моделью LES

Условия проведения численных экспериментов были близки к условиям, описанным в работе [4], за исключением того, что в модель была добавлена сила объемного сопротивления растительности:

$$\overline{F}_i^f = -c_{df} \text{LAD} |\overline{\mathbf{u}}| \overline{u}_i, \quad (3.5)$$

где  $c_{df}$  – безразмерный эмпирический коэффициент сопротивления;  $\text{LAD}(x,y,z)$  – плотность площади листьев ( $[\text{LAD}] = \text{m}^{-1}$ ), а  $\overline{u}_i$  – разрешаемая явно фильтрованная скорость в LES-модели. Детали подходов к представлению динамического воздействия растительности в LES и RANS моделях турбулентных течений можно найти, например, в работах [5], [6] [7], [8].

На основе большой серии предварительных расчетов с LES-моделью был выбран диапазон изменения параметров растительного слоя и параметров расположения растительности в ГС, а также диапазон морфологических параметров ГС при которых и здания и растительность оказывают существенное и сравнимое между собой влияние на турбулентность. После чего была проведена серия из 18-ти длительных расчетов с моделью, по результатам которых выполнялся детальный статистический анализ данных моделирования.

Схема постановки этих численных экспериментов приведена на рис. 3.3. Приведены четыре геометрии поверхности городского типа, обозначенные на рис.3.3а как SRF1, SRF2, SRF3 и SRF4, с различными значениями морфологических параметров  $\lambda_p$  (отношение площади поверхности, занятой зданиями  $S_p$  к общей площади урбанизированной поверхности  $S_t$ ) и  $\lambda_f$  (отношение площади фронтальной поверхности зданий  $S_f$  к площади  $S_t$ ). Объекты ("здания") были либо кубическими с длиной стороны  $h$  (SRF2 и SRF4), либо прямоугольными параллелепипедами со сторонами:  $l_x = l_y = h/2$ ,  $l_z = h$  (SRF1 и

SRF3). Рассматривались как случаи с однородным заполнением ГС растительностью, так и случаи с растительностью, расположенной пятнами. Размер всей расчетной области составлял:  $L_x \times L_y \times L_z = 16h \times 8h \times 4h$ , расчетная сетка состояла из  $512 \times 256 \times 128$  узлов.

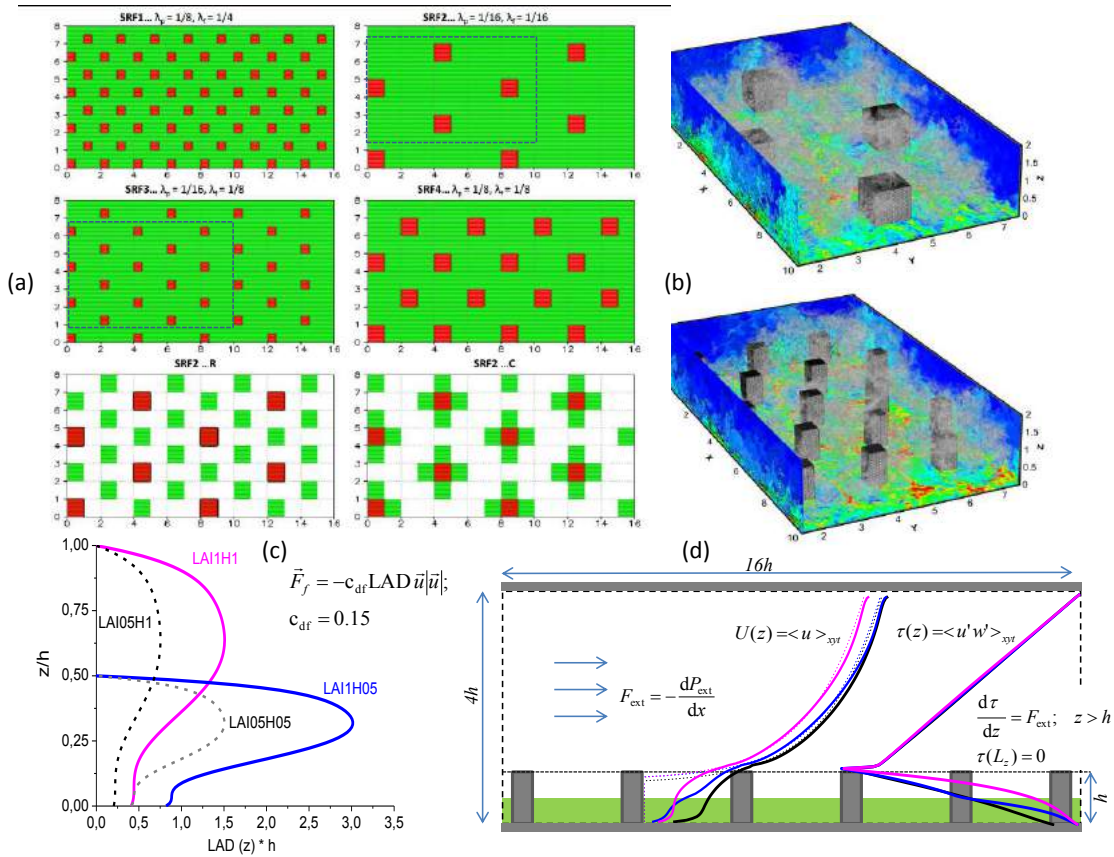


Рис. 3.3: (а) - расчетная область, вид сверху; объекты ("здания") окрашены в красный цвет, а растительность - в зеленый. (б) - Иллюстрация турбулентных потоков в подобластях (отмеченных на рис. (а) пунктирными линиями) с помощью изолиний и изоповерхностей концентрации скаляра. (с) - плотность площади листьев  $LAD(z)$  в различных LES-расчетах. (d) - Схема расчетной области и течения в вертикальной плоскости; показаны профили среднего ветра и потоки импульса, полученные в расчетах без растительности и с растительностью.

## II. Результаты численных экспериментов

### (а) Новая параметризация силы сопротивления для моделей RANS

Стандартным методом расчета силы  $F_B(z)$ , действующей на турбулентное течение со стороны крупных объектов (зданий), является следующий подход:

$$F_B(z) = -C_D(z)|U(z)|U(z) = -a_s(z)c_d(z)|U(z)|U(z). \quad (3.6)$$

Здесь  $a_s$  - объемная плотность площадь фронтальной поверхности (общая площадь фронтальной поверхности  $dS_F$  в слое  $dz$ , деленная на объем этого слоя);  $c_d$  - безразмерный коэффициент сопротивления, а  $U(z) = \langle \mathbf{u} \rangle_{x,y}$  - средняя скорость турбулентного течения. В частности, этот подход применяется в многослойной RANS модели ВЕР [9], используемой для расчетов микроклимата городской среды [10],

[11]. Величину коэффициента  $c_d$  считают зависящей исключительно от геометрических характеристик городской застройки и связывают с морфологическими параметрами ГС на основе данных измерений или данных численного моделирования (см. [12, 14? ]). Так как эмпирический, вычисленный формально из уравнения (3.6), коэффициент  $c_d(z)$  сильно растет у поверхности земли, что препятствует применению формулы (3.6) в RANS-моделях, то его заменяют на независимый от высоты коэффициент

$$c_{deq} = -\frac{1}{a_s} \int_0^h F_B dz \left( \int_0^h U^2 dz \right)^{-1}. \quad (3.7)$$

По результатам LES-расчетов было показано, что данный подход не учитывает нелокальную природу силы сопротивления. Эта сила возникает за счет распределения давления на стенках зданий, а давление, в свою очередь, зависит от всей трехмерной структуры течения в ГС. Это приводит к существенным ошибкам при вычислении  $F_B$ . Эти ошибки сильно увеличиваются при наличии растительности.

Для того, чтобы учесть нелокальность, был предложен альтернативный способ вычисления силы сопротивления. Этот способ основан на методах теории подобия. Мы представили силу, аппроксимирующую  $F_B(z)$ , в виде:

$$F_P(z/h) = -c_{deq} a_s \left( (1 - C_{loc}) \Phi(z/h, \lambda_{b1}, \lambda_{b2}, \dots) \overline{U^2} + C_{loc} U^2(z/h) \right). \quad (3.8)$$

Здесь  $C_{loc}$  – константа по высоте  $0 \leq C_{loc} \leq 1$ , возможно зависящая от некоторых морфологических параметров ГС (например, от значений  $\lambda_p$  и  $\lambda_f$ );  $\Phi(z/h, \lambda_{b1}, \lambda_{b2}, \dots)$  – универсальная функция, зависящая только от параметров  $\lambda_{bi}$ , определяющих форму объектов и их ориентацию относительно среднего потока. Предложен и реализован способ вычисления функций  $\Phi$  по данным трехмерного моделирования. Для этого были введены дополнительные предположения, в частности, предположение о том, что на удалении от поверхности земли и на удалении от верхней границы ГС для объектов простой формы функция  $\Phi$  зависит только от геометрии горизонтального сечения зданий.

На рис.3.4 представлены примеры расчетов силы сопротивления с применением общепринятого метода (3.6) (пунктирные линии) и при помощи нового подхода (3.8) (сплошные кружки разного цвета). Результаты приведены в сравнении с данными LES (сплошные линии).

На рис.3.5 представлены нормированные среднеквадратические ошибки вычисления силы сопротивления  $F_B(z)$  по формуле (3.8) по отношению к силе, вычисленной явным образом по данным LES. Для сравнения приведены ошибки стандартного метода (3.6). Показаны результаты 18-ти численных экспериментов, в том числе, 14-ти расчетов с растительностью (отмечены зеленым фоном).

Отметим, что аппроксимации функции  $\Phi(z/h, \lambda_{b1}, \lambda_{b2}, \dots)$  находились только по данным расчетов без растительности, а затем подставлялись в формулу (3.8) для сравнения с результатами соответствующих LES-расчетов с растительностью. Таким образом, значительное повышение точности вычисления силы сопротивления  $F_B$  (части силы сопротивления, связанной с обтеканием зданий) было достигнуто без привлечения какой-либо физической модели воздействия растительности на течение. Здесь это

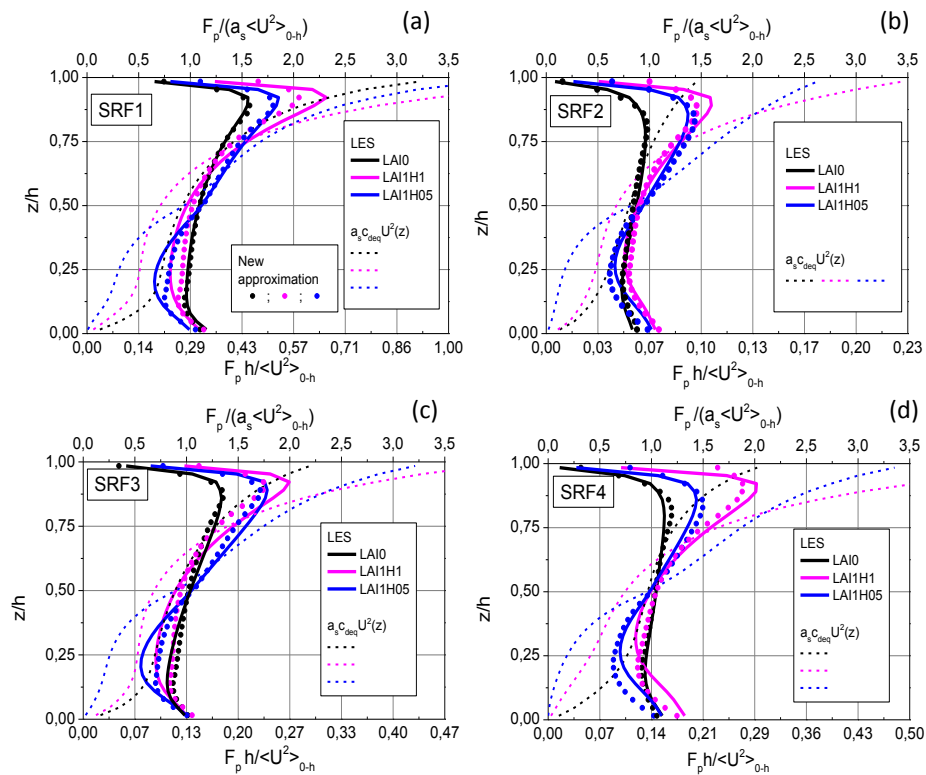


Рис. 3.4: Нормированная сила  $F_P(z)$  в LES без растений (LAI0, черные сплошные линии) и в LES с растительностью (LAI1H05, высота деревьев  $h_f = 0.5h$  - синие сплошные линии; LAI1H1,  $h_f = h$  - фиолетовые сплошные линии). Пунктирные линии - стандартный метод расчета (3.6) с  $c_d = c_{deg}$ ; кружки - новый метод расчета силы сопротивления (3.8).

воздействие учитывается неявно – через среднюю скорость течения на заданной высоте и благодаря удачно-выбранному разделению определяющих параметров при построении универсального представления силы (3.8).

(б) Турбулентные масштабы длины и их изменения под воздействием растительности

В многослойных моделях RANS ГС используются различные турбулентные масштабы длины  $l_{Ti}$  или универсальные функции, переводящие один масштаб в другой (см., например, [14]). Считается, что эти масштабы универсальным образом связаны с набором морфологических параметров ГС. Универсальные зависимости строятся по данным LES или трехмерных RANS моделей. В статье [?] был сделан вывод о том, что влияние зданий и деревьев можно рассматривать независимо, и что коэффициенты сопротивления и масштабы длины не чувствительны к присутствию деревьев. Этот вывод был сделан на основе расчетов с трехмерной RANS-моделью, в которой турбулентность не воспроизводится явным образом, а рассчитывается согласно выбранному замыканию, содержащему большое количество упрощений и предположений. При помощи вихререзающих моделей данный вопрос ранее не исследовался.

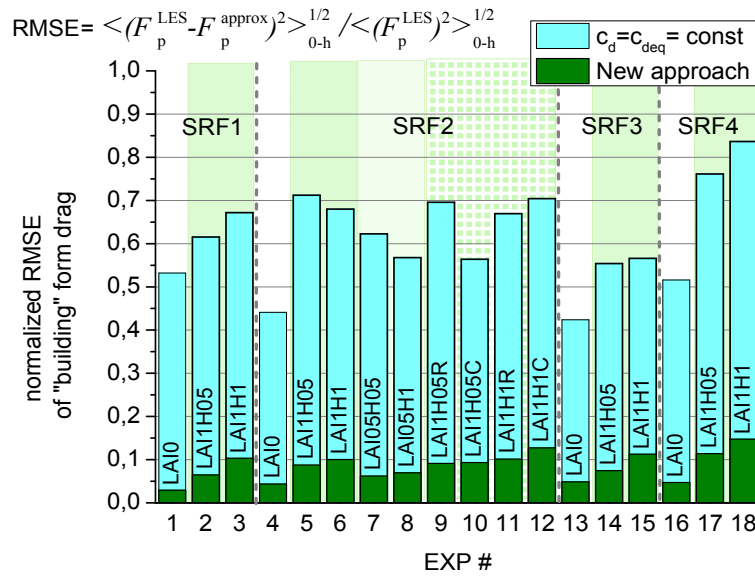


Рис. 3.5: Ошибки аппроксимации силы сопротивления по отношению к данным LES-расчетов. Расчеты с растительностью отмечены светло-зеленым фоном. Ошибки стандартного подхода - голубые столбцы. Новый метод расчета силы - темно-зеленые столбцы.

По данным расчетов с LES-моделью были вычислены следующие турбулентные масштабы: длина пути смешения Прандтля для импульса:

$$l_{TP}(z) = |\tau_t|^{1/2} |dU/dz|^{-1}, \quad (3.9)$$

где  $\tau_t = \langle \tilde{u}\tilde{v} \rangle + \langle u'w' \rangle$  полный поток импульса в ГС, состоящий из стационарной по времени и флуктуационной частей; путь смешения Прандтля для флуктуационной компоненты течения:

$$l'_{TP}(z) = |\langle u'w' \rangle|^{1/2} |dU/dz|^{-1}; \quad (3.10)$$

турбулентный масштаб  $l_{TK}$ , необходимый для вычисления турбулентной вязкости в  $K - \varepsilon$  моделях турбулентности:

$$l_{TK}(z) = c_K^{-1} |\tau_t| E^{-1/2} |dU/dz|^{-1}, \quad (3.11)$$

где  $E$  – турбулентная кинетическая энергия (ТКЭ); масштаб, связывающий ТКЭ и скорость ее диссипации:

$$l_{T\varepsilon}(z) = c_\varepsilon E^{3/2} / \varepsilon \quad (3.12)$$

и масштаб

$$l_{TE}(z) = S c_E^{-1} l_{TK} = c_E^{-1} |T_E| E^{-1/2} |dE/dz|^{-1}, \quad (3.13)$$

используемый для параметризации турбулентного потока ТКЭ  $T_E$  (третьих моментов флуктуаций скорости и ковариаций скорости и давления).



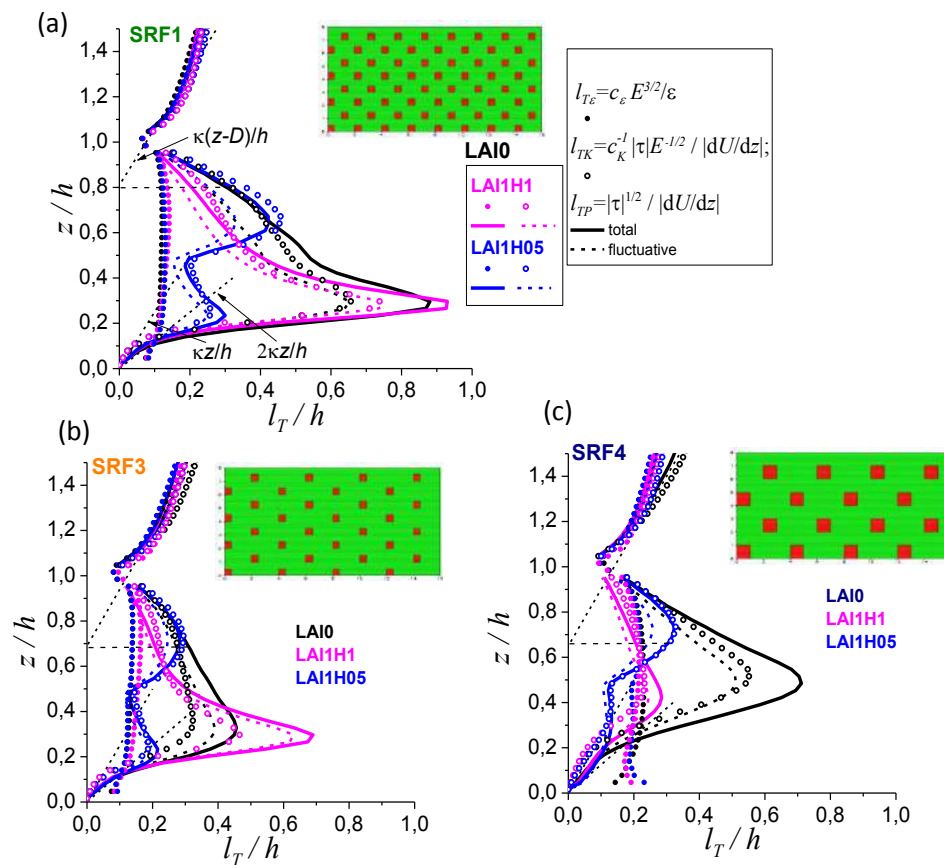


Рис. 3.6: Турбулентные масштабы длины  $l_{TP}$ ,  $l'_{TP}$ ,  $l_{T\epsilon}$  и  $l_{TK}$ , полученные в экспериментах с растительностью (LAI1H1, LAI1H05). Эталонные результаты для ГС без растительности (LAI0) показаны черным цветом.

Некоторые из перечисленных турбулентных масштабов длины в расчетах с растительностью и без растительности приведены на рис.3.6.

Было обнаружено, что турбулентные масштабы длины, связанные с переносом импульса,  $l_{TP}$ ,  $l'_{TP}$  и  $l_{TK}$  подвержены сильному влиянию наличия растительного слоя, в то время как масштабы  $l_{T\epsilon}$  в экспериментах с однородной растительностью и без растительности практически совпадают между собой. Кроме того, было обнаружено, что масштаб  $l_{T\epsilon}$  слабо зависит от пространственных координат и в большей степени определяется размером объектов (зданий), а не их взаимным расположением и расстояниями между ними. Это свойство объясняется универсальностью пространственных спектров ТКЭ в ГС, значительная часть которой генерируется при обтекании объектов. Полученный результат может быть использован при вычислении скорости диссипации ТКЭ как в многослойных моделях ГС, так и в турбулентных замыканиях трехмерных RANS-моделей, где обтекаемые объекты представлены явным образом.

(в) Влияние растительности на баланс турбулентной кинетической энергии и на ее потоки

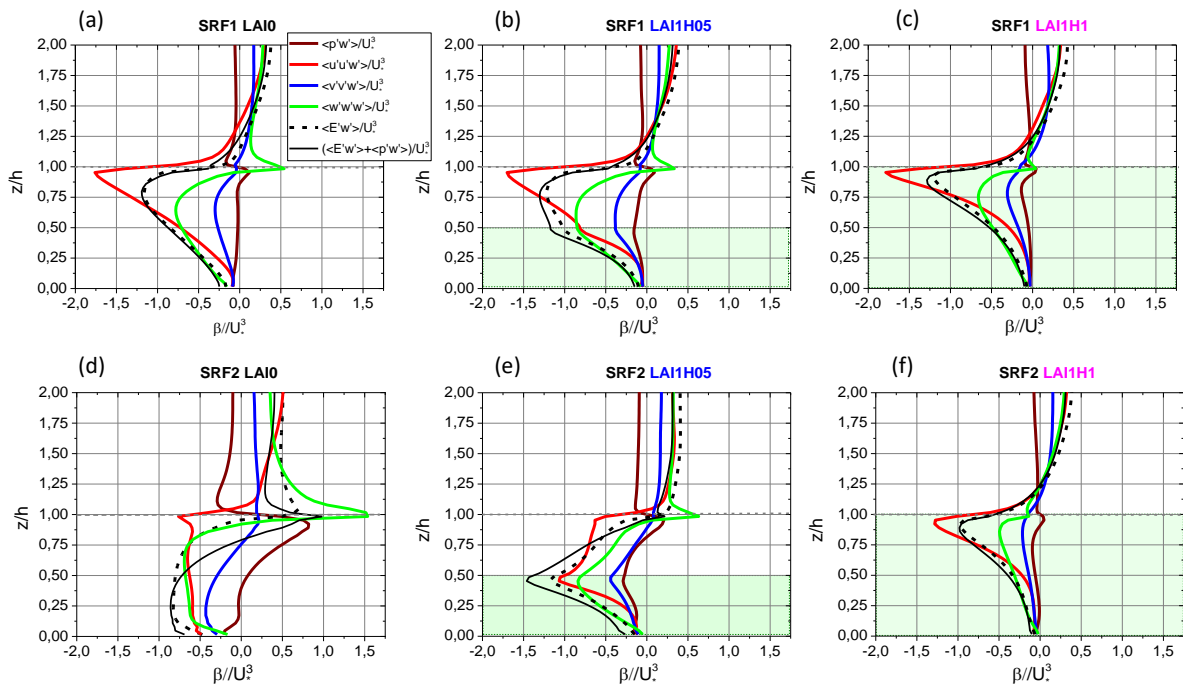


Рис. 3.7: Поток ТКЭ (сплошная черная кривая) и его составляющие (см. легенду) внутри ГС и над ним в расчетах без растительности (a,d) и при наличии растительности (b,c,e,f). Слой с растительностью отмечен светло-зеленой штриховкой.

Помимо турбулентных масштабов длины, были получены балансы и потоки турбулентной кинетической энергии внутри ГС и над ним. Обнаружены и объяснены два режима взаимодействия турбулентности в городском слое с турбулентностью в пограничном слое атмосферы над ним. В одном из режимов поток ТКЭ направлен вниз из слоя шероховатостей в ГС (см. рис.3.7abcf) , а в другом (см. рис.3.7d) – поток энергии направлен вверх из ГС в вышележащие слои пограничного слоя. Последний режим реализуется для ГС с редким расположением зданий (что способствует генерации ТКЭ при обтекании за счет большой средней скорости ветра) и с крупными размерами обтекаемых объектов (что препятствует эффективной диссипации ТКЭ вследствие увеличения масштаба  $l_{T\varepsilon}$ , см. формулу (3.12)). При этом происходит существенное увеличение ТКЭ в верхней части ГС и непосредственно над ним. Показано, что растительность, вносящая дополнительную диссипацию ТКЭ, способствует переходу в первый режим взаимодействия, для которого характерно автомодельное состояние турбулентности над ГС, независимое от геометрических характеристик городского слоя и состояния турбулентности внутри него.

### III. Тестирование нового подхода к вычислению силы сопротивления в многослойной модели городского слоя

Проведено тестирование параметризаций расчета силы сопротивления в многослойной RANS модели городского слоя. Для расчетов применялась двухпараметрическая модель RANS в трех различных конфигурациях: (i) с новой параметризацией силы сопротивления (3.8) и с турбулентным масштабом

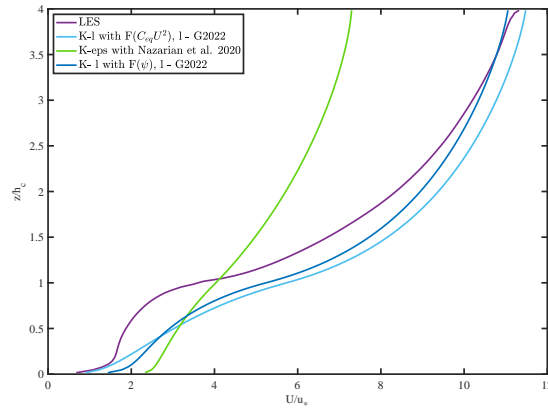


Рис. 3.8: Профили безразмерной скорости ветра  $U/U_*$  в многослойной RANS-модели при различном представлении турбулентного масштаба длины  $l_{TK}$  и силы сопротивления  $F_B$ ; для сравнения приведены результаты LES-модели; геометрия ГС - SRF1 (рис. 3.3).

длины, предложенным нами в работе [15] (см. также отчет по проекту за 2021 год); (ii) с силой сопротивления, вычисленной стандартным способом (3.6) и масштабом длины из работы [15]; (iii) со стандартными представлениями турбулентного масштаба длины и силы сопротивления, вычисленными в соответствии с работой [14]. На рисунке (3.8) показано полученное вертикальное распределение средней скорости ветра для этих трех конфигураций модели RANS в сравнении с результатами вихреразрешающего моделирования (фиолетовая кривая). Здесь приведены результаты RANS-моделирования при условиях, аналогичных условиям в LES-расчетах для городской поверхности SRF1 (рис. 3.3а).

Новая параметризация силы сопротивления (темно-синяя кривая) позволяет лучше воспроизвести характерный профиль средней скорости ветра внутри городского слоя и уменьшает расхождения с данными LES как внутри "застройки", так и над ней. При этом, все модели завышают среднюю скорость ветра на верхней границе ГС, что, видимо, является следствием неверного представления потока ТКЭ через верхнюю границу ГС (см. рис. 3.7) в рамках диффузионного приближения.

### 2.3.3 Адаптация построенных моделей к реалистичной геометрии городской среды

Трехмерная численная модель URANS (Unsteady Reynolds-Averaged Navier-Stokes) была адаптирована для воспроизведения потока внутри и над городской поверхностью. В модели для замыкания системы уравнений используются вспомогательные прогностические уравнения для кинетической энергии турбулентности и скорости ее диссипации, а коэффициенты турбулентной вязкости и диффузии рассчитываются из соотношений подобия. Для дискретизации системы уравнений на прямоугольных сетках используются консервативные конечно-разностные схемы [16]. Для повышения локального разрешения допускается измельчение шага сетки вдоль каждой из координат. Численная модель позволяет проводить расчеты как в периодических по горизонтали областях, так и при задании входных и выходных граничных условий на гранях вычислительной прямоугольной области. Программная реализация

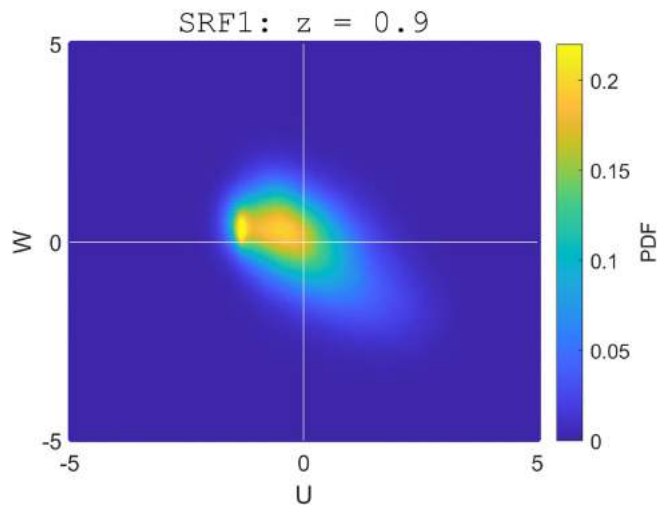


Рис. 3.9: Совместная функция распределения продольной и вертикальной компонент скорости внутри городского слоя.

URANS модели для параллельных вычислительных систем основана на трехмерной декомпозиции вычислительной области и использовании гибридного подхода MPI-OpenMP. Возможно выполнение расчетов на графических процессорах с помощью технологии CUDA.

Городская поверхность задается в виде сеточной маски, поддерживается считывание и интерполяция карты высот поверхности из внешних файлов, что позволяет рассматривать постановки экспериментов для реалистичной геометрии городской среды. В рамках проекта был также разработан единый для DNS-, LES-, и RANS-моделей блок для расчета средних величин и статистических моментов. В LES- и DNS-моделях вычисляются все моменты до третьего порядка и совместные функции распределения гидродинамических полей внутри городского слоя. Реализованные алгоритмы необходимы для обработки трехмерных полей непосредственно во время выполнения счета (так называемая "онлайн" обработка) и не требуют хранения большого объема данных. Такой подход востребован при задании реалистичной геометрии городской среды в численных экспериментах, где, как правило, требуется крайне высокое пространственное разрешение. На рисунке 3.9 приведен пример расчета совместной функции распределения продольной и вертикальной компонент скорости внутри городского слоя.

В URANS модели реализована возможность параметризации влияния растительности на динамику атмосферного пограничного слоя (АПС) за счет определения объемной силы сопротивления в уравнениях движения. При этом плотность площади листьев может быть задана как постоянной, так и с помощью параметризаций, описывающих растительность разных типов, см. [17]. Отметим, что в RANS-модели дополнительная поправка в виде объемной силы сопротивления может также рассматриваться как параметризация "городского" слоя, например, для воспроизведения влияния неразрешаемой явно геометрии зданий (относительно шага сетки модели) на динамику потока или для сравнения с многослойными одномерными (по вертикали) моделями городского пограничного слоя. Двухпараметрическое замыкание в RANS модели модифицировано и учитывает дополнительную диссипацию энергии среднего течения и соответствующую ей генерацию ТКЭ при обтекании зданий.

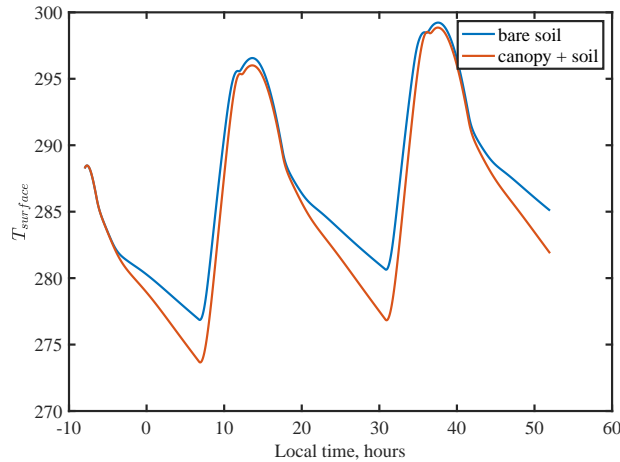


Рис. 3.10: Ход температуры поверхности в суточном ходе, полученный при вычислении теплового и радиационного баланса поверхности с учетом растительности (красная кривая) и без учета растительности (синяя кривая).

### 2.3.4 Процедуры расчета теплового и радиационного баланса поверхностей

В LES- и RANS-моделях реализованы алгоритмы расчета теплового и радиационного баланса поверхностей. При фиксированной температуре поверхности (например, известной по данным измерений) рассчитываются потоки явного и скрытого тепла из теории подобия Мони́на-Обухова. Возможно также нахождение температуры поверхности из непосредственно теплового баланса, в котором учитываются приходящие и исходящие радиационные потоки (коротковолновой  $SW \uparrow$ ,  $SW \downarrow$  и длинноволновой  $LW \uparrow$ ,  $LW \downarrow$  части спектра), потоки явного  $H_s$  и скрытого тепла  $H_l$ , а также теплообмен с поверхностью  $G_f$ :

$$SW \uparrow + SW \downarrow + LW \uparrow + LW \downarrow + G_f + H_s + H_l = 0. \quad (3.14)$$

Решение нелинейного уравнения (3.14), определяющего тепловой баланс поверхности, относительно температуры поверхности в этом случае реализовано с помощью построения последовательных приближений методом секущих. При этом на каждом шаге рассчитываются все поверхностные потоки, входящие в балансовое соотношение.

Радиационные потоки  $SW$  и  $LW$  могут определяться как моделями радиационного переноса в атмосфере, так и рассчитываться с привлечением упрощенных параметризаций [18], учитывающих свойства поверхности и характеристики пограничного слоя атмосферы (например, балла облачности). В модели процедуры расчета теплового баланса выполняются для всех близлежащих к поверхности ячеек. На рисунке 3.10 приведен ход температуры поверхности, полученный при вычислении теплового и радиационного баланса поверхности в суточном ходе атмосферного пограничного слоя без и с учетом влияния слоя растительности.

# Литература

- [1] Alexander Varentsov, V. Stepanenko, Evgeny Mortikov, and Pavel Konstantinov. Numerical simulation of particle transport in the urban boundary layer with implications for sars-cov-2 virion distribution. *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science*, 611:012017, 12 2020. doi: 10.1088/1755-1315/611/1/012017.
- [2] A. Glazunov, Ü. Rannik, V. Stepanenko, V. Lykosov, M. Auvinen, T. Vesala, and I. Mammarella. Large-eddy simulation and stochastic modeling of lagrangian particles for footprint determination in the stable boundary layer. *Geoscientific Model Development*, 9(9):2925–2949, 2016. <https://doi.org/10.5194/gmd-9-2925-2016>.
- [3] DJ Thomson. Criteria for the selection of stochastic models of particle trajectories in turbulent flows. *Journal of fluid mechanics*, 180:529–556, 1987.
- [4] Andrey Glazunov, Evgeny Mortikov, and Andrey Debolskiy. Studies of stable stratification effect on dynamic and thermal roughness lengths of urban-type canopy using large-eddy simulation. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 80(1):31 – 48, 2023. doi: <https://doi.org/10.1175/JAS-D-22-0044.1>. URL <https://journals.ametsoc.org/view/journals/atsc/80/1/JAS-D-22-0044.1.xml>.
- [5] Roger Shaw and Ulrich Schumann. Large-eddy simulation of turbulent flow above and within a forest. *Boundary-Layer Meteorology*, 61:47–64, 01 1992. doi: 10.1007/BF02033994.
- [6] Yves Brunet. Turbulent Flow in Plant Canopies: Historical Perspective and Overview. *Boundary-Layer Meteorology*, 177(2-3):315–364, sep 2020. doi: 10.1007/s10546-020-00560-7.
- [7] A. Silva Lopes, J. M. L. M. Palma, and J. Viana Lopes. Improving a Two-Equation Turbulence Model for Canopy Flows Using Large-Eddy Simulation. *Boundary-Layer Meteorology*, 149(2):231–257, nov 2013. doi: 10.1007/s10546-013-9850-x.
- [8] J. Quimbayo-Duarte, J. Wagner, N. Wildmann, T. Gerz, and J. Schmidli. Evaluation of a forest parameterization to improve boundary layer flow simulations over complex terrain. a case study using wrf-les v4.0.1. *Geoscientific Model Development*, 15(13):5195–5209, 2022. doi: 10.5194/gmd-15-5195-2022. URL <https://gmd.copernicus.org/articles/15/5195/2022/>.

- [9] E. Scott Krayenhoff, Timothy Jiang, Andreas Christen, Alberto Martilli, Timothy R. Oke, Brian N. Bailey, Negin Nazarian, James A. Voogt, Marco G. Giometto, Austine Stastny, and Ben R. Crawford. A multi-layer urban canopy meteorological model with trees (bep-tree): Street tree impacts on pedestrian-level climate. *Urban Climate*, 32:100590, 2020. ISSN 2212-0955. doi: <https://doi.org/10.1016/j.uclim.2020.100590>. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2212095519302640>.
- [10] G. Mussetti, D. Brunner, S. Henne, J. Allegrini, E. S. Krayenhoff, S. Schubert, C. Feigenwinter, R. Vogt, A. Wicki, and J. Carmeliet. Cosmo-bep-tree v1.0: a coupled urban climate model with explicit representation of street trees. *Geoscientific Model Development*, 13(3):1685–1710, 2020. doi: [10.5194/gmd-13-1685-2020](https://doi.org/10.5194/gmd-13-1685-2020). URL <https://gmd.copernicus.org/articles/13/1685/2020/>.
- [11] I. Ribeiro, A. Martilli, M. Falls, A. Zonato, and G. Villalba. Highly resolved wrf-bep/bem simulations over barcelona urban area with lcz. *Atmospheric Research*, 248:105220, 2021. ISSN 0169-8095. doi: <https://doi.org/10.1016/j.atmosres.2020.105220>. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S016980952031156X>.
- [12] Jose Santiago and Alberto Martilli. A dynamic urban canopy parameterization for mesoscale models based on computational fluid dynamics reynolds-averaged navier–stokes microscale simulations. *Boundary-Layer Meteorology*, 137:417–439, 12 2010. doi: [10.1007/s10546-010-9538-4](https://doi.org/10.1007/s10546-010-9538-4).
- [13] )Krayenhoff, Santiago, Martilli, Christen, and Oke]2015BoLMe.156..157K E. S. Krayenhoff, J. L. Santiago, A. Martilli, A. Christen, and T. R. Oke. Parametrization of Drag and Turbulence for Urban Neighbourhoods with Trees. *Boundary-Layer Meteorology*, aug, volume = 156, number = 2, pages = 157-189, doi = [10.1007/s10546-015-0028-6](https://doi.org/10.1007/s10546-015-0028-6), adsurl = <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2015BoLMe.156..157K>, adsnote = Provided by the SAO/NASA Astrophysics Data System 201]5.
- [14] N. Nazarian, E. S. Krayenhoff, and A. Martilli. A one-dimensional model of turbulent flow through “urban” canopies (mlucm v2.0): updates based on large-eddy simulation. *Geoscientific Model Development*, 13(3):937–953, 2020. doi: [10.5194/gmd-13-937-2020](https://doi.org/10.5194/gmd-13-937-2020). URL <https://gmd.copernicus.org/articles/13/937/2020/>.
- [15] A. V. Glazunov, Andrey V. Debolskiy, and Evgeny V. Mortikov. Turbulent length scale for multilayer RANS model of urban canopy and its evaluation based on large-eddy simulations. *Supercomputing Frontiers and Innovations*, 8(4):100–116, Feb. 2021. doi: [10.14529/jsfi210409](https://doi.org/10.14529/jsfi210409). URL <https://superfri.org/index.php/superfri/article/view/420>.
- [16] Y. Morinishi, T.S. Lund, O.V. Vasilyev, and P. Moin. Fully conservative higher order finite difference schemes for incompressible flows. *J. Comp. Phys.*, 143:99–124, 1998.
- [17] B. Lalic and D. Mihailovic. An empirical relation describing leaf-area density inside the forest for environment modeling. *J. Appl. Meteorol.*, 43:641–645, 2004.

- [18] H. de Bruin and B. Holtslag. A simple parameterization of the surface fluxes of sensible and latent heat during daytime compared with penman-monteith concept. *J. Appl. Meteorol.*, 21:1610–1621, 1982.



## Задача 2.4. Разработка модели динамики морского льда

- Реализация совместной модели динамики и термодинамики льда. Проведение тестовых расчетов и сравнение с данными ТОРАЗ-4.
- Реализация альтернативного динамического ядра с использованием треугольных CD-сеток (схемы переноса и солвер уравнения баланса импульса).
- Реализация адаптивного по параметру простой итерации аEVP солвера. Модификация граничных условий на береговом контуре (замена условия прилипания на условие скольжения с трением).
- Оптимизация локально-одномерной модели термодинамики льда для исполнения на графических процессорах с использованием библиотеки CUDA.

### 2.4.1 Реализация совместной модели динамики и термодинамики льда. Проведение тестовых расчетов и сравнение с данными ТОРАЗ-4

В прошлом году была создана простейшая система прогноза дрейфа льда в Арктическом бассейне. Она состояла из блока динамики на треугольной сетке типа "А" и блока параллельной интерполяции геоданных в формате **netcdf** на модельную сетку. Данные океанического внешнего воздействия брались из системы Европейского прогноза ТОРАЗ-4 [1], а атмосферного форсинга из реанализа SAMS [2]. Короткий двухнедельный тестовый расчет показал, что модель способна детально воспроизводить картину линейных кинематических особенностей, которая показана на рисунке 4.1. В то же время, полная система динамики-термодинамики ТОРАЗ-4 не дает такое подробное разрешение (рисунок 4.2). Это связано с тем, что разрешающая способность линейных кинематических особенностей значительно увеличивается при повышении пространственного разрешения. Текущее рабочее пространственное разрешение модели - 15 км в областях с потенциальной высокой сплоченностью, а ТОРАЗ-4 дает прогноз на прямоугольной сетке размера 100 км.

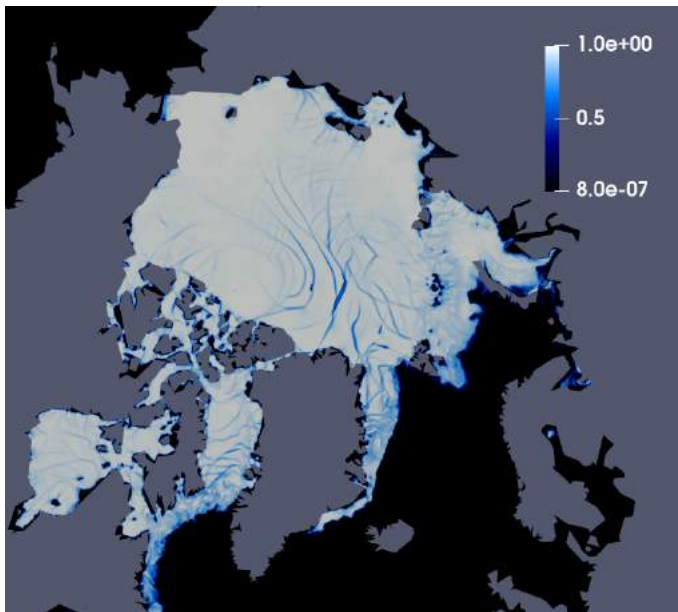


Рис. 4.1: Сплоченность морского льда, предсказанная разрабатываемой моделью.

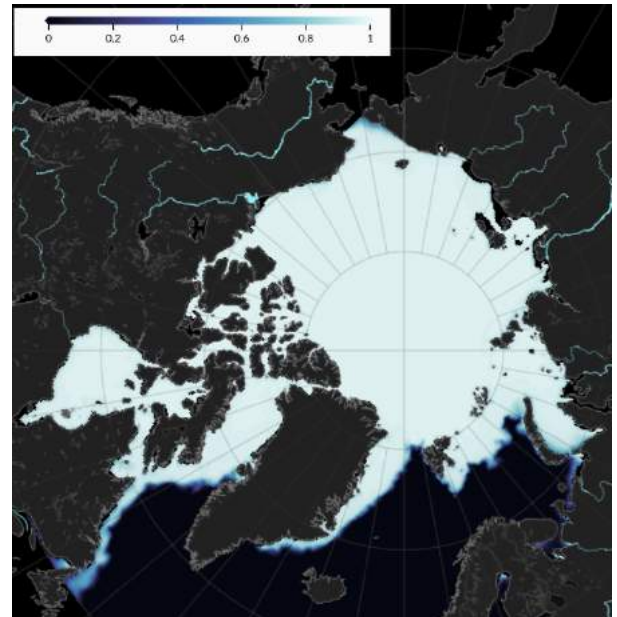


Рис. 4.2: Сплоченность морского льда, предсказанная системой TORAZ-4.

В текущем году разрабатываемая отдельно библиотека термодинамики морского льда была подключена к блоку динамики на треугольной сетке типа "А". Однако детальное сравнение на достаточно большое время с результатами аналогичных систем затрудняется тем, что разработанная модель динамики-термодинамики не связана с моделью океана. Основным источником нового льда является фазовый переход из жидкого состояния за счет переохлаждения воды. За этот процесс отвечает океаническая компонента. Без учета этого перехода сравнение на больших временных интервалах не имеет смысла. Кроме того, на масштабах времени больше недели в динамику льда начинает вносить свой вклад трение о воду и наклон уровня океана. Каплинг разработанной модели динамики-термодинамики льда с какой-либо моделью океана является трудоемкой задачей, хотя этот вопрос решается в рамках разрабатываемого в ИВМ РАН каплера для модели Земной системы, позволяющего соединять между собой модели различных компонент. Однако практического опыта работы с существенно разнородными и разномасштабными сетками в данный момент нет. Поэтому для проведения тестовых расчетов и иллюстрации правильности работы блока термодинамики морского льда было принято решение подключить разработанную модель термодинамики к климатической модели ИВМ РАН INMCM [3]. Модель INMCM включает в себя блок динамики морского льда на прямоугольной сетке типа "С", а также океаническую и атмосферную компоненту. Базовое пространственное разрешение океанического блока:  $1^\circ \times 0.5^\circ (\approx 111\text{км.} \times 55\text{км.})$ . Стоит отметить, что в программной реализации подключение блока термодинамики как внешней библиотеки проводилось с помощью специальных C/C++ - Fortran интерфейсов.

На рисунках 4.3 и 4.4 представлены сплоченность и толщина морского льда соответственно в декабре 2008 года. В качестве тестового эксперимента реализован один шестидесятилетний цикл климатического эксперимента CORE-II [4] с предписанной атмосферой (климатическая модель инициализируется

состоянием на декабрь 1948 года). По результатам расчетов можно сделать вывод, что новый блок термодинамики морского льда работает устойчиво и полноценно заменяет старую нольмерную версию. Сравнение с нольмерной версией демонстрирует правильность вызова библиотеки из Фортран-программы. Поскольку новая версия блока термодинамики льда может работать в одномерном варианте с любым количеством уровней в снегу и во льду, можно ожидать улучшения воспроизведения состояния морского льда как в режиме прогноза (в данном случае мы ориентируемся на сезонные и декадные прогнозы), так и в режиме моделирования климата.

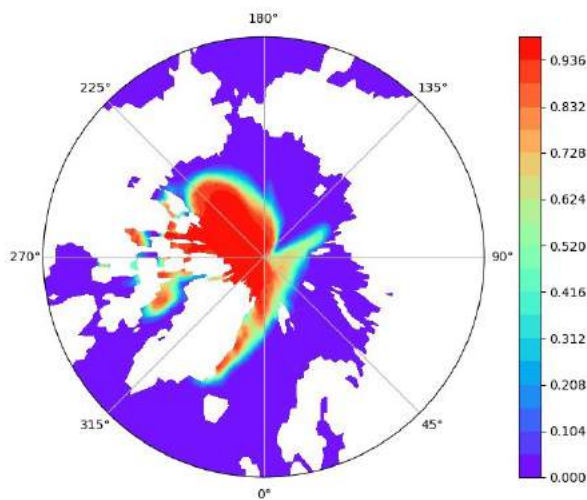


Рис. 4.3: Сплоченность морского льда. Результаты 60-летнего расчета эксперимента CORE-II с помощью модели INMCM с новым блоком термодинамики льда.

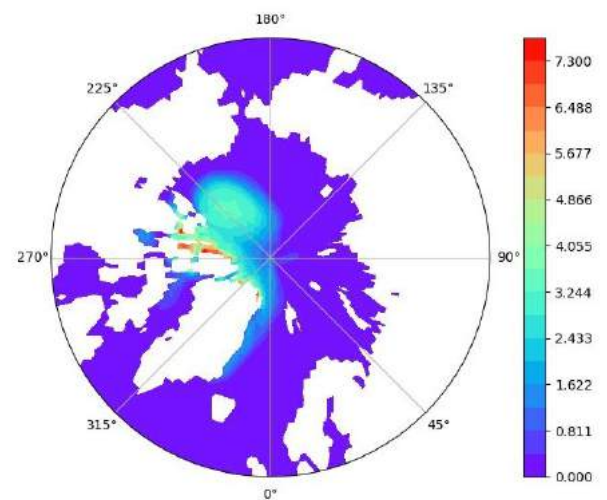


Рис. 4.4: Толщина морского льда. Результаты 60-летнего расчета эксперимента CORE-II с помощью модели INMCM с новым блоком термодинамики льда.

## 2.4.2 Реализация альтернативного динамического ядра с использованием треугольных CD-сеток (схемы переноса и солвер уравнения баланса импульса)

Для аппроксимации по пространству в "CD"-версии модели (скаляры определены на треугольниках, а векторы на ребрах) используется постоянная на треугольнике функции для скаляров и элемент Крузье-Равиар для векторов. Данная пара функций обеспечивает простой, но в то же время вычислительно эффективный вид дискретизации.

### 2.4.2.1 Схемы переноса

При аппроксимации по пространству однородного уравнения переноса скаляра

$$\partial_t m + \nabla \cdot (m \mathbf{u}) = 0 \quad (4.1)$$

методом Галеркина с постоянной на треугольнике тестовой функцией, получается стандартная конечно-объемная полудискретная формулировка задачи

$$|T_i| \frac{\partial m}{\partial t} = -R_i, \quad R_i = \sum_{E_j \text{ adj to } T_i} F_j, \quad F_j = U_j m_j, \quad (4.2)$$

где  $F_j$  — поток скаляра в треугольник  $T_i$  из ребра  $E_j$ ,  $U_j$  — интеграл по ребру  $E_j$  нормальной компоненты скорости,  $m_j$  — значение скаляра в середине ребра  $E_j$ .

В качестве схемы по времени реализовано семейство явных многошаговых схем Рунге-Кутты вплоть до 4 порядка. В качестве схемы по пространству, стандартный метод против потока дополняется схемами типа **MUST** [5] и **MUSCL** [6].

Для повышения порядка пространственной аппроксимации предлагается использовать приближение первого порядка для оценки реберного значения скаляра

$$m(x, y) = m(x_c, y_c) + \nabla m_c \cdot \Delta \mathbf{r} + O(\Delta \mathbf{r}^2), \quad (4.3)$$

где  $(x_c, y_c)$  — координаты барицентра треугольника, а  $\Delta \mathbf{r}$  — вектор, направленный из барицентра треугольника в середину ребра. Идея схемы **MUST**, заключается приближению градиента в (4.3) методом конечных разностей. Идея схемы **MUSCL** заключается в приближении градиента с помощью формулы Гаусса. Отметим, что оба подхода нуждаются в применении управляющей функции для обеспечения квазимонотонности.

### 2.4.2.2 Уравнение баланса импульса

Опишем основные детали аппроксимации по времени и пространству классической системы однокатегорийного морского льда с вязко-пластичной реологией Хиблера [7].

Вводя двумерную тестовую функцию  $\bar{\mathbf{u}}$ , пересчет компонент скорости классическим mEVP-методом [8] в слабой постановке запишем в виде

$$\left( \beta \frac{\rho_i h}{\Delta t} (\mathbf{u}^{p+1} - \mathbf{u}^p), \bar{\mathbf{u}} \right) + \left( \frac{\rho_i h}{\Delta t} (\mathbf{u}^p - \mathbf{u}^n), \bar{\mathbf{u}} \right) = - \left( \boldsymbol{\sigma}^{p+1}, \nabla \bar{\mathbf{u}} \right) + \left( \mathbf{F}_{\text{ext}}^{p+1}, \bar{\mathbf{u}} \right). \quad (4.4)$$

Здесь  $(f_1, f_2) = \int_{\Omega} f_1 f_2 \, dS$  — скалярное произведение в  $L_2$ . Пересчет компонент тензора напряжений записывается в виде

$$\alpha(\sigma_1^{p+1} - \sigma_1^p) = \frac{P}{\Delta^p} (\dot{\varepsilon}_1^p - \Delta^p) - \sigma_1^p, \quad \alpha(\sigma_{2/12}^{p+1} - \sigma_{2/12}^p) = \frac{P}{e^2 \Delta^p} \dot{\varepsilon}_{2/12}^p - \sigma_{2/12}^p. \quad (4.5)$$

Приближение компонент скорости элементами Круэье-Равиар дает диагональную массовую матрицу в следствие их ортогональности.

Решение на "CD"-сетке нуждается в стабилизации [9]. Стабилизационное слагаемое, которое добавляется в правую часть (4.4) имеет вид

$$S_i = 2.0 \cdot \alpha_{st} \sum_{E_k \text{ adj to } E_i} \frac{\xi_k}{|E_k|} \int_{E_k} [u_h^p]_{E_k} [\psi_i]_{E_k} dl. \quad (4.6)$$

Здесь  $[\cdot]_E$  – скачок функции вдоль ребра,  $u_h$  – компонента дискретной скорости,  $\psi_i$  – базисная функция. Параметр  $\alpha_{st}$  позволяет контролировать количество добавляемой стабилизации (в модели используется значение  $\alpha_{st} = 1$ ). Дискретный вид стабилизационного слагаемого (4.6) во многом похож на дискретный лапласиан, "штрафующий скорость" за разрыв вдоль ребра.

### 2.4.2.3 Численные эксперименты

Для тестирования разработанного динамического ядра был проведен ряд модельных экспериментов с искусственным внешним воздействием, а также краткосрочный запуск модели в Арктическом бассейне с реалистичным форсингом. По результатам расчетов была опубликована работа [10].

## 2.4.3 Реализация адаптивного по параметру простой итерации aEVP солвера. Модификация граничных условий на береговом контуре (замена условия прилипания на условие скольжения с трением)

### 2.4.3.1 Адаптивный по параметру простой итеции метод aEVP

Классическая схема по времени mEVP [8] для аппроксимации уравнения баланса импульса морского льда записывается в виде

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma}^{p+1} - \boldsymbol{\sigma}^p &= \frac{1}{\alpha} (\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}^p) - \boldsymbol{\sigma}^p), \\ \mathbf{u}^{p+1} - \mathbf{u}^p &= \frac{1}{\beta} \left( \frac{\Delta t}{m} \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}^{p+1} + \frac{\Delta t}{m} \mathbf{R}^{p+1/2} + \mathbf{u}^n - \mathbf{u}^p \right), \end{aligned} \quad (4.7)$$

где  $\boldsymbol{\sigma}$  – тензор напряжений,  $\mathbf{u}$  – вектор скорости,  $\mathbf{R}$  – вектор внешних сил,  $m$  – масса,  $\Delta t$  – шаг по времени,  $\alpha, \beta$  – эмпирические константы порядка  $10^2 - 10^3$ . Индексы  $p+1, p$  соответствуют внутренним итерациям, а индекс  $n$  – значению с предыдущего шага по времени. В случае сходимости метода  $\mathbf{f}^{p+1} - \mathbf{f}^p \rightarrow 0$  (где  $\mathbf{f} = \boldsymbol{\sigma}$  или  $\mathbf{f} = \mathbf{u}$ ) достигается аппроксимация уравнения баланса импульса морского льда с вязко-пластичной реологией Хиблера [7].

В работе [11] предлагается рассмотреть схему

$$\begin{aligned}\sigma_{kl}^{p+1} &= \frac{\alpha}{\alpha+1}\sigma_{kl}^p + \frac{\xi}{\alpha+1}((1-e^{-2})\nabla \cdot \mathbf{u}^p \delta_{kl} + 2e^{-2}\dot{\epsilon}_{kl}^p), \\ \mathbf{u}^{p+1} &= \frac{\beta}{\beta+1}\mathbf{u}^p + \left(\frac{1}{\beta+1} \frac{\Delta t}{m}\right) \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}^{p+1}.\end{aligned}\quad (4.8)$$

Эта схема отличается от представленной ранее (4.7) тем, что значения  $\boldsymbol{\sigma}$ ,  $\mathbf{u}$  в правой части берутся в момент времени  $p+1$ , что вносит дополнительную неявность. Также в (4.8) опущены слагаемые  $\mathbf{R}$ , соответствующее вектору внешних сил, и скорости  $\mathbf{u}^n$  с предыдущего шага по времени. Проводится Фурье-анализ линеаризованной системы (4.8). Для линеаризации значения объемной вязкости  $\xi$  и массы  $m$  фиксируются равными константе. Результаты анализа показывают, что за устойчивость системы отвечает параметр

$$\gamma = \xi \frac{c}{A_c} \frac{\Delta t}{m},$$

где  $A_c$  – площадь ячейки, а  $c$  – некоторая априорная константа, которая задает максимальную фазу разрешаемой Фурье-гармоники. Критерий устойчивости метода (4.8) записывается в виде:  $\alpha \cdot \beta \gg \gamma$ . В работе предлагается выбирать следующие значения параметров итерации, которые гарантируют выполнение условия устойчивости

$$\alpha = \beta = (\tilde{c}\gamma)^{1/2}. \quad (4.9)$$

В рамках "А"-версии разрабатываемой модели динамики на треугольных сетках был реализован аEVP подход (4.8), (4.9) с параметрами  $c = 10 \gg (0.5\pi)^2$ ,  $\tilde{c} = 10$ . Для сравнения сходимости аEVP и mEVP методов использовался первый шаг по времени классического теста высоких деформаций в квадратной расчетной области [12]. В качестве метрики ошибки для скоростей и напряжений использовались значения

$$\begin{aligned}\text{err}_{\mathbf{u}} &= \sum_{V_i} \beta_i \|\mathbf{u}_i^{p+1} - \mathbf{u}_i^p\|, \\ \text{err}_{\boldsymbol{\sigma}} &= \sum_{T_i} \alpha_i \|\boldsymbol{\sigma}_i^{p+1} - \boldsymbol{\sigma}_i^p\|.\end{aligned}$$

На рисунках 4.5 и 4.6 представлена зависимость ошибки по скоростям и напряжениям в зависимости от номера псевдоитерации. Из графиков наглядно видно, что метод с адаптивным выбором параметра простой итерации обладает заметно лучшими свойствами сходимости как по скоростям, так и по деформациям, и может обеспечить необходимую точность за меньшее число итераций алгоритма.



Рис. 4.5: Ошибка  $err_u$  для методов mEVP ( $\alpha = \beta = 500$ ) и aEVP в зависимости от номера итерации.

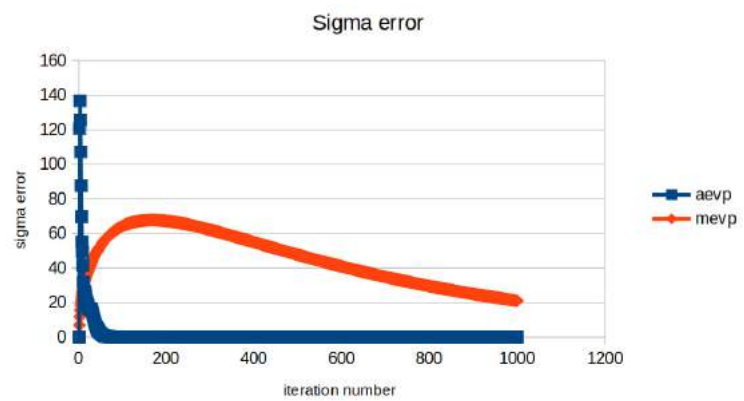


Рис. 4.6: Ошибка  $err_\sigma$  для методов mEVP ( $\alpha = \beta = 500$ ) и aEVP в зависимости от номера итерации.

### 2.4.3.2 Граничные условия скольжения и трения

Пусть  $\Gamma$  – граница кромки льда, которая может быть смежна с открытой водой, либо линией берега (рисунок 4.8). Простейшими граничными условиями для системы уравнений динамики морского льда являются условия прилипания

$$\mathbf{u}|_\Gamma = 0.$$

Данное условие не отражает механизм проскальзывания и трения льда о контур берега. При моделировании динамики льда в большинстве случаев обычно предполагается, что проблема аппроксимации режимов скольжения вдоль берега и дрейфа в направлении от берега может быть смягчена при выборе специальных сгущающихся к твердой границе сеток (что и сделано в нашей версии модели), однако это предположение все равно остается неточным. Особенно остро эта проблема встает при моделировании климата, когда приходится использовать достаточно грубые сетки по пространству. Главная ошибка, которая при этом возникает – недостаточно точное воспроизведение областей открытой воды у берега при отжимном ветре (что важно для воспроизведения скорости образования нового льда), и динамики льда вдоль берега в областях с большой скоростью дрейфа - на рисунках 4.3 и 4.4 это восточное побережье Гренландии, где формируется слишком короткий так называемый "Язык Одина", со слишком толстым льдом, по сравнению с данными наблюдений.

Пусть  $\mathbf{n}$  – внешняя нормаль линии берега, а  $\boldsymbol{\tau}$  – тангенциальный вектор. Чтобы поставить граничное условие скольжения, необходимо обнулить нормальную составляющую скорости в случае движения льда в сторону берега, а также обнулить нормальную составляющую тензора напряжений на открытой границе:

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \leq 0 \text{ на границе берега,} \tag{4.10}$$

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = 0 \text{ на открытой границе.} \tag{4.11}$$

Такая постановка задачи была предложена в пионерской работе Овсиенко С.Н. [13]. К сожалению, детального математического исследования корректности такой постановки граничных условий, насколько известно авторам, не проводилось.

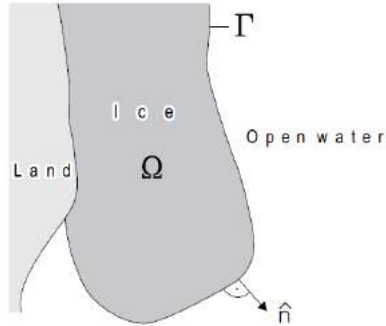


Рис. 4.7: Схема кромки льда, взятая из книги [14].

На программном уровне для реализации граничных условий проскальзывания необходимо провести следующую проверку скорости на границе на очередном шаге по времени:

- Если  $\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} > 0$  (движение в сторону берега), то  $\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0$  (обнуление нормальной компоненты скорости). При этом дополнительное условие ставится и на тангенциальную компоненту напряжений. Условие  $\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\tau} = 0$  соответствует случаю свободного проскальзывания, а  $\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\tau} = -\gamma(\mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\tau})^2 \boldsymbol{\tau}$  - закону квадратичного трения с эмпирической константой  $\gamma$ ;
- Если  $\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \leq 0$  (движение от берега), то  $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = 0$  (обнуление нормальной компоненты напряжений);

Покажем, что при подстановке граничных условий скольжения, аппроксимация по пространству уравнения баланса импульса не меняется по сравнению с граничными условиями прилипания (за исключением того, что теперь в расчете участвуют как внутренние, так и граничные элементы сетки). Рассмотрим классическое уравнение импульса

$$m\partial_t \mathbf{u} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{F}. \quad (4.12)$$

Запишем слабую постановку задачи, скалярно домножив (4.12) на двумерную тестовую функцию  $\bar{\mathbf{u}}$

$$(m\partial_t \mathbf{u}, \bar{\mathbf{u}})_{L_2} = (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}, \bar{\mathbf{u}})_{L_2} + (\mathbf{F}, \bar{\mathbf{u}})_{L_2}. \quad (4.13)$$

Распишем первое слагаемое в правой части (4.13) по формуле Гаусса

$$(\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}, \bar{\mathbf{u}})_{L_2} = \int_{\Omega} \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} \bar{\mathbf{u}} \, dS = - \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma} \nabla \bar{\mathbf{u}} \, dS + \int_{\Gamma} (\boldsymbol{\sigma} \bar{\mathbf{u}})_n \, dl = -(\boldsymbol{\sigma}, \nabla \bar{\mathbf{u}})_{L_2}. \quad (4.14)$$

Последнее равенство в (4.14) достигается за счет постановки граничных условий скольжения (всегда выполнено  $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = 0$  либо  $\bar{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{n} = 0$ ).



Отдельного внимания заслуживает вопрос обнуления нормальной компоненты скорости на сетке типа "А", поскольку в классическом смысле нормаль в узле сетки не определена. Рассмотрим граничный узел сетки  $V$ , к которому примыкает два ребра с длинами  $h_1$  и  $h_2$  и внешними нормальными  $\mathbf{n}_1$  и  $\mathbf{n}_2$  (рисунок 4.8). Определим направление обобщенной нормали в вершине  $V$  из соотношения

$$0.5h_1\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_1 + 0.5h_2\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_2 = 0.5(h_1 + h_2)\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_V \Rightarrow \mathbf{n}_V = \frac{h_1\mathbf{n}_1 + h_2\mathbf{n}_2}{h_1 + h_2}.$$

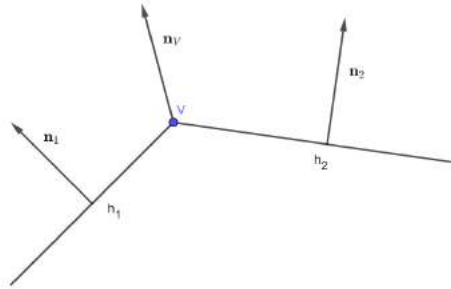


Рис. 4.8: Схема определения обобщенной нормали в узле сетки.

В рамках А- и CD-версий разрабатываемой модели в этом году реализованы дополнительные граничные условия скольжения.

#### 2.4.4 Оптимизация локально-одномерной модели термодинамики льда для исполнения на графических процессорах с использованием библиотеки CUDA

Для создания программного кода библиотеки термодинамики морского льда на языке C++, способного поддерживать операции с данными (массивами целых и действительных чисел) на центральных (CPU) и графических (GPU) процессорах, помимо шаблона на действительный тип данных был добавлен шаблонный параметр для типа памяти.

Для хранения сеточных данных в CPU-версии библиотеки [15] реализован специальный, шаблонный по типу действительных чисел, класс **Mesh**. В нем определены различные конструкторы (базовый, копирования, присваивания, особенные), деструктор, а также основные операции манипуляции с сеточными данными: создание, удаление, изменение, вывод в текстовый файл, вывод в json-файл. Описание этого класса представлено в листинге 4.1.

---

```
template <typename NumType>
class Mesh
{
public:
    // constructors
    Mesh();
```

```

Mesh(NumType thickness);
Mesh(int n_uniform_layers, NumType thickness);
Mesh(const std::vector<NumType>& unit_segment_decomposition, NumType thickness);
Mesh(const Mesh<NumType>& other);
~Mesh();

// cells and nodes number getters
int GetCellsNum() const;
int GetNodesNum() const;

// Creators of single, cells and nodes data
std::shared_ptr<NumType> CreateSingleData(const std::string& varname, bool visible = true);
std::shared_ptr<std::vector<NumType>> CreateCellsData(const std::string& varname, bool visible);
std::shared_ptr<std::vector<NumType>> CreateNodesData(const std::string& varname, bool visible);

// Deleters of single, cells and nodes data
void DeleteSingleData(const std::string& varname);
void DeleteCellsData(const std::string& varname);
void DeleteNodesData(const std::string& varname);

// Getters of single, cells and nodes data
std::shared_ptr<NumType> GetSingleData(const std::string& varname);
std::shared_ptr<std::vector<NumType>> GetCellsData(const std::string& varname);
std::shared_ptr<std::vector<NumType>> GetNodesData(const std::string& varname);

// Getter for cell thicknesses and total thickness
std::shared_ptr<std::vector<NumType>> GetCellsThickness();
NumType GetTotalThickness() const;

// Muters and Unmuters
void MuteSingleData(const std::string& varname);
void MuteCellData(const std::string& varname);
void MuteNodeData(const std::string& varname);

void UnmuteSingleData(const std::string& varname);
void UnmuteCellData(const std::string& varname);
void UnmuteNodeData(const std::string& varname);

// Write mesh to File
void SaveTXT(const std::string& filename) const;
void SaveTXT(const std::string& filename, int postscript) const;

#ifdef USE_JSON_OUTPUT
void SaveJSON(const std::string& filename) const;
void SaveJSON(const std::string& filename, int postscript) const;
#endif

// Check existency of data
bool CheckCellsDataExistency(const std::string& varname) const;
bool CheckNodesDataExistency(const std::string& varname) const;
bool CheckSingleDataExistency(const std::string& varname) const;

private:
// vector of cell thicknesses
std::shared_ptr<std::vector<NumType>> cells_thickness;

```

---

```

// container for stand-alone variables
std::map<std::string, std::pair<std::shared_ptr<NumType>, bool>> single_data;

// container for cell data [name : {vector_of_values, is_visible}]
std::map<std::string, std::pair<std::shared_ptr<std::vector<NumType>>, bool>> cells_data;

// container for node data [name : {vector_of_values, is_visible}]
std::map<std::string, std::pair<std::shared_ptr<std::vector<NumType>>, bool>> nodes_data;
};

```

---

Листинг 4.1: Описание класса **Mesh** в CPU-версии библиотеки

Поскольку библиотека CUDA, поддерживает работу только с указателями на типы данных, было принято решение использовать обычный указатель **NumType\*** вместо **std::vector** стандартной библиотеки C++ в GPU-версии библиотеки [16]. Описание класса **Mesh**, способного работать как с данными на CPU, так и на GPU, представлено в листинге 4.2.

---

```

template <typename NumType, MemType memtype>
class Mesh
{
public:
    ...

private:
    // vector of cell thicknesses
    std::shared_ptr<NumType*> cells_thickness;
    size_t cells_thickness_size_t;

    // container for stand-alone variables
    std::map<std::string, std::pair<std::shared_ptr<NumType>, bool>> single_data;

    // container for cell data [name : {vector_of_values, is_visible}]
    std::map<std::string, std::pair<std::shared_ptr<NumType*>, bool>> cells_data;
    std::map<std::string, size_t> cells_data_size_t;

    // container for node data [name : {vector_of_values, is_visible}]
    std::map<std::string, std::pair<std::shared_ptr<NumType*>, bool>> nodes_data;
    std::map<std::string, size_t> nodes_data_size_t;

    // sub-bufer for data output (needs if data on the GPU)
    NumType* SubBuffer;
    size_t SubBuffer_size;
};

```

---

Листинг 4.2: Описание класса **Mesh** в GPU-версии библиотеки

Таким образом, была проведена оптимизация написанного ранее кода для исполнения на графических процессорах. Программа была протестирована. Результаты ее работы не отличаются при исполнении на CPU и GPU, что свидетельствует о ее корректной реализации.

# Литература

- [1] P. Sakov, F. Counillon, L. Bertino, K. A. Lisæter, P. R. Oke, and A. Korabelv. Topaz4: an ocean-sea ice data assimilation system for the north atlantic and arctic. *Ocean Science*, 8(4):633–656, 2012.
- [2] Vincent-Henri Peuch, Richard Engelen, Michel Rixen, Dick Dee, Johannes Flemming, Martin Suttie, Melanie Ades, Anna Agustí-Panareda, Cristina Ananasso, Erik Andersson, David Armstrong, Jérôme Barré, Nicolas Bousserez, Juan Jose Dominguez, Sébastien Garrigues, Antje Inness, Luke Jones, Zak Kipling, Julie Letertre-Danczak, Mark Parrington, Miha Razinger, Roberto Ribas, Stijn Vermoote, Xiaobo Yang, Adrian Simmons, Juan Garcés de Marcilla, and Jean-Noël Thépaut. The copernicus atmosphere monitoring service: From research to operations. *Bulletin of the American Meteorological Society*, 103(12):E2650 – E2668, 2022.
- [3] Evgeny Volodin, Evgeny Mortikov, Sergey Kostykin, V Galin, Vasily Lykossov, Andrey Gritsun, Nikolay Diansky, Anatoly Gusev, and Nikolay Iakovlev. Simulation of the present-day climate with the climate model inmcm5. *Climate Dynamics*, 49, 12 2017.
- [4] Oceanography Section, Climate and Global Dynamics Division, National Center for Atmospheric Research, University Corporation for Atmospheric Research. Coordinated ocean-ice reference experiments - phase ii, 2016. URL <https://doi.org/10.5065/D6WM1C78>.
- [5] Panos Tamamidis. A new upwind scheme on triangular meshes using the finite volume method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 124(1):15–31, 1995.
- [6] Bram van Leer. Towards the ultimate conservative difference scheme. v. a second-order sequel to godunov’s method. *Journal of Computational Physics*, 32(1):101–136, 1979.
- [7] III Hibler, W. D. A dynamic thermodynamic sea ice model. *Journal of Physical Oceanography*, 9(4): 815–846, jul 1979.
- [8] Sylvain Bouillon, Thierry Fichefet, Vincent Legat, and Gurvan Madec. The elastic–viscous–plastic method revisited. *Ocean Modelling*, 71:2–12, 2013. ISSN 1463-5003. Arctic Ocean.
- [9] Carolin Mehlmann and Peter Korn. Sea-ice dynamics on triangular grids. *Journal of Computational Physics*, 428:110086, 12 2020.

- 
- [10] Sergey S. Petrov and Nikolay G. Iakovlev. Simug - finite element model of sea ice dynamics on triangular grid in local cartesian basis. *Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling*, 38(3):145–160, 2023.
- [11] Madlen Kimmritz, Sergey Danilov, and Martin Losch. The adaptive evp method for solving the sea ice momentum equation. *Ocean Modelling*, 101, 03 2016. doi: 10.1016/j.ocemod.2016.03.004.
- [12] Sergey Danilov, Qiang Wang, Ralph Timmermann, Nikolay Iakovlev, Dmitry Sidorenko, Madlen Kimmritz, T. Jung, and Jens Schröter. Finite-element sea ice model (fesim), version 2. *Geoscientific Model Development*, 8, 06 2015. doi: 10.5194/gmd-8-1747-2015.
- [13] Овсиенко С.Н. Численное моделирование дрейфа льда. *Известия АН СССР, серия ФАО*, 12: 1201–1206.
- [14] Matti Lepparanta. *The Drift of Sea Ice*. Springer, 2011.
- [15] [https://github.com/chuck97/ice\\_thermodynamics](https://github.com/chuck97/ice_thermodynamics), .
- [16] [http://tesla.parallel.ru/Lizzzka007/inmcm\\_ice\\_thermodynamics](http://tesla.parallel.ru/Lizzzka007/inmcm_ice_thermodynamics), .