

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 РНФ 21-71-30023. Этап четвертый.

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

16 декабря 2024 г.

Аннотация

Данный отчет посвящен результатам исследований в рамках четвертого этапа (2024 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
- Сравнительный анализ вычисленных значений нового ПКТ-индекса и существующих индексов (FFR,iFR,CFR) и определение области их применимости
- Разработка системы поддержки принятия решений с использованием вычисленных индексов

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

- Технологическая цепочка выбора раскроя створок аортального клапана при его реконструкции с использованием аутоперикарда
- Хирургическая техника выкраивания персонализированных створок из аутоперикарда на основе разработанной технологии, экспериментальная проверка эффективности данной техники

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

- Технологическая цепочка выбора поиска наилучшей геометрии соединения сосудов для гемодинамической коррекции сложных пороков сердца
- Хирургическая техника гемодинамической коррекции сложных пороков сердца по принципу Фонтена на основе разработанной технологии, экспериментальная проверка эффективности данной техники

Задача 1.4. Персонализированные модели подсистем опорно-двигательного аппарата

- Реализация движений, записанных при помощи технологии захвата движения, в биомеханической модели.
- Корректировка параметров персонализированной биомеханической редуцированной модели плечевого сустава.

- Исследование работы мышц при реализации движений головы (поворот влево, наклон назад/вперед/влево) и плеча (сгибание/разгибание, отведение) с помощью разработанной в 2023 году редуцированной модели плеча.
- Выявление вклада различных анатомических структур в нормальное функционирование шейно-плечевого отдела.

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

- Реализация методов локального повышения разрешения по типу одно- и двунаправленного вложения областей.
- Испытание блока численного решения уравнений гидротермодинамики атмосферы с вложенным регионом повышенного разрешения на идеализированных задачах. Изучение характера численного решения в регионах повышенного разрешения.
- Совместная настройка параметров блока стохастических возмущений полулагранжевых траекторий и блока стохастического возмущения параметров и тенденций параметризаций. Оценка разброса ансамбля среднесрочных прогнозов.

Задача 2.2. Развитие вычислительных технологий для моделирования Мирового океана

- Проведение численных экспериментов с совместной моделью атмосферы и новой версией модели океана. Сравнение результатов расчетов с данными реанализа, расчетами с версией моделью INMCM, используемой в рамках экспериментов CMIP6.
- Разработка негидростатической версии динамики модели океана для архитектуры графических процессоров.
- Реализация в модели океана технологии вложенных сеток.

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

- Конфигурация моделей RANS с использованием реалистичной геометрии зданий и характерных метеорологических условий, полученных на основе данных мезомасштабного моделирования.
- Проведение расчетов турбулентных течений и переноса мелкодисперсных примесей в городской среде и над городом. Анализ результатов расчетов.

Задача 2.4. Разработка модели динамики морского льда

- Проведение методологических и тестовых расчетов по ретроспективному прогнозу состояния льда с использованием полной модели динамики и термодинамики льда с применением технологии усвоения данных.

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

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

- Разработана система поддержки принятия решений при неинвазивной диагностике ИБС. Система основана на индексе «изолированного FFR», позволяющего оценить гемодинамическую значимость стеноза в отсутствие других патологий. Данная система позволяет как использовать только FFR, вычисленный с помощью математического моделирования, так и расширять диагноз, используя сопоставление измеренного и вычисленного FFR. Если значение вычисленного изолированного FFR ниже измеренного FFR более чем на 3-4%, то это говорит о наличии поражений микрососудистого русла ниже по течению. При наличии измеренного FFR и данных ПКТ производится уточнение зон перфузии для персонализированной оценки поражённых коронарных артерий.

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

- Предложена и реализована технология автоматического виртуального размещения (“вшивания”) произвольных плоских шаблонов створок аортального клапана внутри корня аорты. Корень аорты задается внутренней поверхностью как результат сегментирования медицинских изображений КТ пациента.
- Разработаны основные черты новой технологии компоновки веб приложений в виде сервис-контейнеров докера.
- Выбраны параметризованные дизайны (плоские шаблоны) новых створок аортального клапана, которые могут быть использованы для процедуры оптимизации геометрии неостворок аортального клапана для каждого пациента.
- Проведены тестовые расчеты по оптимизации одного из предложенных шаблонов с помощью алгоритма оптимизации, основанного на методе глобального поиска и отображения многомерного пространства на одномерное пространство на основе заполняющих кривых Гильберта.

- Была произведена оценка возможностей применения технологии математического моделирования для прогнозирования замыкательной функции аортального клапана после неокуспидизации у реальных пациентов. Методика математического моделирования показала высокий прогностический потенциал у пациентов с приобретённым пороком аортального клапана, которым планируется неокуспидизация аортального клапана. В случае с врождённым двустворчатым аортальным клапаном результаты моделирования также подтверждены интраоперационно. У пациентов с анатомическими особенностями корня аорты результаты математического моделирования не подтвердились. Основная причина неудовлетворительного результата неокуспидизации у пациентов с узким корнем аорты – неверная оценка межкомиссуральных расстояний при дооперационных расчетах. Также для улучшения результатов необходимо оценить больше комбинаций неостворок для более точной оценки замыкательной способности неоклапана.
- Предложена методология вычислительной технологии выбора раскроя створок аортального клапана при его реконструкции с использованием аутоперикарда и реализованы основные элементы предложенной технологии.

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

- Разработана методология и реализованы основные этапы вычислительной технологии поиска наилучшей геометрии соединения сосудов для гемодинамической коррекции сложных пороков сердца (операции Фонтена) с помощью 1D-PINN модели гемодинамики.
- Показана эффективность выбора наилучшей геометрии на клинических данных.
- Разработан и реализован численный алгоритм расчета 1D-PINN моделью, проведены численные расчеты течения крови в областях полного кава-пульмонального соединения различной конфигурации. Модель верифицирована путем сравнения результатов с аналогичными расчетами двухмасштабной 1D-3D и полной 3D моделями.

Задача 1.4. Персонализированные модели подсистем опорно-двигательного аппарата

- Был проведен анализ имеющейся информации относительно анатомических и морфологических ориентиров плечевого и шейного отделов. По результатам проведенного анализа совместно с врачами-травматологами были определены точки креплений сухожилий мышц плечевого и шейного отделов, а также их конфигурация в базовой биомеханической модели. При персонализации биомеханической модели корректировка положения сухожилий происходит автоматически в процессе масштабирования.
- Была реализована последовательность процедур, в результате которой с использованием экспериментальных данных и созданной персонализированной биомеханической модели шейно-плечевого

отдела был численно исследован вклад мышц плечевого и шейного отделов, а также мышц спины в нормальное функционирование шейно-плечевого отдела при реализации движений плеча (сгибание/разгибание, отведение/приведение, элевация) и головы (поворот влево и вправо, наклон вперед и назад, наклон влево и вправо). Вычисленные вклады мышц при движениях головы, а также при сгибании плеча качественно совпадают с анатомическими данными и информацией из медицинской практики. Во всех четырех движениях задействованы как мышцы плеча, так и шеи. Вычисленные вклады мышц в подъем плеча, сгибание и отведение демонстрируют значительную роль трапецевидной и дельтовидной мышц при сгибании и отведении, а также мышцы, поднимающей лопатку, при подъеме плеч.

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

- Реализована версия блока численного решения уравнений гидротермодинамики негидростатической сжимаемой атмосферы на сетке кубическая сфера с возможностью повышения разрешения в отдельных регионах. Реализованы методы повышения разрешения типа одно- и двунаправленное вложение областей. Для методов двунаправленного вложения областей построена пространственная аппроксимация уравнений динамики, сохраняющая энергию. При использовании метода однонаправленного вложения, энергия сохраняется в глобальной области интегрирования, в регионе повышенного разрешения энергия сохраняется с учетом потоков, создаваемых граничными условиями. Блок численного решения уравнений динамики с локальным повышением разрешения испытан на ряде идеализированных задач. Показано повышение эффективного разрешения и точности решения в регионах с более мелким шагом сетки.
- В модели атмосферы ПЛАВ20 достигнуто статистически значимое повышение разброса прогностического ансамбля для заблаговременностей прогноза от 24 до 240 часов для всех верифицируемых переменных, на всех уровнях и во всех регионах земного шара при использовании комбинации стохастических возмущений параметров и тенденций параметризаций, а также возмущений полулагранжевых траекторий. При этом, изменение среднеквадратической ошибки средних по ансамблю прогнозов статистически незначимо по сравнению с использованием только одного из методов возмущения решения. Среднеквадратическая ошибка среднего по ансамблю прогноза меньше, чем ошибка детерминистического прогноза для заблаговременностей начиная с 4 суток для всех верифицируемых переменных во всех регионах.

Задача 2.2. Развитие вычислительных технологий для моделирования Мирового океана

- Проведены ансамблевые расчеты по полной модели Земной Системы INMCM для различных конфигураций модели Мирового океана. Сравнение с данными реанализа SODA3.4.2 показало,

что использование менее диссипативных схем по времени дает существенное улучшение воспроизведения температуры поверхности океана и системы экваториальных течений Тихого океана, что важно для прогноза явлений типа Эль-Ниньо - Южная Осцилляция.

- Выполнены расчеты по моделированию океана с вложением региона, динамика которого воспроизводилась с применением измельченной сетки. Показана практическая применимость используемой методики для уточнения климатических прогнозов в выбранных регионах Мирового океана.
- Разработана негидростатическая модель динамики океана для выполнения расчетов на параллельных вычислительных системах гибридной архитектуры, включающих графические процессоры. В негидростатической версии модели рассматривается трехмерная система уравнений динамики вязкой несжимаемой жидкости в приближении Буссинеска, осредненная по Рейнольдсу, учитывающая динамику свободной поверхности; включены параметризации подсеточного горизонтального переноса и вертикального перемешивания. Программная реализация основана на использовании библиотеки коммуникационных процедур MPI, технологии OpenMP для систем с общей памятью и среды программирования CUDA для поддержки расчетов на графических картах. Показано, что разработанная версия модели океана на графических ускорителях позволяет значительно ускорить расчеты, по сравнению с проведением вычислений на центральных процессорах.

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

- Разработаны, реализованы и протестированы вычислительные технологии проведения численных расчетов с трехмерными моделями RANS, позволяющие задавать реалистичную геометрию городской застройки и использовать данные мезомасштабного моделирования для задания внешних воздействий и граничных условий. Разработана и реализована многослойная трехмерная модель RANS с параметрическим представлением городского полога. На основе результатов численного моделирования лагранжева переноса частиц турбулентностью исследовано влияние морфологических параметров застройки на распространение мелкодисперсной примеси. При помощи разработанного алгоритма спектрального анализа турбулентности в городской среде исследована зависимость турбулентных масштабов длины, необходимых для построения многослойных моделей RANS, от геометрических характеристик поверхностей городского типа. Проведена верификация трехмерных и одномерных RANS моделей турбулентности в городской среде с использованием данных вихреразрешающего моделирования. Верификация проводилась как для идеализированных поверхностей городского типа, так и для реалистичного представления городской застройки и слоя растительности. Таким образом, была реализована вычислительная технология моделирования состояния атмосферы на масштабах отдельных улиц и зданий, включающая лагранжевы и эйлеровы методы расчета переноса загрязняющих газообразных и мелкодисперсных примесей.

Задача 2.4. Разработка модели динамики морского льда

- В рамках климатической модели Земли ИВМ РАН был реализован блок обработки данных о характеристиках льда. Этот модуль поддерживает параллельное считывание данных мгновенных наблюдений и обработку данных о сплоченности льда, полученных из спутниковых данных NSIDC, с использованием специального варианта релаксационного метода (как простого варианта метода оптимальной интерполяции). При этом делалась коррекция толщины льда путем обновления анализа пропорциональной средней толщины (РМТ). С использованием этой технологии обработки данных были проведены методологические и тестовые расчеты для ретроспективного прогнозирования состояния льда. Анализ, в том числе сравнение с данными исторических наблюдений и расчетами по другим моделям, показал важность учета не только характеристик собственно льда, но и верхних слоев океана и нижних слоев атмосферы при обработке ледовых данных.

Оглавление

Аннотация	i
Оглавление	viii
1. Биомеханика	2
Задача 1.1. Разработка неинвазивных методов диагностики ишемической болезни сердца (ИБС)	2
1.1.1 Клинический сбор данных ПКТ, их статистическая обработка	3
1.1.2 Сравнительный анализ вычисленных значений нового ПКТ-индекса и существующих индексов (FFR,iFR,CFR) и определение области их применимости.	6
1.1.2.1 Модификация модели одномерной гемодинамики	6
1.1.2.2 Сравнительный анализ вычисленных значений FFR_{iso} и индексов FFR,iFR,CFR	8
1.1.3 Системы поддержки принятия решений с использованием вычисленных гемодинамических индексов	11
Задача 1.2. Виртуальный персонализированный раскрой створок аортального клапана при его реконструкции из аутоперикарда	14
1.2.1 Технология автоматического виртуального размещения плоских шаблонов лепестков внутри просвета реальной аорты	15
1.2.2 Плоские шаблоны неостворок. Алгоритм оптимизации	17
1.2.3 Оценка возможностей применения технологии математического моделирования для реальных пациентов	18
Случай приобретённого порока аортального клапана.	18
Двустворчатый аортальный клапан.	21
Паталогическая анатомия корня аорты.	22
1.2.4 Разработка веб-интерфейса приложения в виде сервис-контейнера докера	23
Общая архитектура.	23
Сериализация данных в запросах.	24
Компоновка сервис-контейнеров, submodules и контейнеры-сборщики.	25
Автоматический запуск сервис-контейнеров через URL-активацию.	26
Задача 1.3. Предсказательное моделирование одножелудочковой коррекции врожденных пороков сердца у детей (операция Фонтена)	29
1.3.1 Технологическая цепочка выбора наилучшей геометрии соединения сосудов для гемодинамической коррекции сложных пороков сердца	29

1.3.2 Хирургическая техника гемодинамической коррекции сложных пороков сердца по принципу Фонтена на основе разработанной технологии	40
1.3.3 Экспериментальная проверка эффективности данной техники	40
Задача 1.4. Персонализированные модели подсистем опорно-двигательного аппарата	45
1.4.1 Реализация движений, записанных при помощи технологии захвата движения, в биомеханической модели	45
1.4.2 Корректировка параметров персонализированной биомеханической редуцированной модели плечевого сустава	49
1.4.3 Исследование работы мышц при реализации движений головы (поворот влево, наклон назад/вперед/влево) и плеча (сгибание/разгибание, отведение) с помощью разработанной в 2023 году редуцированной модели плеча	50
1.4.4 Выявление вклада различных анатомических структур в нормальное функционирование шейно-плечевого отдела	52
1.4.4.1 Выводы	54
2. Геофизика	58
Задача 2.1. Разработка негидростатической модели сжимаемой атмосферы для задач прогноза погоды и моделирования климата	58
2.1.1 Реализация методов локального повышения разрешения по типу одно- и двунаправленного вложения областей.	58
2.1.1.1 Преобразование Шмидта	59
2.1.1.2 Вложение блока более высокого пространственного разрешения	60
2.1.1.2.1 Дифференциальные операторы первого порядка	61
2.1.1.2.2 Интерфейсные условия между блоками сетки	63
2.1.1.3 Однонаправленное вложение	65
2.1.2 Численные эксперименты с моделью атмосферы на сетках с локальным повышением разрешения	65
2.1.2.1 Преобразование Шмидта	66
2.1.2.2 Встраивание блока повышенного разрешения	66
2.1.2.3 Однонаправленное вложение	67
2.1.3 Совместная настройка стохастических возмущений в модели ПЛАВ	68
Задача 2.2. Развитие вычислительных технологий для моделирования Мирового океана	73
2.2.1 Проведение численных экспериментов с совместной моделью атмосферы и новой версией модели океана. Сравнение результатов расчетов с данными реанализа, расчетами с версией моделью INMCM, используемой в рамках экспериментов CMIP6	73
2.2.2 Разработка негидростатической версии динамики модели океана для архитектуры графических процессоров	76
2.2.3 Реализация в модели океана технологии вложенных сеток	79
Задача 2.3. Разработка эффективных вычислительных технологий для прогнозирования и диагноза состояния атмосферы в городской среде	86
2.3.1 Конфигурация моделей RANS с использованием реалистичной геометрии зданий и характерных метеорологических условий, полученных на основе данных мезомасштабного моделирования	86

2.3.1.1 RANS модель городской среды	86
2.3.2 Проведение расчетов турбулентных течений и переноса мелкодисперсных примесей в городской среде и над городом. Анализ результатов расчетов	90
2.3.2.1 Вихреразрешающие расчёты переноса твёрдой мелкодисперсной примеси в городской среде и над городом при типичных конфигурациях застройки	90
2.3.2.2 Спектральный анализ расчетов турбулентных течений в городской среде и связь пространственных спектров с турбулентными масштабами длины	95
Задача 2.4. Разработка модели динамики морского льда.	102
2.4.1 Оценка качества модели морского льда	102
2.4.2 Усвоение данных для задач прогноза	103
2.4.2.1 Обновление анализа сплоченности льда	105
2.4.2.2 Обновление анализа толщины льда	105
2.4.3 Численные эксперименты и результаты	110
2.4.4 Обсуждение результатов и Выводы	113

1. Биомеханика

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

- Клинический сбор данных ПКТ, их статистическая обработка.
- Сравнительный анализ вычисленных значений нового ПКТ-индекса и существующих индексов (FFR,iFR,CFR) и определение области их применимости.
- Разработка системы поддержки принятия решений с использованием вычисленных индексов.

Список сокращений и медицинских терминов, используемых в Главе 1.1:

CFR	Coronary Flow Reserve - коронарный резерв кровотока
FFR	Fractional Flow Reserve - фракционный резерв кровотока
iFR	Instantaneous Wve-free Ratio - мгновенный волновой индекс (индекс свободной волны)
TPR	Transmural Perfusion Ratio - трансмуральный индекс перфузии
ВТК	Ветвь тупого края
ДА	Диагональная артерия
АД	Артериальное давление
Гиперемия	Расширение периферических сосудов, приводящее к повышению кровотока
ИБС	Ишемическая болезнь сердца
МСКТ	Мультиспиральная компьютерная томография
КТ	Компьютерная томография
ПКА	Правая коронарная артерия
ПКТ	Перфузионная компьютерная томография
Стеноз	Сужение кровеносного сосуда
ПМЖВ	Передняя межжелудочковая ветвь
ЧКВ	Чрескожное коронарное вмешательство
ЧСС	Частота сердечных сокращений

1.1.1 Клинический сбор данных ПКТ, их статистическая обработка

В прошедшем году был продолжен сбор данных перфузионной компьютерной томографии (ПКТ). Дополнительно собраны данные 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.). Проведён анализ областей с патологической перфузией. Выявлена высокая корреляция между наличием пониженных гемодинамических индексов на стенозе в коронарном сосуде и наличием патологической перфузии в области миокарда, снабжаемой данным коронарным сосудом. Проведено исследование факторов, изменяющихся при стентировании гемодинамически значимого стеноза: улучшение коронарной перфузии, увеличение коронарного резерва, снижение давления в сердце, улучшение гемодинамических индексов.

КТ-перфузия миокарда является методом оценки перфузии сердца и может помочь визуализировать изменения в индексах гемодинамики после стентирования [1]. Однако, следует отметить, что КТ-перфузия миокарда не является прямым методом измерения гемодинамических параметров, таких как сердечный выброс или артериальное давление. Она позволяет оценить качество перфузии миокарда и выявить области с недостаточным кровоснабжением. При проведении КТ-перфузии миокарда после стентирования можно ожидать следующих изменений:

1. Улучшение перфузии: Одним из основных эффектов стентирования является восстановление нормального кровотока в заболевшей артерии. После стентирования можно наблюдать улучшение перфузии миокарда на КТ-изображениях. Это проявляется в виде увеличения концентрации контрастного вещества в ранее ишемических областях или уменьшения размеров инфарктной зоны.
2. Снижение или исчезновение ишемических областей: Если стентирование приводит к улучшению перфузии, можно ожидать снижения или полного исчезновения ишемических областей на КТ-изображениях. Это указывает на восстановление нормального кровоснабжения в сердце.
3. Уменьшение размера инфарктной зоны: В случае наличия инфарктной зоны, стентирование может привести к уменьшению ее размеров. КТ-перфузия миокарда может помочь оценить изменения в размере инфарктной зоны после лечения.
4. Улучшение симптомов ишемии: Улучшение перфузии миокарда после стентирования может привести к снижению или исчезновению симптомов ишемии, таких как стенокардия (боль в груди) или одышка.

Важно отметить, что конкретные изменения, наблюдаемые на КТ-перфузии миокарда, могут быть индивидуальными и зависят от множества факторов, включая размер и местоположение суженной артерии, общее состояние пациента и другие сопутствующие заболевания. Оценку результатов КТ-перфузии миокарда и их интерпретацию лучше доверить квалифицированному врачу, который сможет

учесть все аспекты клинической ситуации пациента. Для корректной оценки результатов КТ-перфузии можно использовать персонализированные модели кровотока, способные учесть индивидуальные особенности строения коронарных артерий и формы левого желудочка.

Для иллюстрации данной темы рассмотрим клинический случай пациента с ишемической болезнью сердца, который подвергся операции шунтирования. Перед операцией пациент прошел КТ перфузию сердца (Рисунок 1.1), результаты которой показали задержку поступления контрастного вещества в определенных участках миокарда, что свидетельствовало о нарушении перфузии. После операции шунтирования проведена контрольная КТ, которая показала улучшение плотности перфузии, более равномерное распределение контрастного вещества и сокращение времени до достижения пика концентрации в зонах, где были созданы шунты.

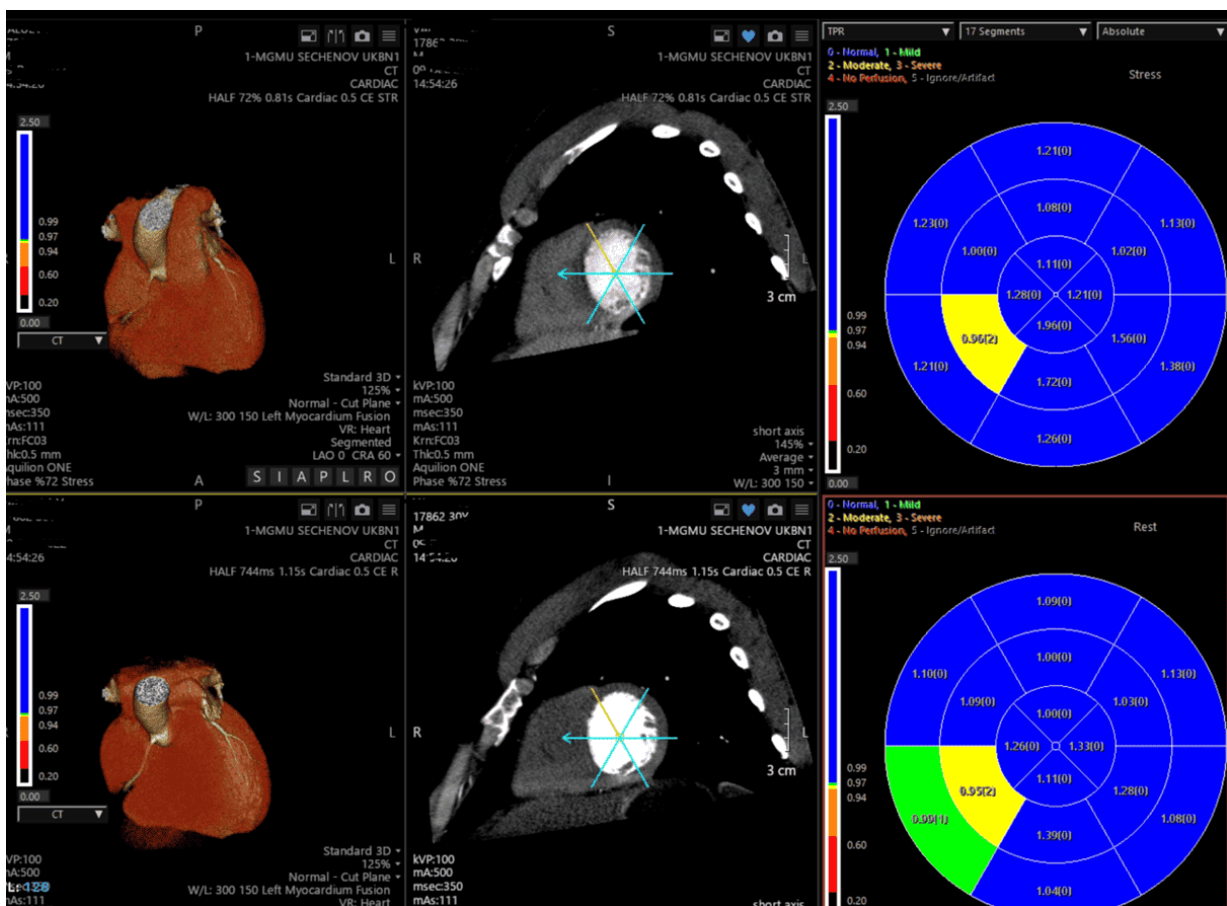


Рис. 1.1: КТ -перфузия миокарда. Определение зон с нарушением перфузии.

Таким образом, шунтирование коронарных артерий способствует восстановлению нормальной перфузии миокарда, что может улучшить функцию сердца и уменьшить риск развития осложнений ишемической болезни. КТ перфузия сердца является важным методом для оценки эффективности данной операции и контроля за процессом восстановления кровотока в миокарде.

КТ перфузия миокарда позволяет оценить несколько ключевых гемодинамических показателей, которые помогают в диагностике и оценке состояния сердечно-сосудистой системы [1]. Основные показатели

включают:

1. Перфузия миокарда: Это основной показатель, который отражает объем крови, поступающей в миокард за единицу времени на единицу объема ткани. Он может быть измерен в миллилитрах на минуту на 100 граммов ткани (мл/мин/100 г).
2. Тканевая плотность: Изменения в тканевой плотности миокарда могут указывать на наличие ишемии или инфаркта. Сравнение плотности в разных участках миокарда позволяет выявить зоны с недостаточным кровоснабжением.
3. Коронарный резерв: Это разница между максимальной и покоей перфузией миокарда. Он отражает способность коронарных артерий увеличивать кровоток в ответ на физическую нагрузку или стресс.
4. Время до достижения максимальной перфузии: Этот показатель может помочь определить, насколько быстро миокард получает кровь после введения контрастного вещества.
5. Динамика перфузии: Анализ изменений перфузии в различных условиях (покой, физическая нагрузка) может дать представление о функциональном состоянии миокарда и коронарных артерий.

Установка стентов в коронарные артерии (стентирование) является распространенной процедурой для лечения стенозов и окклюзий, вызванных атеросклерозом.

После установки стентов могут наблюдаться изменения гемодинамических индексов, которые включают:

1. Улучшение коронарной перфузии: Установка стента восстанавливает просвет коронарной артерии, что приводит к увеличению кровотока в миокард [2]. Это может быть отражено в увеличении показателей перфузии миокарда на КТ или других методах визуализации. Уменьшение ишемии: после стентирования уменьшается или устраняется ишемия миокарда, что может быть подтверждено клиническими симптомами (уменьшение стенокардии) и функциональными тестами.
2. Увеличение коронарного резерва: после успешной установки стента коронарный резерв (разница между максимальной и покоей перфузией) обычно увеличивается, что свидетельствует о восстановлении способности коронарных сосудов адаптироваться к увеличению потребности в кислороде.
3. Снижение давления в сердце: Устранение стеноза может привести к снижению давления в коронарных артериях, что может уменьшить нагрузку на сердце и улучшить его функцию.
4. Изменения в гемодинамических показателях: в некоторых случаях могут наблюдаться изменения в таких показателях, как сердечный индекс, минутный объем крови и другие параметры, отражающие эффективность работы сердца.

5. Снижение риска осложнений: Установка стентов может снизить риск острых коронарных событий, таких как инфаркт миокарда, что также является важным аспектом гемодинамического состояния пациента.

Результаты стентирования могут варьироваться в зависимости от индивидуальных особенностей пациента, состояния коронарных артерий и других факторов. Регулярный мониторинг и оценка состояния пациента после процедуры являются важными для достижения оптимальных результатов лечения.

1.1.2 Сравнительный анализ вычисленных значений нового ПКТ-индекса и существующих индексов (FFR, iFR, CFR) и определение области их применимости.

1.1.2.1 Модификация модели одномерной гемодинамики

В рамках работ на предыдущих этапах была разработана модель коронарного кровотока, способная оценить индексы FFR, iFR, CFR [3]. Индексы FFR и CFR основаны на средних значениях давления и потока. Поэтому для их точной оценки достаточно точного воспроизведения средних величин характеристик кровотока. Моделирование и неинвазивная оценка индекса iFR требует наличия модели кровотока, способной воспроизводить реальные профили давления во время диастолы.

В рамках работ на данном этапе была модифицирована одномерная модель кровотока для повышения ее пригодности к задачам моделирования коронарного кровообращения. В качестве ключевого изменения – виртуальная аорта, ранее используемая для учета влияния системного кровотока, была заменена на модель Виндкесселя, что позволило более точно описать взаимодействие между системным и коронарным кровотоком. Использование виртуальной аорты позволяет достаточно точно воспроизводить средние значения кровяного давления в коронарных сосудах. Однако, профиль давления сильно зависит от характеристик виртуальной аорты (Рисунок 1.2), правильный подбор которых является сложной задачей.

Для более точного воспроизведения профиля аортального давления пациента была проведена модификация модели коронарного кровотока. Корень аорты и виртуальная аорта были заменены двухэлементной моделью эластичного резервуара и потоком на входе в аорту. Сердечный выброс, как и раньше, задаётся в виде известной функции потока крови. Поток на входе в систему распределяется на три составляющих: поток в правую коронарную артерию, поток в левую коронарную артерию, поток в аорту. Поток в аорту затем рассчитывается как поток на входе в двухэлементную модель эластичного резервуара [4] (Рисунок 1.3).

На входе в аорту решается система уравнений:

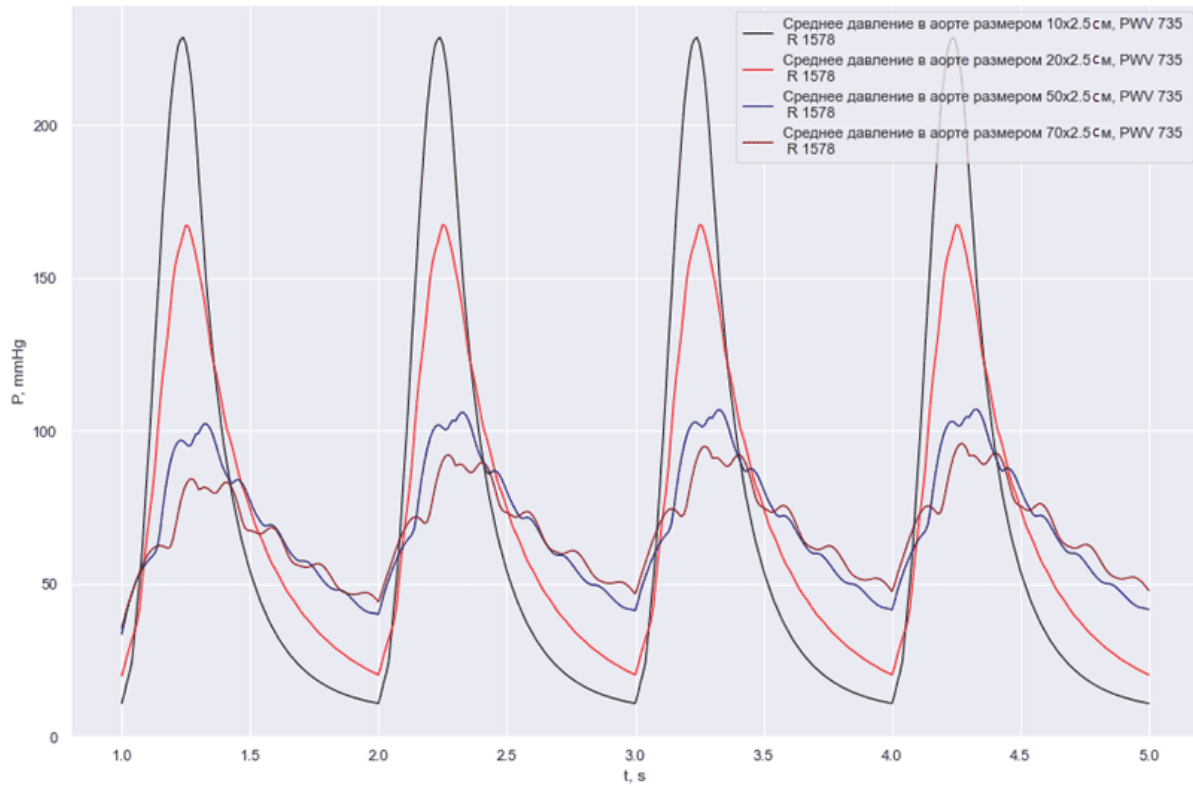


Рис. 1.2: Профили аортального давления при различных значениях длины виртуальной аорты

$$\begin{cases} Q_{in}(t) = Q_a + Q_L + Q_R, \\ Q_a = \frac{P_a - P_{out}}{R} + C \frac{dP_a}{dt} \\ Q_L = A_L u_L, \\ Q_R = A_R u_R, \\ P_a = P_L = P_R, \end{cases} \quad (1.1)$$

где $Q_{in}(t)$ — заданная функция сердечного выброса; P_a, Q_a — давление и поток в аорте; Q_R, P_R, A_R, u_R — поток, давление, площадь сечения и скорость кровотока на входе в правую коронарную артерию; Q_L, P_L, A_L, u_L — поток, давление, площадь сечения и скорость кровотока на входе в левую коронарную артерию; P_{out}, R, C — параметры модели эластичного резервуара [5]. Система уравнений (1.1) дополняется условиями совместности системы уравнений одномерной гемодинамики. Полученная дискретизованная система решается методом Ньютона.

Параметр R полагается равным системному сосудистому сопротивлению [5]. Параметры P_{out}, C подбираются итерационно в течение расчётов. Обычно хватает 10-15 сердечных циклов, чтобы подобрать параметры P_{out}, C , обеспечивающие уровень систолического и диастолического давления, измеренные у пациента. На рисунке 1.4 представлен пример профиля давления при подборе параметров для достижения давления 120/80 мм рт.ст.

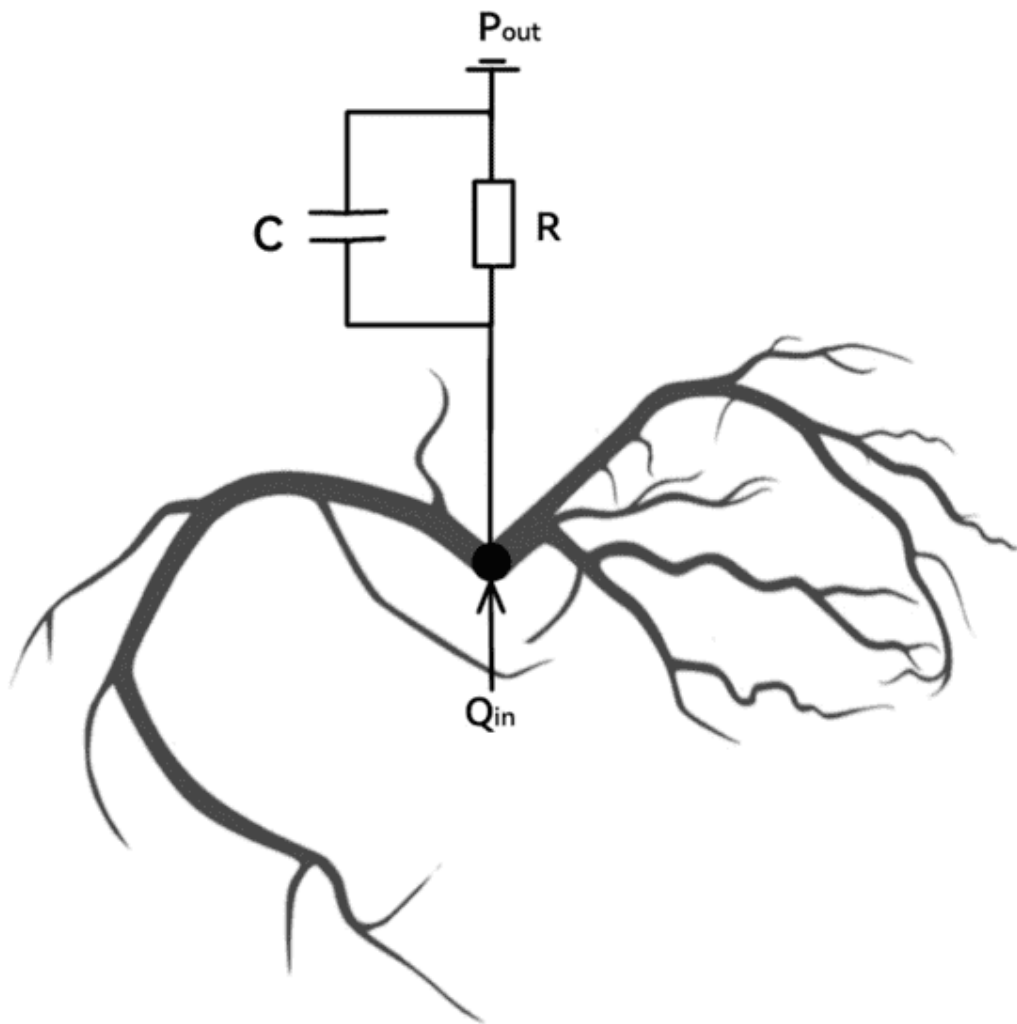


Рис. 1.3: Модель одномерного кровотока с двухэлементной моделью эластичного резервуара

Проведённая модификация модели коронарного кровотока позволила уменьшить время расчёта за счёт отсутствия длинной виртуальной аорты, упростить процедуру подбора параметров для персонализации модели, а также сделать профиль давления более физиологичным.

1.1.2.2 Сравнительный анализ вычисленных значений FFR_{iso} и индексов FFR, iFR, CFR

Различные индексы коронарного кровотока (FFR, iFR, CFR) широко применяются для оценки гемодинамической значимости стенозов [6]. В отчётах за предыдущие этапы проекта приводилось подробное описание индексов. Здесь приведём их краткое описание. Индекс FFR вычисляется как отношение среднего давления после стеноза к среднему давлению в аорте при гиперемии (состоянии с расширенными периферическими сосудами). На данный момент FFR является самым распространённым и точным из используемых индексов значимости стенозов. iFR вычисляется как отношение среднего давления после стеноза к среднему давлению в аорте в покое в период свободной волны (когда сердечная мышца расслаблена). iFR уступает в точности FFR , но более прост в измерении из-за отсутствия

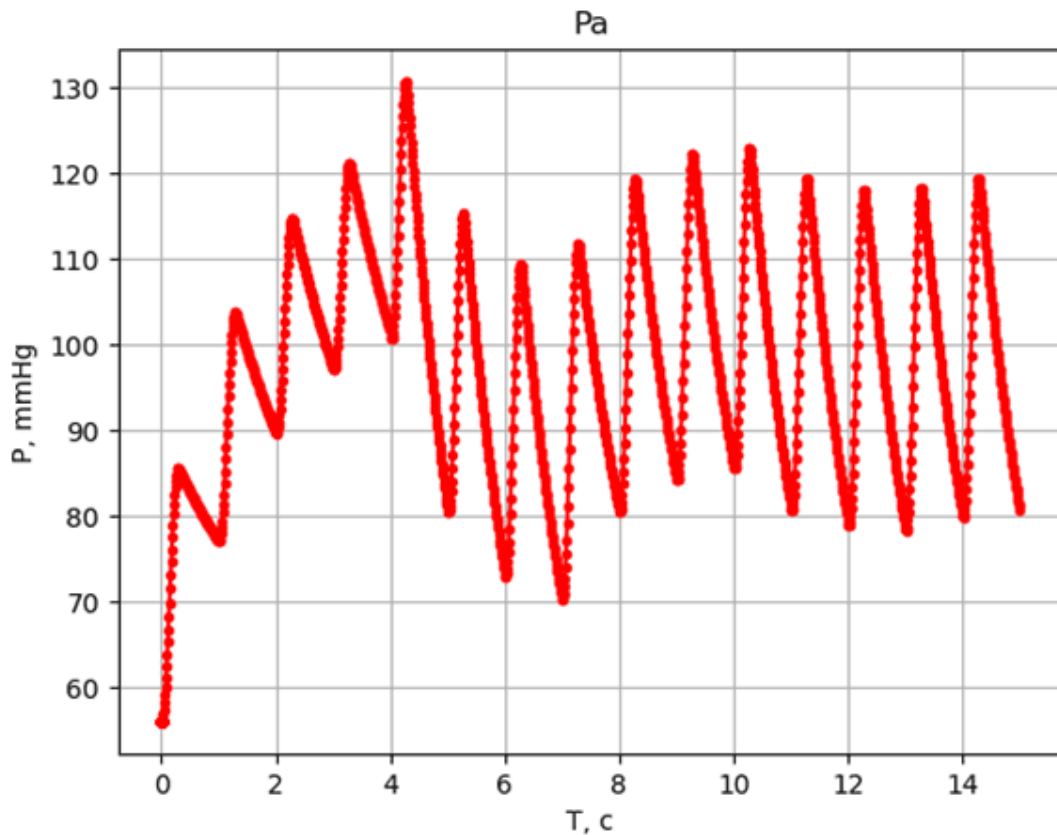


Рис. 1.4: Изменение артериального давления в процессе подбора параметров эластичного резервуара. В результате модель обеспечивает давление 120/80 мм рт.ст.

необходимости установления гиперемического режима. CFR вычисляется как отношение среднего потока крови в поражённом сосуде при гиперемии к среднему потоку в покое. CFR является потоковым индексом, из-за чего его сложнее измерить [7].

В ходе работ на предыдущем этапе был предложен индекс “изолированного” FFR — FFR_{iso} . Этот индекс вычисляется с помощью разработанной модели коронарного кровотока [8] и является индексом FFR, вычисленным при отсутствии других стенозов и при здоровой перфузии. Индекс FFR_{iso} позволяет оценить индивидуальную значимость стеноза и его влияние на изменения потока крови и артериального давления.

В таблице 1.1 представлено сравнение значения индекса FFR_{iso} с другими гемодинамическими индексами для 11-ти пациентов с данными ПКТ до и после операции. Нумерация пациентов взята из отчёта за предыдущий период. В первую очередь следует обратить внимание на соотношение между FFR и FFR_{iso} . Первый индекс вычислен с учётом данных перфузии, второй — в предположении здоровой перфузии и отсутствия других стенозов. Эти индексы совпадают для пациентов 4, 6, 8, 9, 10, 11. У этих пациентов не было обнаружено значимых дефектов перфузии на ПКТ снимках. Отношение FFR/FFR_{iso} выше единицы для пациентов 1 и 2. У этих пациентов были обнаружены дефекты перфузии в зонах миокарда, снабжаемых ПМЖВ.

ТАБЛИЦА 1.1: Вычисленные значения FFR, iFR, CFR и FFR_{iso} . № — номер пациента; сосуд — коронарная артерия, в которой был расположен стеноз; измерение и значение — тип индекса, который измерялся инвазивно, и его значение; FFR, FFR_{iso}, iFR, CFR — вычисленное с помощью модели кровотока значение индекса FFR, FFR_{iso}, iFR, CFR ; FFR/FFR_{iso} — отношение FFR к FFR_{iso}

№	Сосуд	Измерение и значение	FFR	FFR_{iso}	FFR/FFR_{iso}	iFR	CFR
1	ПМЖВ	FFR = 0.43	0.41	0.32	1.28	0.72	2.16
2	ПМЖВ	FFR = 0.81	0.8	0.77	1.04	0.81	2.18
3	ПМЖВ	FFR = 0.58	0.58	0.59	0.98	0.69	1.91
4	ПКА	iFR = 0.56	0.5	0.5	1.0	0.57	1.6
6	ПКА	FFR = 0.94	0.93	0.93	1.0	0.95	2.68
	ВТК	FFR = 0.74	0.75	0.75	1.0	0.91	2.42
8	ПМЖВ	FFR = 0.77	0.77	0.77	1.0	0.86	2.14
	ДА	FFR = 0.69	0.69	0.69	1.0	0.89	2.3
9	ВТК	iFR = 0.74	0.64	0.64	1.0	0.74	1.9
10	ВТК	FFR = 0.91	0.91	0.91	1.0	0.96	1.98
	ПКА	FFR = 0.71	0.71	0.71	1.0	0.75	2.09
11	ПМЖВ	FFR = 0.52	0.52	0.52	1.0	0.66	1.66

Вычисленное значение FFR для пациентов 1 и 2 гораздо ближе к измеренному. При реальном измерении нет возможности устранить влияние других стенозов и дефектов микроциркуляции. Поэтому реально измеренный FFR в таких ситуациях не несёт достоверной информации о гемодинамической значимости стеноза, т.к. наличие дефектов перфузии за стенозом приводит к искусственному повышению давления и, как следствие, индекса FFR. Поэтому индекс FFR_{iso} является более точной оценкой значимости стеноза.

У пациента 2 измеренное значение FFR на стенозе в ПМЖВ составило 0.81. Это значение выше порога 0.8, поэтому, согласно общепринятым стандартам [9], стентирование данного стеноза не показано. Однако, в данном случае было принято решение провести ЧКВ из-за наличия информации о дефектах перфузии на снимках ПКТ. Комплексное обследование привело к принятию решения об установке стента. Без информации о перфузии решение могло бы быть другим. Расчётное значение FFR_{iso} , вычисленное в предположении здоровой перфузии, составило 0.77. Это значение является показанием к стентированию. Таким образом, вычисленное значение лучше характеризует значимость стеноза, чем измеренное.

При отсутствии возможности получить информацию о перфузии, соотношение между FFR и FFR_{iso} можно использовать для характеристики микроциркуляторного русла. Если отношение FFR/FFR_{iso} выше единицы, то это говорит о наличии дефектов перфузии.

У пациента 3 значение отношения FFR/FFR_{iso} оказалось ниже единицы, т.е. произошла переоценка индивидуальной значимости стеноза. Подобное возможно при наличии дефектов перфузии и стенозов в коронарных артериях, являющимися параллельными ветвями с ПМЖВ. В данном случае это ОА (огибающая артерия). ПМЖВ и ОА являются двумя ветвями левой коронарной артерии. При наличии

стенозов или дефектов перфузии в ОА часть кровотока переправляется через ПМЖВ за счёт компенсационного эффекта. Из-за этого кровоток через ПМЖВ возрастает. Возрастание кровотока приводит к увеличению гемодинамической значимости стенозов в ПМЖВ. При искусственном устранении стенозов и дефектов перфузии в ОА (для вычисления FFR_{iso}) происходит снижение кровотока в ПМЖВ, что увеличивает значения фракционного резерва кровотока для стенозов в ПМЖВ.

Таким образом, наличие дефектов перфузии может приводить как к недооценке, так и к переоценке значимости стенозов. Использование индекса FFR_{iso} позволяет избежать неправильного диагноза.

1.1.3 Системы поддержки принятия решений с использованием вычисленных гемодинамических индексов

Система поддержки принятия врачебных решений связывает результат клинических исследований с данными, имеющимися в отношении конкретного пациента, влияя на выбор врачебного решения для более эффективного оказания медицинской помощи [10]. В рамках работ на данном этапе разработан ряд стратегий и рекомендаций для эффективной диагностики значимости стенозов коронарных артерий. Эти рекомендации основаны на соотношении между измеренным или вычисленным индексом FFR и вычисленным индексом FFR_{iso} .

Рассмотрим различные сценарии, отличающиеся друг от друга наличием следующих данных о пациенте: МСКТ снимки коронарных сосудов, измеренный инвазивно FFR , ПКТ снимки. Для каждого сценария приведём рекомендации по подходу к диагностике значимости стеноза с использованием индекса FFR_{iso} .

Сценарий 1. Доступны только МСКТ снимки коронарных сосудов. В этом случае при наличии только одного стеноза индексы FFR_{iso} и FFR будут совпадать. На основании значения этого индекса можно принять значение о значимости стеноза. При наличии нескольких стенозов нужно вычислить FFR_{iso} для каждого из стенозов и руководствоваться им для определения необходимости стентирования.

Сценарий 2. Доступны МСКТ снимки коронарных сосудов и измеренные инвазивно FFR . В этом случае нужно сравнить вычисленный индекс FFR_{iso} и измеренный FFR . Если отсутствуют другие значительные поражения коронарного русла и индекс FFR_{iso} меньше индекса FFR более чем на 2%, то это свидетельствует о вероятном дефекте перфузии в области миокарда, снабжаемой поражённым сосудом. При значении измеренного FFR выше 0.8 рекомендуется отправить пациента на дополнительное обследование, связанное с оценкой перфузии миокарда.

Сценарий 3. Доступны МСКТ снимки коронарных сосудов, измеренные инвазивно FFR и снимки ПКТ. В этом случае вычисленный индекс FFR_{iso} может использоваться для дополнительного анализа гемодинамической значимости каждого из стенозов в отсутствие поражений перфузии.

При наличии дефектной перфузии и измеренного FFR выше 0.8 рекомендуется вычислить FFR_{iso} и стентировать пораженный сосуд при FFR_{iso} менее 0.8. Если FFR_{iso} и измеренный FFR выше 0.8, то рекомендуется провести дополнительные обследования, которые помогут выявить причины патологий перфузии миокарда.

Использование индекса FFR_{iso} возможно при наличии различных типов наборов данных. В некоторых случаях он может использоваться для постановки диагноза, а в некоторых для уточнения дальнейшей стратегии диагностики и лечения. Необходимым условием использования FFR_{iso} является наличие тщательно настроенной персонифицированной модели коронарного кровотока.

Литература

- [1] Computed Tomography Myocardial Perfusion Imaging for Assessment of Myocardial Perfusion After Percutaneous Coronary Intervention: A Systematic Review and Meta-analysis / J. Smith, A. Johnson, K. Brown, et al // *Journal of Cardiology*. — 2020. — Vol. 1. — P. 1.
- [2] Mack M. J., et al. Multiscale Vessel Enhancement Filtering // *American Journal of Cardiology*. — 220. — Vol. 104. — Pp. 1567–1572.
- [3] Computational Analysis of Hemodynamic Indices Based on Personalized Identification of Aortic Pulse Wave Velocity by a Neural Network / Timur Gamilov, Fuyou Liang, Philipp Kopylov et al. // *Mathematics*. — 2023. — Vol. 11, no. 6. — URL: <https://www.mdpi.com/2227-7390/11/6/1358>.
- [4] SYSTEM ANALYZE OF THE WINDKESSEL MODELS / Jan Hauser, Jakub Parak, Miroslav Lozek, Jan Havlik. — 2012. — URL: <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:43784333>.
- [5] Estimating central blood pressure from aortic flow: development and assessment of algorithms / Jorge Mariscal-Harana, Peter H. Charlton, Samuel Vennin et al. // *American Journal of Physiology-Heart and Circulatory Physiology*. — 2021. — Vol. 320, no. 2. — Pp. H494–H510. — PMID: 33064563.
- [6] Physiological Basis of Clinically Used Coronary Hemodynamic Indices / Jos A.E. Spaan, Jan J. Piek, Julien I.E. Hoffman, Maria Siebes // *Circulation*. — 2006. — Vol. 113, no. 3. — Pp. 446–455.
- [7] Petretta Mario, Costanzo Pierluigi, Cuocolo Alberto. Imaging Techniques for the Assessment of Coronary Flow Reserve // *European Cardiology*. — 2008. — Vol. 4, no. 1. — Pp. 37–40.
- [8] Computational Analysis of Hemodynamic Indices in Multivessel Coronary Artery Disease in the Presence of Myocardial Perfusion Dysfunction / Timur Gamilov, Alexander Danilov, Peter Chomakhidze et al. // *Computation*. — 2024. — Vol. 12, no. 6. — URL: <https://www.mdpi.com/2079-3197/12/6/110>.
- [9] Fractional Flow Reserve-Guided Stent Optimisation in Focal and Diffuse Coronary Artery Disease / Hirofumi Ohashi, Damien Collison, Takuya Mizukami et al. // *Diagnostics*. — 2023. — Vol. 13, no. 15.
- [10] Effectiveness of Computerized Decision Support Systems Linked to Electronic Health Records: A Systematic Review and Meta-Analysis / Lorenzo Moja, Koren H. Kwag, Theodore Lytras et al. // *American Journal of Public Health*. — 2014. — Vol. 104, no. 12. — Pp. e12–e22. — PMID: 25322302.

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

- Технологическая цепочка выбора раскроя створок аортального клапана при его реконструкции с использованием аутоперикарда.
- Хирургическая техника выкраивания персонализированных створок из аутоперикарда на основе разработанной технологии, экспериментальная проверка эффективности данной техники.

Основные этапы технологической цепочки виртуального раскроя новых створок аортального клапана при его реконструкции с использованием аутоперикарда (неокуспидизация) следующие:

- A. Автоматическая сегментация корня аорты;
- B. Виртуальное вшивание новой створки (неостворки) для формирования нового аортального клапана;
- C. Моделирование закрытого (диастолического) состояния аортального клапана;
- D. Оптимизация дизайна неостворки: геометрические критерии;
- E. Использование врачом веб-интерфейса.

На текущем этапе проекта, учитывая результаты прошлых лет, были решены следующие задачи, которые позволили реализовать основные элементы предложенной технологии:

1. Автоматическое виртуальное размещение (“вшивание”) произвольных плоских шаблонов створок аортального клапана внутри корня аорты.

По результатам работ были подготовлена публикация: A.Liogky “Personalized numerical technology for the assessment of coaptation of the reconstructed aortic valve” (подана в Lobachevskii Journal of Mathematics)

2. Разработка веб-интерфейса и технология компоновки веб-приложений в виде сервис-контейнеров докера.
3. Параметризованные дизайны (плоские шаблоны) новых створок аортального клапана. Постановка

и решение задачи оптимизации.

4. Оценка возможностей применения технологии математического моделирования для реальных пациентов.

1.2.1 Технология автоматического виртуального размещения плоских шаблонов лепестков внутри просвета реальной аорты

Для формирования начальной конфигурации нового аортального клапана и оптимизации его замыкательной способности методами математического моделирования, необходимо разместить пробные створки клапана внутри аорты с учётом следующих ограничений:

1. Пришиваемая граница створки (ПГС) должна точно совпадать с закрепляемой границей на аорте (ЗГА). ЗГА фактически это линия пришивания, которая задается хирургом в специальном веб-интерфейсе на внутренней поверхности корня аорты.
2. Створки клапана не должны пересекаться друг с другом или сами с собой.
3. Створки должны находиться внутри просвета аорты и, за исключением ПГС, не должны пересекаться с её поверхностью.

Даже позволяя створкам претерпевать произвольные деформации после их размещения внутри аорты, удовлетворение всем указанным требованиям является непростой задачей. Существуют общие подходы, которые позволяют решить данную задачу, но они довольно сложны как вычислительно, так и логически. Поэтому было принято решение о разработке алгоритма размещения, пригодного для достаточно хороших реальных геометрий. Идея алгоритма основана на следующем предположении: если убрать синусы Вальсальвы, то оставшаяся часть корня аорты, расположенная вблизи ЗГА, хорошо аппроксимируется эллиптическим цилиндром с линейно изменяющимся сечением, причём точки комиссур, которые являются концами ЗГА, образуют треугольник, ортогональный оси этого цилиндра. Если это предположение выполнено с достаточной точностью, то виртуальное “вшивание” можно представить в виде Алгоритма 1, где введены дополнительные геометрические обозначения (рис. 2.1): M_a — сетка поверхности аорты; M_c^i — сетка поверхности i -ой створки; ϕ^i — отображение точек ПГС на точки ЗГА; $N_{0,i}$ и $N_{1,i}$ — концы ПГС i -ой створки; $P_{0,i} = \phi^i(N_{0,i})$ и $P_{1,i} = \phi^i(N_{1,i})$ — начало и конец i -ой ЗГА при их обходе против часовой стрелки, глядя на клапан из восходящей части аорты; $A_i = (P_{1,j} + P_{0,k})/2$ — i -ая точка комиссуры, где i, j, k образуют положительную перестановку чисел $0, 1, 2$; $\Pi = \text{aff}(A_0, A_1, A_2)$ — плоскость комиссур с нормалью $\mathbf{n} = \frac{(A_1 - A_0) \times (A_2 - A_0)}{\|(A_1 - A_0) \times (A_2 - A_0)\|}$; K^i и L^i — середины отрезков $N_{0,i}N_{1,i}$ и $P_{0,i}P_{1,i}$, соответственно.

Не всякая начальная конфигурация, удовлетворяющая указанным выше условиям 1-3, может быть использована для запуска численного расчета с использованием гиперупругого потенциала, который описывает поведение реальной створки. В частности, нередко для описания реальных биологических тканей используют такие потенциалы, в которых напряжения растут экспоненциально с деформацией, это означает, что начальные деформации при запуске с такими материалами не должны быть

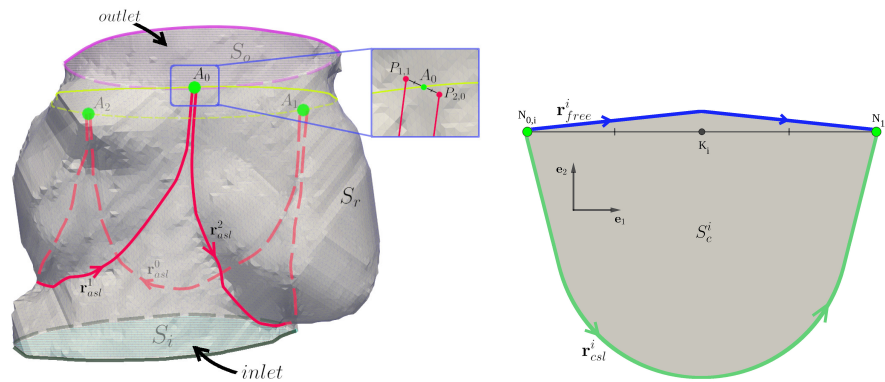


Рис. 2.1: Начальная геометрия: слева показан корень аорты, а справа — схема плоского шаблона створки. Красные линии обозначают линии пришивания (ЗГА), жёлтая линия показывает сечение аорты плоскостью точек коммиссур. На секции увеличения показано положение точки коммиссуры A_0 относительно концов соседних ЗГА. Шаблон створки справа определяется двумя границами: зелёная линия — это линия крепления створки к корню аорты (ПГС), а синяя — свободный край створки.

Algorithm 1 Размещение масштабированных створок внутри аорты

- 1: Присвоить $s := \min \left(\frac{\|P_{0,0}P_{1,0}\|}{\|N_{0,0}N_{1,0}\|}, \frac{\|P_{0,1}P_{1,1}\|}{\|N_{0,1}N_{1,1}\|}, \frac{\|P_{0,2}P_{1,2}\|}{\|N_{0,2}N_{1,2}\|}, 1 \right)$
 - 2: Промасштабировать $M_c^i := s \cdot M_c^{i,(0)}$, где $M_c^{i,(0)}$ - начальная ненагруженная плоская триангуляция створки
 - 3: Сдвинуть и повернуть M_c^i чтобы добиться свойств:
 - а) K^i совпадает с L^i и $\overrightarrow{N_{0,i}N_{1,i}} \uparrow \uparrow \overrightarrow{P_{0,i}P_{1,i}}$
 - б) M_c^i лежит в плоскости векторов $\overrightarrow{P_{0,i}P_{1,i}}$ и \mathbf{n} и ориентирована так, что ПГС и ЗГА находятся в одном полупространстве относительно плоскости $P_{0,i}P_{1,i}A_i$
 - 4: Сдвинуть вершины ПГС створки M_c^i в соответствии с ϕ^i в вершины i -ой ЗГА.
 - 5: Пусть \mathcal{F}_{nocsl}^i - подмножество граней M_c^i , которые не содержат вершины из ПГС
 - 6: **if** $\mathcal{F}_{nocsl}^i \cap S_a = \emptyset \forall i$ **AND** $\exists i : (S_c^i \cap S_a) \setminus \{i\text{-ая ЗГА}\} \neq \emptyset$ **then**
 - 7: $\mathbf{u}^i := \mathbf{n} \times \overrightarrow{P_{0,i}P_{1,i}} / \|\mathbf{n} \times \overrightarrow{P_{0,i}P_{1,i}}\|$
 - 8: Найти наибольшее $d \in \mathbb{R}$ такое, что $\text{dist}(\mathcal{F}_{nocsl}^i + d \cdot \mathbf{u}^i, \mathcal{F}_{nocsl}^j + d \cdot \mathbf{u}^j) \geq H^{ij} \forall i, j, i \neq j$, где сложение $d \cdot \mathbf{u}$ понимается в смысле суммы Минковского
 - 9: Сдвинуть все вершины M_c^i , не лежащие на ПГС, на вектор $\max(d, 0) \cdot \mathbf{u}^i$
 - 10: **end if**
 - 11: **if** $\exists i, j : i \neq j \leftrightarrow S_c^i$ имеет самопересечения **OR** $S_c^i \cap S_c^j \neq \emptyset$ **OR** $(S_c^i \cap S_a) \setminus \{i\text{-ая ЗГА}\} \neq \emptyset$ **then**
 - 12: Присвоить $s := 0.8 \cdot s$
 - 13: Перейти на строку 2
 - 14: **end if**
-

слишком большими. Проблема с неконтролируемыми начальными деформациями решается с помощью двухэтапных расчетов, где на первом этапе происходит релаксация деформации путем моделирования с достаточно податливым и стабильным гиперупругим потенциалом, а уже на втором этапе используется правильная форма потенциала, соответствующая материалу створки. Релаксацию можно проводить, решая обыкновенную задачу закрытия клапана, но с введением искусственной силы, поддерживающей свободный край от провала в сторону сердца (чтобы избежать априорного провала клапана), а также используя релаксацию по масштабирующему множителю, выбирая в качестве ненагруженной конфигурации лепестки постепенно увеличивающегося размера вплоть до достижения нужного

размера. Использование релаксации деформации резюмировано в виде Алгоритма 2.

Algorithm 2 Релаксация деформаций после размещения

- 1: s - параметр из алгоритма 1
 - 2: **while** $s \leq 1$ **do**
 - 3: Подготовить параметры задачи статического равновесия:
 - a) Присвоить новое начальное ненагруженное состояние $M_c^{i,*} := s \cdot M_c^{i,(0)}$ и выбрать M_c^i в качестве начального приближения
 - b) Наложить условие Дирихле на ПГС
 - c) Применить штрафные рёберные силы чтобы избежать провала створок вглубь аорты
 - d) Приложить диастолическое давление на поверхности створок
 - e) Использовать материал Гента для задания свойств ткани створок
 - 4: Пусть $W = \sum_{i=1}^3 \sum_{T \in S_c^{i,*}} \int_T (\|C_S\|_2 + \|C_S^{-1}\|_2) d\mathbf{X}$
 - 5: Производить итерации квазистатического симулятора пока не будут достигнуты стабилизация деформаций $\frac{|W^n - W^{n-1}|}{|W^n - W^0|} \leq \varepsilon_{strain}$ или максимальное число итераций $n = N_{maxits}$
 - 6: $s := \text{ifelse}(s < 1, \min(k_{repair} \cdot s, 1), 2)$
 - 7: **end while**
-

Была проведена проверка работоспособности Алгоритмов 1-2 на имеющихся 6 геометриях человеческих корней аорты и 21 геометрии свиных корней аорты с заданными линиями крепления. Размеры пришиваемых лепестков выбирались на основе длин сторон комиссурального треугольника. Для выбранных шаблонов створок алгоритмы успешно завершили работу на всех геометриях аорты. Более подробно алгоритм и результаты его применения представлены в работе:

A.Liogky “Personalized numerical technology for the assessment of coaptation of the reconstructed aortic valve” (подана в Lobachevskii Journal of Mathematics)

1.2.2 Плоские шаблоны неостворок. Алгоритм оптимизации

В качестве одного из вариантов параметризованных плоских шаблонов неостворки предлагается использовать шаблоны, которые активно применяются для транскатетерной имплантации аортального клапана. Створка клапана характеризуются двумя основными линиями – линией крепления (пришивания) к корню аорты и линией свободного края. Параметризация кривых:

$$y_a = ae^{cx^2} \text{ — линия крепления (пришивания);}$$

$$y_f = h \left(1 - \frac{e^{x^3 - m^3} - 1}{e^{u^3 - m^3} - 1} \right) \text{ — линия свободного края.}$$

Здесь линия крепления задается двумя параметрами a и c , а второе уравнение описывает линию свободного края с параметрами h , u и m , причем h характеризуют высоту свободного края.

Другой параметризованный шаблон, который в некоторой степени отражает шаблон, предложенный С.Озаки, представлен на рисунке 2.2. Параметры шаблона: R_s — радиус шаблона, H_i — линейная высота, H_f — дополнительная высота, L_f — ширина лепестков.

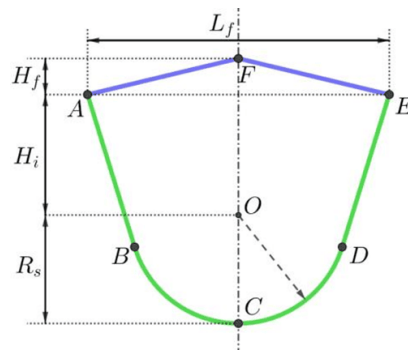


Рис. 2.2: Параметризованный шаблон типа Озаки

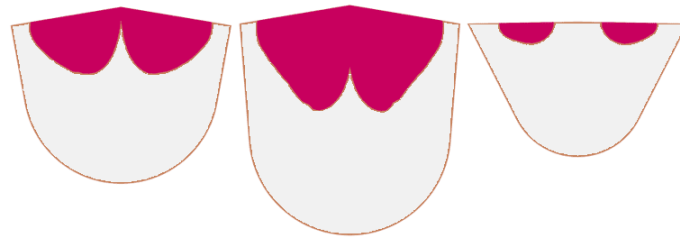


Рис. 2.3: Слева: оптимальный вариант, в центре: большие створки, справа: маленькие створки

Для оптимизации параметров шаблонов предлагается использовать многомерный метод глобального поиска на основе кривых Гильберта, описанный подробно в работах [1], [2]. Для тестирования предложенного метода был выбран шаблон типа Озаки (см. рисунок 2.2). В качестве критерия оптимизации были выбраны геометрические критерии и функционал, предложенные на предыдущем этапе проекта. На рисунке 2.3 приведен пример результата релизованного алгоритма оптимизации в случае круглого цилиндрического корня аорты радиуса 12 мм. Корень аорты делится на 3 равные части, к которым пришиваются 3 лепестка равной формы. На рисунке 2.3 слева направо показаны примеры моделирования областей коаптации створок аортального клапана в диастолическом состоянии для наилучшей по результатам оптимизации створки, излишне крупной створки и наоборот слишком маленькой створки. Маленькая створка не обеспечивает закрытие клапана, поэтому она непригодна, а крупная створка в свою очередь приводит к большому провисанию (биллоингу) створки. Полученная оптимизированная створка обеспечивает закрытие клапана и отсутствие существенного биллоунга.

1.2.3 Оценка возможностей применения технологии математического моделирования для реальных пациентов

Случай приобретённого порока аортального клапана. Пациент К., 20 лет, госпитализирован в кардиохирургическое отделение ЦКБ УДП РФ с клинической картиной приобретённого порока аортального клапана. В раннем детстве у пациента был диагностирован врождённый порок сердца: двустворчатый аортальный клапан. С 12 лет прогрессировал стеноз аортального клапана. Пациент подготовлен к хирургическому лечению приобретённого порока аортального клапана в плановом порядке.

Учитывая молодой возраст пациента, с ним обсуждена возможность выполнения неокуспидизация аортального клапана по методике S. Ozaki. С целью уточнения анатомических особенностей корня аорты и аортального клапана пациента, а также для предоперационного расчёта подходящих для конкретного пациента шаблонов для неостворок, прогнозирования замыкательной способности аортального неоклапана при различных размерах неостворок с помощью математического моделирования, выполнена мультиспиральная компьютерная томография (МСКТ) сердца с контрастированием и синхронизацией в диастолу желудочков. На основании МСКТ сердца выполнена сегментация восходящей аорты и выводного тракта левого желудочка в программе ИТК-SNAP с помощью метода levelset [3]. Конечная сегментация области проверена визуально и скорректирована вручную. С помощью библиотеки CGAL (Computational Geometry Algorithms Library) [4] построена неструктурированная треугольная сетка поверхности просегментированной области с заданным шагом в 0,5 мм. В программе MeshLab с помощью инструмента PickPoints на поверхности построенной треугольной сетки вручную размечалась линия пришивания неостворок с учётом особенностей анатомии и техники пришивания. Учитывая наличие у пациента двустворчатого аортального клапана со сросшимися левой (ЛКС) и правой коронарными створками (ПКС), высота комиссуры между левой и правой коронарными створками была значительно меньше остальных. Согласно анатомическим исследованиям [5], рассчитана подходящая высота комиссуры — 16 мм (Рисунок 2.4а). Измерены межкомиссуральные расстояния (МКР) для каждой створки [6], то есть длины дуги описывающей вентрикулоаортальное соединение окружности, ограниченной проекциями комиссур. Учитывая наличие у пациента двустворчатого аортального клапана со сросшимися ЛКС и ПКС, МКР составили: для ЛКС — 27 мм, для ПКС — 31 мм (либо 29 при выборе меньшего шаблона), для некоронарной створки (НКС) — 31 мм. Учитывая рекомендацию S. Ozaki при различии МКР разных створок более 2 мм смещать неокomisсуру [7], размечена линия пришивания неостворок с учётом смещения неокomisсуры (Рисунок 2.4б).

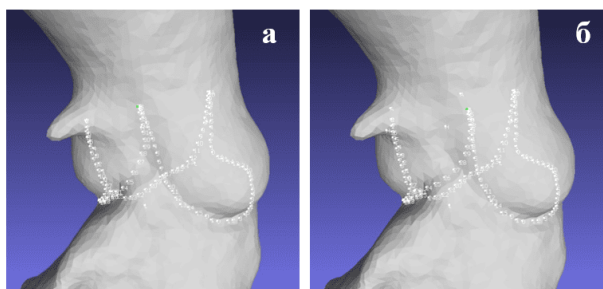


Рис. 2.4: Линия пришивания неостворок: а — без перемещения комиссур, б — с перемещением комиссуры

С помощью методов математического моделирования выполнена оценка замыкательной функции аортального неоклапана при трёх сценариях (Рисунок 2.5):

1. Нативные комиссуры с размерами створок: НКС 31 мм, ПКС 31 мм, ЛКС 27 мм;
2. Нативные комиссуры с размерами створок: НКС 31 мм, ПКС 29 мм, ЛКС 27 мм;
3. Перемещённая комиссура с размерами створок: НКС 29 мм, ПКС 29 мм, ЛКС 29 мм.

Построены проксимальные границы зоны коаптации неостворок на их развёртках с расчётом параметров замыкательной способности неоклапана (Рисунок 2.6). Все варианты показали хорошие параметры

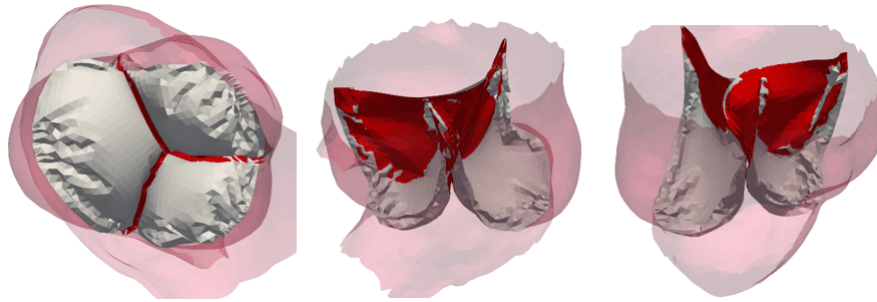


Рис. 2.5: Графическое изображение квазистатического положения неостворок аортального клапана после некуспидизации в диастолу желудочков

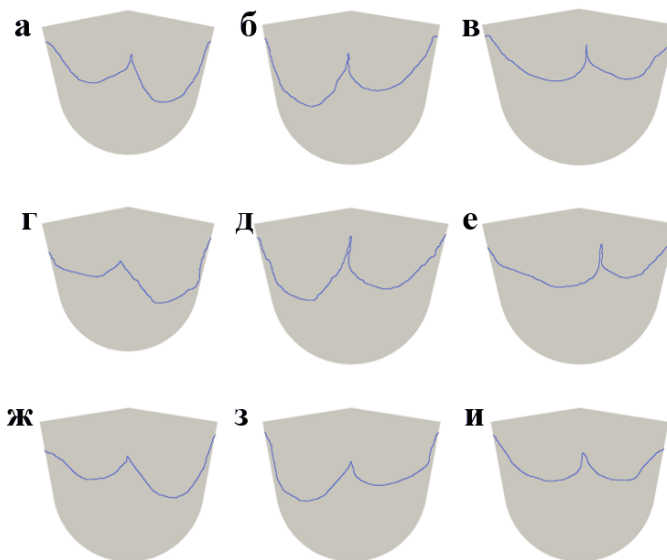


Рис. 2.6: Профиль зон коаптации неостворок: верхний ряд – нативные комиссуры: а – ЛКС (27), б – ПКС (29), в – НКС (31); средний ряд – нативные комиссуры: г – ЛКС (27), д – ПКС (31), е – НКС (31); нижний ряд – перемещённая комиссура: ж – ЛКС (29), з – ПКС (29), и – НКС (29)

замыкательной способности неоклапана. Удовлетворительный профиль зоны коаптации продемонстрировал вариант с нативным расположением комиссур и следующими номерами створок: ЛКС 27, ПКС 29, НКС 31, – а также вариант с перемещением комиссуры и номерами створок: ЛКС 29, ПКС 29, НКС 29.

Пациенту выполнена операция в условиях искусственного кровообращения, кардиopleгии. Доступ – полная продольная срединная стернотомия. Измерены межкомиссуральные расстояния: для ЛКС – 27 мм, для ПКС – 29 мм, для НКС – 31 мм. Учитывая удовлетворительные показатели замыкательной способности неоклапана, рассчитанные в предоперационном периоде с помощью математического моделирования с нативным положением комиссур, а также большую техническую сложность перемещения комиссур, принято решение выбрать для некуспидизации следующие номера неостворок: ЛКС – 27, ПКС – 29, НКС – 31. Выкроены три неостворки из аутоперикарда с помощью шаблона

S. Ozaki. Поочерёдно обвивным швом имплантированы три неостворки (ЛКС-ПКС-НКС). Сформированы неокomisсуры неоклапана. В послеоперационном периоде выполнялась трансторакальная эхокардиография. Конечно-диастолический объём левого желудочка – 94 мл. Аортальный клапан представлен тремя створками с достаточным их раскрытием (максимальное раскрытие – 1,7 см). Пиковый градиент давления – 11 мм рт. ст., средний градиент давления – 6 мм рт. ст. Аортальная регургитация эксцентрически направленная I степени. Клинические результаты хирургического лечения в послеоперационном периоде продемонстрировали удовлетворительные параметры функции аортального неоклапана.

Данный клинический пример иллюстрирует высокую прогностическую значимость математического моделирования замыкательной способности аортального клапана. В распоряжении кардиохирурга появился дополнительный инструмент, помогающий выбрать подходящий размер и форму неостворок, в частности в спорном случае и при наличии альтернативных вариантов.

Двустворчатый аортальный клапан. Пациентка П., 66 лет, госпитализирована в кардиохирургическое отделение ЦКБ УДП РФ с симптомным стенозом аортального клапана на фоне врождённого порока сердца: двустворчатого аортального клапана I L/R типа по Н.Н. Sievers. Пациентка подготовлена к хирургическому лечению в плановом порядке. По согласованию с пациенткой запланирована неокusпидизация аортального клапана по методике S. Ozaki. В предоперационном периоде выполнена мультиспиральная компьютерная томография (МСКТ) сердца с контрастированием и синхронизацией в диастолу желудочков. Аортальный клапан с тремя комиссурами и сросшимися левой коронарной створкой (ЛКС) и правой коронарной створкой (ПКС). На основании МСКТ сердца выполнена сегментация восходящей аорты и выводного тракта левого желудочка в программе ITK-SNAP с помощью метода levelset [3]. С помощью библиотеки CGAL [4] построена неструктурированная треугольная сетка поверхности просегментированной области с заданным шагом в 0,5 мм. Рассчитаны сегментарные межкомиссуральные расстояния для трех створок [6]: правая коронарная створка (ПКС) 31,41 мм, левая коронарная створка (ЛКС) 31,19 мм, некоронарная створка (НКС) 37,80 мм. Учитывая значительный перепад межкомиссуральных расстояний, превышающий 2 размера [7], максимальный размер створок 33, показано перемещение комиссур для выравнивания межкомиссуральных расстояний. Согласно анатомическим исследованиям [5], рассчитана подходящая высота неокomisсуры – 20 мм. В программе MeshLab с помощью инструмента PickPoints на поверхности построенной треугольной сетки вручную размечена линия пришивания с учётом перемещения комиссур: комиссура между ЛКС и НКС перемещена на 4 мм против часовой стрелки, комиссура между ПКС и НКС перемещена на 4 мм по часовой стрелке (Рисунок 2.7).

Используя математическую модель диастолического состояния аортального клапана, виртуально оценили замыкательную функцию аортального неоклапана, состоящего из трёх створок №33. Построены проксимальные границы зоны коаптации неостворок на их развёртках с расчётом параметров замыкательной способности неоклапана (Рисунок 2.8). Пациентке выполнена операция в условиях искусствен-

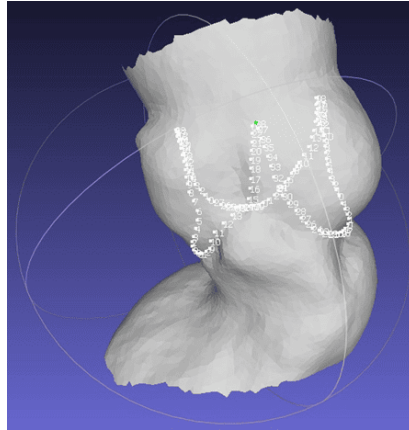


Рис. 2.7: Линия пришивания неостворок с перемещением комиссур

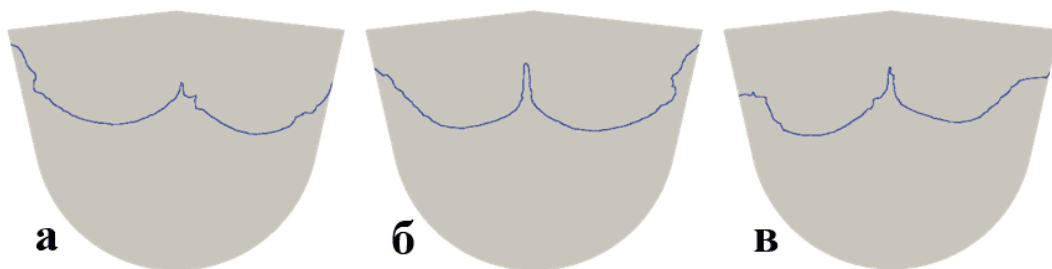


Рис. 2.8: Профиль зон коаптации неостворок: а – ЛКС, б – ПКС, в – НКС

ного кровообращения, кардиолегии. Доступ – полная продольная срединная стернотомия. Измерены межкомиссуральные расстояния: для ЛКС – 29 мм, для ПКС – 29 мм, для НКС – 37 мм. Разметка неокольца: комиссура между ПКС и ЛКС на высоту 2 см, комиссура между ЛКС и НКС перемещена на 4 мм против часовой стрелки, комиссура между ПКС и НКС перемещена на 4 мм по часовой стрелке. Размечены центры полулуний с помощью измерителя 33 мм. Выкроены три неостворки из аутоперикарда с помощью шаблона S. Ozaki №33. Поочередно обвивным швом имплантированы три неостворки (ЛКС-ПКС-НКС). Сформированы неокomisсуры неоклапана.

В послеоперационном периоде выполнялась трансторакальная эхокардиография. Конечнo-диастолический объём левого желудочка – 110 мл. Аортальный клапан: пиковый градиент давления – 20 мм рт. ст., средний градиент давления – 12 мм рт. ст. Аортальная регургитация I степени.

На данном клиническом примере показана возможность разработанной технологии не только прогнозировать замыкательную функцию неоклапана, фиксированного к нативным комиссурам, но и моделировать симметричный неоклапан у пациента с двустворчатым аортальным клапаном в корне аорты с заведомо асимметричным строением с помощью перемещения комиссур.

Паталогическая анатомия корня аорты. Аналогично предыдущим случаям были исследованы случаи вариантной анатомии корня аорты. У пациентки с узким корнем аорты, фиброзным кольцом аортального клапана и нетипичным углом между осью корня аорты и плоскостью надиров створок

аортального клапана выполнен дооперационный расчёт межкомиссуральных расстояний и моделирование замыкательной способности неоклапана с соответствующими неостворками. Интраоперационное измерение межкомиссуральных расстояний соответствовало дооперационному расчёту, однако замыкательная способность неоклапана после возобновления сердечной деятельности оказалась неудовлетворительной, что потребовало паракомиссуральной редукции свободного края неостворок. У пациентки с узким синотубулярным соединением интраоперационное измерение межкомиссуральных расстояний не соответствовало дооперационному расчёту, что потребовало модификации тактики в виде выбора более крупных неостворок. На основании анализа результатов неокуспидизации у пациенток с узким корнем аорты, фиброзным кольцом и синотубулярным соединением выявлена ведущая причина неудовлетворительного результата неокуспидизации – неверная оценка межкомиссуральных расстояний в предоперационном периоде, что требует дальнейшей модификации технологии дооперационного измерения. Также у пациентов с узким корнем аорты необходима оценка большего количества комбинаций неостворок для более точной оценки идеальной замыкательной способности неоклапана.

1.2.4 Разработка веб-интерфейса приложения в виде сервис-контейнера докера

Общая архитектура. Изначально веб-приложение “Озаки” для виртуальной раскройки створок аортального неоклапана из аутоперикарда было предложено в виде традиционно развертываемого на выделенном сервере веб-приложения на базе Apache с PHP, в котором программа сегментации аорты представляла собой статически собранный исполняемый файл без внешних зависимостей от разделяемых библиотек. Отметим, что унификация разработки и развертывания веб-приложений в виде сервис-контейнера докера позволяет запускать такие приложения в любое время и в любом месте, где возможен запуск докер-контейнера. Таким образом отпадает необходимость в конфигурировании отдельного сервера, установки необходимых библиотек и фреймворков при развертывании, так как вся необходимая среда уже сконфигурирована в контейнере. Кроме того контейнер содержит само приложение в виде статических HTML, CSS и JavaScript файлов, позволяя тем самым начать пользоваться приложением в браузере сразу после запуска докер-контейнера с приложением.

Первым этапом развития технологии сервис-контейнеров был создан контейнер `ozaki:0.50`, в котором было скомпоновано неконтейнерное приложение “Озаки”, работающее на выделенном сервере в ИВМ РАН. Размер полученного контейнера `ozaki:0.50` составлял 1.23 Гб и в нем был осуществлен полный цикл сегментации аорты реального пациента. Параллельно первому этапу шла разработка нового веб-интерфейса приложения “Озаки”, написанного на TypeScript на базе технологии React. Главная причина перехода на новую веб-технологии состоит в существенном сокращении сроков разработки веб-приложений с целевым показателем 6-12 месяцев. На втором этапе встала задача интеграции нового веб-интерфейса со старым бэкендом, который к тому времени был упакован в контейнер `ozaki:0.50`. Взаимодействие старого веб-интерфейса с бэкендом происходило через динамические вызовы PHP-скриптов

с использованием XMLHttpRequest, произвольно разбросанных в коде. Таким образом встала необходимость формализации взаимодействия веб-приложения с контейнеризированным бэкендом в виде API. Сама идея контейнеризированных веб-приложений меняет не только процесс развертки приложений, но и сам процесс разработки. Веб-программист видит бэкенд, с которым он взаимодействует только через API. При этом природа взаимодействия и используемые транспортные средства могут быть различными — HTTP REST запросы, динамическое взаимодействие с PHP скриптами через XMLHttpRequest, взаимодействие через веб-сокеты и т.д. Архитектура сервис-контейнеров не накладывает ограничений на характер взаимодействия. Первоначальные варианты API разрабатывались в канве существующего взаимодействия через динамические вызовы PHP скриптов. Однако довольно быстро стало ясно, что необходим более общий механизм, в котором не будет ограничений HTTP транспорта и который сможет реализовать четыре базовых варианта взаимодействия: (1) Однонаправленный; (2) потоковая передача сервера; (3) потоковая передача клиента и (4) двунаправленная потоковая передача. Первый тип взаимодействия — это традиционное клиент-серверное взаимодействие, которое хорошо реализуется HTTP запросами. Три оставшихся типа реализовать проблематично, хотя они присутствуют в gRPC на базе HTTP2. Однако HTTP2 невозможно напрямую использовать в браузерах, поэтому gRPC как транспортный механизм отпадает. Было решено отказаться от HTTP REST и XMLHttpRequest запросов в пользу веб-сокетов, которые позволяют реализовать все четыре типа взаимодействия. Отметим, что современные веб-серверы типа Apache или nginx не имеют прямой поддержки веб-сокетов и могут выступать только как прокси-сервера, отдавая фактическое выполнение запросов куда-то дальше по цепочке. Поэтому было решено использовать библиотеку Lightweight Web Sockets (Libwebsockets <https://github.com/warmcat/libwebsockets>) как базу для написания посредников между API запросами веб-приложения и программами на бэкенде. При этом посредник, написанный с использованием LWS выступает и как Web-сервер, и как WebSocket-сервер, позволяет обслуживать как статический HTTP контент, так и запросы по веб-сокетам. Посредник реализует подпротокол приложения, указываемый при подключении API к бэкенду, например, для приложения “Озаки” — это “ozaki-protocol”. Он также осуществляет сериализацию и десериализацию данных, при вызовах различных методов API, организует запуск и выполнение программ на бэкенде, извещает веб-приложение о текущем прогрессе при выполнении длительных операций, например, операции сегментирования аорты (см. режим 2 — потоковая передача с сервера). Посредник также реализует ассемблирование данных в режиме 3 — потоковая передача с клиента. Это происходит, например, при передаче данных DICOM, которые могут составлять десятки мегабайт. Поскольку перечисленные операции являются общими для посредников разных приложений, то они были вынесены в базовый класс, на основе которого пишутся посредники любых приложений.

Сериализация данных в запросах. В приложениях, работающих с КТ изображениями, львиную долю при взаимодействии составляют двоичные данные разнообразной природы — скаляры (целочисленные и действительные), вектора, массивы, строки и т.д. Поэтому встал вопрос о типизации и сериализации этих данных при передаче. Ранее была разработана система сериализации данных

под названием FSF, реализованная и на JavaScript и на C++. Разработанный формат данных FSF, обеспечивающий самотипизацию, был сильно оптимизирован для передачи одно-, двух- и трехмерных массивов, включая массивы битовых масок, в том числе в сжатом формате. То есть это формат, оптимизированный для работы с DICOM данными. При разработке общей системы сериализации для контейнерных приложений первоначально было решено использовать FSF. Однако FSF требовала значительных доработок как общая система сериализации, и в результате в качестве базовой была выбрана библиотека MESSAGE PACK (<https://msgpack.org/> и <https://github.com/msgpack/msgpack>), с принципами, очень близкими к FSF — самотипизация, эффективная сериализация и т.д., имеющая к настоящему времени большое сообщество разработчиков, хорошую документацию и реализации на дюжине языков программирования включая C, C++, JavaScript и другие. MESSAGE PACK уступает FSF в эффективности сериализации массивов однородных данных, однако временные выгоды от использования уже готовой библиотеки вместо доработки FSF были значительными.

Компоновка сервис-контейнеров, submodules и контейнеры-сборщики. В процессе создания сервис-контейнера возникает вопрос, что выбрать в качестве базового образа. Как правило, за основу берется образ, в котором развернута минимально необходимая среда для выполнения алгоритмической части бэкенда. На выбор базового образа влияет его размер, возможности установки дополнительных пакетов и многие другие факторы. Опыт показал, что в процессе установки дополнительных пакетов начальный образ вырастает до значительных размеров, например, `ozaki:0.50` вырос до 1.23 Гб, но, например, отказ от API на основе динамических вызовов PHP скриптов и переход к архитектуре на основе LWS, описанной в предыдущем разделе, позволил уменьшить размер сервис-контейнера `ozaki:3.52` до 38 Мб, то есть в 30 раз, по сравнению с первоначальной компоновкой в сервис-контейнере `ozaki:0.50` на основе PHP скриптов. Размер базового образа также растет в результате установки необходимой среды для работы дополнительных модулей на бэкенде, зачастую написанных на разных языках программирования, и требующих совершенно разных библиотек поддержки. Например, в сервис-контейнере “Озаки” модуль сегментации аорты требует библиотеки ИТК и VTK, а модуль мембранной модели — свои библиотеки, версии которых могут находиться в конфликте с библиотеками модуля сегментации. Поэтому предпочтительным способом компоновки модулей при сборке сервис-контейнера является включение статически собранного модуля без внешних ссылок на разделяемые библиотеки. Для статической сборки модулей используются сборочные контейнеры, которые получили название `cradle`-контейнеров, со своей средой компиляции, установленными библиотеками и т.д. Сборочный контейнер выдает на выходе статический модуль без внешних ссылок, который затем используется при компоновке сервис-контейнера веб-приложения. Опыт показал, что перемешивание кодов веб-приложения с кодами модулей, является катастрофическим решением, приводящим к невозможности сопровождения единой кодовой базы. Правильным решением оказалось использование механизма подмодулей (`submodules`) системы управления версиями GIT. При этом подходе каждый модуль бэкенда, включая само веб-приложение, является независимым репозиторием

кода, разработку которого ведет один или несколько программистов, и этот репозиторий используется как подмодуль при сборке сервис-контейнера. Таким образом исключается перемешивание кода, что позволяет компоновать сервис-контейнеры приложений, включающих в себя разработки многих программистов. Описанный выше подход приводит к необходимости суперсборщика, который синхронизирует сборку сервис-контейнера на уровне коммитов подмодулей, разрабатываемых как независимые проекты разными командами разработчиков. Описание структуры и работы суперсборщика выходит за рамки данного отчета. На базе описываемой выше технологии был создан сервис-контейнер `ozaki:3.52`, показанный на рисунке 2.9. Он включает в себя подмодуль сегментации арты и само веб-приложение, написано на TypeScript с использованием фреймворка React.

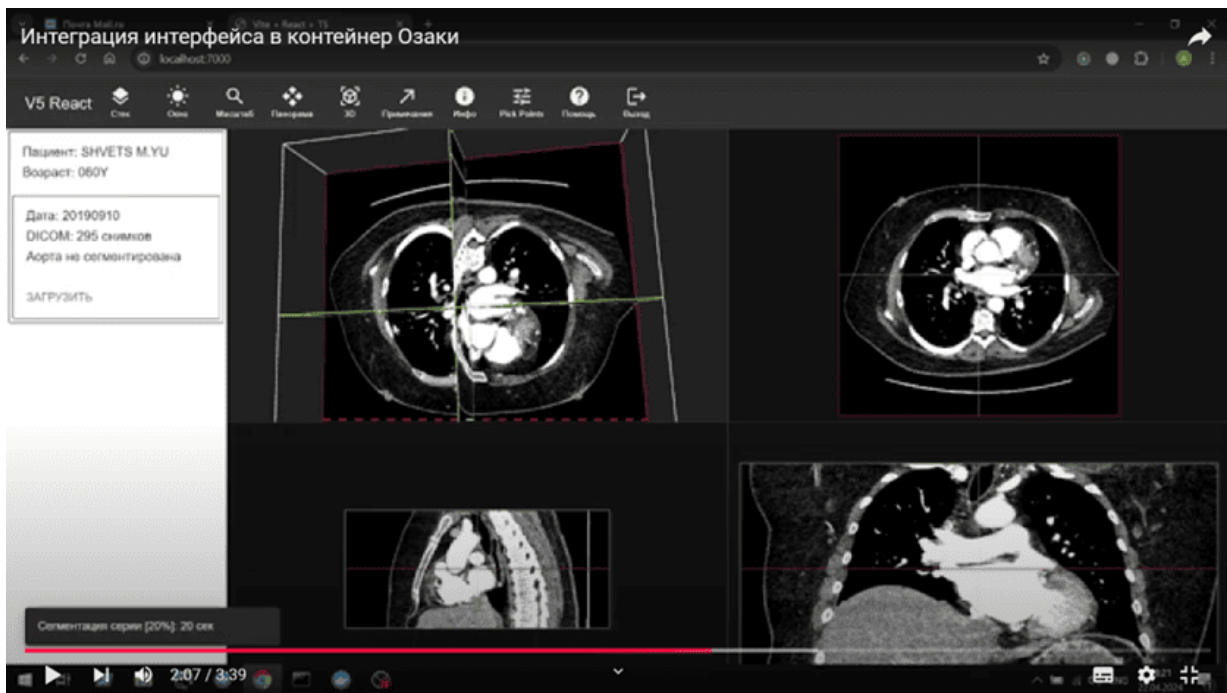


Рис. 2.9: Скриншот из видео, демонстрирующего работу сервис-контейнера `ozaki:3.52`

Автоматический запуск сервис-контейнеров через URL-активацию. Последним элементом разрабатываемой технологии является активация сервис-контейнера по запросу, аналогично тому, как это делает `systemd` в Unix системах, когда при обращении на порт 22 автоматически стартует процесс `sshd` и образуется SSH сессия. Поскольку сервис-контейнеры являются веб-приложениями, то необходим механизм автоматического запуска сервис-контейнера при обращении на определенный URL, например, <https://zeroapp.ru/app/ozaki>. Некоторые черты подобной URL активации присутствовали в системе Fleet (<https://github.com/coreos/fleet>) разрабатываемой на базе CoreOS. Но в прямом виде Fleet использовать для URL-активации нельзя, так как там реализован общий механизм сокет-активации, который не учитывает особенности URL-активации, главная из которых состоит в том, что HTTP по своей природе является stateless протоколом, и единственным способом закрепить сервис-контейнер за определенным клиентом является образование сессии. Кроме того проект Fleet прекратил

развиваться в 2018 году. Никаких других примеров контейнерной оркестровки для URL-активации найти не удалось, хотя что-то вероятно можно сделать с использованием кластеров Kubernetes. Но это показалось чрезмерным. Поэтому было решено написать собственную систему URL активации сервис-контейнеров, которая сейчас проходит опытную проверку на <http://zegoapp.ru>.

Литература

- [1] Yaroslav D Sergeyev, Roman G Strongin, and Daniela Lera. *Introduction to global optimization exploiting space-filling curves*. Springer Science & Business Media, 2013.
- [2] RG Strongin, VP Gergel, KA Barkalov, and AV Sysoyev. Generalized parallel computational schemes for time-consuming global optimization. *Lobachevskii Journal of Mathematics*, 39:576–586, 2018.
- [3] JA Sethian. Level set methods and fast marching methods. *Cambridge University*, 1999.
- [4] Laurent Rineau and Mariette Yvinec. A generic software design for delaunay refinement meshing. *Computational Geometry*, 38(1-2):100–110, 2007.
- [5] Laurent De Kerchove, Mona Momeni, Gaby Aphram, Christine Watremez, Xavier Bollen, Ramadan Jashari, Munir Boodhwani, Parla Astarci, Philippe Noirhomme, and Gebrine El Khoury. Free margin length and coaptation surface area in normal tricuspid aortic valve: an anatomical study. *European Journal of Cardio-Thoracic Surgery*, 53(5):1040–1048, 2018.
- [6] Shigeyuki Ozaki, Isamu Kawase, Hiromasa Yamashita, Shin Uchida, Yukinari Nozawa, Takayoshi Matsuyama, Mikio Takatoh, and So Hagiwara. Aortic valve reconstruction using self-developed aortic valve plasty system in aortic valve disease. *Interactive cardiovascular and thoracic surgery*, 12(4):550–553, 2011.
- [7] Shigeyuki Ozaki. Ozaki procedure: 1,100 patients with up to 12 years of follow-up. *Turkish Journal of Thoracic and Cardiovascular Surgery*, 27(4):454, 2019.

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

-Технологическая цепочка выбора поиска наилучшей геометрии соединения сосудов для гемодинамической коррекции сложных пороков сердца.

-Хирургическая техника гемодинамической коррекции сложных пороков сердца по принципу Фонтена на основе разработанной технологии, экспериментальная проверка эффективности данной техники.

1.3.1 Технологическая цепочка выбора наилучшей геометрии соединения сосудов для гемодинамической коррекции сложных пороков сердца

Пациентам со сложными пороками сердца проводится гемодинамическая коррекция в несколько этапов, обеспечивая постепенную адаптацию сердечно-сосудистой системы к новой конфигурации. На первом этапе новорожденному создается системно-легочный шунт для подготовки сосудистого русла к последующим изменениям. На втором этапе в ходе операции Глена формируется двунаправленный кава-пульмональный анастомоз (ДКПА), когда легочный ствол отделяется от сердца, а верхняя полая вена подшивается к легочной артерии. Финальным этапом является операция Фонтена, когда создается полное кава-пульмональное соединение (ПКПС) и кровь из нижней полой вены (НПВ) направляется в легочные артерии, минуя сердце. Популярной техникой является применение экстракардиального кондуита, в результате чего и образуется соединение четырех сосудов: верхней полой вены (ВПВ), кондуита (продолжения нижней полой вены (НПВ)), правой и левой легочных артерий (ПЛА, ЛЛА).

Данная техника является эффективной, однако, у многих пациентов возникают серьезные осложнения, и на текущий момент не ясно, что является причиной. Математическое моделирование является способом прогнозирования исхода операции, а также выбора оптимальной конфигурации будущего ПКПС.

В рамках проекта разработана технологическая цепочка выбора наилучшей геометрии ПКПС с помощью редуцированной 1D-PINN модели гемодинамики. Предложенная модель представляет собой стандартную 1D модель глобального кровотока, в которой учитывается сложное течение в области ПКПС в зависимости от его геометрии с помощью физически-информированной нейронной сети PINN. Важным преимуществом использования глобальных моделей кровообращения является возможность рассчитать послеоперационные изменения граничных условий в области ПКПС, а также учитывать наличие коллатерального кровотока и кровотока через фенестрации - данные осложнения типичны для пациентов с контуром Фонтена. Технологическая цепочка включает несколько этапов: 1) сбор клинических данных пациента; 2) построение персонализированной 1D-PINN модели кровотока и реализация численных экспериментов с использованием разных конфигураций области ПКПС; 3) выбор оптимальной геометрии ПКПС.

Обследование пациента, сбор клинических данных для персонализации модели[1]

Перед операцией Фонтена пациенты с двунаправленным кава-пульмональным анастомозом проходят ультразвуковое исследование сосудов. В легкодоступных сосудах УЗИ измерения скоростей являются довольно точными, а следовательно, могут быть использованы для персонификации одномерных моделей гемодинамики.

КТ и МРТ (компьютерная и магнитнорезонансная томография) являются ключевыми методами диагностики пациентов перед операцией Фонтена. Оба исследования предоставляют информацию о геометрии сосудов, а МРТ также позволяет оценить величину потока и скорость крови даже в труднодоступных сосудах. В клинической практике КТ оказывается более предпочтительным ввиду более высокой контрастности и лучшего пространственного разрешения. Более того, она может проводиться пациентам с металлическими имплантами, например, стентами. КТ проводится до и после операции, чтобы оценить 3D геометрию всех анатомических структур. Реже, например, пациентам с особенностями анатомии или несоответствии результатов УЗИ и анамнеза, проводится МРТ исследование. Результаты также могут использоваться для сегментации изображений, но обладают худшим пространственным разрешением.

Для построения 3D области ПКПС/ДКПА ранее в проекте был разработан автоматизированный метод сегментации КТ/МРТ-данных с выделением легочных артерий, полой вены, камер сердца и построения расчетных сеток. При сравнении результатов сегментации КТ и МРТ данных одного и того же пациента оказалось, что область, полученная из данных МРТ, существенно меньше, хотя исследование

проводилось позже, и пациент к тому времени уже подросток. Легочные вены не визуализировались на МРТ снимках, область аорты не была видна четко и сегментировалась с учетом опыта оператора.

Скорости и объем протекающей в сечении сосуда крови могут быть рассчитаны с помощью 2D фазово-контрастной или 4D-flow MR томографии. Мы сравнили потоки крови в области полых вен и легочных артерий, рассчитанные указанными методами у пациентов с контуром Фонтена и у пациентов с ДКПА. Оказалось, что результаты измерений противоречивы и имеют большую погрешность. Величина погрешности сравнима со скоростью крови в венах и обусловлена параметром томографического исследования VENC. Данный параметр определяет диапазон видимых скоростей крови, а погрешность измерений достигает 22% от выбранного значения. Поскольку скорость крови в венах значительно ниже задаваемого параметра VENC, то измерение происходит с большой ошибкой. Однако, поток крови в аорте, измеренный 2D фазово-контрастной томографией, оказывается больше, чем он же, измеренный методом 4D-flow. Данные расхождения также могут быть обусловлены заданным значением параметра VENC, который выбирается различным для 2D и 4D исследований. Результаты сравнимы, если скорости не превышают значение VENC.

Анамнез пациента может быть использован для персонализации моделей гемодинамики, в частности, антропометрические измерения, измерения давления, пульса на руке и тп.

Таким образом, для персонализации [2] 1D части 1D-PINN модели могут использоваться достоверные клинические данные: 1) КТ/МРТ данные для определения сосудистой структуры; 2) МРТ измерения потока крови в аорте; 2) УЗИ измерения скоростей крови в легкодоступных сосудах; 3) антропометрические данные, измерения давления. Для получения 3D геометрии сосудов в области ДКПА/ПКПС путем сегментации предпочтительнее использовать КТ данные. Пример персонализации двухмасштабной 1D-3D модели системного кровообращения в контуре Фонтена рассматривался в работе [3].

1D-PINN редуцированная модель гемодинамики в области полного кава-пульмонального соединения [4]

Выбор оптимальной геометрии ПКПС требует проведения серии численных расчетов. В данной работе предложен метод учета данной области в 1D модели кровообращения с помощью физически-информированной нейронной сети (PINN). После успешного обучения нейронная сеть может использоваться без привлечения дополнительных вычислительных ресурсов.

Процесс обучения физически-информированной нейронной сети начинается с создания синтетических наборов данных на выборке геометрических параметров из латинского гиперкуба. Сначала с помощью библиотеки GMSH [5] генерируется набор 3D-сеток, учитывая физиологические диапазоны радиусов в области ПКПС, обработка сетки проводится с помощью Anis3D [6]. 3D моделирование кровотока в каждой построенной области осуществляется также программным пакетом Anis3D: решаются стационарные уравнения Навье-Стокса, в данной работе стенки области считались жесткими. Входными

параметрами для нейронной сети являются осредненные по сечению давления, приравниваемые к нормальной компоненте тензора напряжений, на четырех границах втекания и вытекания. В зависимости от этих параметров нейросеть выдает средние значения потоков на тех же границах.

Подробно все перечисленные этапы генерации данных, обучения нейросети и ее верификации рассматривались в работах [4, 7] и отчете по данному проекту в 2023 году.

В одномерной модели кровотока каждый сосуд считается длинной осесимметричной эластичной круглой трубкой. Кровь рассматривается как вязкая несжимаемая жидкость с плотностью ρ . В каждой трубке предполагается выполнение законов сохранения массы и импульса

$$\begin{aligned} \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial(S\bar{u})}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial \bar{u}}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{u}^2/2 + p/\rho)}{\partial x} &= 0, \end{aligned} \quad x \in [0, l], t \in [0, T] \quad (3.1)$$

а также уравнения состояния

$$p = \rho c_0^2 f(S), \quad (3.2)$$

где \bar{u} и p - линейная скорость и давление, осредненные по сечению, S - площадь поперечного сечения, c_0 - скорость распространения малых возмущений в стенке сосуда. Уравнение состояния (3.2) представляет собой зависимость давления от площади поперечного сечения и описывает эластичные свойства стенки сосуда. В данной работе указанная зависимость имеет вид

$$f(S) = \begin{cases} \exp(S\hat{S}^{-1} - 1) - 1, & \text{for } S > \hat{S} \\ \ln(S\hat{S}^{-1}), & \text{for } S \leq \hat{S}, \end{cases} \quad (3.3)$$

где \hat{S} - площадь поперечного сечения в покое (при нулевом трансмуральном давлении). В качестве начальных условий предполагается, что скорость крови равна нулю, а сам сосуд находится в покое: $\bar{u}|_{t=0} = 0$, $S|_{t=0} = \hat{S}$.

Гиперболическая система (3.1) может быть проинтегрирована с использованием сеточно-характеристического метода. Граничные условия в точках стыковки сосудов включают численную дискретизацию инвариантов вдоль выходящих характеристик [8] (условия совместности)

$$\bar{u} = \psi S + \xi \quad (3.4)$$

для двух граничных (первой и последней) точек на сетке сосуда, ψ и ξ зависят от типа аппроксимации. Другие граничные условия обычно требуют выполнения законов сохранения массы и полного давления. Некоторые альтернативные условия рассматриваются в работах [8, 9].

Для предсказательного моделирования операции Фонтена важно учитывать влияние углов стыковки сосудов и особенностей течения крови в области ПКПС. Перечисленными выше условиями это учесть не возможно, поэтому расчет гемодинамики в области ПКПС производится нейросетью, а именно

устанавливается зависимость между давлениями и потоками на границах области ПКПС при учете ее геометрии. То есть для фиксированной геометрии ПКПС имеем зависимость для j -го 1D – NN интерфейса, имитирующую параметры 3D течения нейросетью

$$q_j = F_j(p_1, p_2, p_3, p_4), \quad j = 1, \dots, 4. \quad (3.5)$$

Таким образом, для каждого заданного множества $\{p_j\}_{j=1}^4$ имеем соответствующее множество $\{q_j\}_{j=1}^4$, которое физически соответствует решениям уравнений Навье-Стокса.

Далее представлен алгоритм расчета 1D моделью с нейросетью в области ПКПС. Он построен аналогично методу сопряжения 1D и 3D моделей течения жидкости [10].

Предположим, что численное решение в 1D модели известно в момент времени t_n . Для $n = 0$ решение определяется начальными условиями. Начальные условия $q_{1D,j}^{(0)}$ на интерфейсах 1D–PINN задаются как линейная экстраполяция потоков с двух предыдущих шагов по времени $q_j(t_{n-K})$ и $q_j(t_n)$

$$q_{1D,j}^{(0)}(t) = q_j(t_{n-K}) + \frac{t - t_{n-K}}{t_n - t_{n-K}} \left(q_j^{(0)}(t_n) - q_j(t_{n-K}) \right), \quad j = 1, \dots, 4, \quad t_n \leq t \leq t_{n+K} \quad (3.6)$$

и производится расчет 1D моделью (3.1) с момента времени t_n до t_{n+K} с переменным шагом $\tau_k^{(0)}$ ($t_{n+K} - t_n = \sum_{k=1}^K \tau_k^{(0)}$), который определяется согласно критерию Куранта. На каждом шаге по времени мы задаем граничное условие на каждом интерфейсе 1D – PINN как

$$S_j^{(0)}(t) \bar{u}_j^{(0)}(t) = q_{1D,j}^{(0)}(t), \quad j = 1, \dots, 4, \quad t_n \leq t \leq t_{n+K}$$

совместно с условием совместности. Для $n = 0$ мы требуем выполнения законов сохранения массы и непрерывности полного давления в узле для первых K шагов по времени, чтобы вычислить $q_j^{(0)}(t)$, $0 \leq t \leq t_K$ (стандартная система условий в точке стыковки сосудов 1D модели). Далее мы пересчитываем значения

$$\begin{aligned} p_j^{(0)}(t_{n+K}) &= \rho c_{0j}^2 f(S_j^{(0)}(t_{n+K})) \\ q_j^{(0)}(t_{n+K}) &= F_j \left(p_1^{(0)}(t_{n+K}), p_2^{(0)}(t_{n+K}), p_3^{(0)}(t_{n+K}), p_4^{(0)}(t_{n+K}) \right), \quad j = 1, \dots, 4, \end{aligned} \quad (3.7)$$

где c_{0j} и S_{0j} — заданные параметры сосуда j , рассчитанные на основе клинических данных, F_j определяется нейросетью.

Аналогично находим $p_j^{(i+1)}(t_{n+K})$, $q_j^{(i+1)}(t_{n+K})$ на 1D–PINN интерфейсах с помощью i -ой итерации алгоритма.

В данной работе мы полагаем $K = 5 \cdot 10^3$, $\varepsilon = 10^{-9}$, $N_{max} = 100$, $\chi = 0.09$, $\omega = 0.09$.

Algorithm 3 Алгоритм расчета 1D–PINN моделью

1. Рассчитываем потоки на 1D–PINN интерфейсах как

$$\tilde{q}_j^{(i+1)}(t_{n+K}) = (1 - \omega)q_{1D,j}^{(i)}(t_{n+K}) + \omega q_j^{(i)}(t_{n+K}), j = 1, \dots, 4,$$

где $q_{1D,j}^{(i)}(t_{n+K})$ рассчитаны с помощью 1D численных расчетов

$$q_{1D,j}^{(i)}(t_{n+K}) = S_j^{(i)}(t_{n+K})\bar{u}_j^{(i)}(t_{n+K}). \quad (3.8)$$

2. Запускаем 1D модель (3.1) от момента по времени t_n до t_{n+K} с обновленными граничными условиями на 1D–PINN интерфейсах

$$S_j^{(i+1)}(t)\bar{u}_j^{(i+1)}(t) = q_j(t_n) + \frac{t - t_n}{t_{n+K} - t_n} \left(\tilde{q}_j^{(i+1)}(t_{n+K}) - q_j(t_n) \right), \quad j = 1, \dots, 4, \quad t_n \leq t \leq t_{n+K} \quad (3.9)$$

и (3.4). Для повышения точности численных расчетов рассчитываем $S_j^{(i+1)}(t)\bar{u}_j^{(i+1)}(t)$, интерполируя $q_j(t_{n+K}), q_j(t_n), q_j(t_{n-K})$ со вторым порядком точности.

3. Рассчитываем значения для следующей итерации

$$\begin{aligned} \tilde{p}_j^{(i+1)}(t_{n+K}) &= \rho c_{0j}^2 f(S_j^{(i+1)}(t_{n+K})), \\ p_j^{(i+1)}(t_{n+K}) &= (1 - \chi)p_j^{(i)}(t_{n+K}) + \chi \tilde{p}_j^{(i+1)}(t_{n+K}), \\ q_j^{(i+1)}(t_{n+K}) &= F_j \left(p_1^{(i+1)}(t_{n+K}), p_2^{(i+1)}(t_{n+K}), p_3^{(i+1)}(t_{n+K}), p_4^{(i+1)}(t_{n+K}) \right), \quad j = 1, \dots, 4. \end{aligned} \quad (3.10)$$

4. Увеличиваем i на 1, если $|p^{(i+1)}(t_{n+K}) - p^{(i)}(t_{n+K})| > \varepsilon$ и $i < N_{max}$, иначе останавливаем итерационный процесс.

Верификация 1D–PINN модели гемодинамики [4]

Для верификации модели проведен ряд численных экспериментов по моделированию кровотока в области ПКПС. Для определения параметров модели мы проанализировали 4D flow MR данные 8 пациентов 11-13 лет с кровообращением по Фонтену. Исследования проводились на MR-томографе Siemens 1,5 Tesla Avanto с использованием многоканальной поверхностной катушки для сканирования с синхронизацией ЭКГ. Средние диаметры ВПВ, ПЛА и ЛЛА составили 1,19 см, 1,18 см и 1,32 см, соответственно. Средняя величина потока в секунду в НПВ и ВПВ составила 31,6 мл/с и 11,7 мл/с.

Каждый из четырех сосудов (ВПВ, ПЛА, ЛЛА и кондуит, продолжаемый НПВ) представляет собой прямую трубку длиной 12 см с круглым поперечным сечением. Длины кондуита и НПВ заданы 7 см и 5 см, соответственно. Диаметры ВПВ, ПЛА, ЛЛА, НПВ для всех случаев заданы равными 1,2 см. Мы рассматривали четыре типичных геометрии:

Случай 1: Четыре равных взаимно перпендикулярных сосуда лежат в одной плоскости (симметричный крест), диаметр кондуита 1.2 см (Рисунок 3.1а);

Случай 2: Диаметр кондуита в 1,5 раза больше диаметров остальных сосудов (Рис. 3.1b);

Случай 3: ВПВ находится под углом 60° к ЛЛА (рис. 3.1c);

Случай 4: ВПВ смещена на 0,6 см вправо относительно кондуита (Рисунок 3.1d).

Геометрические параметры расчетной области для всех случаев сведены в таблицу 3.1.

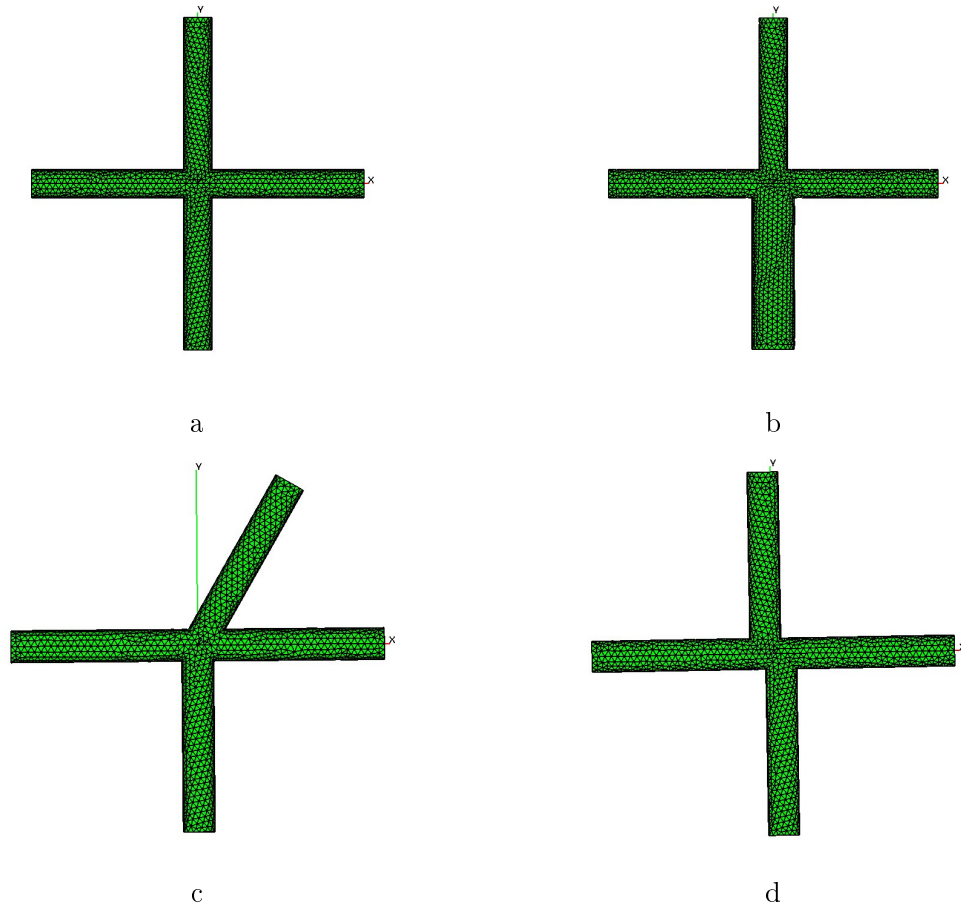


Рис. 3.1: Типичные конфигурации ПКПС.

ТАБЛИЦА 3.1: Геометрические параметры рассматриваемых областей ПКПС.

Вариант	Диаметр кондуита, см	α	β	dx , см
1	1.2	90°	90°	0
2	1.8	90°	90°	0
3	1.2	90°	60°	0
4	1.2	90°	90°	0.6

Мы задаем потоки на границах втекания в НПВ и ВПВ равными 31,6 мл/с и 11,7 мл/с по результатам анализа данных МРТ пациентов. Условие Пуазейля ставится на границах вытекания в ПЛА и ЛЛА: $P = P_{out} + QR$, где P и Q — давление и величина потока на конце сосуда, $P_{out} = 5 \text{ mmHg}$ — давление в

здоровом сердце. Типичное давление в области ПКПС равно 14 мм рт. ст. Мы задаем сопротивление R равным $553 \text{ г/см}^4 \cdot \text{с}$. Это значение обеспечивает физиологически приемлемый перепад давления в 9 мм рт. ст. в случае симметричного распределения потока между ПЛА и ЛЛА ($Q=21,65 \text{ мл/с}$).

Далее кровоток в рассматриваемых геометриях (см. рис. 3.1) рассчитывается с помощью 1D-PINN, 1D-3D и 3D моделей кровотока с целью верификации 1D-PINN модели.

На рисунке 3.2а представлена трехмерная расчетная область для 3D модели кровотока, основанной на стационарных уравнениях Навье-Стокса. Для численного моделирования используется метод конечных элементов Тейлора-Худа (P2/P1) [2]. Для устранения конвективной неустойчивости в численное решение добавлена модель турбулентности Смагоринского с весовым коэффициентом 0.2. Потoki и давления, осредненные по сечению, рассчитывались на расстоянии 5 см от внешних границ втекания и вытекания. Эти сечения соответствуют интерфейсам между 1D и другими подмоделями в 1D-PINN и 1D-3D моделях.

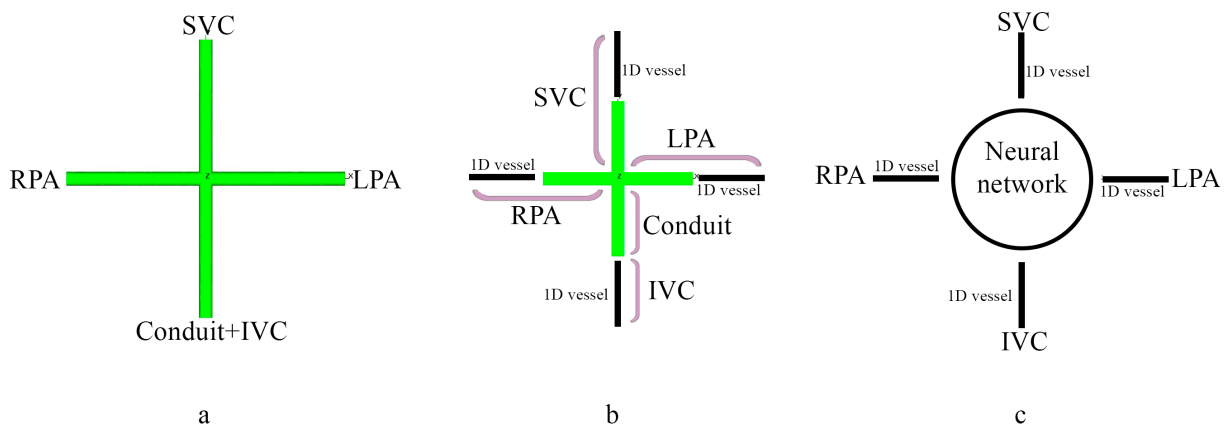


Рис. 3.2: Вычислительные области ПКПС для а) 3D-модели; б) 1D-3D двухмасштабной модели; в) 1D-PINN модели.

Схема расчетной области для 1D-3D модели показана на рисунке 3.2б. Центральная часть области ПКПС рассматривается как 3D-область с жесткими стенками, а остальные части сосудов - как 1D-области. Стационарная трехмерная задача Стокса решается на каждом временном шаге в трехмерной области. Непрерывность потока и давления требуются на границе между 1D и 3D моделями. Дискретизация и численный алгоритм решения описаны в работе [10]. Длина каждого 1D сосуда в обеих моделях равна 5 см.

Схема вычислительной области для модели 1D-PINN представлена на рисунке 3.2с. Среднее число итераций для сходимости на границе раздела 1D-PINN составляет от 17 до 26 в зависимости от геометрии.

Результаты моделирования включают величины потока и давления на интерфейсах подмоделей в 1D-PINN и 1D-3D моделях, а также в соответствующих сечениях 3D модели. В таблицах 3.2, 3.3 показаны

ТАБЛИЦА 3.2: Значения q_{SVC} , q_{RPA} , q_{IVC} , q_{LPA} , рассчитанные 1D-PINN, 1D-3D и 3D(NS), а также относительная разница 1D-PINN — 1D-3D и 1D-PINN — 3D(NS) решений в скобках.

Вариант	1D-PINN	1D-3D	3D(NS)
q_{SVC} , ml/s			
1	11.70	11.70 (0.00%)	11.70 (0.00%)
2	11.70	11.70 (0.00%)	11.70 (0.00%)
3	11.70	11.70 (0.00%)	11.70 (0.00%)
4	11.70	11.70 (0.00%)	11.70 (0.00%)
q_{RPA} , ml/s			
1	21.37	21.65 (1.29%)	21.65 (1.29%)
2	21.43	21.65 (1.02%)	21.64 (0.97%)
3	21.35	21.65 (1.39%)	21.56 (0.97%)
4	21.40	21.65 (1.15%)	21.80 (1.83%)
q_{IVC} , ml/s			
1	31.60	31.60 (0.00%)	31.60 (0.00%)
2	31.60	31.60 (0.00%)	31.60 (0.00%)
3	31.60	31.60 (0.00%)	31.60 (0.00%)
4	31.60	31.60 (0.00%)	31.60 (0.00%)
q_{LPA} , ml/s			
1	21.40	21.65 (1.15%)	21.63 (1.06%)
2	21.44	21.65 (0.97%)	21.65 (0.97%)
3	21.40	21.65 (1.15%)	21.71 (1.43%)
4	21.44	21.65 (0.97%)	21.50 (0.28%)

рассчитанные значения, а также относительные расхождения между 1D-PINN и 1D-3D, а также между 1D-PINN и 3D(NS) решениями для сравнения.

Из таблиц 3.2, 3.3 можно сделать вывод, что результаты расчетов 1D-PINN и 1D-3D моделями идентичны. Максимальное отклонение как по давлению, так и по потоку не превышает 1,48%. Поскольку одна и та же 3D-модель использовалась как для 3D-части в 1D-3D-модели, так и для обучения PINN, это наблюдение подтверждает успешную работу нейронной сети PINN. Существует небольшая асимметрия в распределении потока между ПЛА и ЛЛА и потеря жидкости в пределах 1–1,3% в модели 1D-PINN. Вероятно, PINN систематически недооценивает давление на 0,6-1,5%.

По результатам расчетов 3D(NS) моделью перепад давления между границами втекания и вытекания в области ПКПС оказывается в диапазоне 0,8–1,65 мм рт. ст. Это намного больше, чем перепад давления в моделях 1D-PINN и 1D-3D (0,11–0,22 мм рт. ст.). Разница объясняется наличием в 3D(NS) модели инерционных сил, описываемых конвективным членом. Максимальная относительная разница между давлениями, рассчитанными моделями 1D-PINN и 3D(NS), составляет 12,26%.

В результате 3D(NS) моделирования наблюдается разница гемодинамических параметров в зависимости от геометрической конфигурации. Увеличение диаметра кондуита приводит к общему снижению давления в ПКПС: в случае 2 давление в НПВ ниже на 0,66 мм рт. ст. Изменение угла соединения

ТАБЛИЦА 3.3: $p_{SVC}, p_{RPA}, p_{IVC}, p_{LPA}$, рассчитанные 1D-PINN, 1D-3D и 3D(NS), а также относительная разница 1D-PINN — 1D-3D и 1D-PINN — 3D(NS) решений в скобках.

Вариант	1D-PINN	1D-3D	3D(NS)
p_{SVC}, mmHg			
1	13.96	14.11 (1.06%)	15.91 (12.26%)
2	13.99	14.11 (0.85%)	15.24 (8.20%)
3	13.96	14.11 (1.06%)	15.82 (11.76%)
4	13.97	14.11 (0.99%)	15.60 (10.45%)
p_{RPA}, mmHg			
1	13.85	13.97 (0.86%)	14.26 (2.88%)
2	13.88	13.97 (0.64%)	14.26 (2.66%)
3	13.85	13.97 (0.86%)	14.22 (2.60%)
4	13.87	13.97 (0.72%)	14.31 (3.07%)
p_{IVC}, mmHg			
1	13.98	14.19 (1.48%)	15.72 (11.07%)
2	13.98	14.08 (0.71%)	15.06 (7.17%)
3	13.98	14.19 (1.48%)	15.68 (10.84%)
4	14.00	14.19 (1.34%)	15.56 (10.03%)
p_{LPA}, mmHg			
1	13.87	13.97 (0.72%)	14.26 (2.73%)
2	13.88	13.97 (0.64%)	14.25 (2.60%)
3	13.87	13.97 (0.72%)	14.29 (2.94%)
4	13.88	13.97 (0.64%)	14.19 (2.18%)

ВПВ или смещение ВПВ относительно НПВ приводит к перераспределению крови между ПЛА и ЛЛА: 49,83% крови поступает в ПЛА в случае 3 и 50,35% — в случае 4. Центральное давление также снижается, но менее значительно, чем в случае 2. При этом максимальное относительное отклонение между потоками, рассчитанными 1D-PINN и полной 3D моделями, составляет 1,83%.

Выбор оптимальной конфигурации полного кава-пульмонального соединения

Для пациентов со сформированным двунаправленным кава-пульмональным анастомозом оптимизируемыми параметрами задачи являются углы между кондуитом и ПЛА и кондуитом и ВПВ, диаметр кондуита, а также сдвиг кондуита относительно ВПВ. До начала лечения также можно оптимизировать угол между ВПВ и ПЛА.

Минимизируемые функционалы:

- сопротивление ПКПС $R_{TCPC} = \frac{P_{SVC}-P_0}{Q_{SVC}} + \frac{P_{IVC}-P_0}{Q_{IVC}} + \frac{P_0-P_{RPA}}{Q_{RPA}} + \frac{P_0-P_{LPA}}{Q_{LPA}}$, $F_1 = R_{RP}$ (в случае использования глобальной модели кровообращения, также можно минимизировать легочные сопротивления $R_{TCPC} = \frac{P_{RPA}-P_{atrium}}{Q_{RPA}}$, $R_{LP} = \frac{P_{LPA}-P_{atrium}}{Q_{LPA}}$);

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 ρ — 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 $F = F_1^2 + F_2^2 + F_3^2$ был минимальным.

Ограничения на вариации геометрических 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.

Определить оптимальные значения возможно с использованием автоматизированного алгоритма Adam.

1.3.2 Хирургическая техника гемодинамической коррекции сложных пороков сердца по принципу Фонтена на основе разработанной технологии

Операция Фонтена является заключительным этапом в создании полного кава-пульмонального соединения. К этому моменту у пациента уже сформирован двунаправленный кава-пульмональный анастомоз. Таким образом, при хирургической коррекции в технике установки экстракардиального кондуита, влияние на итоговую геометрию возможно путем выбора диаметра кондуита, угла его пришивания, а также сдвига относительно верхней полой вены. Оптимальные параметры могут быть определены с помощью методики, представленной выше.

При создании анастомоза между протезом и правой легочной артерией, хирург достаточно ограничен в месте выбора подшивания кондуита, в виду того, что размер протеза берется «на вырост», и его диаметр превышает необходимый на данный момент жизни ребенка. Однако, в зависимости от исходной анатомии и расположения ранее выполненного двунаправленного кавапульмонального анастомоза у хирурга есть возможность несколько регулировать положение кондуита относительно верхней полой вены, начиная от таких редких случаев, как подшивание протеза к противоположной от ДКПА легочной артерии и заканчивая элементами смещения анастомоза относительно ДКПА. В первом случае должна быть соответствующая анатомия расположения нижней полой вены и сердца, а во втором - необходимость в разграничении двух потоков из верхней и нижней полой вен согласно предварительным математическим расчетам.

Для регулирования угла между кондуитом и легочными артериями, необходимо край протеза отсечь косым разрезом. Для распределения потока крови из кондуита ближе к бифуркации легочной артерии острый его угол должен быть направлен к бифуркации. Для распределения потока крови из протеза ближе к долевым ветвям, необходимо выполнить эту процедуру зеркально.

Потенциально данная техника позволяет выбрать оптимальную геометрию ПКПС на этапе формирования ДКПА. В этом случае можно регулировать угол соединения верхней полой вены и правой легочной артерии, а также выбрать место крепления ВПВ к ПЛА с учетом будущего желаемого смещения кондуита относительно ВПВ. Однако, необходимо учитывать, что к моменту проведения операции Фонтена диаметры сосудов могут увеличиться ввиду роста пациента, а угол измениться под воздействием сформированного потока крови. Данные аспекты требуют дополнительного исследования.

1.3.3 Экспериментальная проверка эффективности данной техники

Для экспериментальной проверки техники были выбраны 18 пациентов, перенесших операцию Фонтена. Для каждого из них проведен анализ КТ данных и измерены геометрические характеристики

полного кава-пульмонального соединения. Кроме того, врачом проведена оценка состояния каждого пациента на основе анамнеза по шкале от 0 до 5. Оценка складывалась из количества осложнений и их степени выраженности: 0-1 балл - осложнения гемодинамически не значимы, 5 баллов - 5 признаков тяжелых поражений всех систем (тяжелая недостаточность кровообращения, энтеропатия, тромбозы, стенозы легочных артерий). Пациент с оценкой 5 баллов умер от осложнений.

Для каждого пациента была построена расчетная область ПКПС, состоящая из четырех сосудов с заданными диаметрами и углами их соединения, и соответствующая расчетная сетка. В каждой области решались стационарные уравнения Навье-Стокса (метод конечных элементов с добавлением турбулентной модели Смагоринского для стабилизации течения). На границах втекания и вытекания были заданы условия Неймана: нормальная компонента тензора напряжений равнялась 135,0, 85, 0 г·с⁻²·м⁻¹ для ВПВ, ПЛА, НПВ, ЛЛА соответственно.

В результате расчетов были получены диссипация энергии ($E_{diss} = -E_{SVC} - E_{IVC} - E_{RPA} - E_{LPA}$, где $E_{vessel} = \int_{S_{vessel}} (p + \frac{u^2}{2}) \mathbf{u} dS$ - полная энергия жидкости на границе втекания/вытекания), энергетическая эффективность ($E_{ef} = (-E_{SVC} - E_{IVC}) / (E_{RPA} + E_{LPA})$) и сопротивление ПКПС (R_{TCPC} , см. 1.3.1). Результаты представлены на рис. 3.3: значение координаты на оси соответствует оценке состояния пациента, а по оси Y - соответствующее значение параметра. Из графиков видно, что ПКПС пациентов, не имеющих осложнений (оценка 0-1), имеют меньшие потерю энергии и сопротивление и большую энергетическую эффективность.

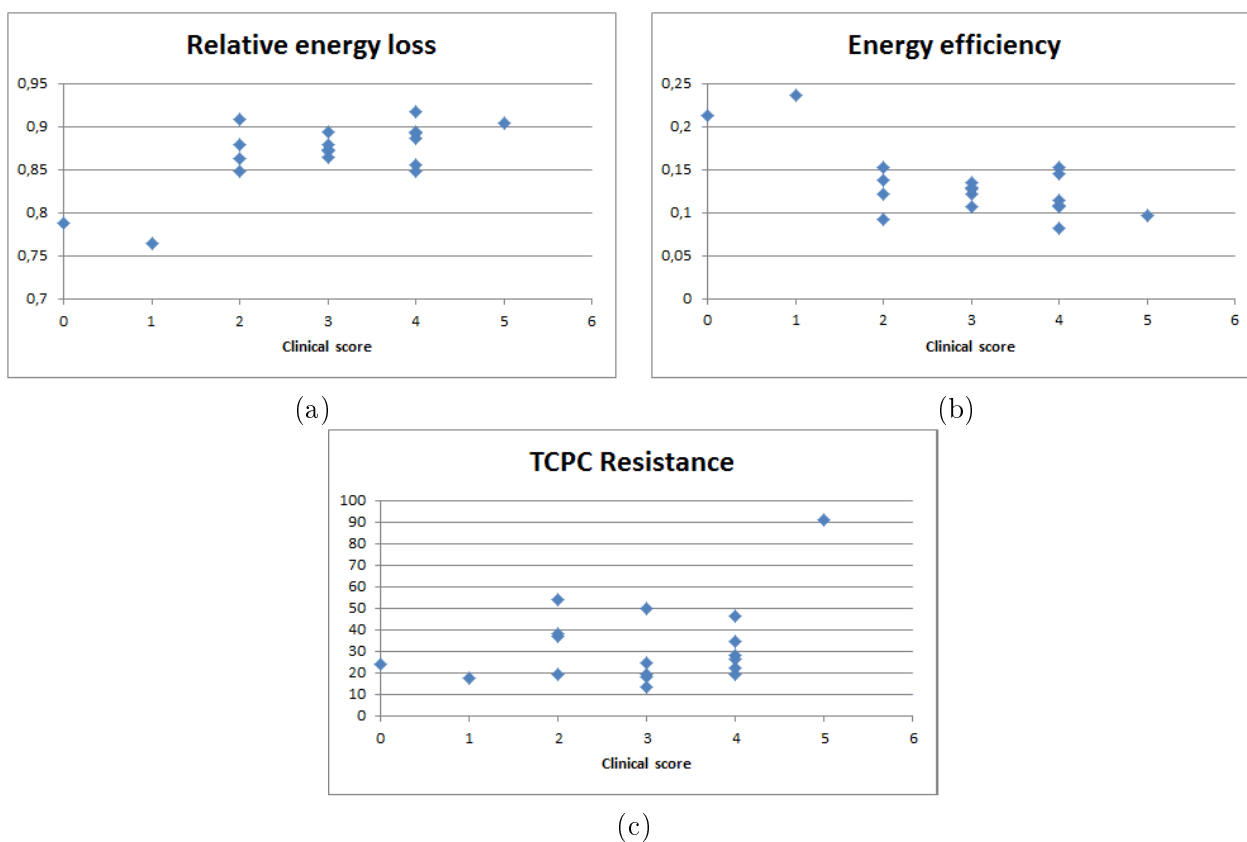


Рис. 3.3: а) Диссипация энергии, б) энергетическая эффективность и с) сопротивление полного кава-пульмонального соединения пациента в зависимости от оценки его клинического состояния.

Литература

- [1] Patient-specific input data for predictive modelling of the Fontan procedure / T. Dobroserdova, L. Yurpolskaya, Yu. Vassilevski, Svobodov A. // *Math. Model. Nat. Phenom.* — 2024. — Vol. 19. — P. 16.
- [2] Personalized Computational Hemodynamics. Models, Methods, and Applications for Vascular Surgery and Antitumor Therapy / Yu. Vassilevski, M. Olshanskii, S. Simakov, et al. — Academic Press, 2020. — P. 280.
- [3] Two-scale haemodynamic modelling for patients with Fontan circulation / T. Dobroserdova, Yu. Vassilevski, Simakov S., et al // *Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling.* — 2021. — Vol. 36, no. 5. — Pp. 267–278.
- [4] Junction conditions for one-dimensional network hemodynamic model for total cavopulmonary connection using physically informed deep learning technique / T. Dobroserdova, A. Isaev, A. Danilov, S. Simakov // *Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling.* — 2024. — Vol. 39, no. 5. — P. 16.
- [5] *Geuzaine C., Remacle J.F.* Gmsh: A 3-D Finite Element Mesh Generator with Built-in Pre- and Post-Processing Facilities // *International Journal for Numerical Methods in Engineering.* — 2009. — 09. — Vol. 79. — Pp. 1309 – 1331.
- [6] Автоматизированные технологии построения неструктурированных расчетных сеток / Ю.В. Василевский, А.А. Данилов, К.Н. Липников, Чугунов В.Н. — М.: ФИЗМАТЛИТ, ISBN 978-5-9221-1730-2, 2016.
- [7] Physically informed deep learning technique for estimating blood flow parameters in four-vessel junction after the fontan procedure / A. Isaev, T. Dobroserdova, A. Danilov, S. Simakov // *Computation.* — 2024. — Vol. 12. — P. 41.
- [8] *Simakov S.* Modern methods of mathematical modeling of blood flow using reduced order methods // *Computer research and modeling.* — 2018. — Vol. 5. — Pp. 581–604.
- [9] *Simakov S.* New boundary conditions for one-dimensional network models of hemodynamics // *Computational Mathematics and Mathematical Physics.* — 2021. — Vol. 61. — Pp. 2102–2117.

- [10] *Dobroserdova T., Olshanskii M., Simakov S.* Multiscale coupling of compliant and rigid walls blood flow models // *Int. J. Numer. Meth. Fluids.* — 2016. — Vol. 8. — Pp. 799–817.

Задача 1.4. Персонализированные модели подсистем опорно-двигательного аппарата

- Реализация движений, записанных при помощи технологии захвата движения, в биомеханической модели.
- Корректировка параметров персонализированной биомеханической редуцированной модели плечевого сустава.
- Исследование работы мышц при реализации движений головы (поворот влево, наклон назад/вперед/влево) и плеча (сгибание/разгибание, отведение) с помощью разработанной в 2023 году редуцированной модели плеча.
- Выявление вклада различных анатомических структур в нормальное функционирование шейно-плечевого отдела.

1.4.1 Реализация движений, записанных при помощи технологии захвата движения, в биомеханической модели

В ходе работы в 2023 году были проведены эксперименты для записи движений плеча и шеи при помощи технологии захвата движения (motion capture). Для реализации необходимых движений в биомеханической модели были выполнены следующие подготовительные этапы, позволяющие адаптировать биомеханическую модель под антропометрические данные испытуемого:

- масштабирование,
- настройка параметров эллипсоида, применяемого для задания движения лопатки относительно грудной клетки.

Процедура масштабирования биомеханической модели выполнялась итеративно в интерфейсе OpenSim. Масштабирование предполагает изменение размеров каждого тела скелета модели вдоль осей X , Y , Z на определённый коэффициент таким образом, чтобы виртуальные маркеры модели как можно



Рис. 4.1: Исходная модель (слева) и модель после масштабирования (справа).

точнее соответствовали экспериментальным. Производилась пропорциональная корректировка масс, тензоров инерции и точек прикрепления мышц в масштабированной модели. Оригинальная немасштабированная модель имеет набор маркеров, расположенных в тех же анатомических позициях, что и экспериментальные маркеры. Полученные результаты процедуры масштабирования соответствуют диапазону ошибок, представленному в руководстве по оценке результатов масштабирования OpenSim: среднеквадратичная ошибка составляет 1,5 см, максимальная ошибка — 2,6 см, где ошибка представляет собой расстояние между экспериментальным маркером и соответствующим маркером на модели. Изменения антропометрических свойств проиллюстрированы на рисунке 4.1.

Для обеспечения точного представления сустава, образованного лопаткой и грудной клеткой, после масштабирования были настроены параметры эллипсоида, ограничивающего движение лопатки. Для определения длин полуосей эллипсоида a, b, c и его барицентра x_0, y_0, z_0 использовался метод градиентного спуска, который на каждом временном шаге минимизирует выражение:

$$f(x_0, y_0, z_0, a, b, c) = \sum_t \left[\left(\frac{x(t) - x_0}{a} \right)^2 + \left(\frac{y(t) - y_0}{b} \right)^2 + \left(\frac{z(t) - z_0}{c} \right)^2 - 1 \right]^2 \rightarrow \min,$$

где $x(t), y(t), z(t)$ — координаты некоторой точки лопатки в момент времени t , найденные экспериментально.

Далее был применён алгоритм поиска обратной кинематики (Inverse Kinematics) [1], позволяющий определить значения обобщённых координат, которые помещают геометрическую модель в позу, оптимально соответствующую экспериментальным маркерам для каждого временного шага. Достижение наилучшего совпадения включает решение задачи взвешенных наименьших квадратов:

$$\min_{\mathbf{q}} \left[\sum_{i \in \text{markers}} \omega_i \|\mathbf{x}_i^{\text{exp}} - \mathbf{x}_i(\mathbf{q})\|^2 \right],$$

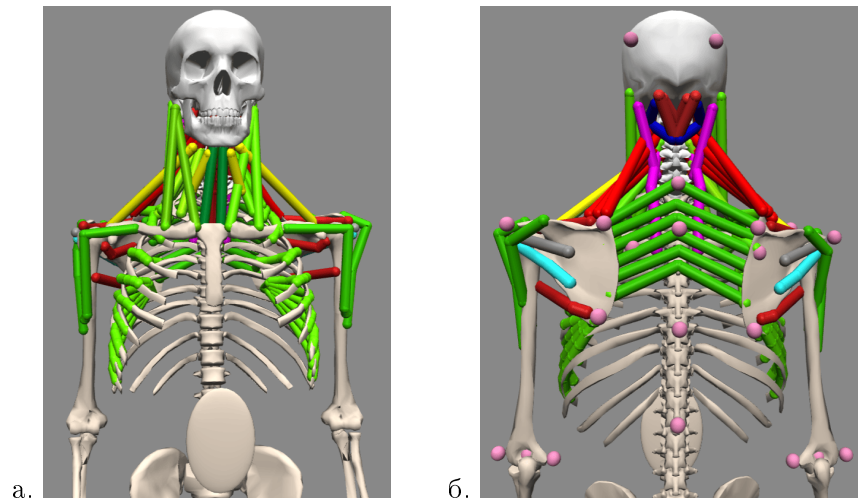


Рис. 4.2: Вид спереди (а) и вид сзади (б) биомеханической модели совместного функционирования плечевого и шейного отделов (некоторые мышцы скрыты).

Движение	RMS, м	max, м
Поворот головы влево	0.015	0.026
Наклон головы вперёд	0.014	0.026
Наклон головы назад	0.015	0.025
Наклон головы вправо	0.014	0.026
Сгибание плеча	0.023	0.040
Разгибание плеча	0.017	0.037
Отведение плеча	0.021	0.039
Подъём плеча	0.020	0.039

Таблица 4.1: Ошибки алгоритма обратной кинематики для различных движений.

где \mathbf{q} — вектор обобщённых координат, которые необходимо найти, $\mathbf{x}_i^{\text{exp}}$ — положение маркера i , измеренное во время эксперимента, $\mathbf{x}_i(\mathbf{q})$ — положение соответствующего маркера модели. Во время движений головы веса маркеров ω_i выбирались равными, тогда как во время движений руки более высокий вес назначался маркерам лопатки. В частности, веса, назначенные маркерам лопатки, устанавливались равными 2, 3, 6, веса маркеров локтя — равными 2, в то время как веса остальных маркеров равнялись 1. Окончательная модель, описывающая совместное функционирование шеи и плеча, включает 23 мышцы (Рисунок 4.2).

Из-за большого количества маркеров было сложно добиться точности в пределах заданного в руководстве OpenSim диапазона ошибок для всех маркеров. Воспроизведённые движения показаны на рисунке 4.3. Все мышцы не пересекали кости во время всех изученных движений.

Таблица 4.1 представляет ошибки алгоритма обратной кинематики для исследуемых движений. Согласно рекомендациям OpenSim, максимальная ошибка маркеров не должна превышать 2–4 см, а среднеквадратичная — 2 см.

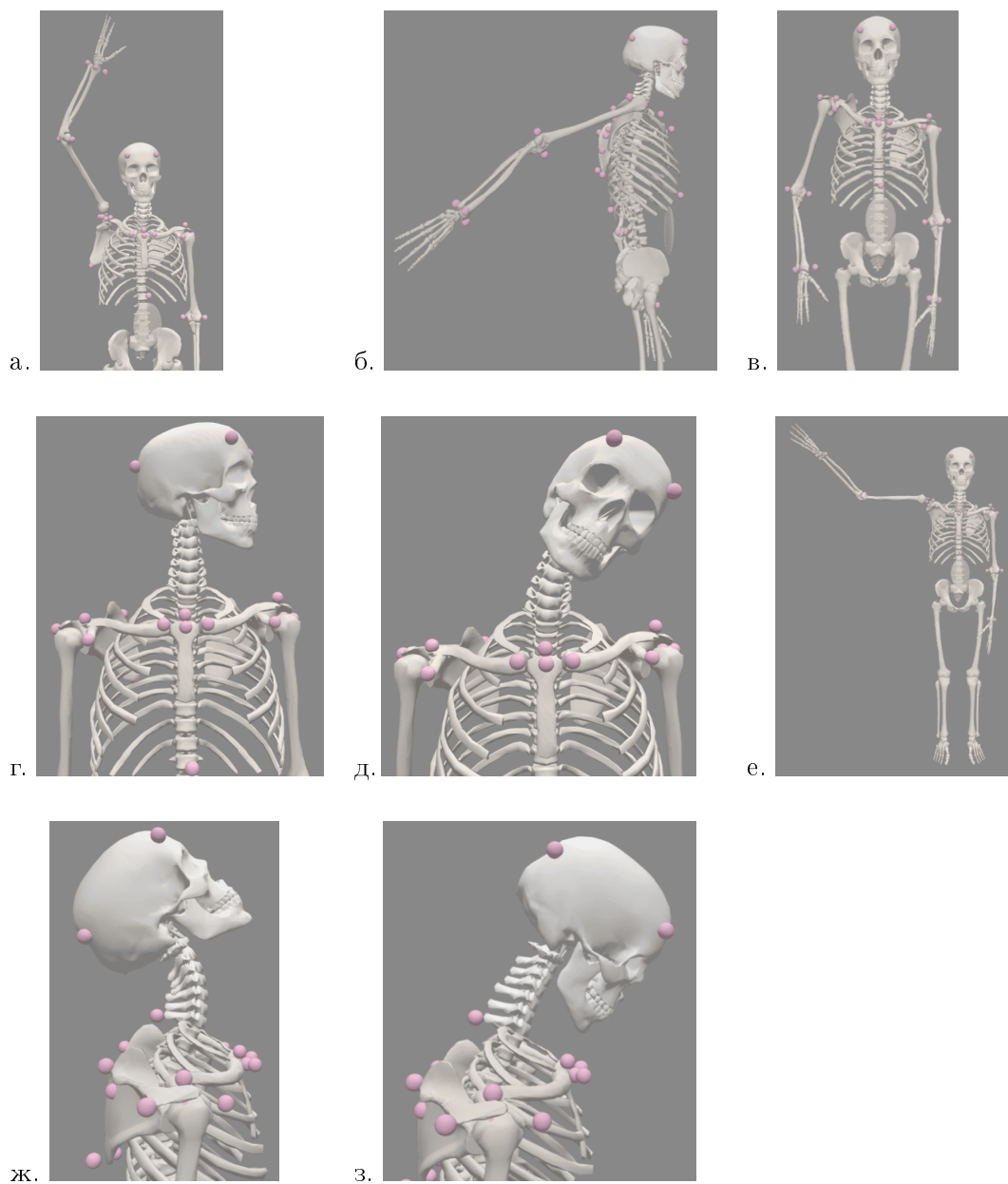


Рис. 4.3: Движения, записанные в ходе эксперимента с захватом движений: а. Отведение плеча. б. Разгибание плеча. в. Подъём плеча. г. Поворот головы влево. д. Наклон головы влево. е. Сгибание плеча. ж. Наклон головы назад. з. Наклон головы вперёд.

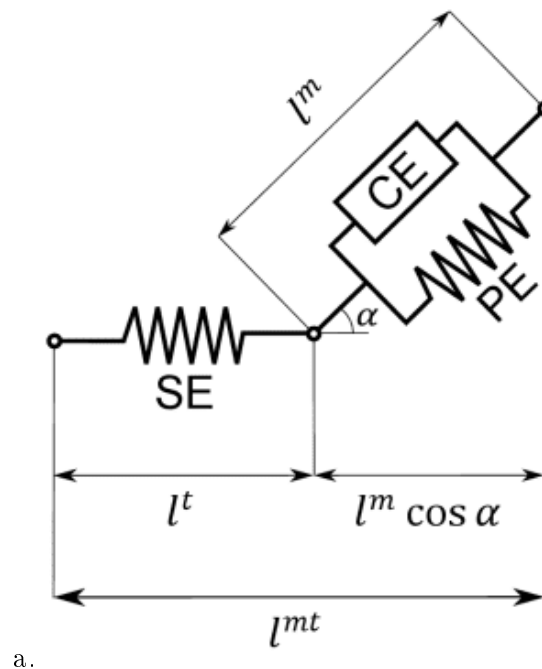


Рис. 4.4: Изображение элементов модели мышцы типа Хилла.

1.4.2 Корректировка параметров персонализированной биомеханической редуцированной модели плечевого сустава

Настройка параметров является одним из ключевых этапов построения биомеханической модели. В данном исследовании настройка параметров проводилась для положения покоя с целью моделирования основного пострального тонуса, т.е. минимальной непрерывной мышечной активности, необходимой для поддержания позы испытуемого в положении стоя [2]. Основной постральный тонус выражается через параметры модели мышц. Модель мышцы типа Хилла, используемая в OpenSim, описана в [3]. Мышцы представлены в виде набора волокон, которые прикрепляются к сухожилию под углом прикрепления α . Мышечное волокно состоит из двух элементов: сократительного элемента и параллельного эластичного элемента, соединённых с эластичным сухожилием. Сократительный элемент и параллельный эластичный элемент соответствуют активным и пассивным силам мышцы. Схематическое изображение элементов модели приводится на рисунке 4.4.

Схематическое изображение кривых зависимости силы от длины для пассивной, активной и общей силы, соответствующих моделям типа Хилла, показано на рисунке 4.5а. Кривая зависимости активной силы от длины для модели мышцы Милларда представлена на рисунке 4.5б.

Длина сухожилия в состоянии покоя и угол прикрепления для каждой мышцы определялись путём настройки (после масштабирования) параметров мышц в исходной модели. Длина мышечного волокна

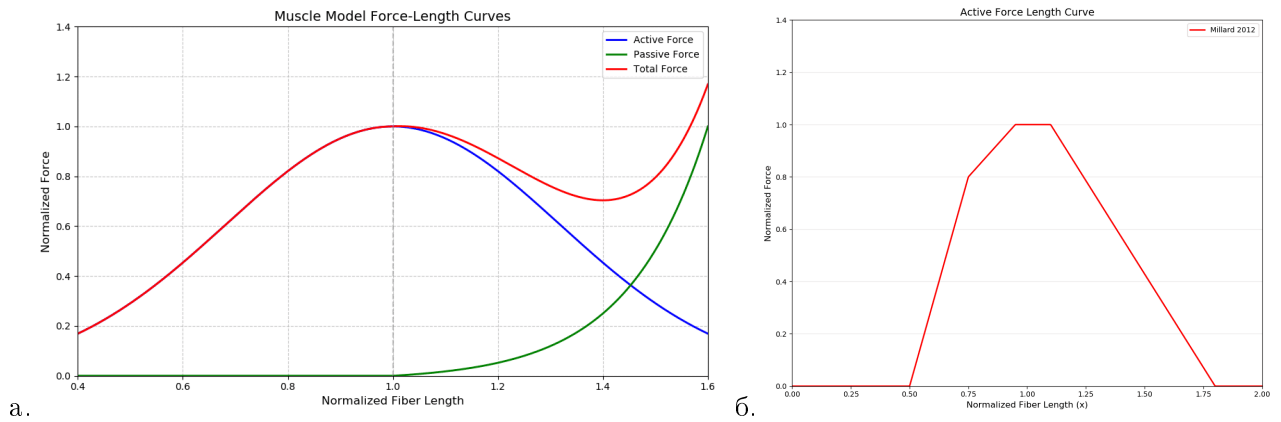


Рис. 4.5: а. Схематическое изображение кривых зависимости пассивной, активной и общей силы от длины для моделей типа Хилла. б. Кривая зависимости активной силы от длины для модели мышцы Милларда.

l^M в положении стоя вычисляется по формуле

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

где l^{MT} — длина мышечно-сухожильного комплекса, l_s^T — длина сухожилия в состоянии покоя, α — угол прикрепления. Оптимальная длина волокна определяется по формуле

$$l_{opt} = \frac{l^M}{l_{max}^M k},$$

где k — коэффициент, определяющий начальное натяжение мышцы, l_{max}^M — максимальная активная нормализованная длина волокна, равная 1.8123 в модели мышцы Милларда [4]. Указанная настройка параметров позволяет задать небольшие начальные напряжения в мышцах шеи и плечевого пояса, которые соответствуют основному поструральному тону. Настройка параметров была автоматизирована с использованием Python-версии библиотеки OpenSim.

1.4.3 Исследование работы мышц при реализации движений головы (поворот влево, наклон назад/вперед/влево) и плеча (сгибание/разгибание, отведение) с помощью разработанной в 2023 году редуцированной модели плеча

После настройки параметров мышц и определения обобщенных координат \mathbf{q} для каждого движения были определены индивидуальные силы мышц и их активации, которые приводят модель в требуемые

положения в любой момент времени для каждого конкретного движения. Каждое движение описывается уравнением динамического взаимодействия нескольких тел:

$$M(\mathbf{q})\ddot{\mathbf{q}} = \mathbf{C}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) + \mathbf{G}(\mathbf{q}) + \mathbf{F}, \quad (4.1)$$

где $\mathbf{q}(t)$, $\dot{\mathbf{q}}(t)$, $\ddot{\mathbf{q}}(t)$ — обобщенные координаты, скорость и ускорение, соответственно, $\mathbf{C}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}})$ — член, описывающий кориолисовы и центробежные силы, $\mathbf{G}(\mathbf{q})$ — сила тяжести, \mathbf{F} — прочие силы, приложенные к модели.

Инструмент Static Optimization в OpenSim использует известное движение модели и решение уравнения (4.1) для определения неизвестных обобщенных сил путем минимизации целевой функции:

$$J = \sum_{m=1}^n a_m^2 \longrightarrow \min \quad (4.2)$$

при условии:

$$\sum_{m=1}^n [a_m f(F_m^0, l_m, v_m)] r_{m,j} = \tau_j.$$

Здесь для оси сустава j $r_{m,j}$ — плечо момента мышцы m относительно этой оси, τ_j — обобщенная сила, действующая относительно оси; n — число мышц в модели; $a_m = a_m(t)$ — уровень активации мышцы m на дискретном временном шаге; F_m^0 — максимальная изометрическая сила мышцы m , l_m — длина мышцы m , v_m — скорость укорочения мышцы m , $f(F_m^0, l_m, v_m) = F_0^m \mathbf{f}^L(l_m^M) \mathbf{f}^V(v_m^M)$ — поверхность "сила-длина-скорость" для мышцы m , где $\mathbf{f}^L(l_m^M)$ и $\mathbf{f}^V(v_m^M)$ — кривые активной силы-длины и силы-скорости, соответственно.

При выбранных параметрах мышц решение задачи статической оптимизации может быть недостижимым для некоторых движений, поскольку модель не является полностью анатомически корректной. Для компенсации неточности модели в неё были добавлены дополнительные элементы — координатные актуаторы для каждой разблокированной координаты в соответствии с [5]. Основная роль координатных актуаторов заключается в применении к телам модели сил $f(t) = f^{opt} \xi(t)$ и их моментов, зависящих от функции управления $\xi(t)$ и текущего состояния модели. Оптимальная сила актуатора f^{opt} — параметр, задаваемый пользователем. Действие актуаторов важно для компенсации неточностей в измерениях движения, структуре мышц и выборе параметров. Однако во время выполнения движения влияние актуаторов должно быть минимизировано. Для избежания чрезмерного использования актуаторов по сравнению с обычными мышцами в процессе выполнения движения, важно минимизировать оптимальную силу актуатора f^{opt} : большие значения f^{opt} могут привести к активному функционированию актуаторов, даже при низких значениях $\xi(t)$. В то же время действие актуаторов должно быть достаточным для выполнения движения. В ходе работы на данном этапе было подобрано минимальное значение оптимальной силы актуатора, при котором задача статической оптимизации могла быть решена. Для движений головы значения оптимальной силы для актуатора было выбрано $f^{opt} = 0.1$ Н, для движений руки $f^{opt} = 1.0$ Н.

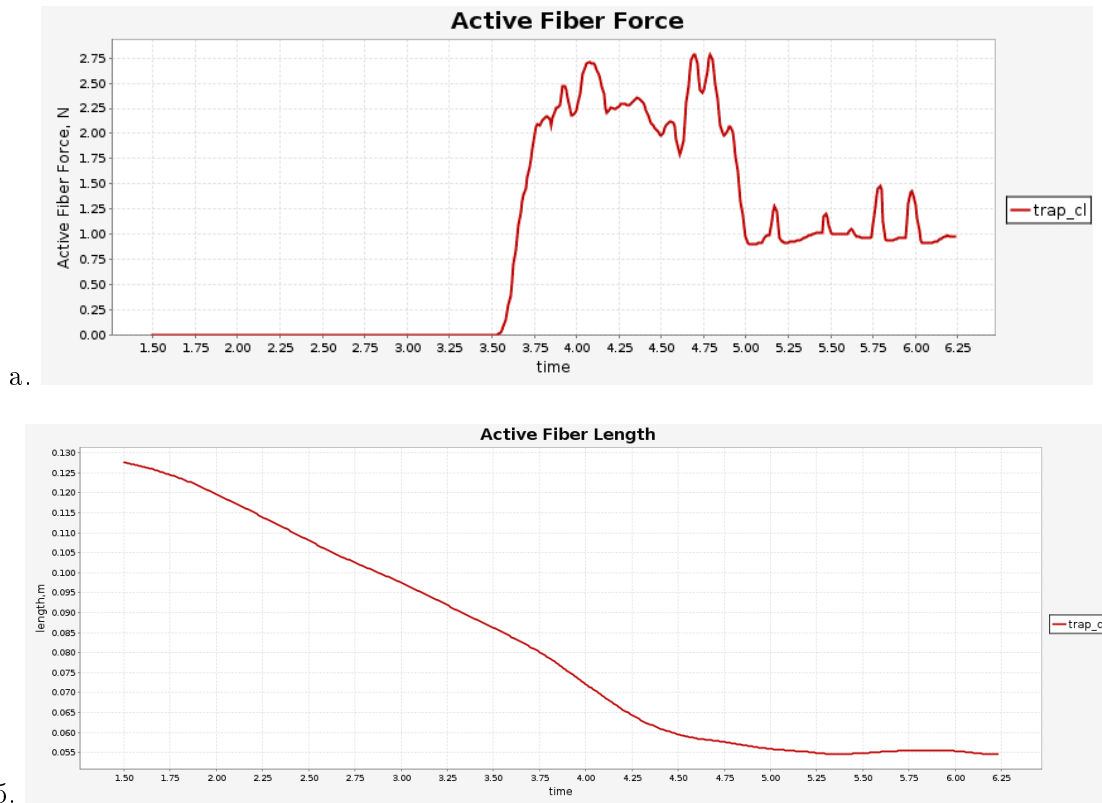


Рис. 4.6: Сила (а) и длина (б) компонента трапециевидной мышцы во время абдукции плеча.

1.4.4 Выявление вклада различных анатомических структур в нормальное функционирование шейно-плечевого отдела

Для каждого движения работа мышцы определяется выражением:

$$W = \int_{t_0}^{t_1} F \frac{dl}{dt} dt,$$

где t_0 , t_1 — начальный и конечный момент времени движения, F — сила мышцы вдоль сухожилия, а l^M — длина мышечного волокна. В качестве примера вычисленные изменения силы и длины для компонента трапециевидной мышцы, прикрепленного к ключице, во время отведения плеча представлены на Рисунке 4.6.

На основе вычисленной работы для каждой мышцы была построена круговая диаграмма, иллюстрирующая вклад мышц в каждое движение. Вычисленные вклады мышц в движения головы (поворот головы влево и наклоны головы вперед/назад/вправо) представлены на Рисунке 4.7, а вклады мышц в движения плеча (сгибание/разгибание, абдукция и поднятие плеч) — на Рисунке 4.8.

Пример распределения положительной работы для различных мышц во время сгибания (в Джоулях) представлен в Таблице 4.2.

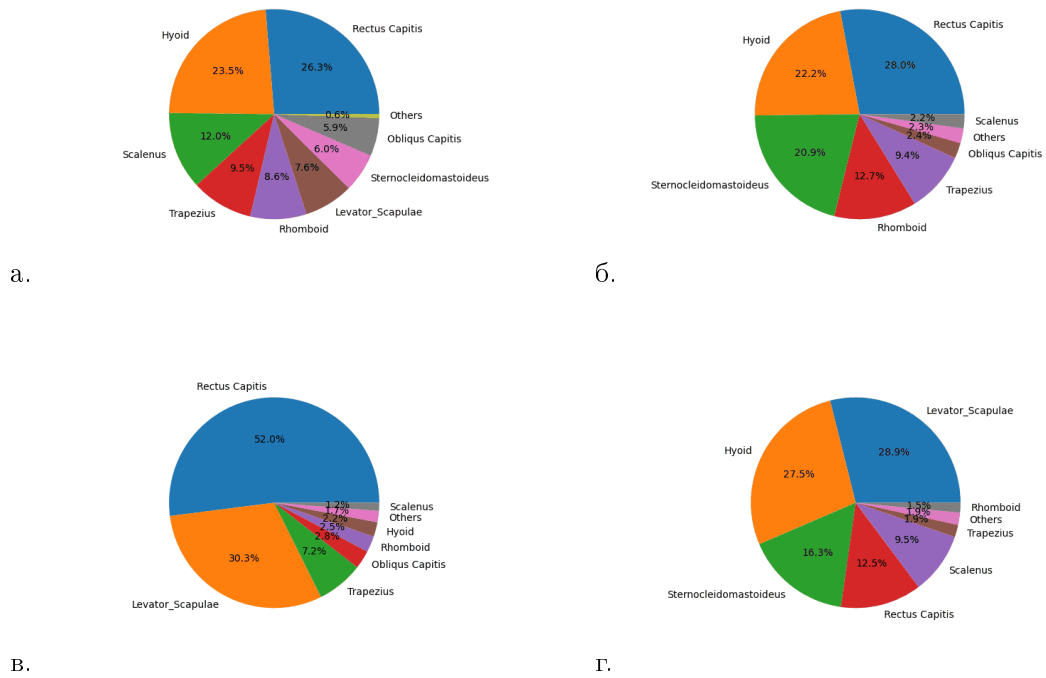


Рис. 4.7: Вклад мышц в движения головы: а. Поворот головы влево. б. Наклон головы вперед. в. Наклон головы назад. г. Наклон головы вправо.

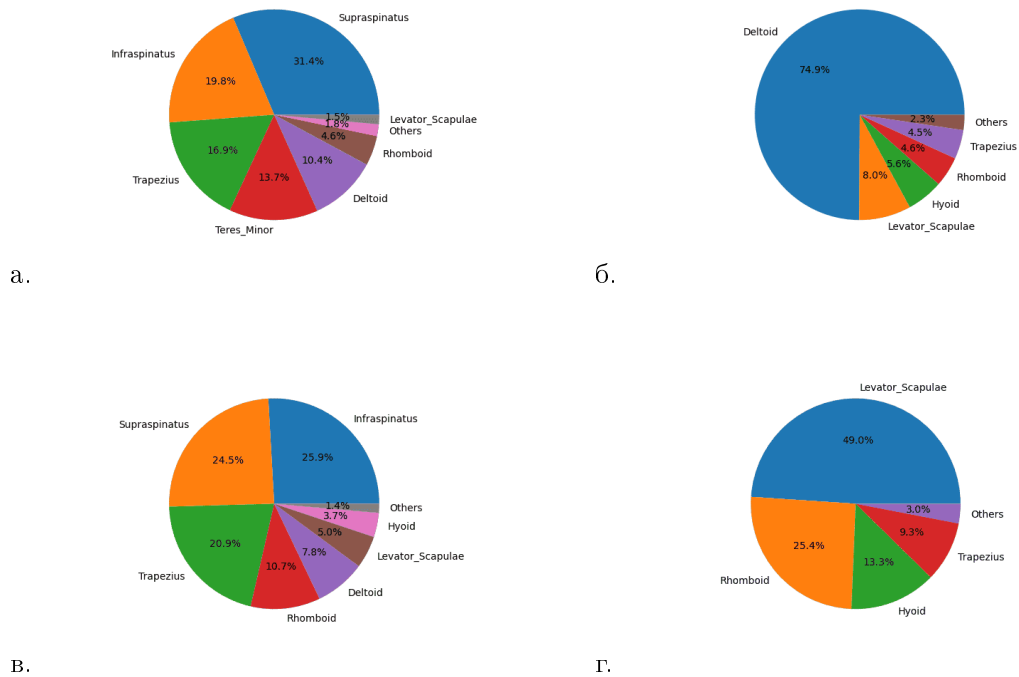


Рис. 4.8: Вклад мышц в движения правого плеча: а. Сгибание плеча. б. Разгибание плеча. в. Абдукция плеча. г. Поднятие плеча.

Мышца	Работа, Джоуль
Надостная	2.844
Подостная	1.793
Трапецевидная	1.531
Малая круглая	1.238
Дельтовидная	0.945
Ромбовидная	0.415
Мышца, поднимающая лопатку	0.132

ТАБЛИЦА 4.2: Положительная работа (Дж), выполненная мышцами во время сгибания плеча.

Вычисленные мышечные вклады, полученные для движений головы, а также для сгибания плеча, качественно согласуются с анатомическими данными и информацией из медицинской практики. При каждом из четырех движений задействованы как мышцы плеча, так и шеи. Вычисленные мышечные вклады для подъема плеча, сгибания и отведения можно сравнить с [6]. Оба исследования демонстрируют значительную роль трапецевидной и дельтовидной мышц при сгибании и отведении, а также мышцы, поднимающей лопатку, при подъеме. Однако результаты настоящей работы продемонстрировали основное влияние надостной и подостной мышц плеча в сгибании и отведении. Различия могут быть объяснены различиями в архитектуре модели, в частности, в подходах к моделированию мышц (места прикрепления, структура мышц, параметры), например, трапецевидная мышца в данной работе представлена с использованием большего числа мышечных компонент, которые не пересекают лопатку. Модель [6] содержит в основном мышцы плеча и спины, тогда как в используемой в данной работе модели присутствует большое количество шейных мышц.

Таблица 4.2 демонстрирует, что мышечная работа, выполненная при сгибании плеча, распределена среди большего количества мышц, чем в [6], и также выполняется шейными и спинными мышцами. Общая работа в используемой модели ниже, что может быть объяснено тем, что рассматривалась только фаза подъема руки, а также к потенциальным различиям в скорости сгибания в обоих исследованиях. В исследовании [6] использовался алгоритм СМС (Computed Muscle Control) OpenSim для вычисления мышечных сил при движениях.

1.4.4.1 Выводы

В ходе работы на данном этапе движения, записанные при помощи технологии захвата движения, были реализованы в биомеханической модели, разработанной в 2023 году. Параметры персонализированной биомеханической редуцированной модели плечевого сустава были скорректированы с учетом особенностей функционирования мышц в положении стоя. Кроме того, было проведено исследование работы мышц при реализации движений головы (поворот влево, наклон назад/вперед/влево) и плеча (сгибание/разгибание, отведение) с помощью разработанной в 2023 году редуцированной модели плеча, а также численно исследовано влияние различных анатомических структур на нормальное функционирование шейно-плечевого отдела. Реализованная последовательность процедур имеет некоторые ограничения:

- результаты экспериментов методом захвата движения могут содержать артефакты, связанные с движением кожи и мягких тканей. Это ограничение особенно заметно при попытке зафиксировать движения лопатки — самой активной кости при движениях плеча. Для более точного определения траектории движения лопатки требуются альтернативные алгоритмы;
- статическая оптимизация вычисляет активную силу волокон вдоль сухожилия, предполагая, что сухожилия являются жесткими и не учитывают вклад параллельного эластичного элемента мышц. Для получения более реалистичных результатов необходимо использовать альтернативные алгоритмы для расчета мышечных сил, например, алгоритм OpenSim Computed Muscle Control;
- представление точек прикрепления мышц и параметров мышц, включая начальные натяжения в положении стоя, является неточным. Эти параметры в большой степени зависят от особенностей анатомии конкретного пациента.

Литература

- [1] OpenSim: Open-Source Software to Create and Analyze Dynamic Simulations of Movement / Scott L. Delp, Frank C. Anderson, Allison S. Arnold et al. // *IEEE Transactions on Biomedical Engineering*. — 2007. — Vol. 54. — Pp. 1940–1950. — URL: <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:535569>.
- [2] *Ivanenko Yury, Gurfinkel Victor*. Human Postural Control // *Frontiers in Neuroscience*. — 2018. — 03. — Vol. 12.
- [3] *Zajac Felix E*. Muscle and tendon: properties, models, scaling, and application to biomechanics and motor control. // *Critical reviews in biomedical engineering*. — 1989. — Vol. 17 4. — Pp. 359–411. — URL: <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:25888803>.
- [4] Flexing Computational Muscle: Modeling and Simulation of Musculotendon Dynamics / Matthew Millard, Thomas Uchida, Ajay Seth, Scott Delp // *Journal of Biomechanical Engineering*. — 2013. — 02. — Vol. 135. — P. 021005.
- [5] OpenSim: A musculoskeletal modeling and simulation framework for in silico investigations and exchange / Ajay Seth, Michael Sherman, Jeffrey Reinbolt, Scott Delp // *Procedia IUTAM*. — 2011. — 12. — Vol. 2. — Pp. 212–232.
- [6] Muscle Contributions to Upper-Extremity Movement and Work From a Musculoskeletal Model of the Human Shoulder / Ajay Seth, Meilin Dong, Ricardo Matias, Scott Delp // *Frontiers in Neurorobotics*. — 2019. — 11. — Vol. 13.

2. Геофизика

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

- Реализация методов локального повышения разрешения по типу одно- и двунаправленного вложения областей.
- Испытание блока численного решения уравнений гидротермодинамики атмосферы с вложенным регионом повышенного разрешения на идеализированных задачах. Изучение характера численного решения в регионах повышенного разрешения.
- Совместная настройка параметров блока стохастических возмущений полулагранжевых траекторий и блока стохастического возмущения параметров и тенденций параметризаций. Оценка разброса ансамбля среднесрочных прогнозов.

2.1.1 Реализация методов локального повышения разрешения по типу одно- и двунаправленного вложения областей.

Повышение пространственного разрешения моделей атмосферы является одним из основных способов повышения точности метеорологических прогнозов. В области моделирования изменений климата сетки высокого разрешения необходимы для исследования трендов повторяемости и интенсивности экстремальных явлений погоды, так как подавляющая часть таких явлений связана с мезомасштабными атмосферными процессами (1-100 км). Также, применение моделей высокого разрешения в области климатических исследований позволит воспроизводить на сетке моделей динамику конвективных кластеров, которая является одним из основных источников неопределенности в проекциях будущего климата.

В области прогноза погоды сейчас применяются модели атмосферы с горизонтальным разрешением около 10 км, в будущем планируется переход к моделям с разрешением 3-5 км. Среднее разрешение моделей атмосферы, участвующих в проекте по изучению изменения климата CMIP6 – около 100 км. Существует также проект HighResMIP по моделированию климата моделями высокого разрешения, который предполагает шаг сетки в атмосферной части 10–20 км. Разрешение динамики облачных (конвективных) кластеров потребует сетки с шагом 3-5 км или менее.

Глобальное повышение разрешения модели до требуемого уровня часто приводит к чрезмерно высоким требованиям к вычислительным ресурсам. Решением этой проблемы, отчасти, может быть локальное повышение разрешения в регионах, представляющих наибольший интерес [1–3]. Существует два подхода к локальному повышению разрешения: однонаправленное вложение расчетной сетки, предполагающее наличие региональной модели высокого разрешения, которая получает граничные условия от глобальной модели с более грубой сеткой, и двунаправленное вложение, при котором существует обратная связь между региональной моделью высокого разрешения и глобальной моделью грубого разрешения, т.е. решение более грубой модели притягивается к решению более точной в подобласти региона, покрываемого моделью высокого разрешения. К типу двунаправленного вложения также относится подход, при котором используется одна глобальная модель, имеющая сетку переменного разрешения, которая намеренно сгущена в определенном регионе [4].

Мы реализовали три подхода к локальному повышению разрешения в разрабатываемой новой негидростатической модели:

1. сгущение сетки с помощью неразрывного преобразования Шмидта на сфере;
2. вложение блока сетки с более высоким разрешением;
3. «классическое» однонаправленное вложение, когда региональная модель получает граничные условия от глобальной.

Первые два подхода относятся к классу двунаправленного вложения, так как имеется обратная связь между регионами высокого и низкого разрешения.

2.1.1.1 Преобразование Шмидта

Преобразование Шмидта [5] меняет географическую широту точки на сфере по следующей формуле

$$\sin \varphi^* = \frac{D + \sin \varphi}{1 + D \sin \varphi}, \quad (1.1)$$

где $D \in [0, 1]$ - параметр сгущения. Географическая долгота при этом остается неизменной. Для преобразования (1.1) Северный и Южный полюса $\phi = \pm\pi/2$ являются неподвижными точками, остальные точки притягиваются к Северному полюсу, однако, путем применения матриц поворота, в качестве

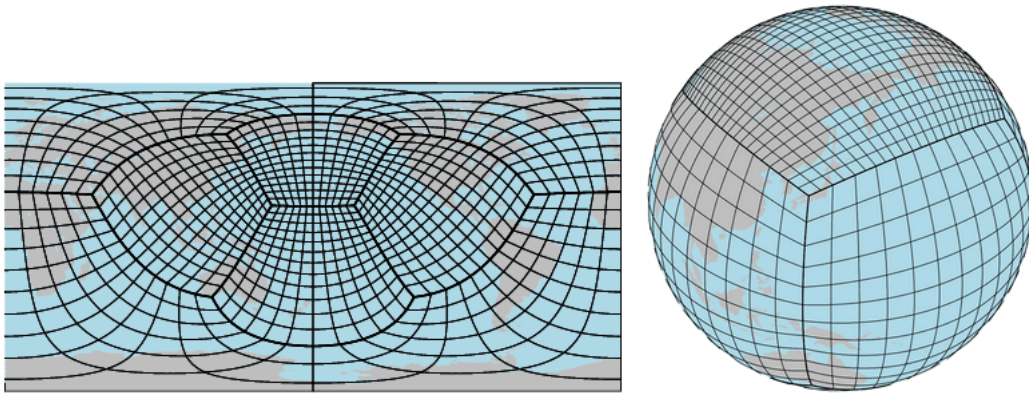


Рис. 1.1: Слева - сетка кубическая сфера после преобразования Шмидта ($D = 0,5$) поворота на 45° . Справа - сетка кубическая сфера с повышением разрешения на одной из граней.

полюса сгущения может быть выбрана любая точка на сфере (см. Рис 1.1). Преобразование Шмидта может применяться в сочетании с любой сеткой на сфере, также оно непрерывно и поэтому не вносит дополнительных особенностей в сетку кубическая сфера, кроме уже существующих образов вершин и ребер куба.

2.1.1.2 Вложение блока более высокого пространственного разрешения

Сетка кубическая сфера, применяемая в разрабатываемой негидростатической модели атмосферы, является многоблочной, логически прямоугольной криволинейной сеткой, т.е. сеткой состоящей из нескольких блоков, каждый из которых логически прямоугольный. Для пространственной аппроксимации на таких сетках мы применяем метод конечных разностей со свойством суммирования по частям [6]. Свойство суммирования по частям (Summation By Parts - SBP) - это дискретный аналог интегрирования по частям. В случае, когда это свойство выполняется для одномерных операторов дифференцирования, построение двух- и трехмерных операторов по методу тензорного произведения и постановка граничных условий на ребрах куба позволяет добиться свойства антисопряженности дискретных операторов градиента и дивергенции на сетке кубическая сфера [7]:

$$\int_{\Omega} f \nabla \cdot \vec{v} d\Omega + \int_{\Omega} \nabla f \cdot \vec{v} d\Omega = 0. \quad (1.2)$$

Таким образом, применение SBP метода позволяет строить устойчивые пространственные аппроксимации высокого порядка точности для уравнений гидродинамики на сетке кубическая сфера, обладающие дискретными аналогами законов сохранения массы и энергии [7].

В рамках SBP-подхода существует методология построения аппроксимаций на сетках, неконформных на границах блоков [8, 9], т.е. когда на общей границе двух блоков точки сетки не совпадают. В нашем случае, примером такой сетки является кубическая сфера с повышенным разрешением одного из блоков (на одной из граней куба, см. Рис 1.1). При этом продолжает выполняться свойство (1.2),

что приводит к устойчивости пространственной аппроксимации, численным аналогам законов сохранения. В рамках проекта мы впервые реализовали метод [8, 9] для аппроксимации уравнений динамики атмосферы по горизонтали на сетке кубическая сфера. Ниже описываются детали метода.

2.1.1.2.1 Дифференциальные операторы первого порядка

Одномерный случай. Рассмотрим отрезок $[a, b]$ с равномерной сеткой из n точек, $\Delta x = (b-a)/(n-1)$. Матрица D , аппроксимирующая первую производную на этом отрезке, называется SBP-производной, если удовлетворяет свойству суммирования по частям:

$$g^T H D f + (D g)^T H f = -g_1 f_1 + g^n f^n, \quad (1.3)$$

где f, g — произвольные сеточные функции, H — некоторая положительно-определенная матрица. Мы рассматриваем случай диагональных матриц H , тогда SBP-операторы первой производной внутри области совпадают с обычными центральными разностями порядка $2p$ и имеют порядок аппроксимации p у границ, тогда матрица H — квадратурная матрица на $[a, b]$, точная для полиномов до x^{2p} [6].

Двумерный случай. Рассмотрим двумерную область $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$, дифференцируемую скалярную $f \in C^1(\Omega)$ и векторную $\vec{v} = [u, v]^T \in C^1(\Omega)$ функции. Тогда *многомерное свойство интегрирования по частям* запишется в виде:

$$\int_{\Omega} f \nabla \cdot \vec{v} d\Omega + \int_{\Omega} \nabla f \cdot \vec{v} d\Omega = \int_{\Gamma} f (\vec{n} \cdot \vec{v}) d\Gamma.$$

или

$$(f, \nabla \cdot \vec{v}) + (\nabla f, \vec{v}) = \langle f, \vec{n} \cdot \vec{v} \rangle,$$

если ввести скалярное произведение во всей области (\cdot, \cdot) и на ее границе $\langle \cdot, \cdot \rangle$.

Случай одного блока. Введем равномерную сетку с одинаковыми шагами $\Delta x, \Delta y$ на n узлов вдоль каждого направления. Функция двух переменных $f(x, y) \in C^1(\Omega)$ будет представляться вектором значений в узлах сетки:

$$\mathbf{f} = [f_{1,1}, \dots, f_{1,n}, f_{2,1}, \dots, f_{n,n}]^T \in \mathbb{R}^{n^2}, \quad f_{i,j} = f(x_i, y_j).$$

Векторные сеточные функции определяются своими компонентами.

Одномерные SBP-операторы расширяются на двумерную область с помощью Кронекерова произведения: $\mathbf{D}^x = D \otimes E$, $\mathbf{D}^y = E \otimes D$, $\mathbf{H}^x = H \otimes E$, $\mathbf{H}^y = E \otimes H$, $\mathbf{e}_W = e_1^T \otimes E$, $\mathbf{e}_E = e_n^T \otimes E$, $\mathbf{e}_S = E \otimes e_1^T$, $\mathbf{e}_N = E \otimes e_n^T$, $\mathbf{H} = \mathbf{H}_x \mathbf{H}_y = H \otimes H$, где D, H и E — матрицы $n \times n$ SBP производной, SBP-нормы и единичная, соответственно, e_i — вектор размера n с равной единице i -ой компонентой и нулевыми остальными.

Определим внутреннее и граничное дискретные скалярные произведения для сеточных полей:

$$(\mathbf{f}, \mathbf{g})_{\mathbf{H}} = \mathbf{f}^T \mathbf{H} \mathbf{g}, \quad (\vec{\mathbf{v}}, \vec{\mathbf{w}})_{\mathbf{H}} = \vec{\mathbf{v}}^T \begin{bmatrix} \mathbf{H} \\ \mathbf{H} \end{bmatrix} \vec{\mathbf{w}},$$

$$\langle \mathbf{f}, \mathbf{g} \rangle_{\mathbf{H}} = \mathbf{f}^T \mathbf{e}_E^T \mathbf{H} \mathbf{e}_E \mathbf{g} + \mathbf{f}^T \mathbf{e}_W^T \mathbf{H} \mathbf{e}_W \mathbf{g} + \mathbf{f}^T \mathbf{e}_N^T \mathbf{H} \mathbf{e}_N \mathbf{g} + \mathbf{f}^T \mathbf{e}_S^T \mathbf{H} \mathbf{e}_S \mathbf{g}.$$

Далее можно ввести операторы относительной завихренности, дивергенции и градиента:

$$\zeta(u(x, y), v(x, y)) = -\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \approx \mathbf{C} \begin{bmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{v} \end{bmatrix} = -\mathbf{D}^y \mathbf{u} + \mathbf{D}^x \mathbf{v},$$

$$\nabla \cdot (u(x, y), v(x, y)) = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \approx \mathbf{D} \begin{bmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{v} \end{bmatrix} = \mathbf{D}^x \mathbf{u} + \mathbf{D}^y \mathbf{v},$$

$$\nabla(f(x, y)) = \left[\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y} \right]^T \approx \mathbf{G} \mathbf{f} = \begin{bmatrix} \mathbf{D}^x \mathbf{f} \\ \mathbf{D}^y \mathbf{f} \end{bmatrix}.$$

Воспользовавшись *SBP*-свойством каждого одномерного оператора мы приходим к *многомерному свойству суммирования по частям*: для любых $\mathbf{f}, \vec{\mathbf{v}} = [\mathbf{u}^T, \mathbf{v}^T]^T$ имеем:

$$\mathbf{f}^T \mathbf{H} \mathbf{D} \vec{\mathbf{v}} + \vec{\mathbf{v}}^T \begin{bmatrix} \mathbf{H} \\ \mathbf{H} \end{bmatrix} \mathbf{G} \mathbf{f} = \underbrace{(\mathbf{e}_E \mathbf{f})^T \mathbf{H} \mathbf{e}_E \mathbf{u}}_{\text{Eastern flux}} - \underbrace{(\mathbf{e}_W \mathbf{f})^T \mathbf{H} \mathbf{e}_W \mathbf{u}}_{\text{Western flux}} + \underbrace{(\mathbf{e}_N \mathbf{f})^T \mathbf{H} \mathbf{e}_N \mathbf{v}}_{\text{Northern flux}} - \underbrace{(\mathbf{e}_S \mathbf{f})^T \mathbf{H} \mathbf{e}_S \mathbf{v}}_{\text{Southern flux}} \quad (1.4)$$

или в форме скалярных произведений:

$$(\mathbf{f}, \mathbf{D} \vec{\mathbf{v}})_{\mathbf{H}} + (\vec{\mathbf{v}}, \mathbf{G} \mathbf{f})_{\mathbf{H}} = \langle \mathbf{f}, \vec{\mathbf{n}} \cdot \vec{\mathbf{v}} \rangle_{\mathbf{H}},$$

что является прямым аналогом свойства интегрирования по частям в двумерном случае.

Случай двухблочной сетки. Теперь рассмотрим двухблочный вариант с разделением вдоль оси y : $\Omega_L = [0, \frac{1}{2}] \times [0, 1], \Omega_R = [\frac{1}{2}, 1] \times [0, 1]$. Введем в каждом блоке сетку из $n \times n$ и $m \times m$ узлов соответственно. Множество узлов, соответствующих точке $x = \frac{1}{2}$ будем называть *интерфейсом* блоков Рис. 1.2.

В каждом блоке построим *SBP*-операторы с соответствующими операторами норм и операторами взятия границы, а также операторы дивергенции, градиента и относительной завихренности. Отличать блок, как и ранее, будем с помощью индексов L, R . Во всей области так же будут действовать блочно-диагональные операторы вида:

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} \mathbf{D}^L & \\ & \mathbf{D}^R \end{bmatrix}, \quad \mathbf{G} = \begin{bmatrix} \mathbf{G}^L & \\ & \mathbf{G}^R \end{bmatrix}, \quad \mathbf{C} = \begin{bmatrix} \mathbf{C}^L & \\ & \mathbf{C}^R \end{bmatrix}. \quad (1.5)$$

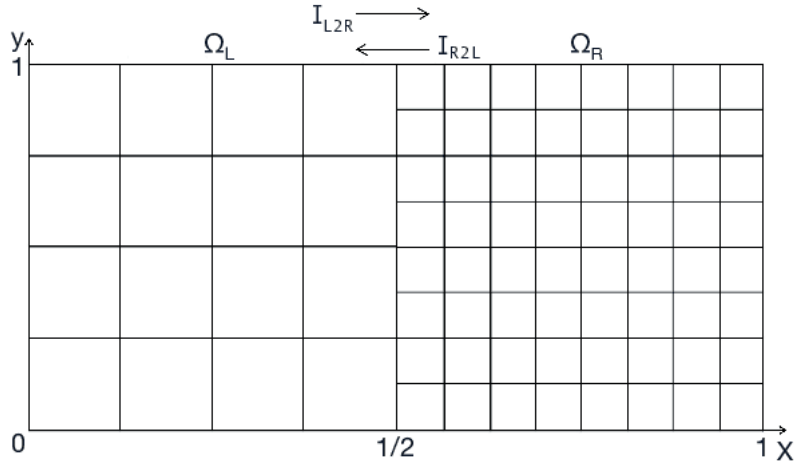


Рис. 1.2: Двумерная плоская дублочная сетка.

Пользуясь уравнением (1.4) в каждом блоке придем к равенству:

$$\mathbf{f}^T \mathbf{H} \mathbf{D} \vec{\mathbf{v}} + \vec{\mathbf{v}} \begin{bmatrix} \mathbf{H} \\ \mathbf{H} \end{bmatrix} \mathbf{G} \mathbf{f} = \underbrace{(\mathbf{e}_N^L \mathbf{f}_L)^T H_L \mathbf{e}_N^L \mathbf{v}_L + (\mathbf{e}_N^R \mathbf{f}_R)^T H_R \mathbf{e}_N^R \mathbf{v}_R}_{Northern\ flux} - \underbrace{(\mathbf{e}_S^L \mathbf{f}_L)^T H_L \mathbf{e}_S^L \mathbf{v}_L - (\mathbf{e}_S^R \mathbf{f}_R)^T H_R \mathbf{e}_S^R \mathbf{v}_R}_{Southern\ flux} + \underbrace{(\mathbf{e}_E^R \mathbf{f}_R)^T H_R \mathbf{e}_E^R \mathbf{u}_R}_{Eastern\ flux} - \underbrace{(\mathbf{e}_W^L \mathbf{f}_L)^T H_L \mathbf{e}_W^L \mathbf{u}_L}_{Western\ flux} + \underbrace{(\mathbf{e}_E^L \mathbf{f}_L)^T H_L \mathbf{e}_E^L \mathbf{u}_L - (\mathbf{e}_W^R \mathbf{f}_R)^T H_R \mathbf{e}_W^R \mathbf{u}_R}_{Interface\ fluxes}. \quad (1.6)$$

2.1.1.2.2 Интерфейсные условия между блоками сетки

Одномерный случай. Пусть отрезок $[a, b]$ разделен точкой c на две части ($L : [a, c]$ и $R : [c, b]$), в каждой из которых определена равномерная сетка из n и m точек соответственно. Сеточные функции в точке c могут иметь разрыв. В силу уравнения (1.3):

$$g_L^T H_L D_L f_L + (D_R g_R)^T H_R f_R = -g_{L1} f_{L1} + (g_{Ln} f_{Ln} - g_{R1} f_{R1}) + g_{Rm} f_{Rm}, \quad (1.7)$$

где требуется модификацией операторов взятия производных исключить интерфейсное слагаемое (в скобках). Используем для этого метод Simultaneous Approximation Terms (SAT), который состоит в добавлении штрафных слагаемых, пропорциональных скачку решения в точке c . Введем вспомогательные операторы продолжения и разности на интерфейсе:

$$e_{\text{exp}} = \begin{bmatrix} e_n^L \\ e_1^R \end{bmatrix}, \quad e_{\text{dif}} = \begin{bmatrix} (e_n^L)^T & -(e_1^R)^T \\ (e_n^L)^T & -(e_1^R)^T \end{bmatrix}$$

Последовательное действие операторов взятия разности и продолжения на функцию \mathbf{f} вычислят скачок решения на интерфейсе и доопределят его нулями в остальных точках многоблочной сетки.

Модифицируем оператор дифференцирования в каждом из подотрезков следующим образом:

$$D_{\text{SAT}} = D + \text{SAT} = D - \frac{1}{2}H^{-1}e_{\text{exp}}e_{\text{dif}}.$$

Для такого оператора мы получим дискретный аналог формулы интегрирования по частям даже в случае многоблочной области:

$$\begin{aligned} (D_{\text{SAT}}\mathbf{f})^T H\mathbf{g} + \mathbf{f}^T H(D_{\text{SAT}}\mathbf{g}) &= (D\mathbf{f})^T H\mathbf{g} + \mathbf{f}^T H(D\mathbf{g}) - \frac{1}{2}(e_{\text{exp}}e_{\text{dif}}\mathbf{f})^T \mathbf{g} - \frac{1}{2}\mathbf{f}^T (e_{\text{exp}}e_{\text{dif}}\mathbf{g}) = \\ &= (f_m^R g_m^R - f_1^L g_1^L) + (f_n^L g_n^L - f_1^R g_1^R) - (f_n^L g_n^L - f_1^R g_1^R) = (f_m^R g_m^R - f_1^L g_1^L). \end{aligned} \quad (1.8)$$

Таким образом, выполняется многоблочное свойство суммирования по частям (1.3). В работе [6] показано, что применение SAT-метода при решении уравнений в частных производных эквивалентно постановке условия неразрывности решения на интерфейсе в слабой форме.

Двумерный случай. Точки сеток на интерфейсе блоков могут не совпадать друг с другом (Рис. 1.2), если используется сетка с переменным разрешением. Использовать формулу штрафных слагаемых для одномерного случая нельзя. В работе [9] было показано, что решить эту проблему можно с помощью операторов интерполяции I_{L2R}, I_{R2L} между сетками на интерфейсе. Операторы интерполяции, при этом, должны удовлетворять условию:

$$I_{R2L}^T H_L = H_R I_{L2R}.$$

Показано, что такие операторы существуют, и они точны для полиномов порядка $2p$ на внутренних точках интерфейса и на полиномах порядка p у краевых точек интерфейса. Операторы продолжения и вычисления скачка на интерфейсе в двумерном случае следующие:

$$\mathbf{e}_{\text{exp}} = \begin{bmatrix} (\mathbf{e}_E^L)^T \\ (\mathbf{e}_W^R)^T \end{bmatrix}, \quad \mathbf{e}_{\text{dif}} = \begin{bmatrix} \mathbf{e}_E^L & -I_{R2L}\mathbf{e}_W^R \\ I_{L2R}\mathbf{e}_E^L & -\mathbf{e}_W^R \end{bmatrix}.$$

Для сетки, как на рисунке 1.2, модифицируется только оператор дифференцирования вдоль оси x , поскольку именно на его пути возникает интерфейс:

$$\mathbf{D}_{\text{SAT}}^x = \mathbf{D}^x + \text{SAT} = \mathbf{D}^x - \frac{1}{2}(\mathbf{H}^x)^{-1} \mathbf{e}_{\text{exp}}\mathbf{e}_{\text{dif}}.$$

Таким образом, штрафное слагаемое в левом блоке получается пропорциональным $f_n^L - I_{R2L}f_1^R$, аналогично для правого блока.

Модифицированные операторы градиента, дивергенции и завихренности ($G_{\text{SAT}}, D_{\text{SAT}}, C_{\text{SAT}}$) для многоблочной сетки определяются аналогично уравнению (1.5), но с использованием оператора D_{SAT}^x . В итоге получается многоблочный дискретный аналог двумерного свойства интегрирования по частям:

$$\mathbf{f}^T \mathbf{H} \mathbf{D}_{\text{SAT}} \vec{\mathbf{v}} + \vec{\mathbf{v}} \begin{bmatrix} \mathbf{H} \\ \mathbf{H} \end{bmatrix} \mathbf{G}_{\text{SAT}} \mathbf{f} = \underbrace{(\mathbf{e}_N^L \mathbf{f}_L)^T H_L \mathbf{e}_N^L \mathbf{v}_L + (\mathbf{e}_N^R \mathbf{f}_R)^T H_R \mathbf{e}_N^R \mathbf{v}_R}_{\text{Northern flux}} - \underbrace{(\mathbf{e}_S^L \mathbf{f}_L)^T H_L \mathbf{e}_S^L \mathbf{v}_L - (\mathbf{e}_S^R \mathbf{f}_R)^T H_R \mathbf{e}_S^R \mathbf{v}_R}_{\text{Southern flux}} + \underbrace{(\mathbf{e}_E^R \mathbf{f}_R)^T H_R \mathbf{e}_E^R \mathbf{u}_R}_{\text{Eastern flux}} - \underbrace{(\mathbf{e}_W^L \mathbf{f}_L)^T H_L \mathbf{e}_W^L \mathbf{u}_L}_{\text{Western flux}}, \quad (1.9)$$

в которое не входят интерфейсные потоки.

2.1.1.3 Однонаправленное вложение

Метод однонаправленного вложения состоит в параллельном расчете двух моделей (или двух конфигураций одной модели) – глобальной и региональной (в ограниченной области). Глобальная модель, в этом случае, имеет более низкое разрешение и является источником граничных условий для региональной модели высокого разрешения. Граничные условия для региональной модели были поставлены в слабом смысле по методу штрафных слагаемых SAT [10]. В отличие от широко применяемой в метеорологическом прогнозе процедуры Дэвиса [11], этот метод позволяет доказать устойчивость региональной модели при заданных граничных условиях в линейном приближении.

2.1.2 Численные эксперименты с моделью атмосферы на сетках с локальным повышением разрешения

Три подхода к локальному повышению разрешения в новой модели атмосферы испытывались на идеализированных задачах, предложенных в международном проекте по сравнению динамических блоков моделей атмосферы DCMIP: «Распространение гравитационной волны», «Бароклинная неустойчивость», «Задача Хелда-Суареса». Далее анализируются результаты в задаче «Бароклинная неустойчивость» [12]. В этом эксперименте на геострофически-сбалансированное, но неустойчивое фоновое состояние атмосферы накладывается малое возмущение скорости ветра, которое приводит к росту бароклинного возмущения на струйном течении в Северном полушарии. В течении 1-6 дня интегрирования возмущение растет экспоненциально, далее происходит выход на нелинейный режим с обрушением волны и переход к хаотической динамике. В момент обрушения волны на 9 день эксперимента в поле завихренности формируются спиральные структуры, аналоги которых можно наблюдать в циклонах над океаном. По качеству воспроизведения этих спиральных структур можно судить об эффективном разрешении модели.

2.1.2.1 Преобразование Шмидта

Сгущение сетки с помощью преобразования Шмидта тестировалось в сочетании с полулагранжевой версией новой модели атмосферы. Использовался параметр сгущения $D = 0,5$ что соответствует максимальному уменьшению шага сетки 1,5-2 раза по сравнению с исходной сеткой. Сетка кубическая сфера после сгущения была повернута таким образом, что на 9 день эксперимента возмущение оказывается примерно в центре сгущенной области, т.е. процесс обрушения волны происходит в области с максимальным разрешением (см. Рис 1.1). Результаты моделирования представлены на Рис. 1.3. В сравнении с решением на недеформированной кубической сфере, решения на сетке, подвергнутой преобразованию Шмидта, отличаются большим развитием структур, более острыми градиентами, эти решения ближе к решению модели ПЛАВ на сетке с разрешением 0,22 градуса [13]. Таким образом, можно судить о том, что преобразование сетки кубическая сфера по Шмидту позволяет добиться повышения пространственного разрешения. Отметим также, что при использовании полунейвного полулагранжева метода, скорость вычислений на сетке преобразованной по Шмидту всего на 7-10% ниже, чем на недеформированной сетке, имеющей локально в два раза более грубое разрешение. Разница в скорости вычислений обуславливается более медленной сходимостью итеративного алгоритма решения системы линейных алгебраических уравнений на деформированной сетке из-за худшей обусловленности матрицы Якоби.

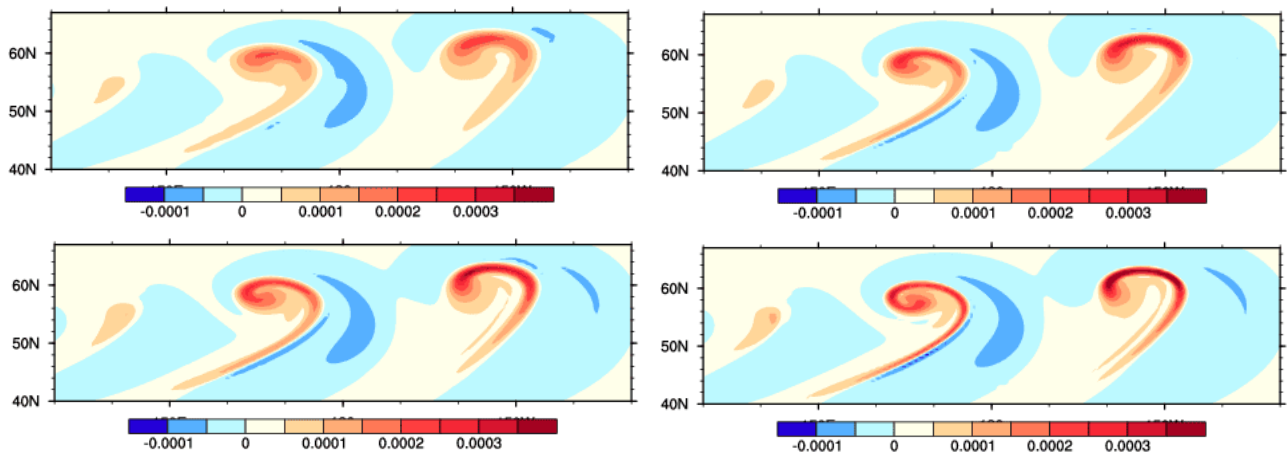


Рис. 1.3: Поле завихренности на 9-й день эксперимента “бароклинная неустойчивость”. Слева - решения на сетке кубическая сфера, справа - на сетке кубическая сфера с преобразованием Шмидта. Верхний ряд – 90 точек вдоль ребра куба (разрешение примерно 1° для недеформированной сетки), нижний ряд – 180 точек вдоль ребра куба.

2.1.2.2 Встраивание блока повышенного разрешения

В этом эксперименте разрешение сетки кубическая сфера на грани, включающей Северный полюс, вышалось в два раза (см. Рис 1.1). Таким образом, фаза обрушения бароклинной волны происходила в регионе повышенного разрешения. Эксперименты проводились с эйлеровой версией новой модели, для аппроксимации горизонтальных дифференциальных операторов применялся SBP-оператор порядка

точности $4/2$ (внутри области/у границы). Результаты эксперимента показаны на Рис. 1.4, можно отметить высокое эффективное разрешение модели, превосходящее разрешение эйлеровой модели ICON на треугольной сетке эквивалентного разрешения [14].

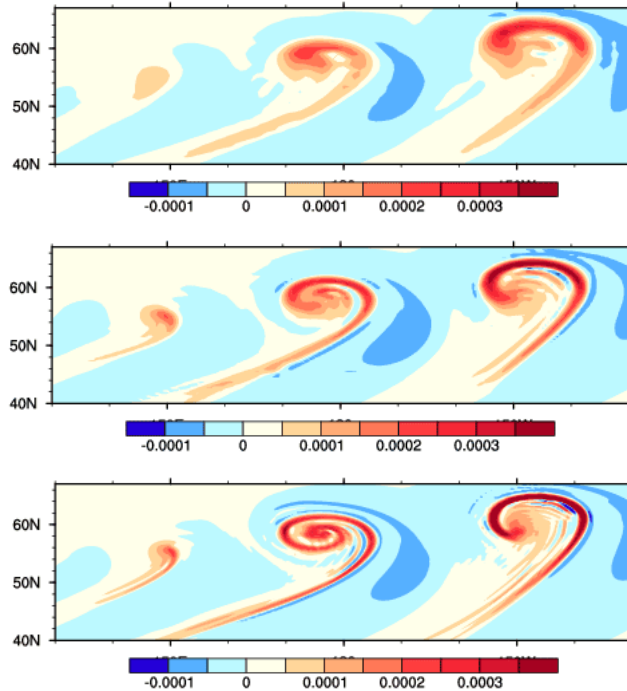


Рис. 1.4: Поле завихренности на 9-й день эксперимента “бароклинная неустойчивость”. Решение на сетке кубическая сфера с разрешением на одной из граней куба, повышенным в два раза. Сверху-вниз – количество точек вдоль ребра куба 48/96, 96/192, 192/384

2.1.2.3 Однонаправленное вложение

В этом эксперименте численное решение вычислялось на сетке кубическая сфера с разрешением около 1° (90 точек вдоль ребра куба), региональная модель использовала регион регулярной широтно-долготной сетки $[-45^\circ, 45^\circ] \times [0^\circ, 90^\circ]$ по широте и долготе, соответственно, разрешение составляло $0, 5^\circ$ (181×181 точек). Область интегрирования региональной модели была смещена на сфере (повернута) так, что ее центр приходился на точку с географическими координатами 45° С.Ш., 180° В.Д., т.е. обрушение бароклинной волны происходило в области региональной модели. Результаты моделирования приведены на Рис. 1.5 – представлено решение глобальной модели на сетке кубическая сфера, решение региональной модели и, для сравнения, решение глобальной модели на сетке кубическая сфера с разрешением, соответствующим региональной модели. Видно, что по эффективному разрешению решение региональной модели превосходит базовую модель на сетке кубическая сфера, а также несколько более детализировано, чем решение модели на сетке кубическая сфера с эквивалентным разрешением. Последнее объясняется применением разных алгоритмов для подавление каскада энергии и энтропии в неразрешаемые на сетке масштабы в региональной модели и глобальной моделях.

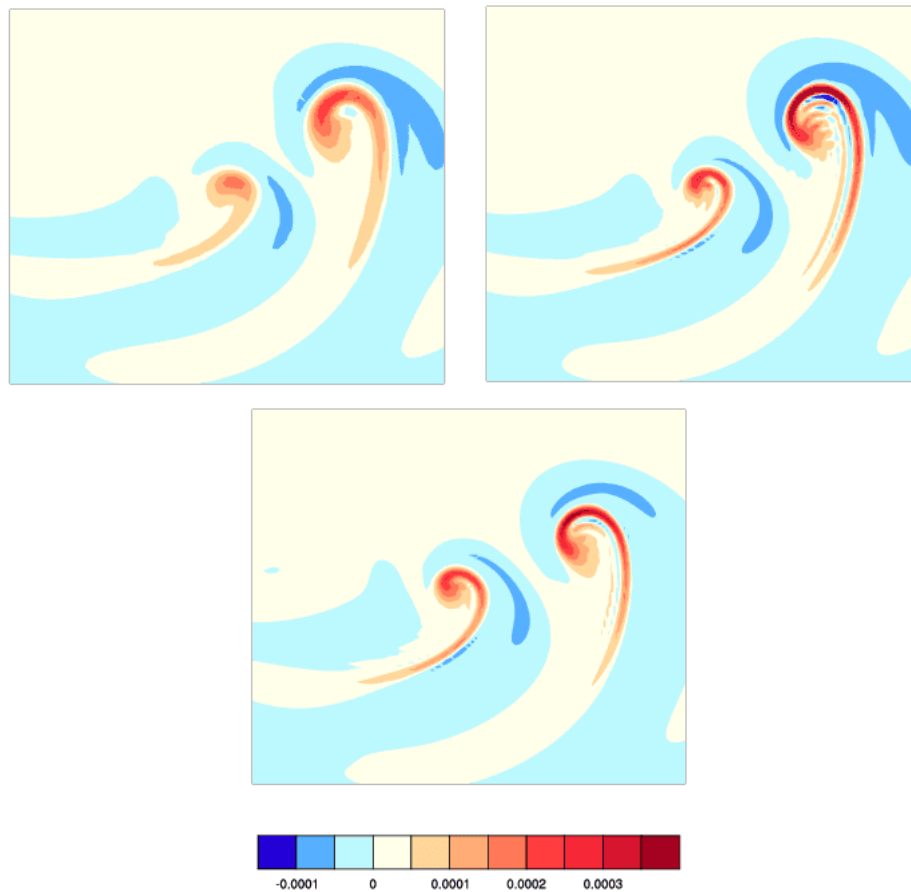


Рис. 1.5: Поле завихренности на 9-й день эксперимента “бароклинная неустойчивость”. Верхний ряд слева – решение на сетке кубическая сфера, разрешение около 1° , верхний ряд справа – решение на вложенной сетке с разрешением $0,5^\circ$, нижний ряд – решение на сетке кубическая сфера, разрешение около $0,5^\circ$

2.1.3 Совместная настройка стохастических возмущений в модели ПЛАВ

Данный раздел посвящен совместной настройке амплитуды возмущений для нескольких методов, реализованных ранее для учета неопределенностей в глобальной модели атмосферы ПЛАВ [15]. К этим методам относятся метод стохастического возмущения параметров и тенденций параметризаций [16] и метод стохастического возмущения полулагранжевых траекторий [17]. Во всех методах применяется реализованный ранее генератор стохастических возмущений на сетке модели ПЛАВ [16].

Рассматриваемая версия модели ПЛАВ20 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.

Проведено исследование чувствительности модели ПЛАВ20 и настроена амплитуда возмущения для

каждого из параметров и тенденций параметризаций и для полулагранжевых траекторий. В численных экспериментах оценивались разброс ансамбля (под разбросом понимается среднеквадратическое отклонение прогнозов в ансамбле от среднего по ансамблю прогноза) и среднеквадратическая ошибка среднего по ансамблю прогноза для заблаговременностей от 24 до 240 часов с шагом 24 часа для ансамблей из 36 прогнозов в среднем за период с 15 мая по 14 июня 2023 года в версии ансамблевой системы на основе модели ПЛАВ20. Для каждой из оценок было проведено исследование статистической значимости полученных результатов, использовался критерий Стьюдента для парных выборок с уровнем значимости 95%.

Эксперименты проводились в следующих конфигурациях: применение каждого из стохастических методов по отдельности и применение одновременно всех приведенных выше методов. 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.

Результаты сравнения среднеквадратической ошибки среднего по ансамблю прогноза и разброса ансамбля для геопотенциала на уровне 500 гПа во внетропической части северного полушария показаны на рисунке 1.6. Красным цветом на графике показана среднеквадратическая ошибка среднего по ансамблю прогноза, а синим – разброс ансамбля. Разные эксперименты показаны разными начертаниями линий: точечная линия — контрольный эксперимент без стохастических возмущений, пунктир с точкой — стохастическое возмущение только параметров и тенденций параметризаций, пунктир — стохастическое возмущение только полулагранжевых траекторий, сплошная линия — эксперимент с применением комбинации всех методов возмущений. Дополнительно черной линией показана среднеквадратическая ошибка детерминистического прогноза ПЛАВ20.

На графике видно, что максимальный разброс ансамбля достигается при использовании комбинации всех методов возмущений — стохастические возмущения параметров и тенденций параметризаций и полулагранжевых траекторий.

Аналогично получено статистически значимое повышение разброса ансамбля для заблаговременностей прогноза от 24 до 240 часов с шагом 24 часа для всех остальных верифицируемых переменных на всех уровнях во всех регионах земного шара при использовании комбинации трех указанных методов (не приводится). При этом изменение среднеквадратической ошибки средних по ансамблю прогнозов статистически незначимо, и среднеквадратическая ошибка среднего по ансамблю прогноза меньше, чем ошибка детерминистического прогноза для заблаговременностей начиная с 4 суток для всех верифицируемых переменных во всех регионах.

По итогам работы в 2024 году была опубликована статья [17].

Все модификации, о которых шла речь выше, внедрены в оперативную версию системы ансамблевого среднесрочного прогноза погоды на основе модели ПЛАВ072L96 в Гидрометцентре России. Новая система ансамблевого среднесрочного прогноза на основе модели ПЛАВ20 в настоящее время проходит оперативные испытания в Гидрометцентре России.

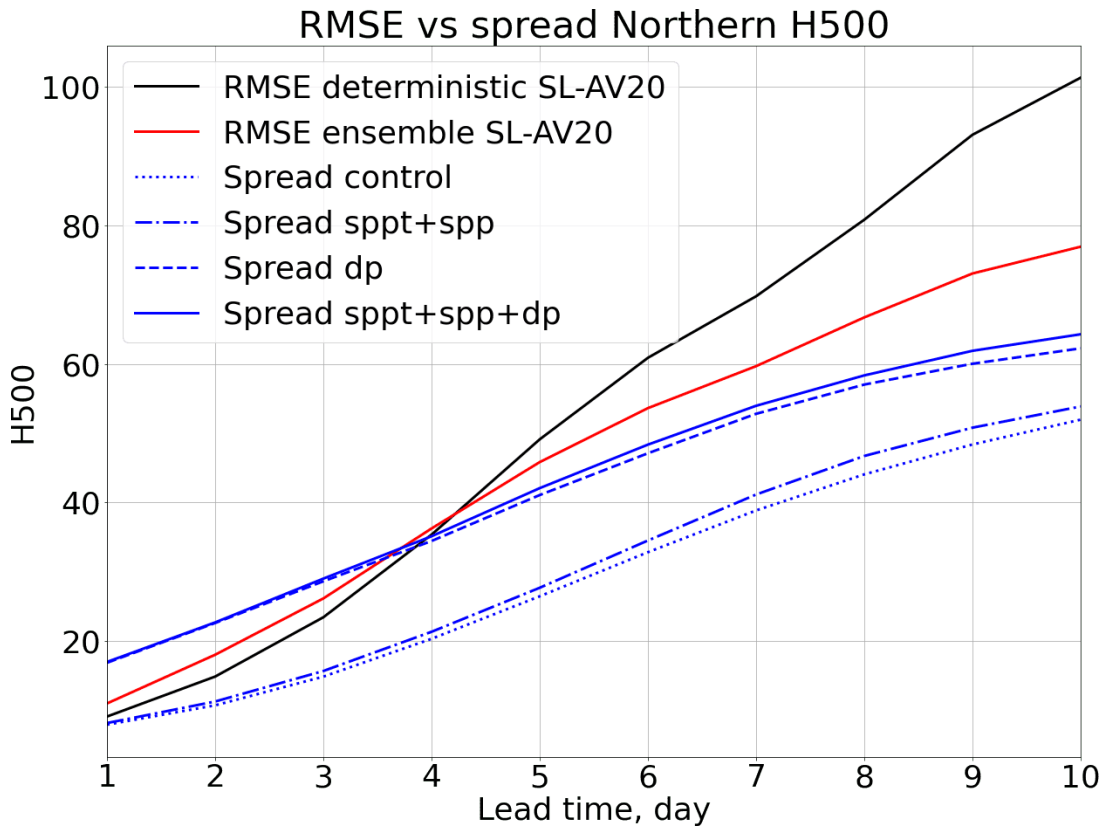


Рис. 1.6: Среднеквадратическая ошибка среднего по ансамблю прогноза (красный) и разброс ансамбля (синий) для контрольного эксперимента без стохастических возмущений (точечная линия), эксперимента со стохастическим возмущением только параметров и тенденций параметризаций (пунктир с точкой), эксперимента со стохастическим возмущением только полулагранжевых траекторий (пунктир) и эксперимента с применением комбинации всех методов возмущений (сплошная линия) в среднем за период 15 мая – 14 июня 2023 года для геопотенциала на уровне 500 гПа во внетропической части северного полушария. Черной линией показана среднеквадратическая ошибка детерминистического прогноза ПЛАВ20.

Литература

- [1] *Harris L. M., Lin S. J.* A Two-Way Nested Global-Regional Dynamical Core on the Cubed-Sphere Grid // *Mon. Wea. Rev.* — 2013. — Vol. 141. — Pp. 283–306.
- [2] *Mouallem J., Harris L., Benson R.* Multiple same-level and telescoping nesting in GFDL’s dynamical core // *Geoscientific Model Development*. — 2022. — Vol. 15, no. 11. — Pp. 4355–4371.
- [3] *Zänagl G., Reinert D., Prill F.* Grid refinement in ICON v2.6.4 // *Geoscientific Model Development*. — 2022. — Vol. 15, no. 18. — Pp. 7153–7176.
- [4] A Multiscale Nonhydrostatic Atmospheric Model Using Centroidal Voronoi Tessellations and C-Grid Staggering / *W. C. Skamarock, J. B. Klemp, M. G. Duda et al.* // *Mon. Wea. Rev.* — 2012. — Vol. 140. — Pp. 3090–3105.
- [5] *Schmidt F.* Variable fine mesh in spectral global models // *Beitr. Phys. Atmos.* — 1977. — Vol. 50. — P. 211–217.
- [6] *Del Rey Fernández David C., Hicken Jason E., Zingg David W.* Review of summation-by-parts operators with simultaneous approximation terms for the numerical solution of partial differential equations // *Computers & Fluids*. — 2014. — Vol. 95. — Pp. 171–196.
- [7] *Shashkin Vladimir V., Goyman Gordey S., Tolstykh Mikhail A.* Summation-by-parts finite-difference shallow water model on the cubed-sphere grid. Part I: Non-staggered grid // *Journal of Computational Physics*. — 2023. — Vol. 474. — P. 111797.
- [8] *Almquist Martin, Wang Siyang, Werpers Jonatan.* Order-Preserving Interpolation for Summation-by-Parts Operators at Nonconforming Grid Interfaces // *SIAM Journal on Scientific Computing*. — 2019. — jan. — Vol. 41, no. 2. — Pp. A1201–A1227.
- [9] *Mattsson K., Carpenter Mark H.* Stable and Accurate Interpolation Operators for High-Order Multi-Block Finite-Difference Methods. — 2009.
- [10] *Frenander Hannes, Nordström Jan.* A stable and accurate Davies-like relaxation procedure using multiple penalty terms for lateral boundary conditions // *Dynamics of Atmospheres and Oceans*. — 2016. — Vol. 73. — Pp. 34–46.

- [11] *Davies Terry*. Lateral boundary conditions for limited area models // *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*. — 2014. — Vol. 140, no. 678. — Pp. 185–196.
- [12] *Jablonowski C., Williamson D. L.* A baroclinic instability test case for atmospheric model dynamical cores // *Quart. J.Roy. Met.Soc.* — 2006. — Vol. 132. — Pp. 2943 – 2975.
- [13] Vorticity-divergence semi-Lagrangian global atmospheric model SL-AV20: dynamical core / M. Tolstykh, V. Shashkin, R. Fadeev, G. Goyman // *Geoscientific Model Development*. — 2017. — Vol. 10, no. 5. — Pp. 1961–1983.
- [14] The ICON (ICOsahedral Non-hydrostatic) modelling framework of DWD and MPI-M: Description of the non-hydrostatic dynamical core / G. Zangl, D. Reinert, P. Ripodas, M. Baldauf // *Quart. J.Roy. Met.Soc.* — 2015. — Vol. 141, no. 687. — Pp. 563–579.
- [15] Vorticity-divergence semi-Lagrangian global atmospheric model SL-AV20: dynamical core / M. Tolstykh, V. Shashkin, R. Fadeev, G. Goyman // *Geoscientific Model Development*. — 2017. — Vol. 10. — P. 1961–1983.
- [16] Stochastic perturbation of tendencies and parameters of parameterizations in the global ensemble prediction system based on the SL-AV model / K. Alipova, G. Goyman, M. Tolstykh et al. // *Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling*. — 2022. — Vol. 37, no. 6. — Pp. 331–347.
- [17] Stochastic perturbations in the semi-Lagrangian advection algorithm of the SL-AV global atmosphere model / K. Alipova, V. Mizyak, M. Tolstykh, G. Goyman // *Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling*. — 2024. — Vol. 39, no. 1. — Pp. 1–11.

Задача 2.2. Развитие вычислительных технологий для моделирования Мирового океана

- Проведение численных экспериментов с совместной моделью атмосферы и новой версией модели океана. Сравнение результатов расчетов с данными реанализа, расчетами с версией моделью INMCM, используемой в рамках экспериментов CMIP6.
- Разработка негидростатической версии динамики модели океана для архитектуры графических процессоров.
- Реализация в модели океана технологии вложенных сеток.

2.2.1 Проведение численных экспериментов с совместной моделью атмосферы и новой версией модели океана. Сравнение результатов расчетов с данными реанализа, расчетами с версией моделью INMCM, используемой в рамках экспериментов CMIP6

На предыдущих этапах проекта была разработана новая версия климатической модели океана со следующими свойствами:

- использование схем по времени с низкой численной диссипацией;
- возможность применения целого набора физических параметризаций;
- наличие системы совместного моделирования;
- возможность исполнения на гибридных вычислительных системах.

В рамках выполнения данного этапа проекта были проведены численное моделирование океана с новой версией климатической модели океана и моделью атмосферы. В качестве модели атмосферы использовалась версия INMCM6 [1], применявшейся в рамках эксперимента CMIP6, с разрешением по горизонтали 2×1.5 и 21 уровень по вертикали. Было проведено совместное моделирование океана и атмосферы сроком на один год. Начальные данные атмосферы и океана возмущались согласно алгоритму, описанному в [2]. Всего было рассчитано 10 членов ансамбля.

Результаты расчетов сравнивались с данными реанализа SODA [3], а также с результатами, полученными со старой версией модели океана. В качестве старой версии модели океана использовалась версия INMCM5, задействованная в рамках эксперимента CMIP5. Версия модели океана INMCM5 отличалась повышенной численной диссипацией, как было показано в статье [4].

Анализ проведенных расчетов показал, что основные различия между двумя версиями модели океана заключаются в экваториальной области Тихого океана. На рисунке 2.1 показано ансамблевое среднее зонального течения на глубине 50 метров за март месяц по всем 10 членам ансамблей со старой, новой версией и согласно усредненным многолетним данным реанализа SODA также для марта месяца.

В полях скорости в новой версии воспроизводятся струи экваториального течения, качественно согласованные с данными реанализа. В старой версии струи экваториального течения сильно размыты. Проведенные тесты показывают наличие качественных отличий между решениями, полученных старой и новой версиями и высокую чувствительность в выборе схем интегрирования по времени.

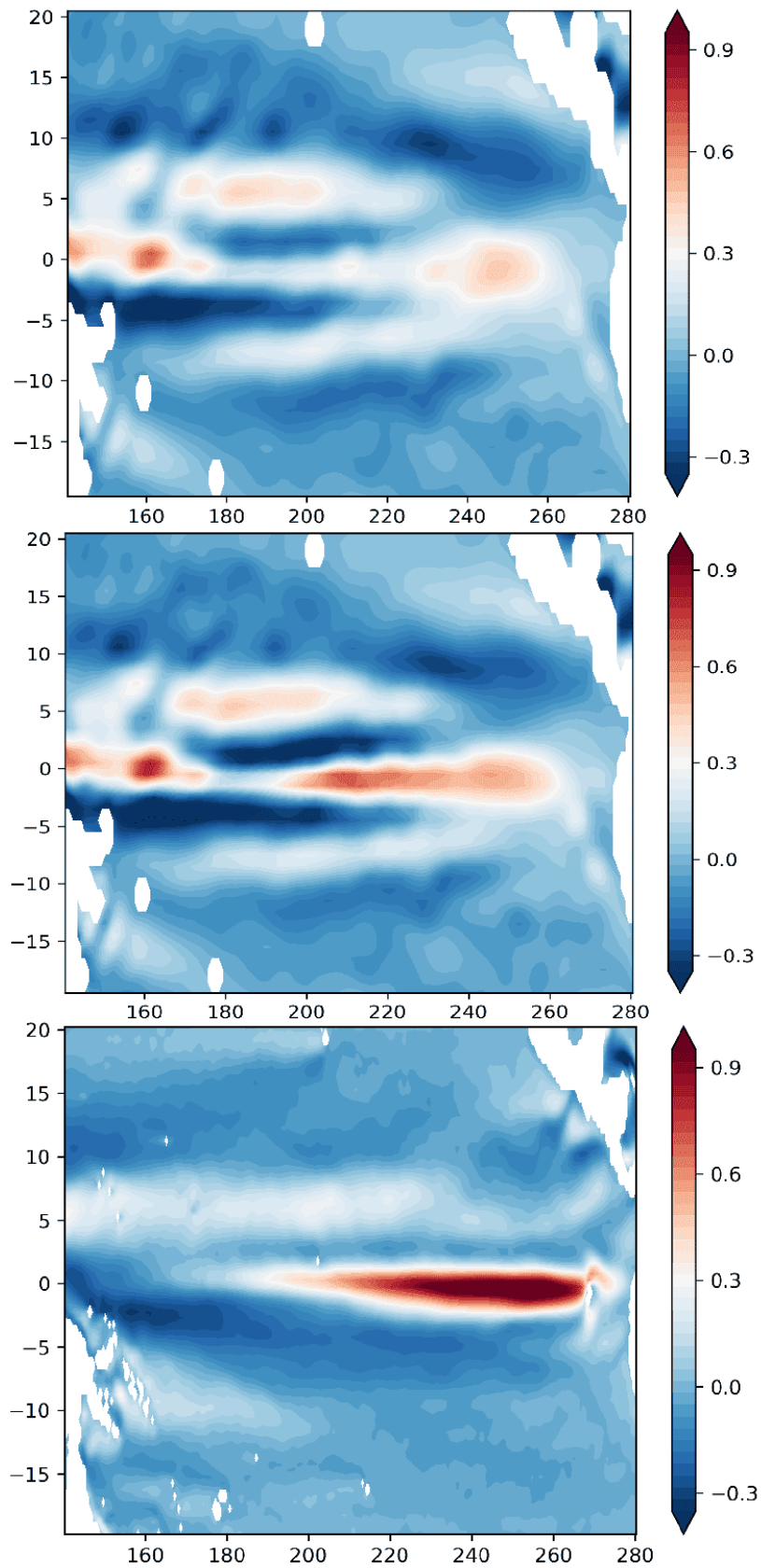


Рис. 2.1: Зональная скорость течения для старой версии (сверху), для новой версии (в центре) и данные реанализа SODA (внизу).

2.2.2 Разработка негидростатической версии динамики модели океана для архитектуры графических процессоров

В рамках выполнения проекта была разработана негидростатическая версия динамики модели океана для выполнения расчетов как на центральных процессорах (CPU, Central Processing Unit), так и на графических ускорителях (GPU, Graphics Processing Unit). Для программной реализации модели использовался гибридный подход на основе объединения библиотеки коммуникационных процедур MPI, технологии OpenMP для систем с общей памятью и среды программирования CUDA для поддержки расчетов на GPU. Библиотека MPI используется для декомпозиции (одномерной или двумерной по горизонтальным координатам) вычислительной сетки между MPI-процессами, которые связываются с набором нитей OpenMP и/или отдельным графическим процессором. Массивы данных, представляющие прогностические и диагностические поля модели, дополняются фиктивными сечениями для выполнения обменов данными между MPI процессами с шириной, зависящей от конечно-разностного шаблона. Технология OpenMP используется для организации перекрытий вычислений и обменов данными между MPI процессами, а также для ускорения части вычислений, выполняемых на CPU. Для организации вычислений на GPU в рамках CUDA используется следующая структура: нити группируются в блоки, которые составляют двумерную или трехмерную вычислительную сетку. Разностные аппроксимации дифференциальных операторов представляются в виде CUDA-функций, где каждая нить вычисляет значение сеточного оператора в отдельных узлах или наборе узлов сетки. Реализация модели океана выполнена в рамках общего программного кода (на языке программирования C/C++), который на данном этапе объединяет как гидростатическую, так и негидростатическую версии.

Негидростатическая версия модели основана на трехмерной системе уравнений вязкой несжимаемой жидкости в приближении Буссинеска, осредненной по Рейнольдсу, включающей полное уравнение для вертикальной компоненты скорости и динамику свободной поверхности. Учитываются подсеточный горизонтальный перенос, параметризуемый в виде оператора Лапласа и бигармонического оператора с предписанными коэффициентами, зависящими от пространственных координат, и процессы вертикального перемешивания. Описание вертикального перемешивания основано на градиентном приближении, где для расчета коэффициентов турбулентной вязкости и диффузии используется двухпараметрическая схема, в которой рассматриваются прогностические уравнения для кинетической энергии турбулентности и скорости ее диссипации. Модель также включает уравнения переноса тепла и солености, а для расчета плотности используется упрощенное уравнение состояния, предложенное в работе [5]. Реализованы параметризация донного трения на основе приближения логарифмического слоя и расчет потоков импульса и тепла в приповерхностном слое по данным о скорости ветра, температуре, влажности в атмосфере на основе теории подобия Монина-Обухова.

В численной модели рассматривается разложение поля давления на баротропную, бароклинную и негидростатическую составляющие. Метод дробных шагов [6], модифицированный для учета свободной поверхности [7, 8], используется для интегрирования системы уравнений динамики по времени. На

первом шаге вычисляется промежуточное поле скорости, где в правой части уравнений движения баротропный градиент давления и вертикальная диффузия аппроксимируются неявным методом Кранка-Николсон, поправка к негидростатическому давлению определяется с предыдущего шага по времени, а для аппроксимации консервативных членов используется метод Адамса-Башфорта третьего порядка точности. На следующих шагах численно решается двумерное эллиптическое уравнение отклонения уровня океана от невозмущенной поверхности и находится поправка к негидростатической компоненте давления из решения трехмерного уравнения Пуассона, обеспечивающая выполнение уравнения неразрывности для поля скорости на новом шаге по времени.

Для решения трехмерного разностного уравнения Пуассона реализована версия предобусловленного стабилизированного метода бисопряженных градиентов на графических ускорителях. В качестве предобуславливателя применяется геометрический многосеточный метод с V-циклом, где на каждой сетке выполняется несколько итераций сглаживания методом последовательной верхней релаксации для красно-черного упорядочивания узлов, а операторы проекции и продолжения соответствуют билинейной интерполяции. В программной реализации многосеточного метода на основе MPI-CUDA используется следующий подход – при достаточно малом размере огрубленной сетки данные группируются на кратных MPI-процессах. Тогда часть GPU остается незадействованными, однако на других процессах увеличивается объем вычислений и, как следствие, эффективность использования ресурсов графического процессора, что оправдывает дополнительные расходы и приводит к общему ускорению выполнения алгоритма.

Для аппроксимации по пространству в блоке динамики реализованы консервативные (выполняются законы сохранения для первых и вторых моментов) конечно-разностные схемы второго порядка точности на разнесенной "C" сетке. Для переноса полей температуры, солености и концентраций пассивных примесей в модели реализован набор монотонных схем [9]. В программной реализации переноса скаляров также используются оптимизации для архитектуры графических ускорителей, предложенные участниками проекта, см. [9].

Проведена верификация реализации модели на графических ускорителях в постановках, использованных для тестирования негидростатической модели океана при счете на центральных процессорах на прошлом этапе проекта: набор экспериментов [8] для модели FVCOM (Finite Volume Coastal Ocean Model), а также постановка по развитию неустойчивости в потоке, описанная в работе [10]. Данный набор экспериментов также использовался для оценки вычислительной эффективности программной реализации на графических ускорителях. Для GPU версии модели проведены вычислительные эксперименты на суперкомпьютере "МГУ-270" (Nvidia Tesla A100), а CPU расчеты проводились на процессорах AMD EPYC 7742 64-Core. На рисунке 2.2 приведено ускорение модели на GPU относительно разработанной ранее реализации на CPU. Полученные оценки показывают, что GPU позволяет значительно ускорить расчеты по сравнению с проведением вычислений на CPU, как для всей модели океана, так и для отдельных ее компонент. На рисунке 2.3 показана масштабируемость гибридной реализации

MPI-OpenMP-CUDA при выполнении вычислений на центральных процессорах и графических ускорителях. Результаты показывают необходимость дальнейшей оптимизации обменов данными между графическими картами. Наибольшие накладные расходы, связанные с копированием данных между GPU и оперативной памятью, приходится на блок динамики и алгоритмы численного решения двухмерного и трехмерного эллиптических уравнений, что существенно ограничивает масштабируемость модели океана. Предполагается в дальнейшем использование специализированных технологий для параллельных вычислительных систем, таких как NCCL (NVIDIA Collective Communication Library) и IPC (Inter-Process Communication). Проведенное тестирование на прошлых этапах проекта показало, в частности, что применение IPC может позволить ускорить обмены данными между GPU в несколько раз.

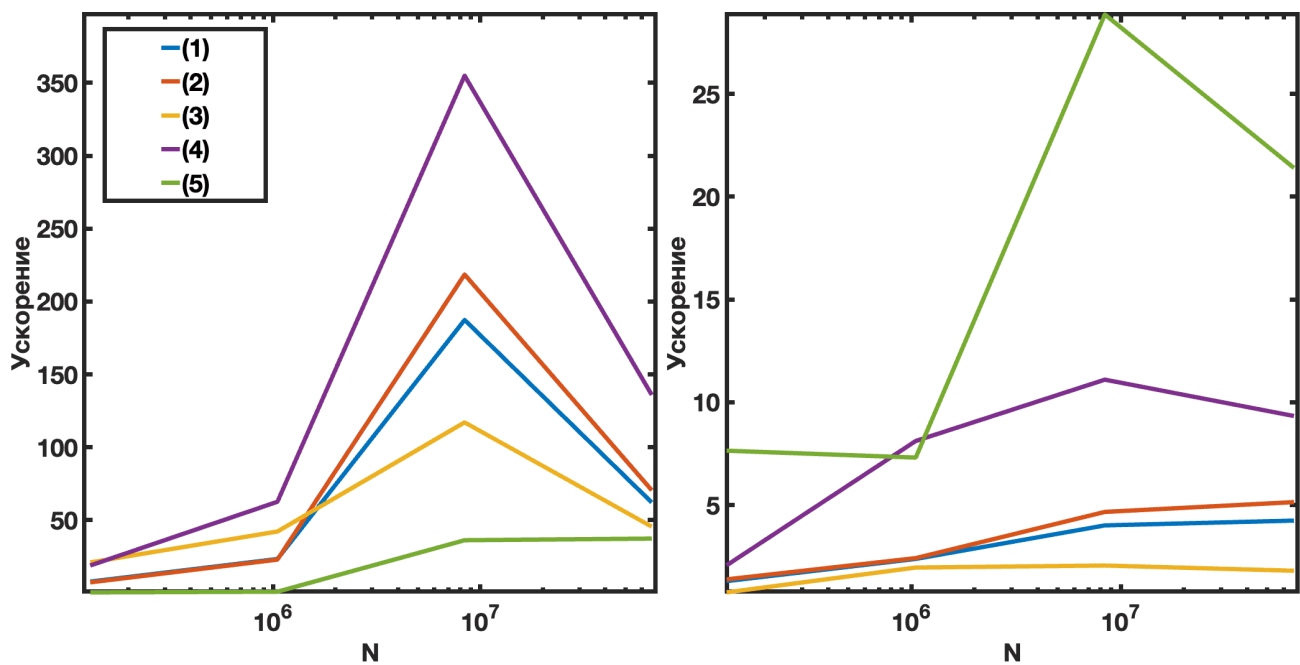


Рис. 2.2: Ускорение GPU (Nvidia Tesla A100) реализации относительно расчетов на одном вычислительном ядре (слева) и одном процессоре (справа) AMD EPYC 7742 64-Core в зависимости от числа узлов N вычислительной сетки. Обозначения: (1) – модель океана; (2) – блок расчета динамики; (3) – расчет переноса тепла; (4) – блок вертикального перемешивания; (5) – алгоритмы численного решения эллиптических уравнений.

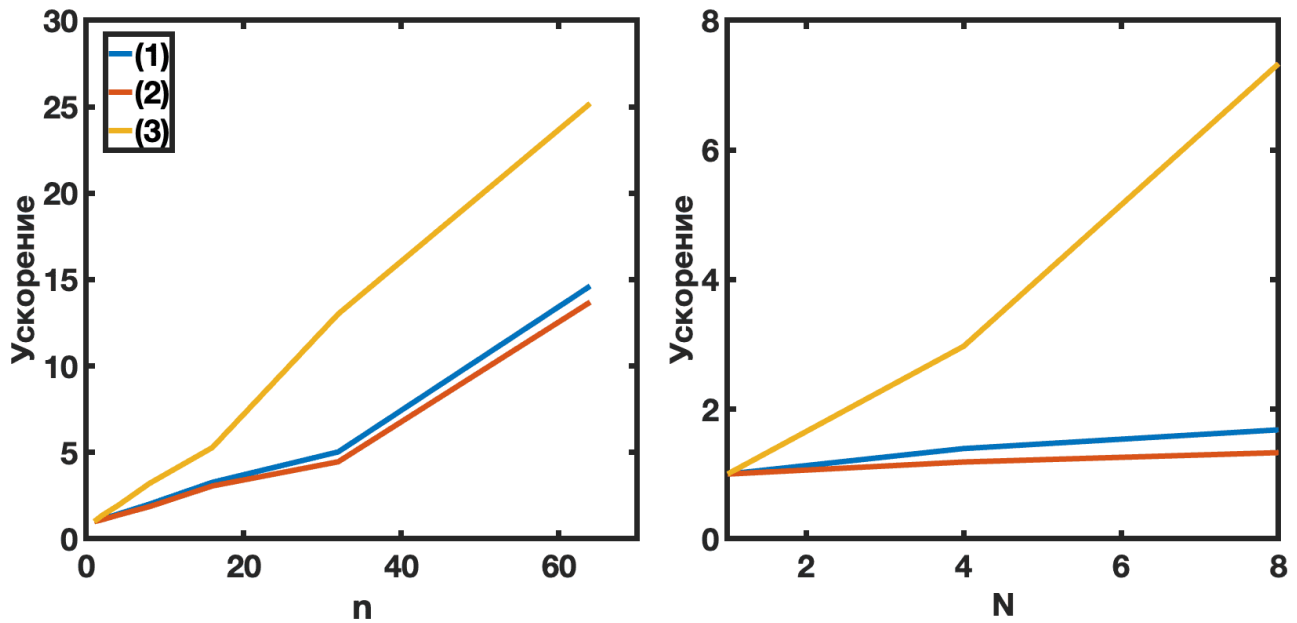


Рис. 2.3: Масштабируемость CPU реализации (слева) для процессора AMD EPYC 7742 64-Core по числу n ядер и GPU реализации (справа) на суперкомпьютере "МГУ-270" по числу N графических ускорителей Nvidia Tesla A100. Обозначения: (1) – модель океана; (2) – блок расчета динамики; (3) – расчет переноса тепла.

2.2.3 Реализация в модели океана технологии вложенных сеток

Реализована возможность запуска глобальной модели океана с увеличенным разрешением для заданного произвольного района океана с помощью технологии вложенных сеток. Этот метод предполагает, что одновременно выполняются расчеты с двумя взаимодействующими моделями: *глобальной*, осуществляющей численное решение системы уравнений гидротермодинамики в области Ω_{gl} в тонком слое жидкости на поверхности вращающейся Земли, и *локальной*, осуществляющей решение той же системы уравнений в некоторой подобласти $\Omega_{loc} \subset \Omega_{gl}$.

Дискретизация уравнений локальной модели происходит на более мелкой горизонтальной вычислительной сетке. В нашей реализации, центры узлов горизонтальной сетки локальной модели $C_{loc}^{i,j}$ равномерно размещаются между узлами глобальной сетки так, что каждый (k_x, k_y) -й узел мелкой сетки совпадает с соответствующим центром расчетной ячейки грубой сетки: $C_{gl}^{i,j} = C_{loc}^{i_0+k_x \cdot i, j_0+k_y \cdot j}$ для ячеек, расположенных внутри Ω_{loc} .

Динамика вектора состояния локальной модели φ_{loc} определяется дифференциальным оператором L^{loc} , аналогично обозначим вектор состояния и оператор глобальной модели с помощью соответственно φ_{gl} и L^{gl} . Тогда уравнения динамики выглядят следующим образом:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \varphi_{loc}}{\partial t} + L^{loc}(\varphi_{loc}) &= f^{loc}(\varphi_{loc}, \varphi_{gl}), \\ \frac{\partial \varphi_{gl}}{\partial t} + L^{gl}(\varphi_{gl}) &= f^{gl}(\varphi_{loc}, \varphi_{gl}),\end{aligned}\tag{2.1}$$

где f^{loc}, f^{gl} — силы взаимодействия глобальной и локальной модели друг с другом, отличные от нуля только в некоторой переходной области $\Omega_{trans} \subset \Omega_{loc}$.

Самый простой вариант реализации взаимодействия между моделями — поставить условия Дирихле на границе моделей. В большом количестве практических случаев такие условия приводят к неудовлетворительной точности получаемых решений [11]. Поэтому мы использовали одну из наиболее часто применяемых альтернатив — схему релаксации потока, аналогичную схеме, описанной в работе [12]. Слагаемое, отвечающее за взаимодействие между моделями, имеет релаксационный вид:

$$f^{loc} = \frac{1}{\tau}(\varphi_{gl} - \varphi_{loc})\tag{2.2}$$

В текущей реализации связь между моделями осуществляется только в одну сторону: от глобальной модели к локальной. Такая схема взаимодействия моделей при реализации метода вложенных сеток называется *односторонний нестинг*, в противовес *двухстороннему нестингу* — схеме, которая предполагает взаимодействие обеих моделей друг с другом.

Система уравнений (2.1), описывающая нашу реализацию метода вложенных сеток, принимает следующий вид:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \varphi_{loc}}{\partial t} + L^{loc}(\varphi_{loc}) &= \frac{\varphi_{gl} - \varphi_{loc}}{\tau}, \\ \frac{\partial \varphi_{gl}}{\partial t} + L^{gl}(\varphi_{gl}) &= 0,\end{aligned}\tag{2.3}$$

где τ — задаваемый параметр времени релаксации, равный бесконечности внутри локальной области за пределами переходной зоны, т.е. внутри области $\Omega_{loc} \setminus \Omega_{trans}$ релаксационное слагаемое равно нулю в уравнении (2.3). Значение параметра τ плавно возрастает внутри переходной области с уменьшением расстояния до открытой (водной) границы между Ω_{gl} и Ω_{loc} , достигая значения, соответствующего $\Delta t/\tau = 1$ на границе, где Δt — шаг модели по времени.

Мы провели серию коротких тестовых расчетов с разработанной реализацией метода вложенных сеток. В качестве области, для которой производилось увеличение разрешения, была выбрана акватория Средиземного, а также Черного морей. На основе заданных значений границ широт от 29.7° до 48.55° с.ш., и долгот от 1.0° до 45.2° в.д., а также топографии океана были построены маски локальной области и переходной зоны, рассчитаны расстояния до открытой границы переходной зоны и глобальной области, а также параметры релаксации. В серии расчетов параметры кратности измельчения сетки (k_x, k_y) принимали значения 2 и 4.

Обмены трехмерными полями, необходимыми для релаксации, выполнены с помощью технологии MPI. Численная эффективность поддерживается за счет размещения переходных областей на одном ядре с соответствующей подобластью глобальной модели, благодаря чему современные реализации библиотеки MPI могут использовать для межпроцессорных обменов общую память ядра, что очень важно в условиях необходимости выполнять интенсивные обмены трехмерных полей на каждом шаге по времени. Передача данных модели атмосферы выполняется с помощью каплера климатической модели ИВМ РАН, что значительно сократило трудоемкость реализации обменов данными по сравнению с традиционными подходами, использовавшимися ранее.

На рисунке 2.4 представлены поля температуры и солёности поверхности океана на конец первой недели расчетов глобальной модели для Средиземноморского региона, модели с повышенным разрешением, и разница между значениями двух моделей. Значения полей локальной модели приводятся на ее расчетной сетке, значения полей глобальной модели переведены на подробную сетку с помощью билинейной интерполяции для возможности анализа разницы значений моделей.

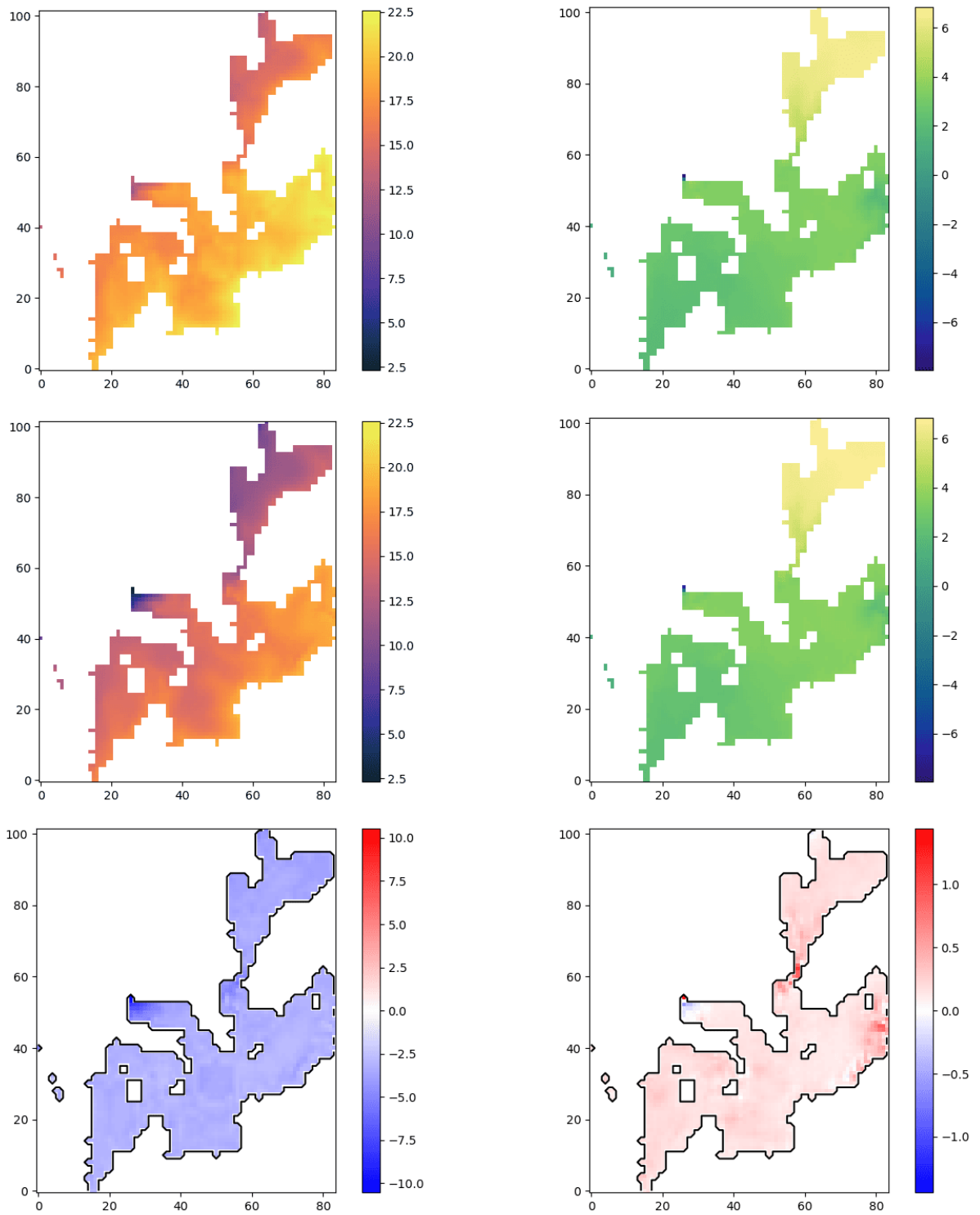


Рис. 2.4: Поля поверхностной температуры (слева) и солёности (справа) для глобальной модели в Средиземноморском регионе (верхний ряд), модели с повышенным разрешением (средний ряд) и разница между моделями (нижний ряд)

На рисунке 2.5 приведены вертикальные разрезы полей температуры и солёности через Средиземное море для глобальной модели и модели с повышенным разрешением.

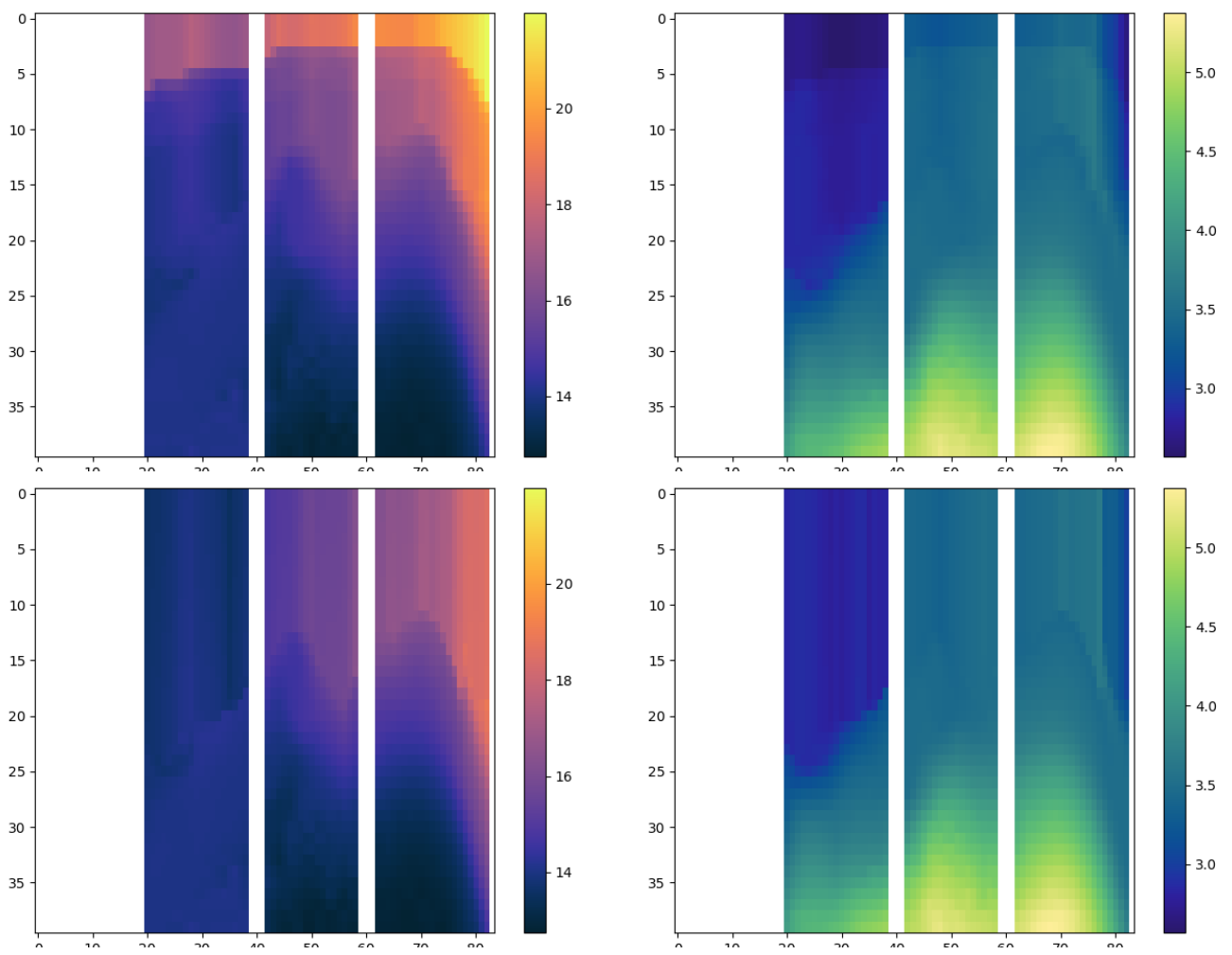


Рис. 2.5: Разрезы поле температуры (слева) и солёности (справа) для глобальной модели в Средиземноморском регионе (верхний ряд) и модели с повышенным разрешением (нижний ряд)

Реализованная технология может быть использована для создания региональных моделей океана.

Литература

- [1] Computational framework for the Earth system modelling and the INM-CM6 climate model implemented on its base / Evgeny M. Volodin, Dmitry V. Blagodatskikh, Vasilisa V. Bragina et al. // *Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling*. — 2024. — Vol. 39, no. 6. — Pp. 379–392. — URL: <https://doi.org/10.1515/rnam-2024-0032>.
- [2] Ensemble-based statistical verification of INM RAS Earth system model / Maria A. Tarasevich, Ivan V. Tsybulin, Vladimir A. Onoprienko et al. // *Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling*. — 2023. — Vol. 38, no. 3. — Pp. 173–186. — URL: <https://doi.org/10.1515/rnam-2023-0014>.
- [3] Carton James A., Chepurin Gennady A., Chen Ligang. SODA3: A New Ocean Climate Reanalysis // *Journal of Climate*. — 2018. — Vol. 31, no. 17. — Pp. 6967 – 6983. — URL: <https://journals.ametsoc.org/view/journals/clim/31/17/jcli-d-18-0149.1.xml>.
- [4] N.G. Iakovlev E.M. Volodin A.S. Gritsun. Simulation of the Spatiotemporal Variability of the World Ocean Sea Surface Hight by the INM Climate Models // *Izvestiya, Atmospheric and Oceanic Physics*. — 2016. — Vol. 52, no. 4. — Pp. 428–438. — URL: <https://link.springer.com/content/pdf/10.1134/S0001433816040125.pdf>.
- [5] Defining a Simplified Yet "Realistic" Equation of State for Seawater / F. Roquet, G. Madec, L. Brodeau, J. Nycander // *J. Phys. Oceanogr.* — 2015. — Vol. 45. — Pp. 2564–2579.
- [6] Brown D.L., Cortez R., Minion M.L. Accurate Projection Methods for the Incompressible Navier–Stokes Equations // *Journal of Computational Physics*. — 2001. — Vol. 168, no. 2. — Pp. 464–499. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999101967154>.
- [7] Kanarska Y., Shchepetkin A., McWilliams J.C. Algorithm for non-hydrostatic dynamics in the Regional Oceanic Modeling System // *Ocean Modelling*. — 2007. — Vol. 18, no. 3. — Pp. 143–174. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1463500307000443>.
- [8] A nonhydrostatic version of FVCOM: 1. Validation experiments / Lai Z., Chen C., Cowles G.W., Beardsley R.C. // *Journal of Geophysical Research: Oceans*. — 2010. — Vol. 115, no. C11. — URL: <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2009JC005525>.

- [9] Passive Tracer Transport in Ocean Modeling: Implementation on GPUs, Efficiency and Optimizations / E.M. Gaschuk, A.A. Ezhkova, V.A. Onoprienko et al. // *Lobachevskii Journal of Mathematics*. — 2023. — Vol. 44, no. 8. — Pp. 3040–3058.
- [10] Härter C., Meiburg E., Necker F. 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*. — 2000. — Vol. 418. — P. 189–212.
- [11] The numerics of hydrostatic structured-grid coastal ocean models: State of the art and future perspectives / Knut Klingbeil, Florian Lemarié, Laurent Debreu, Hans Burchard // *Ocean Modelling*. — 2018. — Vol. 125. — Pp. 80–105. — URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1463500318300180>.
- [12] Davies HwC. A lateral boundary formulation for multi-level prediction models // *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*. — 1976. — Vol. 102, no. 432. — Pp. 405–418.

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

-Конфигурация моделей RANS с использованием реалистичной геометрии зданий и характерных метеорологических условий, полученных на основе данных мезомасштабного моделирования.

-Проведение расчетов турбулентных течений и переноса мелкодисперсных примесей в городской среде и над городом. Анализ результатов расчетов.

2.3.1 Конфигурация моделей RANS с использованием реалистичной геометрии зданий и характерных метеорологических условий, полученных на основе данных мезомасштабного моделирования

2.3.1.1 RANS модель городской среды

Трехмерная модель RANS (Reynolds-Averaged Navier-Stokes) городской среды основана на численном решении системы уравнений, осредненной по Рейнольдсу. Модель позволяет как явно воспроизводить поток вокруг зданий, представленных на подробной сетке, так и допускает возможность задания объемной силы аэродинамического сопротивления в уравнениях движения и связанных с этой силой дополнительных членов в уравнениях для турбулентной кинетической энергии и скорости ее диссипации. Данная сила сопротивления F_d может представлять “локальное” (в части области) влияние неразрешенных на сетке зданий и/или сопротивление слоя растительности. Динамическое воздействие зданий

и растительности на турбулентность согласовано с многослойными параметризациями городской среды, разработанными в ходе выполнения данного проекта.

Для замыкания системы уравнений в RANS модели может использоваться как однопараметрическая, так и двухпараметрическая схема. В случае двухпараметрического подхода численно решаются прогностические уравнения для кинетической энергии турбулентности (КЭТ) E_k и скорости ее диссипации ε :

$$\frac{\partial E_k}{\partial t} + \frac{\partial \bar{U}_i E_k}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{K_m}{\sigma_k} \frac{\partial E_k}{\partial x_i} + P + B - \varepsilon + F_k, \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial \bar{U}_i \varepsilon}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{K_m}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} + \frac{\varepsilon}{E_k} (C_{1\varepsilon} P - C_{2\varepsilon} \varepsilon + C_{3\varepsilon} B + F_\varepsilon), \quad (3.2)$$

где \bar{U}_i – компоненты вектора скорости потока $\bar{\mathbf{U}}$, осредненного по Рейнольдсу, P – генерация кинетической энергии турбулентности за счет сдвига скорости, B описывает генерацию или потребление КЭТ плавучестью, $F_{k,\varepsilon}$ – дополнительные слагаемые, обусловленные переносом средней энергии течения в мелкомасштабную компоненту при наличии квадратичной силы сопротивления $F_{d,i} = -C_d a(\mathbf{x}) |\bar{\mathbf{U}}| \bar{U}_i$ с предписанным коэффициентом аэродинамического сопротивления C_d и удельным коэффициентом растительности $a(\mathbf{x}) \equiv a(x, y, z)$ (LAD, Leaf Area Density). Здесь $C_{i\varepsilon}$, σ_k и σ_ε – эмпирические параметры системы (см. обсуждение возможных значений этих параметров и их связь с равновесными состояниями в [1] для стратифицированной горизонтально однородной турбулентности в пограничном слое). Система уравнений (3.1), (3.2) дополняется граничными условиями Дирихле в ячейках сетки ближайших к поверхности земли и зданий, где используется приближение логарифмического слоя. Коэффициенты турбулентной вязкости K_m и диффузии K_h рассчитываются из соотношений подобия:

$$K_{m,h} = S_{m,h} \frac{E_k^2}{\varepsilon} \equiv S_{m,h} E_k^{1/2} l_T, \quad (3.3)$$

где $S_{m,h}$ – безразмерные функции устойчивости, которые в текущей реализации модели полагаются постоянными, а $l_T = E_k^{3/2}/\varepsilon$ – турбулентный масштаб длины.

Слагаемые F_k , F_ε записываются, следуя [2], в наиболее общем виде как сумма двух компонент – источника мелкомасштабной энергии $F_{+,k}$ и дополнительной диссипации КЭТ $F_{-,k}$, пропорциональной произведению модуля скорости ветра и E_k :

$$F_k = C_d a(\mathbf{x}) (\beta_p |\mathbf{U}|^3 - \beta_d |\mathbf{U}| E_k) = F_{+,k} - F_{-,k}, \quad (3.4)$$

$$F_\varepsilon = C_d a(\mathbf{x}) (C_{4\varepsilon} \beta_p |\mathbf{U}|^3 - C_{5\varepsilon} \beta_d |\mathbf{U}| E_k) = C_{4\varepsilon} F_{+,k} - C_{5\varepsilon} F_{-,k}, \quad (3.5)$$

где β_p , β_d , $C_{4\varepsilon}$, $C_{5\varepsilon}$ – эмпирические параметры модели, см. [3].

В однопараметрическом замыкании рассматривается прогностическое уравнение лишь для кинетической энергии турбулентности (см. (3.1)), а турбулентный масштаб $l_T \equiv l_T^0$ считается предписанным на

основе подхода, предложенного участниками проекта в работе [4]:

$$l_T^{-1} = c_z z^{-1} + c_D D_u^{-1}, \quad (3.6)$$

где D_u – высота вытеснения (параметр зависящий от с геометрических характеристик обтекаемой поверхности), универсальная функция $c_D = c_D(z/\langle h \rangle, \langle h \rangle/D_u)$, зависящая от высоты вытеснения и средней высоты зданий, удовлетворяющая асимптотикам $l_T \rightarrow \kappa z$ для $z \rightarrow 0$ и $l_T \rightarrow \kappa(\langle h \rangle - D_u)$, для $z \rightarrow \langle h \rangle$:

$$c_D = \kappa \left[\left(\frac{\langle h \rangle}{D_u} \right)^2 - \frac{\langle h \rangle}{D_u} \right] + c_1 \frac{(\langle h \rangle - z)}{D_u} \quad (3.7)$$

с калибровочным параметром c_1 .

Численный метод решения системы уравнений RANS основан на использовании консервативных конечно-разностных схем для пространственной дискретизации на прямоугольных сетках [5, 6]. Для повышения локального разрешения допускается измельчение шага сетки по вертикали. Для интегрирования системы уравнений (3.1), (3.2) по времени используется полунейвная схема, обеспечивающая неотрицательность кинетической энергии турбулентности и скорости ее диссипации. В программной реализации модели для параллельных вычислительных систем рассматривается трехмерная декомпозиция области по пространству и используется гибридный MPI-OpenMP подход для организации обменов и синхронизации вычислений; допускается также выполнение расчетов на графических процессорах с помощью технологии CUDA.

Трехмерная RANS модель городской среды адаптирована для возможности задания реалистичной геометрии зданий в виде карты высот поверхности (в текстовом формате или в формате netcdf) или использования поддерживаемого CAD технологиями формата .STL (а также других форматов, которые могут быть конвертированы в .STL, например, .OBJ), в которой описывается триангуляция поверхности и ее свойства произвольной сложности. Вычислительная технология позволяет рассматривать постановки экспериментов с использованием данных о метеорологических условиях, полученных из мезомасштабного моделирования (WRF, COSMO, ICON) или реанализа. В частности, в численной модели могут использоваться данные о пространственном и временном распределении геострофического ветра, тенденций, описывающих крупномасштабную горизонтальную адвекцию и оседание, радиационный нагрев или выхолаживание атмосферы. Для использования данных реанализа ERA5 в RANS модели также реализована поддержка пакета LS2D, см. [7]. Турбулентные потоки импульса, явного и скрытого тепла рассчитываются на основе теории подобия Монина-Обухова при использовании предписанной температуры и влагосодержания поверхности земли и зданий или из решения уравнения баланса энергии, где считаются известными данные о приходящей коротковолновой и длинноволновой радиации и характеристики поверхности (значения альbedo, аэродинамическая шероховатость, теплопроводность и тд).

Проведены численные эксперименты по воспроизведению потока в условиях реалистичной геометрии застройки для области ИМКЭС СО РАН г. Томск с помощью вихреразрешающей (LES, Large-Eddy

Simulation) и трехмерной RANS моделей. На рисунке 3.1 показана карта высот зданий и растительного полога, включающего территорию ИМКЭС СО РАН и окружающего района г. Томск.

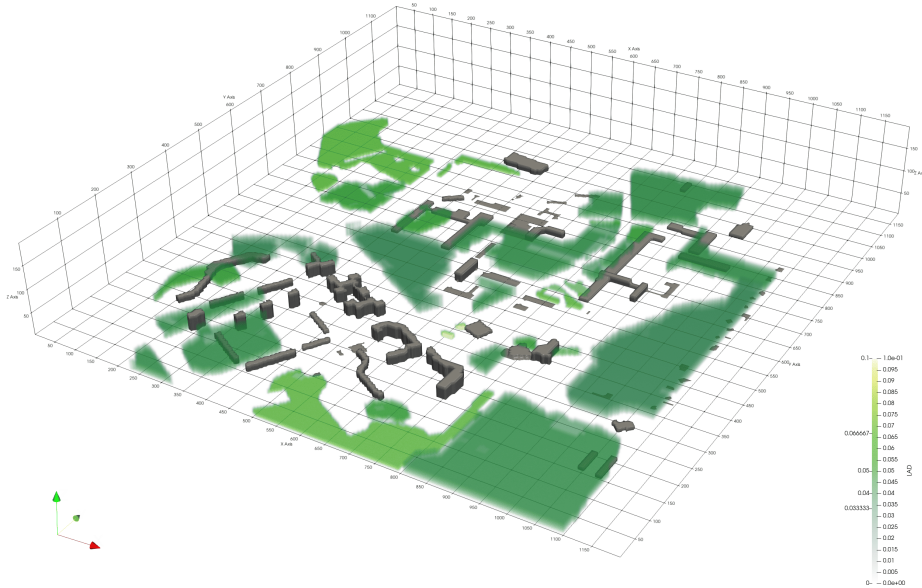


Рис. 3.1: Геометрия подстилающей поверхности зданий и растительности в численной постановке для области ИМКЭС СО РАН г. Томск.

Для изучения возможности использования RANS моделей для воспроизведения переноса примесей в условиях реалистичной геометрии застройки в постановке экспериментов рассматривалось дополнительное скалярное поле с предписанным потоком Q_s на поверхности земли. Для получения статистически стационарного распределения концентрации в правой части уравнения переноса скаляра добавлялось дополнительное слагаемое F_s :

$$F_s = \frac{1}{V_a} \int_{\Gamma} -Q_s d\Gamma, \quad (3.8)$$

где V_a – объем области за вычетом объема занятого зданиями, Γ – граница области, соответствующая поверхности земли.

На рисунке 3.2 приведено сравнение вертикального распределения скорости ветра и концентрации примеси в LES и RANS моделях осредненной по горизонтали и времени. Пунктирными линиями отмечены результаты в численных экспериментах, в которых не учитывалось влияние растительного полога.

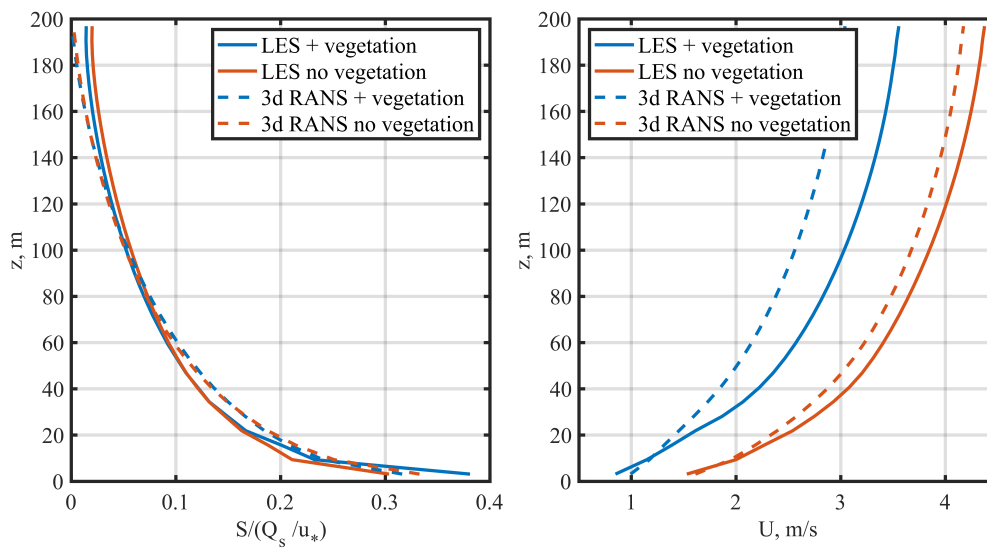


Рис. 3.2: Вертикальное распределение концентрации примеси (слева) и скорости ветра (справа) в численной постановке для области ИМКЭС СО РАН г. Томск. Результаты расчетов без учета растительного покрова отмечены красными линиями, с учетом растительного покрова – синими; данные LES модели показаны сплошными кривыми, трёхмерной RANS модели – пунктирными.

2.3.2 Проведение расчетов турбулентных течений и переноса мелкодисперсных примесей в городской среде и над городом. Анализ результатов расчетов

2.3.2.1 Вихреразрешающие расчёты переноса твёрдой мелкодисперсной примеси в городской среде и над городом при типичных конфигурациях застройки

Одной из задач проекта являлось исследование и анализ турбулентных течений в городской среде и над городом, а также переноса мелкодисперсной примеси в них. В качестве основного инструмента была использована вихреразрешающая модель, позволяющая детально воспроизводить турбулентные воздушные течения в условиях наличия сложной геометрии городской застройки, разрабатываемая в НИВЦ МГУ (Научно-исследовательский вычислительный центр МГУ имени М.В. Ломоносова) и ИВМ РАН (Институт вычислительной математики имени Г.И. Марчука РАН) на основе унифицированного гидродинамического кода, сочетающего LES- (Large Eddy Simulation), DNS- (Direct Numerical Simulation) и RANS-подходы (Reynolds Averaged Navier-Stokes) для моделирования геофизических турбулентных течений с высоким пространственным разрешением [8–11].

Города характеризуются сложными и разнообразными структурами геометрии зданий, улиц, кварталов и районов, которые создают уникальные условия для формирования турбулентных потоков и распределения загрязняющих веществ. В связи с этим, для исследований используются различные классификации поверхностей городского типа, агрегирующие многообразие городской застройки по

наиболее влияющим на турбулентное течение параметрам. При выборе конфигураций городской геометрии для постановки численных экспериментов с LES-моделью использовалась классификация локальных климатических зон – Local Climate Zones (LCZ), предложенная в статье [12]. Тип локальной климатической зоны определяется четырьмя ключевыми параметрами: высотой объектов, их плотностью, типом поверхности и термической инерцией материалов зданий.

В данной работе для построения конфигураций для модели были выбраны 3 типа LCZ : LCZ 4 – открытая многоэтажная застройка, LCZ 5 – открытая среднеэтажная застройка, LCZ 6 – открытая малоэтажная застройка. Для каждой LCZ было реализовано по 3 конфигурации с разной плотностью, формой и ориентацией застройки – всего 9 конфигураций (рис. 3.3). Конфигурации с вытянутыми зданиями соответствуют, например, районам с застройкой длинными панельными домами (5- или 10-этажными) или 2-х этажными зданиями. Конфигурации с квадратными в горизонтальном сечении зданиями соответствуют регулярной застройке, которую можно встретить в южных городах России, а также во многих развивающихся странах.

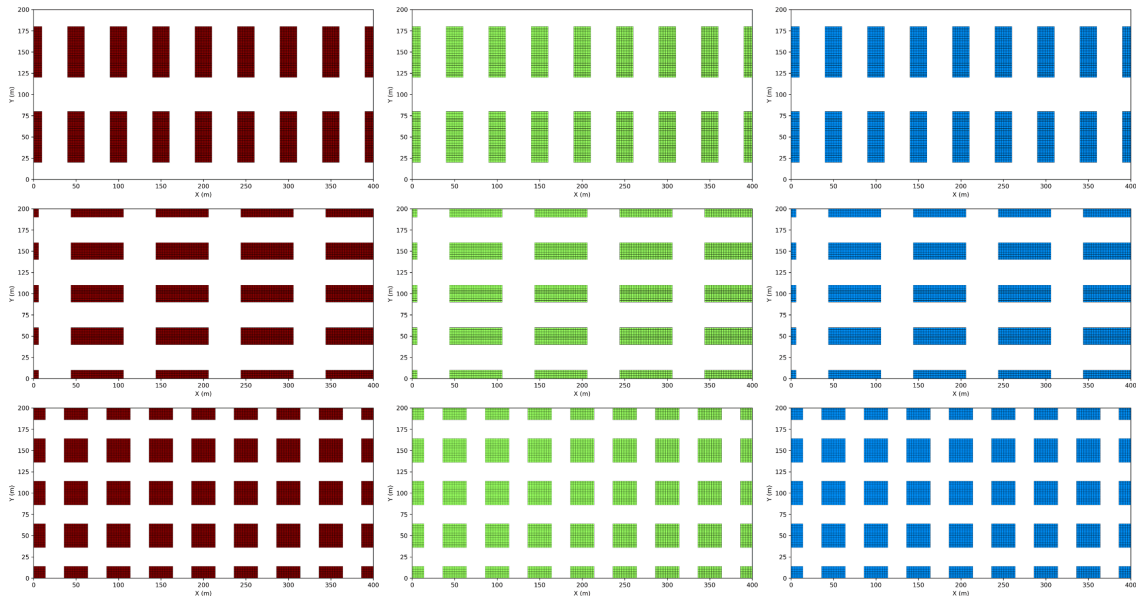


Рис. 3.3: Карты высот конфигураций городской застройки в пределах расчётной области (левый столбец – LCZ 4, средний столбец – LCZ 5, правый столбец – LCZ 6)

Была проведена верификация многослойной RANS модели на идеализированных экспериментах с типичной городской застройкой. Для постановки численных экспериментов использовались конфигурации из повторяющихся простых геометрических зданий (представленных параллелепипедами) так, чтобы отдельные конфигурации соответствовали отдельным типам локальных климатических зон (LCZ, Local Climate Zones [12]). Рассматривались эксперименты с LCZ 4 и LCZ 5 а также эксперимент (LCZ 4/5 -mix) где эти конфигурации распространялись на большей области, замощенной ими в шахматном порядке. Для облегчения сравнения, по данным LES модели были рассчитаны соответствующие пространственные средние коэффициенты сопротивления, которые затем использовались в одноколочной постановке RANS модели с однопараметрическим замыканием, где в качестве турбулентного

масштаба длины используется уравнение (3.6). Результаты верификации представлены на рис. 3.4. Как видно, RANS модель завышает перемешивание в городском подслое.

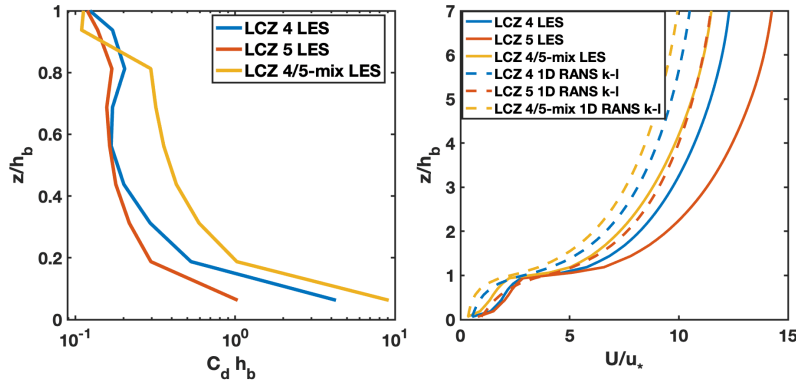


Рис. 3.4: Профили нормированного коэффициента сопротивления по данным LES (слева), а так же нормированные профили скорости ветра полученные по данным многослойной RANS модели и данным LES в экспериментах с идеализированной застройкой LCZ 4, LCZ 5 и LCZ 4/5 - mix (справа). Сплошными линиями показаны данные LES экспериментов, пунктирными - многослойной RANS модели с однопараметрическим замыканием.

Для моделирования переноса мелкодисперсной примеси применялся модуль лагранжева переноса частиц, подключённый к LES-модели. Уравнения движения частиц имеют следующий вид [13]:

$$\frac{d\mathbf{u}_p}{dt} = \frac{\mathbf{g}(\rho_p - \rho)}{\rho_p} + F_D(\mathbf{u} - \mathbf{u}_p), \quad (3.9)$$

$$\frac{dx_p}{dt} = \mathbf{u}_p, \quad (3.10)$$

где \mathbf{u}_p – скорость частицы, x_p – её координата, t – время, \mathbf{g} – ускорение силы тяжести, ρ_p – плотность частицы (её материала), ρ – плотность окружающего воздуха, \mathbf{u} – его скорость, F_D – коэффициент силы сопротивления среды.

Для учёта взаимодействия со зданиями реализована параметризация столкновения с твёрдыми поверхностями, в рамках которой возможны как упругий отскок частицы от поверхности здания, так и осаждение на ней. Также в лагранжевом модуле переноса влияние подсеточных турбулентных вихрей на движение частиц параметризуется. Полная скорость течения \mathbf{u} из уравнения (3.9) представляется в виде суммы осреднённой и подсеточной компонент. Первая задаётся полем скорости из LES-модели, а вторая может быть получена при помощи лагранжевой стохастической модели (ЛСМ). В данном модуле реализовано две ЛСМ, 0-го и 1-го порядка, для которых пульсационное смещение (0-й порядок) или изменение пульсационной компоненты скорости (1-й порядок) могут быть вычислены следующим

образом [13]:

$$\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} + \frac{d\mathbf{x}'}{dt}, \quad dx'_i = \frac{\partial K_S}{\partial x_i} dt + \sqrt{2K_S} \xi_i, \quad (3.11)$$

$$\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} + \mathbf{u}', \quad du'_i = -\frac{1}{2} b^2 \frac{u'_i}{\sigma_{u_i}^2} dt + b \xi_i, \quad (3.12)$$

$$\sigma_{\xi_i} = \sqrt{dt}, \quad b^2 = C_0 \varepsilon, \quad (3.13)$$

где ξ_i $i = 1, \dots, 3$, – независимые дельта-коррелированные по времени гауссовы случайные величины, σ_{ξ_i} – среднеквадратическое отклонение ξ_i , $\sigma_{u_i}^2$ – дисперсия скорости потока, dt – приращение времени, x_i – i -ая эйлерова пространственная координата, K_S – коэффициент турбулентной диффузии, C_0 – постоянная Колмогорова, ε – скорость диссипации турбулентной кинетической энергии.

С каждой из выбранных конфигураций застройки проводились расчёты динамики турбулентных течений и переноса примеси в LES-модели с модулем переноса частиц. Объёмный источник частиц находился в самом левом каньоне в пределах слоя 0-4 метра над поверхностью земли, имитируя выбросы автотранспорта. Для частиц периодическими были границы только вдоль оси Y, при вылете за остальные они исчезали.

Также для одного выбранного типа застройки (LCZ 5 – открытая среднеэтажная застройка) были сгенерированы случайные конфигурации геометрии зданий, чтобы оценить различия между возможными реализациями застройки одного типа. Для созданных 4 конфигураций (рис. 3.5) были проведены аналогичные эксперименты с разницей лишь в том, что расчётная область была в 2 раза больше – 400 на 400 на 120 метров при том же пространственном разрешении.

На рисунке 3.6а представлены рассчитанные вертикальные профили концентрации частиц для всех 9 периодических конфигураций. Заметен значительный разброс на всех высотах между конфигурациями. Для всех рассмотренных конфигураций СКО концентрации на высоте 5 метров составило 19.3% от средней концентрации на этой высоте, а разница между максимальной и минимальной концентрациями – 63.5%. Для LCZ 4 эти параметры составили 26.7% и 58% соответственно – в случае с высокой застройкой различия в реализации геометрии одного и того же типа LCZ привели к значительному различию в концентрациях, сравнимому с различиями между разными типами LCZ. Для LCZ 5 эти параметры составили 5% и 10.7% соответственно, для LCZ 6 – 8.1% и 19.1%. Наименьшие различия в концентрациях между разными реализациями геометрии для одного и того же типа LCZ были получены в случае с застройкой средней высоты, что может говорить о меньшем влиянии формы и ориентации застройки на перемешивание и вынос примеси в данной LCZ.

На рисунке 3.6б представлены рассчитанные вертикальные профили концентрации частиц для всех 4 случайно сгенерированных конфигураций LCZ 5. Заметные небольшие различия между профилями чуть ниже уровня крыш и над ними на высотах 10-20 м, однако в целом профили имеют очень схожую форму. СКО концентрации на высоте 5 метров составило 5.9% от средней концентрации на этой высоте,

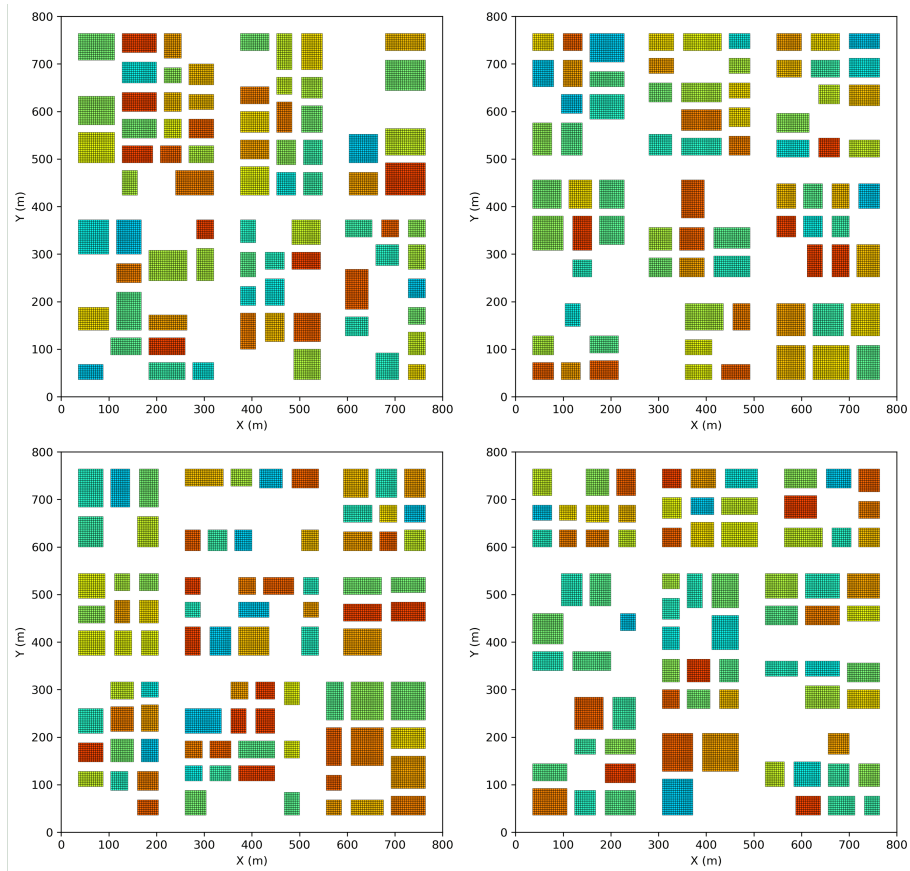


Рис. 3.5: Карты высот конфигураций городской застройки в пределах расчётной области для случайно сгенерированной геометрии LCZ 5

а разница между максимальной и минимальной концентрациями – 14.7%. Для высоты 15 метров эти показатели составили 5.9% и 16.4%.

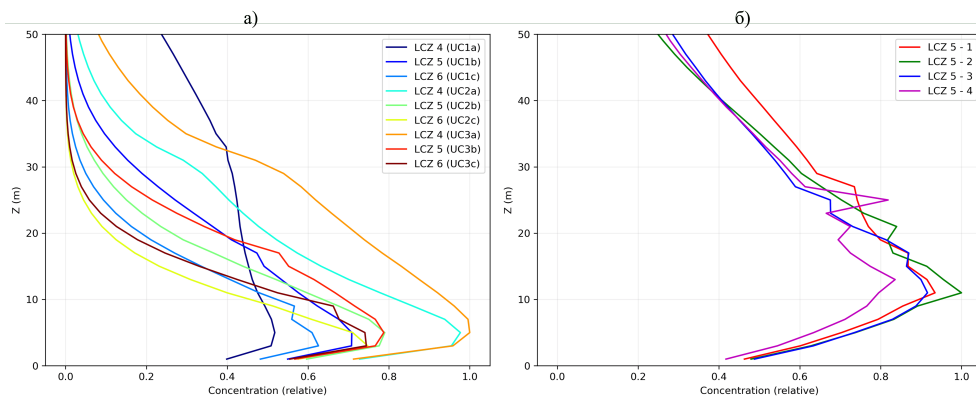


Рис. 3.6: Вертикальные профили концентрации для созданных вручную (а) и случайно сгенерированных (б) конфигураций, осреднённые по X и Y в пределах 50-метровой по оси X части области на расстоянии 100 метров от источника вдоль направления фонового ветра по оси X

Таким образом, в случае среднеэтажной открытой застройки (LCZ 5) как при ручном выборе значительно отличающихся геометрий зданий, так и при случайной их генерации различия между полученными для разных геометрий средними концентрациями оказались довольно малы – СКО и разброс на

порядок меньше, чем средняя концентрация на выбранной высоте, и примерно в 4 раза меньше, чем различия между тремя исследованными LCZ. Для ручной генерации аналогичная ситуация заметна и для низкоэтажной открытой застройки (LCZ 6). Однако в случае высокой открытой застройки даже при ручной генерации различия оказались очень большими и совпали по масштабу с различиями между разными типами застройки (разными LCZ). Следовательно, в зависимости от характеристик конкретной LCZ может значительно меняться масштаб изменчивости результатов для различных реализаций соответствующей геометрии застройки. Было выявлено, что для LCZ 5 эта изменчивость является низкой и, возможно, незначительной для определенных задач, а для LCZ 4, наоборот, свойственна высокая изменчивость, поэтому при моделировании данного типа застройки явно требуется рассматривать целый набор реализаций его геометрии.

2.3.2.2 Спектральный анализ расчетов турбулентных течений в городской среде и связь пространственных спектров с турбулентными масштабами длины

Одной из важных задач при разработке и настройке многослойных RANS-моделей турбулентности в городской среде является параметрическое описание турбулентных масштабов длины $l_{T\alpha}/h = \phi_\alpha(z/h, \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \dots)$, связанных с геометрическими характеристиками группы обтекаемых объектов (зданий) и, возможно, с иными воздействиями на турбулентность, например, с влиянием стратификации или с воздействием сил аэродинамического сопротивления слоя растительности. Здесь h – средняя толщина городского слоя, z – высота над поверхностью земли, $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \dots$ – конечный набор безразмерных морфологических параметров застройки, определяющих соответствующую безразмерную универсальную функцию ϕ_α . В отчете по данному проекту за 2023 год (раздел 2.3.II(б)) приводились определения различных масштабов длины, необходимых для построения многослойной RANS-модели городской турбулентности, основанной на замыкании 1.5-го порядка, и была показана чувствительность этих масштабов к динамическому воздействию слоя растительности.

К возможным морфологическим параметрам застройки можно отнести долю площади, занятой зданиями $\lambda_p = S_B/S_{tot}$ (здесь: S_{tot} – общая площадь поверхности земли, S_B – площадь горизонтального сечения зданий у поверхности) и отношение суммарной площади фронтальных сечений зданий к площади поверхности земли $\lambda_f = S_f/S_{tot}$. Общепринятым методом вычисления турбулентных масштабов длины является проведение больших серий LES-расчетов турбулентных течений при варьировании морфологии городского слоя [14–18]. Затем строятся эмпирические аппроксимации турбулентных масштабов, найденных из осредненных по времени и по горизонтали данных LES. На данный момент не существует консенсусного мнения по вопросу оптимального выбора определяющих морфологических параметров в число которых, помимо упомянутых выше λ_p и λ_f , могут входить параметры, отвечающие за ориентацию зданий, параметры, формализующие протяженность и ориентацию свободных пространств, а также параметры, отвечающие за форму объектов и вариации высот зданий (см., например, [18]). Перспективным направлением исследований городской турбулентности является LES-моделирование течений над поверхностями городского типа с искусственно-сгенерированной случайной геометрией

[19], удовлетворяющей набору признаков, выбранных согласно введенной в работе [12] классификации типов городской застройки на основе локальных климатических зон.

Описанный эмпирический подход не позволяет выявить физические причины вариаций искомых турбулентных масштабов длины. Это осложняет выбор определяющих морфологических параметров и не дает оснований для доказательного обоснования применимости выбранного турбулентного замыкания.

В работах [20, 21] было показано, что в пограничном слое атмосферы анализ пространственных спектров турбулентности над городской поверхностью может объяснить изменения масштабов длины под воздействием крупных шероховатостей и устойчивой стратификации и, тем самым, является удобным инструментом для построения моделей RANS. Однако, внутри городского слоя пространственный спектр не может быть вычислен напрямую вследствие наличия объектов.

Мы предложили и реализовали новый подход к спектральному анализу турбулентности в городской среде, основанный на применении гипотезы “замороженной турбулентности” Тейлора. Аналогии пространственных спектров скорости строились по данным LES-модели ИВМ РАН согласно следующему алгоритму:

- Дискретные поля значений вектора скорости $\mathbf{u}^*_{i,j,k}$ сохранялись в течение всего расчета с малым шагом по времени Δt_s .
- Вектор мгновенной скорости проектировался на локальное направление осредненного по времени течения $\tilde{\mathbf{u}} = \langle \bar{\mathbf{u}} \rangle_t$. Таким образом, в каждом из узлов диагностической сетки, строились временные ряды продольной скорости $u_{||}$ и ортогонального дополнения к ней \mathbf{u}_{\perp} :

$$u_{||} = (\mathbf{u}^*, \langle \bar{\mathbf{u}} \rangle_t) / |\langle \bar{\mathbf{u}} \rangle_t|, \quad (3.14)$$

$$\mathbf{u}_{\perp} \equiv (u_{\perp}, v_{\perp}, w_{\perp}) = \mathbf{u}^* - u_{||} \langle \bar{\mathbf{u}} \rangle_t / |\langle \bar{\mathbf{u}} \rangle_t|. \quad (3.15)$$

- Для того, чтобы избежать искажения мелкомасштабного участка спектров вследствие переноса мелкомасштабной турбулентности крупными вихрями (так называемый “sweeping effect”, см. [22, 23]), мы ограничили выборку только теми узлами сетки, в которых выполняется условие: $|\langle u_{||} \rangle_t| > 2\sigma_{u_{||}}$, где $\sigma_{u_{||}}$ – СКО продольной скорости. Таким образом, был получен набор временных рядов значений скорости в N_{sel} узлах сетки.
- Вычислялись спектральные плотности дисперсий компонент скорости $u_{||}$, u_{\perp} , v_{\perp} и w_{\perp} в зависимости от частоты f , а затем частотные спектры преобразовывались в пространственные согласно гипотезе Тейлора:

$$S_{u_{||}}^i(k_{||}^i) = \frac{|\langle u_{||}^i \rangle_t|}{2\pi} S_{u_{||}}^i(f); k_{||}^i = 2\pi f / |\langle u_{||}^i \rangle_t|, \quad i = 1, \dots, N_{sel}. \quad (3.16)$$

Аналогичным образом вычислялись наборы пространственных спектров $S_{u_{\perp}}^i(k_{||}^i)$, $S_{v_{\perp}}^i(k_{||}^i)$ и $S_{w_{\perp}}^i(k_{||}^i)$.

- Так как переносящая скорость $\langle u_{||}^i \rangle_t$ зависит от положения в пространстве, то вначале спектры интерполировались на общую сетку волновых чисел, а затем осреднялись по всей выборке.

В результате были получены следующие функции, отражающие некоторую среднюю по всему пространству зависимость энергии флуктуаций от их масштабов:

$$\begin{aligned} S_{u_{||}}(k_{||}) &= \frac{1}{N_{sel}} \sum_{i=1}^{N_{sel}} S_{u_{||}}^i(k_{||}), \\ S_{\mathbf{u}_{\perp}}(k_{||}) &= \frac{1}{N_{sel}} \sum_{i=1}^{N_{sel}} (S_{u_{\perp}}^i(k_{||}) + S_{v_{\perp}}^i(k_{||}) + S_{w_{\perp}}^i(k_{||})), \\ S_E(k_{||}) &= \frac{1}{2} (S_{u_{||}}(k_{||}) + S_{\mathbf{u}_{\perp}}(k_{||})), \end{aligned} \quad (3.17)$$

где $S_{\mathbf{u}_{\perp}}(k_{||})$ – суммарная спектральная плотность дисперсии двух компонент скорости, ортогональных к средней скорости течения $\langle \mathbf{u} \rangle_t$ (в локальной системе координат, в которой одна ось направлена вдоль среднего течения), а $S_E(k_{||})$ - аналог пространственного спектра турбулентной кинетической энергии.

Описанный алгоритм удобен тем, что помимо спектра энергии S_E вычисляются спектры продольной и ортогональных ей компонент скорости. Это позволяет оценить границу интервала изотропизации и количественно сравнить моделируемые спектры с теорией локально изотропной и однородной турбулентности Колмогорова.

Примеры построенных описанным образом спектров изображены на рис.3.7 для четырех различных идеализированных поверхностей городского типа с разными морфологическими параметрами.

Было показано, что вычисленные по данным модели спектры качественно и количественно согласуются с теоретическими зависимостями в инерционном интервале турбулентности. Это подтверждает качество разработанной LES-модели городской турбулентности.

Было показано, что изменения в пространственных спектрах, связанные с изменениями морфологии поверхности городского типа отражают соответствующие вариации турбулентных масштабов длины. В частности, мы обнаружили, что горизонтальные размеры объектов (“зданий”) определяют протяженность спектрального распределения и положение максимумов в спектре продольной скорости. Это объясняет увеличение “диссипативного” масштаба длины $l_{T\varepsilon} = c_{\varepsilon} E^{3/2} / \varepsilon$ при увеличении размеров “зданий” (здесь: E - кинетическая энергия флуктуаций, ε - скорость диссипации энергии). В свою очередь, увеличение $l_{T\varepsilon}$ является индикатором менее эффективной внутренней диссипации кинетической энергии флуктуаций, что на практике будет приводить к более высоким ее значениям внутри городского слоя, а следовательно, в том числе, и к улучшению вентиляции городской среды.

Было обнаружено, что при очень разреженной морфологии городской застройки (при малых значениях λ_p) пространственный спектр энергии турбулентных флуктуаций смещается в область больших

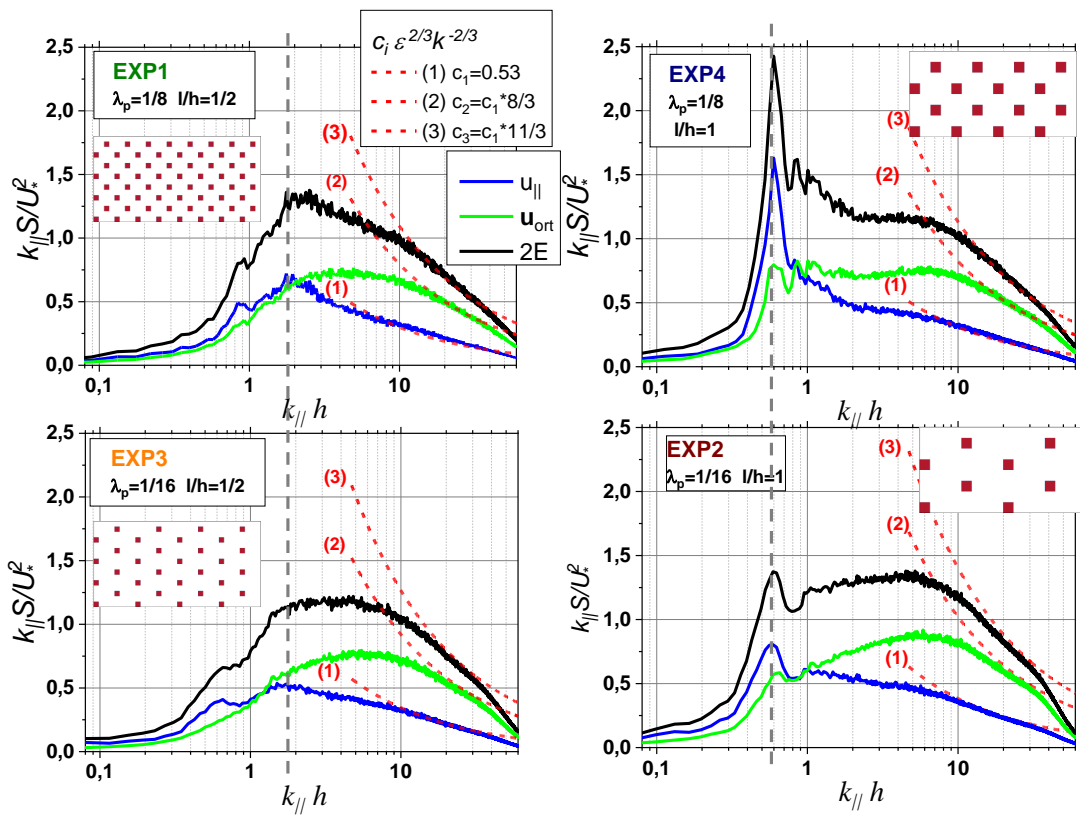


Рис. 3.7: Предумноженные нормированные спектры $k_{\parallel} S_{u_{\parallel}}(k_{\parallel})/U_*^2$ (синие кривые), $k_{\parallel} S_{u_{\perp}}(k_{\parallel})/U_*^2$ (зеленые кривые) и $k_{\parallel} S_E(k_{\parallel})/U_*^2$ (черные кривые); серыми пунктирными вертикальными линиями указано примерное положение максимумов в спектре продольной скорости $S_{u_{\parallel}}$; красные пунктирные кривые (1), (2) и (3) - ожидаемые спектры в инерционном интервале, согласно теории Колмогорова; на врезках изображены конфигурации ПГТ в каждом из расчетов (вид сверху); указаны значения λ_p и отношение горизонтального размера объектов к высоте h/l

волновых чисел, что объясняет уменьшение турбулентных масштабов длины, связанных с переносом импульса, то есть ослабление эффективности переноса импульса по вертикали.

Представленный метод спектрального анализа данных моделирования может применяться для исследования турбулентных течений при реалистичной конфигурации городской застройки. Кроме того, аналогичный подход применим к спектральному анализу данных натуральных пульсационных измерений в городе, где определение пространственных масштабов турбулентности затруднено вследствие фрагментарности данных и большой пространственной изменчивости среднего течения.

Результаты данного исследования более подробно описаны в работе [24] (в печати), выполненной при поддержке настоящего проекта.

Литература

- [1] Modeling of the dissipation rate of turbulent kinetic energy / EV Mortikov, AV Glazunov, AV Debolskiy et al. // *Doklady earth sciences*. — 2019. — Vol. 489. — Pp. 1440–1443.
- [2] One-and two-equation models for canopy turbulence / Gabriel G Katul, Larry Mahrt, Davide Poggi, Christophe Sanz // *Boundary-layer meteorology*. — 2004. — Vol. 113. — Pp. 81–109.
- [3] *Lopes A Silva, Palma JMLM, Lopes J Viana*. Improving a two-equation turbulence model for canopy flows using large-eddy simulation // *Boundary-layer meteorology*. — 2013. — Vol. 149. — Pp. 231–257.
- [4] *Glazunov Andrey V, Debolskiy Andrey V, Mortikov Evgeny V*. Turbulent length scale for multilayer RANS model of urban canopy and its evaluation based on large-eddy simulations // *Supercomputing Frontiers and Innovations*. — 2021. — Vol. 8, no. 4. — Pp. 100–116.
- [5] Fully conservative higher order finite difference schemes for incompressible flow / Yohei Morinishi, Thomas S Lund, Oleg V Vasilyev, Parviz Moin // *Journal of computational physics*. — 1998. — Vol. 143, no. 1. — Pp. 90–124.
- [6] *Vasilyev Oleg V*. High order finite difference schemes on non-uniform meshes with good conservation properties // *Journal of Computational Physics*. — 2000. — Vol. 157, no. 2. — Pp. 746–761.
- [7] *van Stratum BJH, van Heerwaarden Chiel C, Vilà-Guerau de Arellano Jordi*. The Benefits and Challenges of Downscaling a Global Reanalysis With Doubly-Periodic Large-Eddy Simulations // *Journal of Advances in Modeling Earth Systems*. — 2023. — Vol. 15, no. 10. — P. e2023MS003750.
- [8] *Mortikov Evgeny V., Glazunov Andrey V., Lykosov Vasily N*. Numerical study of plane Couette flow: turbulence statistics and the structure of pressure–strain correlations // *Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling*. — 2019. — Vol. 34, no. 2. — Pp. 119–132. — URL: <https://www.degruyter.com/document/doi/10.1515/rnam-2019-0010/html>.
- [9] *Kadantsev Evgeny, Mortikov Evgeny, Zilitinkevich Sergej*. The resistance law for stably stratified atmospheric planetary boundary layers // *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*. — 2021. — Vol. 147, no. 737. — Pp. 2233–2243. — URL: <https://rmets.onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/qj.4019>.

- [10] Large-Eddy Simulation and Parameterization of Decaying Turbulence in the Evening Transition of the Atmospheric Boundary Layer / E. V. Tkachenko, A. V. Debolskiy, E. V. Mortikov, A. V. Glazunov // *Izvestiya, Atmospheric and Oceanic Physics*. — 2022. — Vol. 58, no. 3. — Pp. 219–236. — URL: <https://link.springer.com/10.1134/S0001433822030112>.
- [11] Evaluation of Surface Layer Stability Functions and Their Extension to First Order Turbulent Closures for Weakly and Strongly Stratified Stable Boundary Layer / Andrey V. Debolskiy, Evgeny V. Mortikov, Andrey V. Glazunov, Christof Lüpkes // *Boundary-Layer Meteorology*. — 2023. — Vol. 187, no. 1-2. — Pp. 73–93. — URL: <https://link.springer.com/10.1007/s10546-023-00784-3>.
- [12] Stewart I. D., Oke T. R. Local Climate Zones for Urban Temperature Studies // *Bulletin of the American Meteorological Society*. — 2012. — Vol. 93, no. 12. — Pp. 1879–1900. — URL: <https://journals.ametsoc.org/doi/10.1175/BAMS-D-11-00019.1>.
- [13] Numerical Simulation of Particulate Matter Transport in the Atmospheric Urban Boundary Layer Using Lagrangian Approach: Physical Problems and Parallel Implementation / Alexander Ivanovich Var-entsov, Ochir Anatolievich Imeev, Andrey Vasilievich Glazunov et al. // *Proceedings of the Institute for System Programming of the RAS*. — 2023. — Vol. 35, no. 4. — Pp. 145–164. — URL: <https://ispranproceedings.elpub.ru/jour/article/view/1700>.
- [14] Nazarian N., Krayenhoff E. S., Martilli A. A one-dimensional model of turbulent flow through “urban” canopies (MLUCM v2.0): updates based on large-eddy simulation // *Geoscientific Model Development*. — 2020. — Vol. 13, no. 3. — Pp. 937–953. — URL: <https://gmd.copernicus.org/articles/13/937/2020/>.
- [15] A one-dimensional urban flow model with an eddy-diffusivity mass-flux (EDMF) scheme and refined turbulent transport (MLUCM v3.0) / J. Lu, N. Nazarian, M. A. Hart et al. // *Geoscientific Model Development*. — 2024. — Vol. 17, no. 7. — Pp. 2525–2545. — URL: <https://gmd.copernicus.org/articles/17/2525/2024/>.
- [16] Turbulence Characteristics Across a Range of Idealized Urban Canopy Geometries / Lewis P. Blunn, Omduth Coceal, Negin Nazarian et al. // *Boundary-Layer Meteorology*. — 2022. — Vol. 182, no. 2. — Pp. 275–307.
- [17] Representing the effects of building height variability on urban canopy flow / Jiachen Lu, Negin Nazarian, Melissa Anne Hart et al. // *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*. — 2024. — Vol. 150, no. 758. — Pp. 46–67. — URL: <https://rmets.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/qj.4584>.
- [18] Novel Geometric Parameters for Assessing Flow Over Realistic Versus Idealized Urban Arrays / Jiachen Lu, Negin Nazarian, Melissa Anne Hart et al. // *Journal of Advances in Modeling Earth Systems*. — 2023. — Vol. 15, no. 7. — P. e2022MS003287. — e2022MS003287 2022MS003287. URL: <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2022MS003287>.

- [19] Drag Coefficient and Turbulence Mixing Length of Local Climate Zone-Based Urban Morphologies Derived Using Obstacle-Resolving Modelling / Tim Nagel, Robert Schoetter, Victor Bourgin et al. // *Boundary-Layer Meteorology*. — 2023. — Vol. 186, no. 3. — Pp. 737–769.
- [20] Glazunov A. V. Numerical modeling of turbulent flows over an urban-type surface: Computations for neutral stratification // *Izv. Atmos. Ocean. Phys. (Engl. Transl.)*. — 2014. — Vol. 50, no. 2. — Pp. 134–142. — <https://doi.org/10.1134/S0001433814010034>.
- [21] Glazunov A. V. Numerical simulation of stably stratified turbulent flows over an urban surface: Spectra and scales and parameterization of temperature and wind-velocity profiles // *Izv. Atmos. Ocean. Phys. (Engl. Transl.)*. — 2014. — Vol. 50, no. 4. — Pp. 356–368. — <https://doi.org/10.1134/S0001433814040148>.
- [22] Kraichnan Robert H. Kolmogorov's hypotheses and Eulerian turbulence theory // *The Physics of Fluids*. — 1964. — Vol. 7, no. 11. — Pp. 1723–1734.
- [23] Lumley J.L. Interpretation of time spectra measured in high-intensity shear flows // *The physics of fluids*. — 1965. — Vol. 8, no. 6. — Pp. 1056–1062.
- [24] Глазунов А.В., Мортиков Е.В., Дебольский А.В. Масштабы длины турбулентности в городской среде и их связь со спектром флуктуаций скорости // *Гидрометеорологические исследования и прогнозы*. — 2024 (принята к печати).

Задача 2.4. Разработка модели динамики морского льда.

- Проведение методологических и тестовых расчетов по ретроспективному прогнозу состояния льда с использованием полной модели динамики и термодинамики льда с применением технологии усвоения данных.

2.4.1 Оценка качества модели морского льда

Разработанная в ИВМ РАН модель Земной системы (Volodin et. al, 2024 [1]) имеет в своем составе блок морского льда, который позволяет рассчитывать скорость дрейфа, толщину и сплоченность (концентрацию) льда.

Прежде всего было сделано сравнение сплоченности и толщины льда, полученного в конфигурации с заданным состоянием атмосферы (протокол CORE-II, [2]). Согласно этому протоколу, в свое время было проведено масштабное сравнение различных моделей океана и морского льда – в том числе и относительно воспроизведения состояния льда и воды Северного Ледовитого океана. Этот проект был обязательной частью международной деятельности по моделированию климата CMIP (Climate Model Intercomparison Project), фаза 5. Модель ИВМ РАН в этом сравнении не участвовала, что является недостатком с точки зрения участия модели Земной системы ИВМ РАН в CMIP. С начала 2025 года начинается 7 фаза CMIP, в котором так же, как и в CORE-II, будет проводиться обязательное сравнение моделей океана и морского льда по заданному протоколу атмосферного воздействия. Неучастие в подпроекте по сравнению моделей океана и морского льда автоматически исключает всю климатическую модель из проекта. Поэтому очень важно провести сравнение существующей версии модели морского льда ИВМ РАН относительно данных наблюдений и других моделей, и внести необходимые улучшения до начала активной фазы расчетов CMIP-7 (в ходе расчетов конфигурация и настройки модели не меняются).

Результаты работы большого числа моделей в рамках CORE-II анализируются в работе (Qiang Wang et.al., 2016, [3]), на которую мы в основном и опирались. Был повторен расчет состояния Мирового

океана и морского льда с заданным атмосферным воздействием, как предписано протоколом CORE-II, сделано 5 циклов по 60 модельных лет «разгона» модели 1948-2008 гг, затем рассчитывался 6-й цикл, который и анализировался. Наибольшие проблемы при моделировании морского льда Северного Ледовитого океана вызывает летний (сентябрь) минимум ледовитости. Рассматривался сентябрь 2007 года, который был аномальным с точки зрения площади льда и структуры области, занятой льдом. Далеко не все модели CORE-II смогли воспроизвести наблюдаемую сплоченность (спутниковые данные по сплоченности из архива NSIDC (National Snow and Ice Data Center, США, [4]) показаны в нижнем правом углу (Рис. 4.1 а). Сравнение с данными модели ИВМ РАН (рис. 4.1 б) показывает, что модель хорошо воспроизводит наблюдаемое состояние льда, в качестве недостатка можно указать то, что поле сплоченности слишком сглаженное, и недостаточно хорошо воспроизводится «мост» от Северного полюса к берегам Сибири. Сплоченность льда у берегов Гренландии завышена во всех моделях, в том числе и в модели ИВМ РАН. Предполагается, что это связано с постановкой условия прилипания для скорости дрейфа на твердой границе модельной области – недостаток может быть исправлен либо постановкой условия скольжения, либо специальным сгущением сетки (как это делается в модели FESOM Института Альфреда Вегенера, Бремерхафен, Германия (AWI). Улучшение воспроизведения сплоченности льда в модели ИВМ РАН по сравнению с предыдущими версиями было достигнуто, в частности, под влиянием результатов по использованию более точных схем переноса, полученных при разработке новой модели морского льда в рамках данного проекта.

Основная часть моделей CORE-II неплохо воспроизводит структуру и характерные значения толщины льда (Рис. 4.2), данные сравниваются со спутниковыми данными IceSAT ([5]) за зимние месяцы 2004-2007 гг. (летом точность измерения толщины льда падает). Основными особенностями результатов модели ИВМ РАН (Рис. 4.2 вверху) являются высокое значение максимума толщины льда в море Бофорта и толстый лед у берега Чукотки. Такая структурная особенность поля толщины льда может быть связана с выбором метода расчета скорости дрейфа и учета процессов торошения льда. Опыт, полученный при выполнении проекта, позволяет произвести более оптимальный выбор численных схем и методов, применяемых при расчете динамики льда.

2.4.2 Усвоение данных для задач прогноза

Важная сфера применения модели Земной системы – сезонный прогноз погоды ИВМ РАН-ГМЦ (Хан и др., 2024, [6]). Одним из компонентов прогноза является предсказание состояния льда Северного Ледовитого океана. Модель дает удовлетворительный прогноз состояния льда, однако отмечается, что в задачах сезонного прогноза в Арктике наблюдается существование так называемого *летнего барьера предсказуемости*. Предположительно, барьер может быть преодолен за счет более точного задания начальных условий в конце арктического лета (в сентябре). Для этого используются различные технологии спутниковых и контактных измерений, а также системы усвоения данных наблюдений в моделях.

В задачах *реанализа* – анализа данных для климата – широко используется система PIOMAS ([7]), использующая довольно простую методику усвоения данных по сплоченности, скорости дрейфа и толщине льда (метод релаксации, [8]), а также по температуре поверхности океана. Для задач прогноза погоды на различные сроки в последние 5 лет стали использовать сложные системы усвоения, основанные на ансамблевых фильтрах Калмана (EnKF, [9]) или ансамблевых методах оптимальной интерполяции (EnOI). Пример удачного использования метода оптимальной интерполяции ([10]), когда модель использует спутниковые данные по уровню моря и подправляет не только модельный уровень моря, но и поля температуры и солености по всей глубине. Это связано с тем, что динамика океана связывает между собой изменения уровня моря, температуры и солености, в связи с чем усвоение этих величин не может рассматриваться независимо друг от друга.

Такая же ситуация происходит с усвоением данных по морскому льду, когда сплоченность льда, толщина льда, скорость дрейфа, скорость течений океана, уровень океана, температура и соленость океана, а также характеристики приводного слоя атмосферы тесно связаны между собой через динамику и термодинамику, и не могут рассматриваться независимо. Новые возможности в мощности вычислительных систем и в полноте получаемых данных позволили перейти на новый уровень. При этом часто в качестве блока усвоения используется стандартный пакет PDAF, который используется независимо от моделей динамики атмосферы-океана-льда ([11], [12], [13]) – это избавляет разработчиков от необходимости строить сопряженную модель, как это делают при применении вариационных методов.

К сожалению, в настоящее время спутниковые наблюдения недостаточно регулярны и могут содержать большие ошибки, поэтому полезно реализовать схему усвоения только сплоченности льда с коррекцией модельной толщины льда.

В модели ИВМ РАН для описания морского льда используются характеристики сплоченности льда (безразмерная величина, характеризующая относительную долю занятого льдом океана, варьируется от 0 до 1) и средней толщины льда. На основании этих характеристик вычисляется масса льда. Уравнения для льда представляют собой следствие закона сохранения массы с учетом фазовых переходов при термодинамических процессах. Уравнение для сплоченности рассматривается как эмпирическое соотношение. Решаются три уравнения с заданной скоростью дрейфа \mathbf{u}_i :

$$\frac{\partial m_i}{\partial t} + \nabla(\mathbf{u}_i m_i) = Q_h + \gamma_{si} m_s + F_L,$$

$$\frac{\partial m_s}{\partial t} + \nabla(\mathbf{u}_i m_s) = Q_s - \gamma_{si} m_s - F_L,$$

$$\frac{\partial A}{\partial t} + \nabla(\mathbf{u}_i A) = Q_A.$$

Здесь Q_h, Q_s, Q_A – слагаемые, описывающие изменения массы льда m_i , массы снега m_s и их сплоченности A при термодинамических процессах и в результате выпадения осадков, $-\gamma_{si} m_s$ – уплотнение снега, F_L – намokание снега и превращение его в лёд.

Для обеспечения неотрицательности решения в дискретной модели используется схема 1-го порядка по пространству против потока (upwind). Схема переноса реализована на криволинейной ортогональной сетке со смещенными полюсами, используемой в модели динамики океана.

В этом исследовании использовались ежедневные данные о сплоченности морского льда в Арктике. Выполняется усвоение данных с периодом в месяц. В первую очередь рассматривается эффективность ассимиляции данных, изменение воспроизведения характеристик морского льда в различных регионах после завершения усвоения.

В простейшем случае усвоение данных формулируется в обозначениях, представленных Ф.Бутье и П.Кортье ([14]). Для переменной x мы обозначаем фоновое состояние модели x^b , а наблюдаемое состояние x^o . На каждом шаге по времени рассчитывается разница между этими величинами, называемая коррекцией δx . Коррекция Δx также называется обновлением анализа, а исправленное состояние модели $x^a = x^b + \Delta x$ называется анализом.

2.4.2.1 Обновление анализа сплоченности льда

Модель получает анализ ледовой концентрации на каждом шаге по времени (в данном случае шаг по времени равен 30 минутам), фоновые данные спутниковых наблюдений меняются раз в день.

В упрощенной формулировке анализ ледовой концентрации выглядит следующим образом:

$$C^a = C^b + \Delta C \text{ with } \Delta C = K_N(C^o - C^b).$$

Поскольку задача усвоения часто рассматривается как задача работы с зашумленными данными (с ошибкой как в данных наблюдения, так и в модельных данных), необходимо было выбрать подходящий весовой коэффициент K_N . Исходя из предположения, что на кромке льда соотношение сигнал/шум хорошее (т.е. больше 1), мы используем весовой коэффициент следующего вида:

$$K_N = \frac{|C^o - C^b|^\alpha}{|C^o - C^b|^\alpha + R_{obs}^2},$$

где R_{obs}^2 - дисперсия ошибок наблюдений, а коэффициент α обозначает, что чем сильнее различаются между собой данные модели и наблюдений, тем быстрее происходит усвоение. С опорой на исследования [8] в данной работе используются фиксированные значения $R_{obs} = 0.05$ и $\alpha = 6$.

2.4.2.2 Обновление анализа толщины льда

Для климатических исследований наиболее важными параметрами морского льда являются сплоченность морского льда, которая представляет собой долю площади поверхности, покрытой морским

льдом, и средняя толщина морского льда, которая представляет собой объем морского льда, приходящийся на площадь поверхности. Данные наблюдений по сплоченности льда в Арктике существуют с конца 1970-х годов. Сплоченность определяется достаточно точно и круглогодично, в отличие от данных о средней толщине льда. Данных наблюдений за толщиной льда гораздо меньше, чем данных о сплоченности льда, и они не так точны. Существует неопределённость в полученных значениях истинной толщины льда из-за покрывающего его снега или луж. Спутниковые наблюдения не постоянны и могут содержать большую погрешность. Начальные условия, полученные в результате усвоения подобных данных, наследуют неопределенность, которая, в свою очередь, серьезно ограничивает надежность прогнозов состояния морского льда. Исследования показали, что использование данных наблюдаемой сплоченности морского льда в моделях ледяного океана улучшает воспроизведение ледовых характеристик. Однако, усвоение толщины льда может легко ухудшить характеристики модели, если будут выбраны неподходящие методы ассимиляции. По этой причине, был выбран подход, в котором для непосредственного усвоения используются данные только по сплоченности льда в Арктике.

Существует несколько различных подходов к обновлению анализа толщины льда на основании данных ледовой сплоченности.

Метод обновления анализа с сохранением средней толщины (СМТ) предполагает, что обновление средней толщины льда всегда равно нулю, независимо от обновления значения сплоченности льда:

$$\Delta h_m = 0.$$

Анализ толщины льда задаётся формулой:

$$h_t^a = h_t^b \frac{C^b}{C^a}.$$

В работе [15] данный метод называют лучшим в условиях, когда ошибка модели в основном обуславливается переносом характеристик.

Метод обновления анализа с сохранением фактической толщины (САТ) основывается на предположении, что модель корректно воспроизводит состояние толщины льда. При этом $\Delta h_t \equiv h_t^a - h_t^b = 0$. Это будет гарантировано в случае, если:

$$\Delta h_m = h_t^b \Delta C,$$

где $h_t^b = h_t^b(x, y, t)$ — пространственно и временно изменяющаяся фактическая толщина в модельных данных [15]. Данный метод работает лучше всего, когда ошибка модели в основном связана с термодинамикой.

Были изучены различные подходы в усвоении толщины льда. Для реализации в модели был выбран метод **обновления анализа пропорционально средней величине (РМТ)**, представленный в статье [16], который является смесью методов обновления анализа с сохранением средней толщины (СМТ)

и обновления анализа с сохранением фактической толщины (САТ). Этот метод дает более детальное представление о ледовой обстановке по сравнению с простыми средними показателями, которые имеют большую погрешность из-за неоднородности толщины льда. Толщина льда неравномерно распределена по региону. Простые средние значения могут скрывать важные пространственные различия, например, участки с более толстым или более тонким льдом. Анализ пропорциональной средней толщины учитывает эту неоднородность на основе пространственного распределения толщины льда. В этом методе используются средневзвешенные значения, при которых значения толщины взвешиваются по площади, которую они представляют:

$$\Delta h_m = h^* \Delta C,$$

где константа пропорциональности h^* является свободным параметром. На основании исследований была выбрана величина $h^* = 2$ м.

Этот метод гарантирует, что более крупные участки с более толстым слоем льда в большей степени влияют на общую среднюю толщину, обеспечивая более точное представление о ледовых условиях.

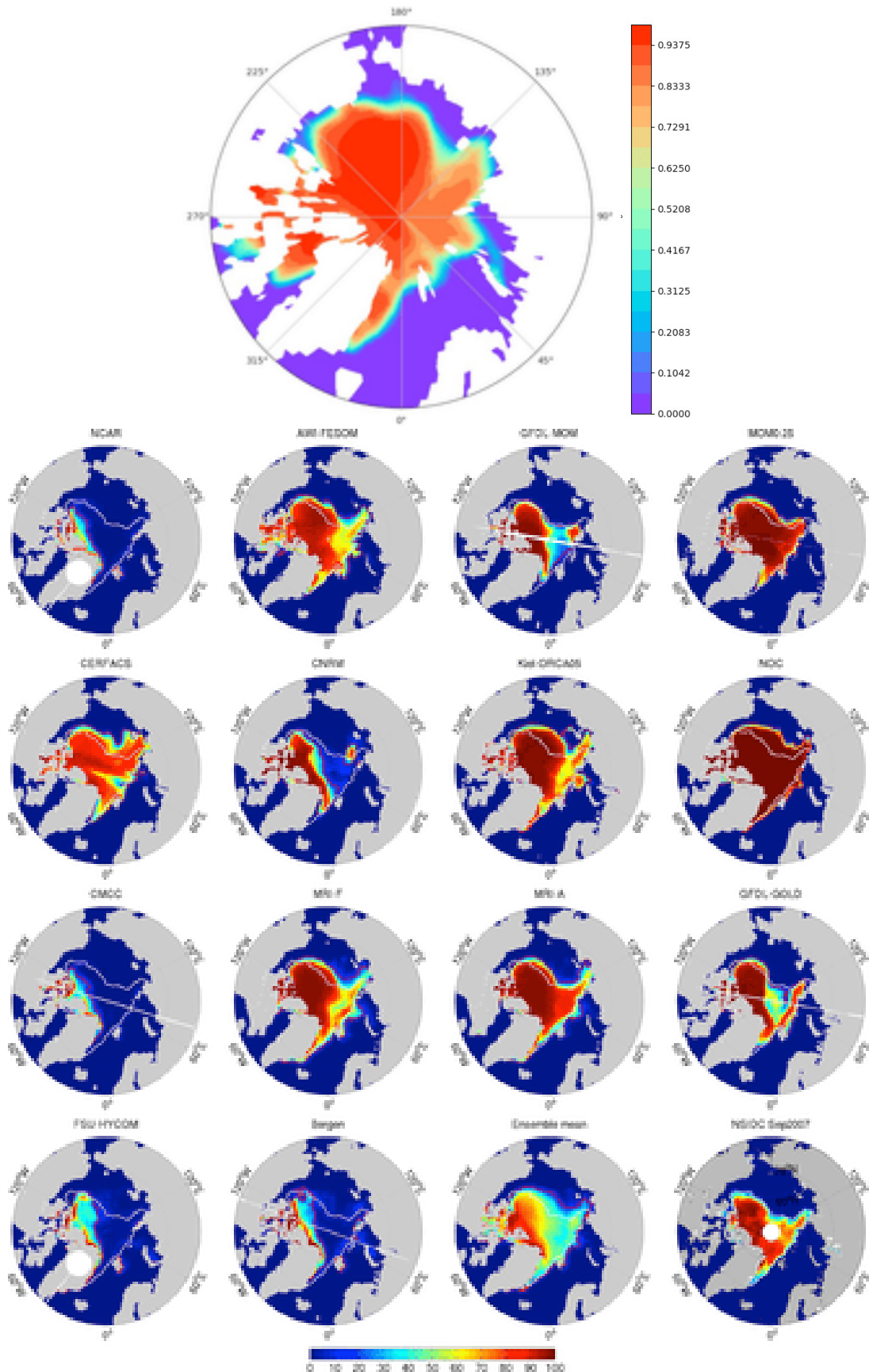


Рис. 4.1: Наблюдаемая и моделируемая концентрация морского льда [%] за сентябрь 2007 г. В рядах сверху вниз представлены данные: (1) модели ИВМ РАН, (2) NCAR, AWI-FESOM, GFDL-MOM, MOM0.25, (3) CERFACS, CNRM, Kiel-ORCA0.5, NOC, (4) CMCC, MRI-F, MRI-A, GFDL-GOLD, (5) FSU-HYCOM, Bergen, средние по мультимодельному ансамблю, спутниковые данные NSIDC

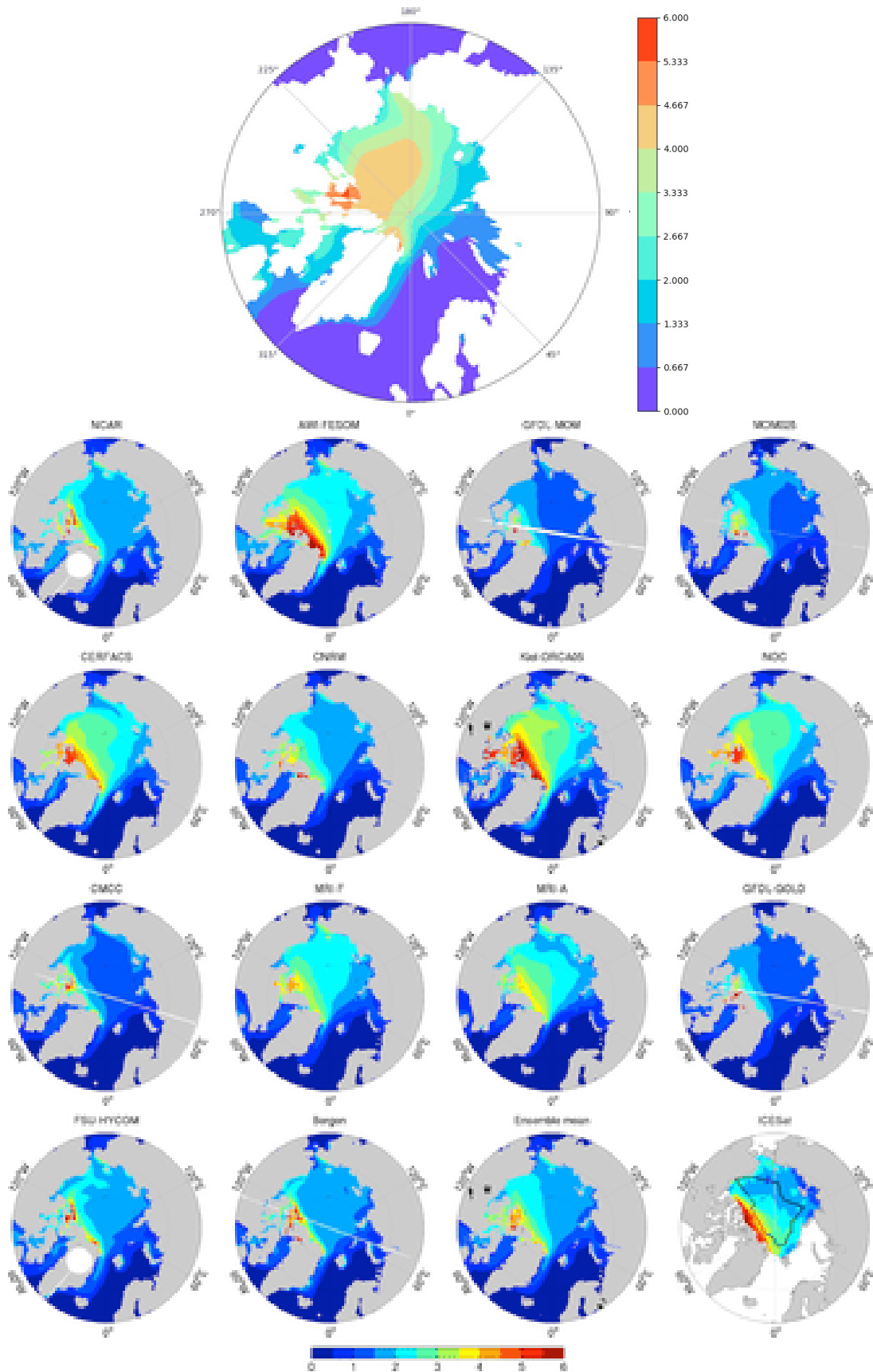


Рис. 4.2: Наблюдаемая и моделируемая толщина морского льда [м], средние за весенние сезоны (февраль, март и апрель) 2004-2007 гг.

В рядах сверху вниз представлены данные: (1) модели ИВМ РАН, (2) NCAR, AWI-FESOM, GFDL-MOM, MOM0.25, (3) CERFACS, CNRM, Kiel-ORCA0.5, NOC, (4) CMCC, MRI-F, MRI-A, GFDL-GOLD, (5) FSU-HYCOM, Bergen, средние по мультимодельному ансамблю, спутниковые данные ICESat

2.4.3 Численные эксперименты и результаты

В рамках выполнения проекта был реализован блок усвоения данных для ледовых характеристик в полной модели динамики и термодинамики морского льда (составной части климатической модели Земли ИВМ РАН) для выполнения расчетов на параллельных вычислительных системах.

Спутниковые данные по сплоченности морского льда NSIDC находятся в открытом доступе и представляют собой исчерпывающие ежедневные и ежемесячные наборы данных о протяженности и концентрации морского льда в Арктике/Антарктике с ноября 1978 года по настоящее время, что делает их одним из самых длинных непрерывных наборов экологических данных. Данные поступают от пассивных микроволновых спутниковых датчиков, начиная с Nimbus-7 SMMR в октябре 1978 года и заканчивая датчиками DMSP SSM/I и SSMIS 2. Данные представлены с пространственным разрешением 25×25 км².

Для сравнения воспроизведения толщины льда в модели с усвоением данных и без него, данные по среднемесячной толщине льда были взяты из реанализа. PIOMAS предоставляет данные о толщине морского льда в высоком разрешении, которое позволяет проводить детальный анализ региональных изменений толщины льда. Модель использует данные из нескольких источников, включая спутниковые наблюдения (например, со спутника ICESat, который отслеживает состояние льда, облаков и рельефа местности) и измерения на месте. Этот процесс обработки повышает точность и надежность оценок толщины льда.

Блок усвоения данных для ледовых характеристик в рамках полной модели динамики и термодинамики морского льда поддерживает считывание как суточных, так и месячных данных наблюдений, а также интерполяцию считанных данных на модельную сетку с последующей ассимиляцией. У пользователя есть возможность указать в конфигурационном файле временной промежуток считывания данных с точностью до суток, а также период усвоения полученных данных.

Блок усвоения производит ассимиляцию данных ледовой сплоченности, полученной из спутниковых данных (NSIDC), в полную модель динамики и термодинамики льда с помощью частного случая метода оптимальной интерполяции. Усвоение толщины льда производится методом обновления анализа пропорциональной средней толщины (PMT).

Были проведены методологические и тестовые расчеты по ретроспективному прогнозу состояния льда с использованием полной модели динамики и термодинамики льда с применением технологии усвоения данных. Методологический анализ показал необходимость учета, при усвоении ледовых данных, не только ледовых характеристик, но также верхних слоёв океана (температура, солёность, скорость течений) и нижних слоёв атмосферы (температура, скорость ветра), что является более сложной задачей.

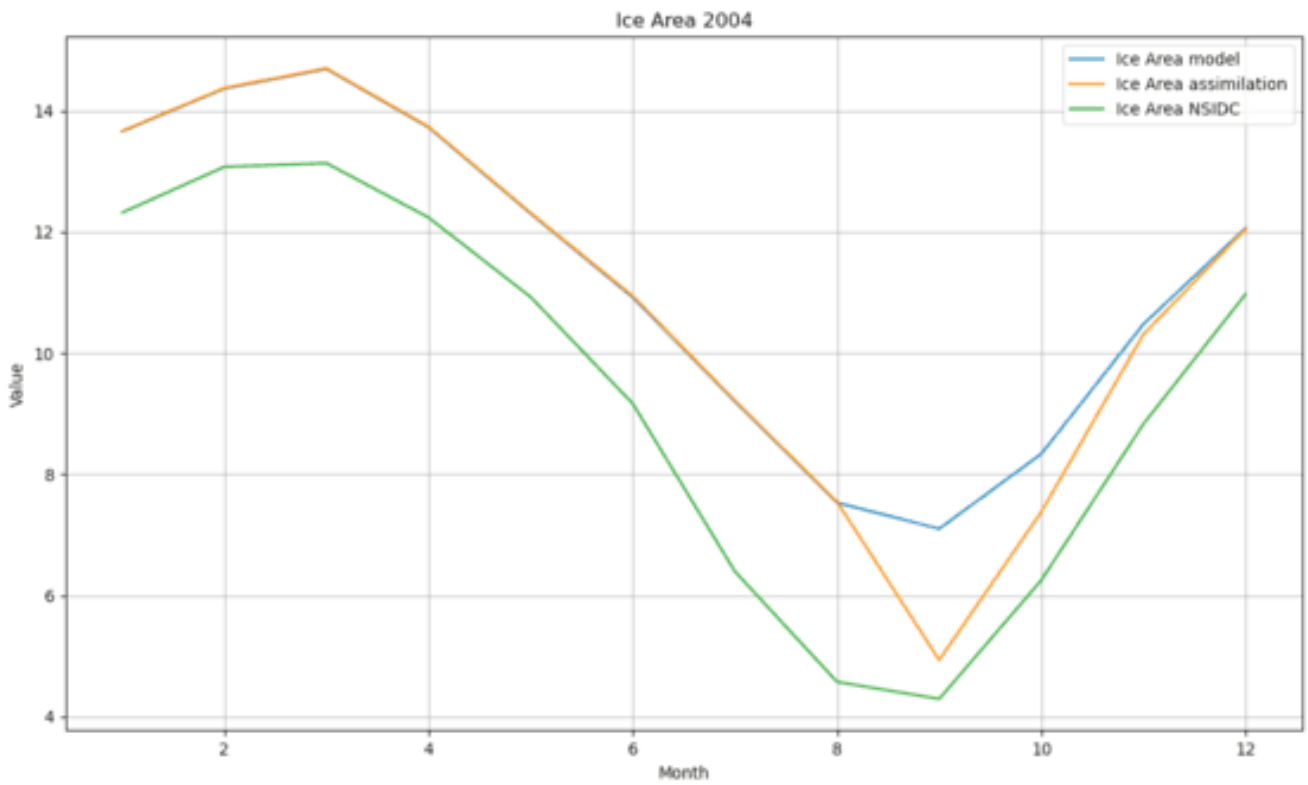


Рис. 4.3: Годовая изменчивость площади льда [10^6 км²] с усвоением (желтая линия) с 1 по 30 сентября и без усвоения (синяя) в сравнении с реанализом PIOMAS (зеленая)

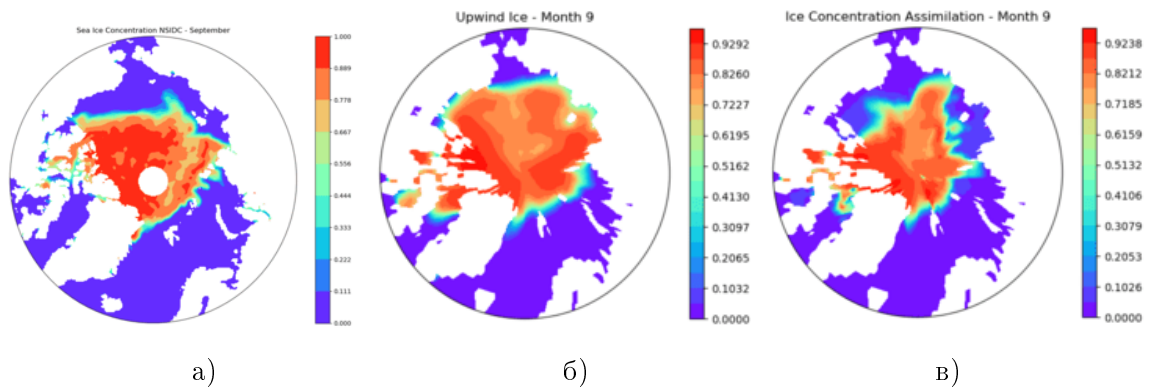


Рис. 4.4: Среднемесячная сплоченность морского льда в Арктике сентябрь 2004 г.: а) по данным спутниковых наблюдений NSIDC; б) данные модели ИВМ РАН без усвоения; в) данные модели ИВМ РАН с усвоением с 1 по 30 сентября суточных данных наблюдений

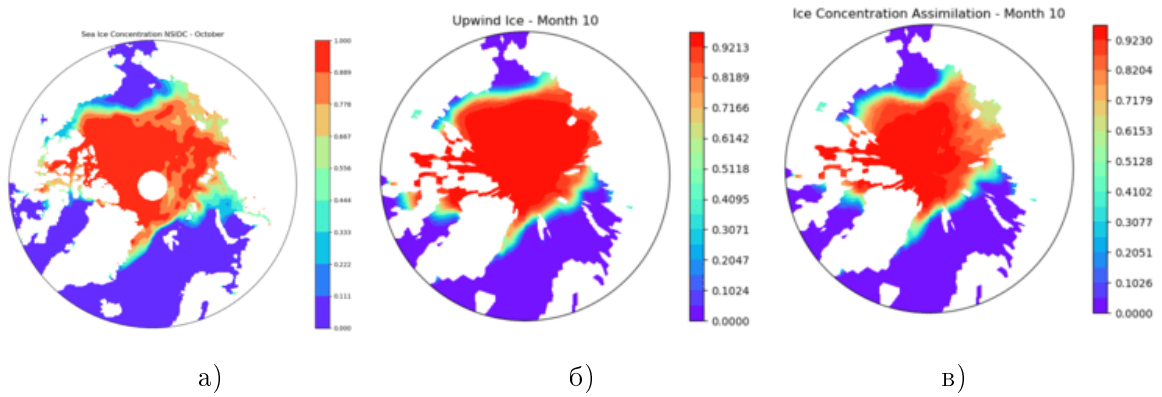


Рис. 4.5: Среднемесячная сплоченность морского льда в Арктике октябрь 2004 г.: а) по данным спутниковых наблюдений NSIDC; б) данные модели ИВМ РАН без усвоения; в) данные модели ИВМ РАН с усвоением с 1 по 30 сентября суточных данных наблюдений

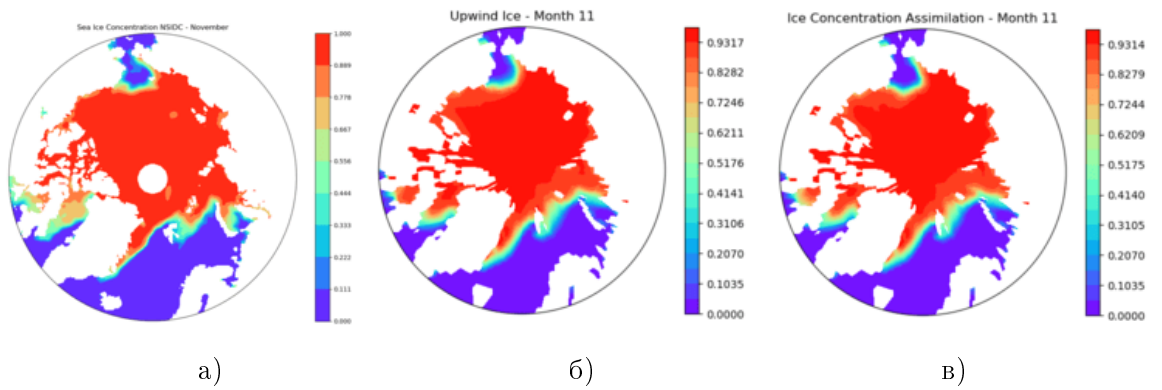


Рис. 4.6: Среднемесячная сплоченность морского льда в Арктике ноябрь 2004 г.: а) по данным спутниковых наблюдений NSIDC; б) данные модели ИВМ РАН без усвоения; в) данные модели ИВМ РАН с усвоением с 1 по 30 сентября суточных данных наблюдений

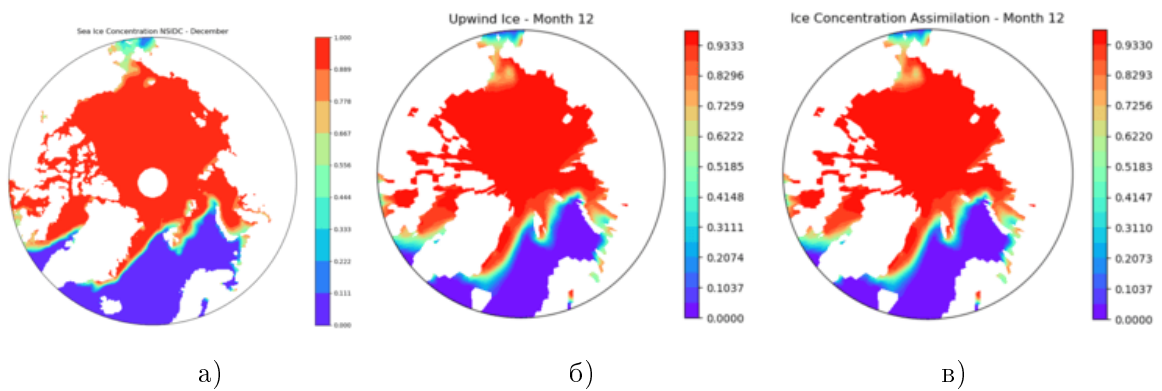


Рис. 4.7: Среднемесячная сплоченность морского льда в Арктике декабрь 2004 г.: а) по данным спутниковых наблюдений NSIDC; б) данные модели ИВМ РАН без усвоения; в) данные модели ИВМ РАН с усвоением с 1 по 30 сентября суточных данных наблюдений

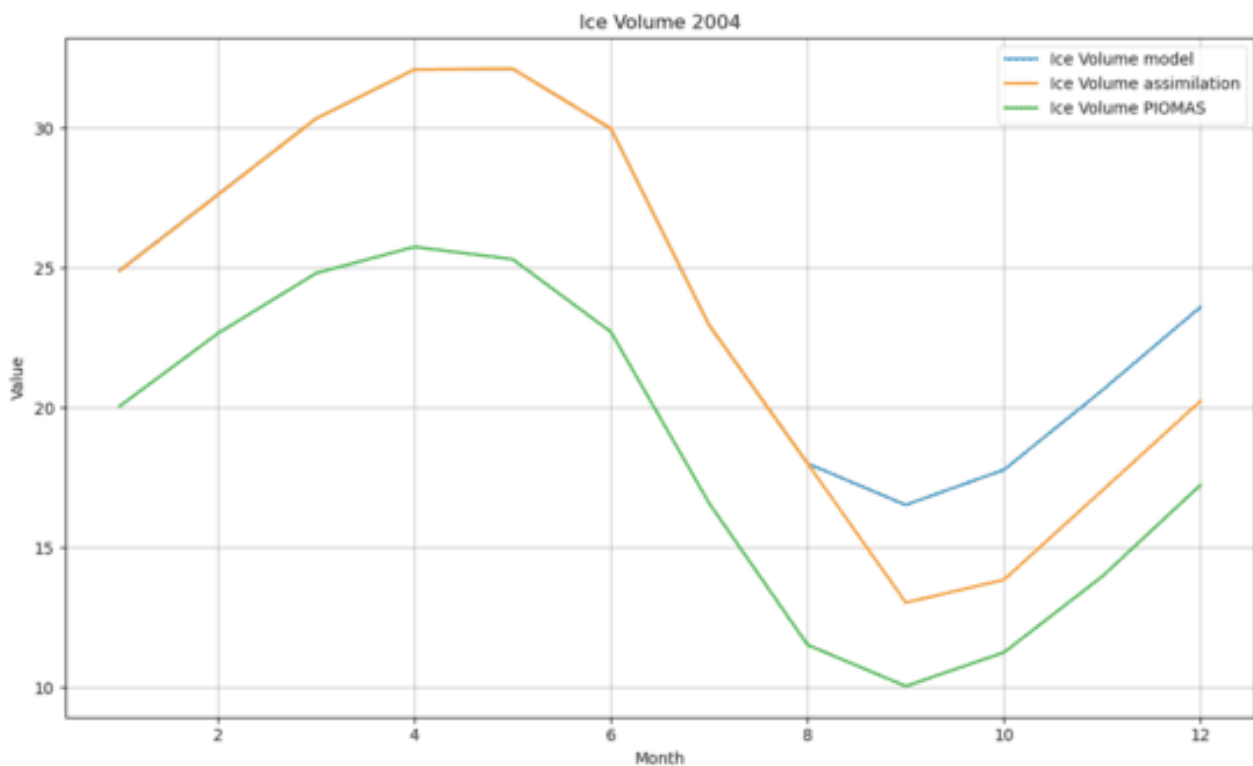


Рис. 4.8: Годовая изменчивость объема льда [10^6 км^3] с усвоением (желтая линия) с 1 по 30 сентября 2004 г. и без усвоения (синия) в сравнении с реанализом PIOMAS (зеленая)

2.4.4 Обсуждение результатов и Выводы

Сравнение модели морского льда (как части модели океан-морской лед ИВМ РАН) с данными наблюдений и с результатами моделей проекта CORE-II показывает, что рассматриваемая модель в целом хорошо воспроизводит площадь океана, покрытую льдом, выдавая результаты, схожие с результатами многих участников проекта. По сравнению с данными наблюдений можно отметить, что модель завышает сплоченность в области океана, занятую льдом. Такая особенность видна и в результатах других моделей. Общепринятого объяснения такого эффекта нет, можно предполагать, что это связано с особенностями неоднородного пограничного слоя океана в области, покрытой погруженным в воду льдом. Тонкие структуры состояния океана в областях открытой воды между льдинами не описываются в крупномасштабных моделях, что и приводит к такому результату.

С точки зрения воспроизведения толщины льда в модели ИВМ РАН есть отличия от наблюдений и от результатов других моделей. Предполагается, что это связано как с довольно простой схемой термодинамики льда, так и с недостатками численной схемы для расчета скорости дрейфа. В ходе выполнения проекта эти вопросы были изучены в рамках более сложной с точки зрения численной реализации отдельной модели льда, не соединенной с моделью океана. Было показано, что сходимость обычного метода интегрирования уравнений динамики льда с вязко-пластичной реологией – так называемой упруго-вязко-пластичной реологии (EVP) очень плохая. Были предложены более быстрые

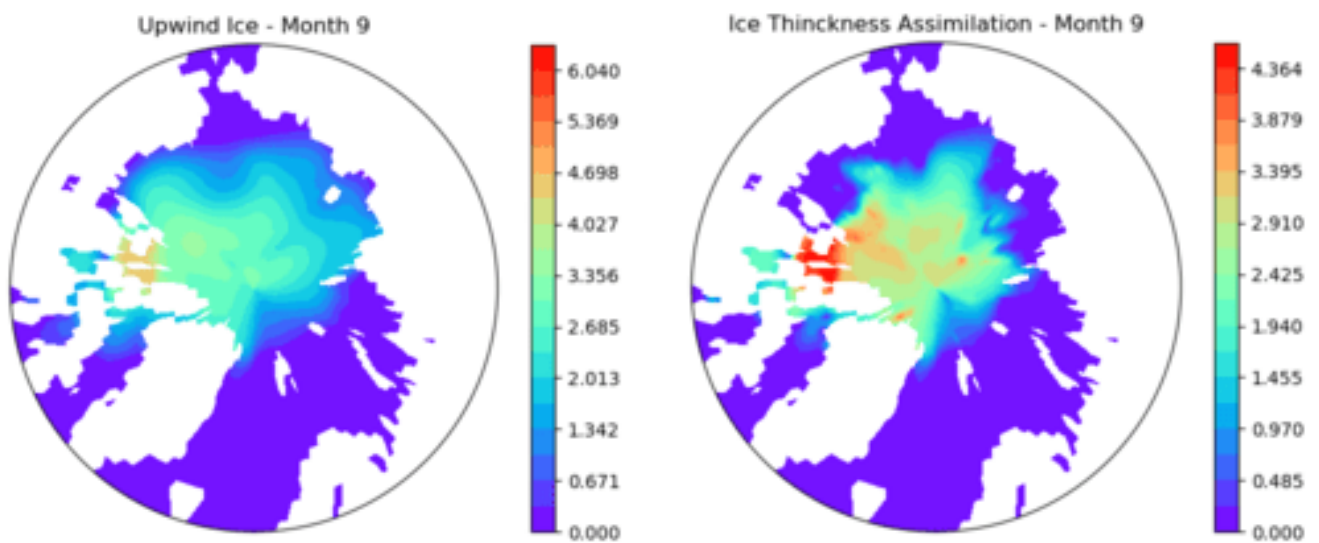


Рис. 4.9: Среднемесячная толщина морского льда в Арктике сентябрь 2004 г.: данные модели ИВМ РАН без усвоения (слева), данные модели ИВМ РАН с усвоением с 1 по 30 сентября суточных данных наблюдений (справа)

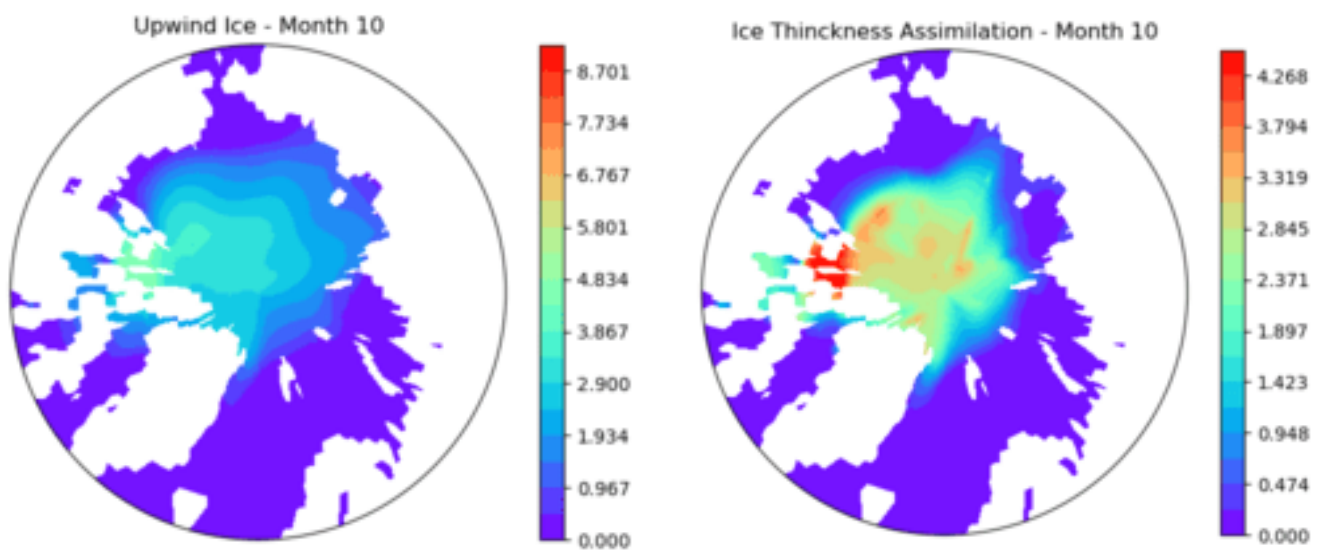


Рис. 4.10: Среднемесячная толщина морского льда в Арктике октябрь 2004 г.: данные модели ИВМ РАН без усвоения (слева), данные модели ИВМ РАН с усвоением с 1 по 30 сентября суточных данных наблюдений (справа)

методы mEVP и Adaptive-EVP методы, которые, тем не менее, сходились не менее чем за 300 итераций. В существующей версии модели, как показал анализ кода, использовалось всего 3 итерации. Фактически это означает, что модель работает в режиме высокой численной вязкости, скорости дрейфа малы, и в целом результат похож на результат, который соответствует моделям льда без дрейфа льда. Сравнение с результатами моделей CORE-II ясно показывает, что результаты наиболее близки к моделям с классической EVP схемой интегрирования уравнений динамики льда, тогда как более сложные модели дают результат, более близкий к данным наблюдений, а именно - почти постоянную толщину льда по большей части акватории Северного Ледовитого океана, и большую толщину льда в

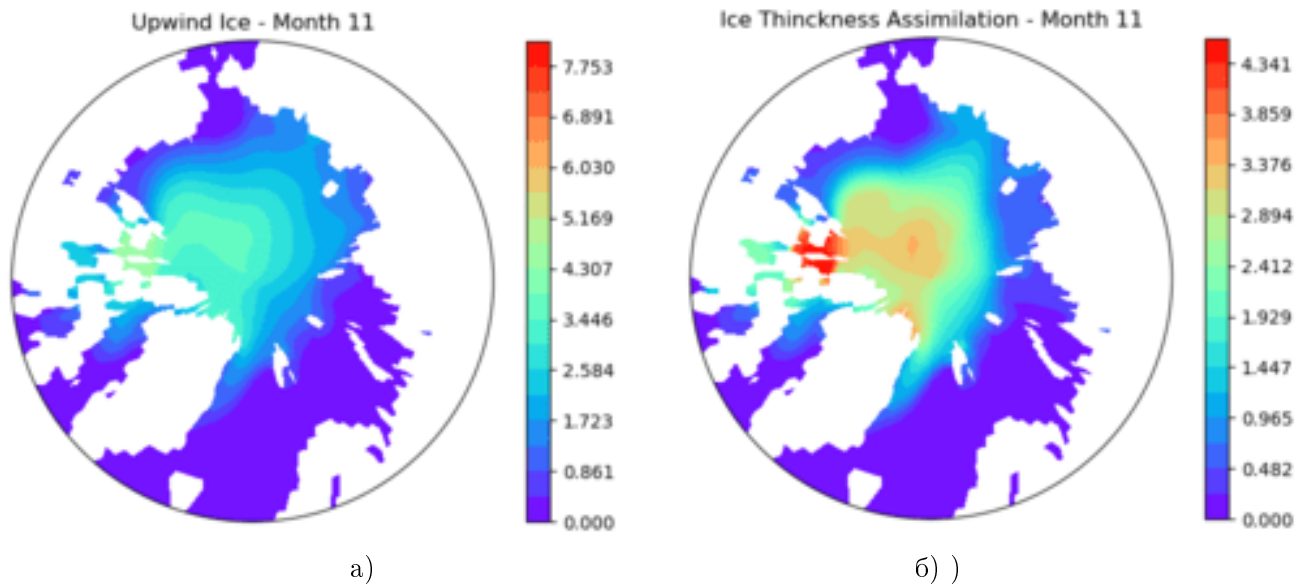


Рис. 4.11: Среднемесячная толщина морского льда в Арктике ноябрь 2004 г.: данные модели ИВМ РАН без усвоения (слева), данные модели ИВМ РАН с усвоением с 1 по 30 сентября суточных данных наблюдений (справа)

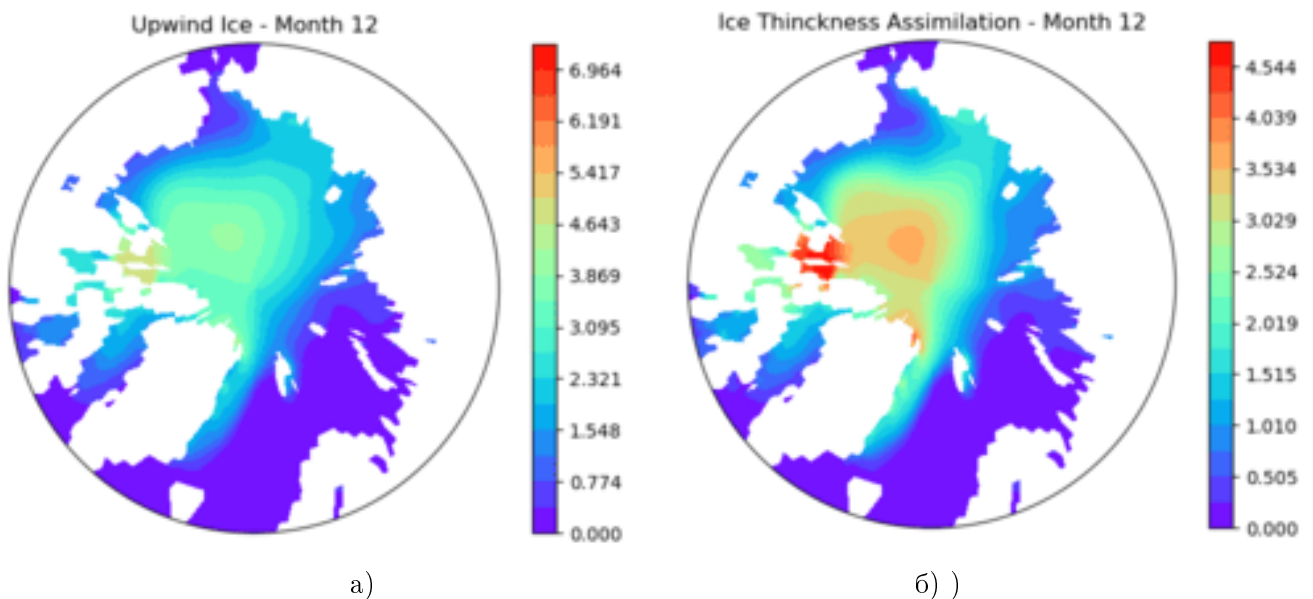


Рис. 4.12: Среднемесячная толщина морского льда в Арктике декабрь 2004 г.: данные модели ИВМ РАН без усвоения (слева), данные модели ИВМ РАН с усвоением с 1 по 30 сентября суточных данных наблюдений (справа)

узкой полосе вдоль берегов островов Канадского Архипелага.

Вторая особенность модели с точки зрения воспроизведения толщины льда – это использование ноль-мерной модели локальной термодинамики льда. Исследования, проведенные в ходе выполнения проекта (как и аналогичные работы других авторов), показали, что ноль-мерная модель дает слишком большую толщину льда в среднем за год. Таким образом, в развитии модели есть определенный потенциал, и нами уже разработаны методы, позволяющие улучшить прогноз толщины льда. При этом

анализ результатов моделей CORE-II показывает, что не все модели, использующие большое число уровней по вертикали (модели класса CICE 5 или LIM3) имеют неоспоримое преимущество перед более простыми термодинамическими моделями.

Было показано, что даже простые ноль-мерные термодинамические модели хорошо воспроизводят температуру поверхности снега/льда, так что можно ожидать, что прогноз погоды при достаточно точном задании начальных условий для температуры снега/льда и океана будет успешным. Однако остается проблема задания начальных условий для сплоченности и толщины льда. Особенно остро эта проблема встает в случае, когда нет доступа к полному объему спутниковой информации. Были сделаны тестовые расчеты с использованием только данных по сплоченности льда, с некоторой коррекцией толщины льда. Моделировалась ситуация преодоления «летнего порога предсказуемости». Расчеты показывают, что использование суточных данных в течение одного сентября позволяет примерно в два раза уменьшить ошибку в массе и площади льда и в последующие как минимум три месяца. При этом изменения затронули не только сплоченность льда, что естественно, но и толщину льда. Толщина льда вдоль побережья Сибири (на трассе Северного Морского пути) стала меньше, что лучше согласуется с данными наблюдений.

В целом можно заключить, что небольшие улучшения собственно численной модели (как в части термодинамики, так и схемы расчета скорости дрейфа льда) должны привести к уточнению и так неплохих результатов с точки зрения воспроизведения крупномасштабных характеристик льда Северного Ледовитого океана. Применение даже простой схемы усвоения спутниковых данных по сплоченности льда улучшило прогноз интегральной площади и массы льда, в основном за счет более тонкого льда вдоль побережья Сибири. Усвоение данных в течение одного сентября повлияло на прогноз в течение следующих трех месяцев. Поэтому использование такой схемы может быть рекомендовано для использования в сезонных прогнозах ИВМ РАН-ГМЦ.

Литература

- [1] Volodin E. et al. Computational framework for the Earth system modelling and the INM-CM6 climate model implemented on its base // *Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling*. — 2024. — Vol. 39, no. 6. — Pp. 379–392. — URL: <https://doi.org/10.1515/rnam-2024-0032>.
- [2] Coordinated Ocean–Ice Reference Experiments (COREs) / S. Griffies, A. Biastoch, C. Boning et al. // *Ocean Modelling*. — 2009. — Vol. 26, no. 1–2. — Pp. 1–46.
- [3] An assessment of the Arctic Ocean in a suite of interannual CORE-II simulations. Part I: Sea ice and solid freshwater / Q. Wang, M. Ilıcak, R. Gerdes et al. // *Ocean Modelling*. — 2016. — Vol. 99. — Pp. 110–132.
- [4] Fetterer F., Knowles K., Meier W., M. S. Sea Ice Index. — Digital media. Updated daily. Boulder, Colorado USA: National Snow and Ice Data Center. — 2002.
- [5] Kwok R. Arctic sea ice thickness, volume, and multiyear ice coverage: losses and coupled variability (1958–2018) // *Environmental Research Letters*. — 2018. — Vol. 13, no. 10. — P. 105005. — URL: <https://doi.org/10.1088/1748-9326/aae3ec>.
- [6] Verification of Seasonal Ensemble Forecasts Based on the INM-CM5 Earth System Model / V. Khan, E. Kruglova, V. Tishchenko et al. // *Russian Meteorology and Hydrology*. — 2024. — Vol. 49, no. 7. — Pp. 587–597.
- [7] PIOMAS. — <http://psc.apl.uw.edu/research/projects/arctic-sea-ice-volume-anomaly/data/>.
- [8] Lindsay R., Zhang J. Assimilation of ice concentration in an ice–ocean model // *Journal of Atmospheric and Oceanic Technology*. — 2006. — Vol. 23, no. 5. — Pp. 742–749.
- [9] TOPAZ4: An ocean sea ice data assimilation system for the North Atlantic and Arctic / P. Sakov, F. Counillon, L. Bertino et al. // *Ocean Science*. — 2012. — Vol. 8, no. 4. — Pp. 633–656.
- [10] Кауржин М. Н., Ибраев Р. А., Белаяев К. П. Усвоение данных альтиметрии в модели динамики океана методом ансамблевой интерполяции // *Известия РАН. Физика атмосферы и океана*. — 2018. — Vol. 54, no. 1. — Pp. 64–72.

- [11] Nerger L. et al. Efficient ensemble data assimilation for coupled models with the Parallel Data Assimilation Framework: example of AWI-CM (AWI-CM-PDAF 1.0) // *Geosci. Model Dev.* — 2020. — Vol. 13. — Pp. 4305–4321.
- [12] Yang C. Y., Liu J., Xu S. Seasonal Arctic Sea ice prediction using a newly developed fully coupled regional model with the assimilation of satellite sea ice observations // *Journal of Advances in Modeling Earth Systems.* — 2020. — Vol. 12, no. 5. — P. e2019MS001938.
- [13] Arctic sea ice concentration and thickness data assimilation in the FIO-ESM climate forecast system / Qi Shu, Fangli Qiao, Jiping Liu et al. // *Acta Oceanologica Sinica.* — 2021. — Vol. 40, no. 10. — Pp. 65–75.
- [14] Bouttier F., Courtier P. Data assimilation concepts and methods – training course lecture notes. — Available at <http://www.ecmwf.int>. — 1999. — Last accessed: 11 January 2013.
- [15] Dulière V., Fichefet T. On the assimilation of ice velocity and concentration data into large-scale sea ice models // *Ocean Science.* — 2007. — Vol. 3. — Pp. 321–335.
- [16] Assimilation of sea ice concentration in a global climate model—physical and statistical aspects / S. Tetsche, D. Notz, J. Jungclaus, J. Marotzke // *Ocean Science.* — 2013. — Vol. 9, no. 1. — Pp. 19–36.