

Моделирование гемодинамики искусственного желудочка сердца в пакете ANSYS на базе супер ЭВМ «Скиф Мономах»

И.В. Волкова

Владимирский государственный университет

Моделирование геометрии искусственного желудочка сердца (ИЖС)

ИЖС с точки зрения геометрического моделирования является моделью высокого уровня и должна отвечать ряду требований: адекватно изображать реальный объект; допускать определение координат и вектора нормали в заданных точках конечно-элементной сетки на поверхности; обладать открытостью для использования в различных программах и алгоритмах. Для формирования сложных объектов используются два метода: метод построения модели из базовых объектов и метод формирования модели с использованием аппарата аппроксимации и интерполяции. Применительно к САПР обычно используется второй метод, когда построение объекта происходит с помощью поверхностей Кунса, Безье, а также В-сплайнов.

Моделирование геометрии ИЖС производилось на базе каркасно-поверхностной технологии, которая обеспечивает построение моделей на основе широкого спектра геометрических элементов: от точек, линий, окружностей, спиралей, двухмерных и трехмерных кривых до кинематических поверхностей и поверхностей вращения. Созданные примитивы обрезались, разделялись, вытягивались, проецировались, перемещались и копировались. ИЖС, построенный методами поверхностного моделирования, представляется пустотелой оболочкой - «топологической поверхностью», состоящей из большого числа элементарных участков - «патчей», под которыми находится пустое пространство. При этом поверхности были сложной свободной формы. Они строились по рассчитанным ранее граничным кривым. Очевидным преимуществом каркасно-поверхностного моделирования является возможность построения объекта любой сложности и конфигурации, что необходимо для ИЖС. Как правило, такое моделирование используется в тех областях, где затруднено или невозможно применение твердотельного моделирования. Как твердотельное, так и поверхностное моделирование имеет свои преимущества, однако использование поверхностей позволяет более гибко подходить к процессу проектирования, поскольку поверхности при моделировании могут быть самостоятельно спозиционированы в пространстве модели и не требуют на начальном этапе точной взаимной увязки с окружающей геометрией.

Каркасно-поверхностное моделирование с различной степенью полноты реализовано только в программных системах верхнего уровня: CATIA, UNIGRAPHICS, Pro/ENGINEER, I-Deas, и позволяет реализовать ряд функций: достоверно представить изделия сколь угодно сложной формы; точно рассчитать инерционно-массовые характеристики проектируемых изделий; проконтролировать взаимное расположение деталей, их собираемость; готовить программы для станков с ЧПУ.

Моделирование геометрии ИЖС проводилось в модуле Pro/SURFACE системы Pro/ENGINEER. Данный модуль предназначен для решения сложных задач моделирования поверхностей и имеет большой набор инструментов для удобного создания гидродинамических поверхностей и многопрофильных шаблонов. Поверхности, созданные в модуле, являются полностью параметрическими, что обеспечивает возможность быстрых и легких модификаций. Модификации распространяются по структуре данных, исправляя соответствующим образом все модели, рабочие чертежи, операции по изготовлению и сборочные узлы, базирующиеся на данных о конфигурации поверхности. Pro/SURFACE позволяет использовать множество поверхностных характеристик, таких как скос, плавность сопряжения, протяженность, смещение, Гауссова кривизна, кривизна сечения, наклон, поверхностная нормаль, зеркальность и др. Pro/SURFACE ис-

пользует математически точные определения поверхности, такие как NURBS, позволяя представлять геометрию без ее аппроксимации, а также создавать дизайн поверхности непосредственно на твердотельных моделях, либо создавать законченную поверхностную модель.

При создании геометрической модели ИЖС использовались следующие средства создания поверхностей: формирование по образующим: вдоль одной двухмерной и трехмерной кривой – при создании патрубка; управление параметром поперечного сечения патрубка и его размером; определение кривизны вдоль границ смещения; управление ротором и направлением сечения патрубка, задавая спин и X-вектор; формирование поверхности сопряжения патрубка и основного тела по сечениям между граничными кривыми; определение касательности и неразрывности второго порядка между участками поверхности сопряжения основного тела ИЖС и патрубков; параллельный перенос сечений патрубков с из одновременным поворотом.

После построения основной геометрии нами использовались следующие инструменты редактирования геометрии: изменение определяющих параметров или размеров; изменение траектории и поперечных сечений, определяющих поверхность; сшивание отдельных поверхностей для формирования общей поверхности; обрезание по линии пересечения с другой поверхностью; редактирование файла, использовавшегося для задания поверхности; замена поверхности пространственной модели другой поверхностью. Использование данных инструментов позволило уточнить геометрию ИЖС, скорректировать переходные поверхности между патрубками и основным телом, сгладить кривизну основного тела.

Конечно-элементное моделирование и анализ гемодинамики

Поведение крови в объеме ИЖС подчиняется основным законам гидродинамики. Эти законы описываются дифференциальными уравнениями в частных производных:

- закон сохранения массы (уравнение неразрывности):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \rho \mathbf{V} = 0; \quad (1)$$

- закон сохранения количества движения (уравнения Навье–Стокса):

$$\tau_{ij} = -P\delta_{ij} + \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \delta_{ij} \lambda \frac{\partial u_i}{\partial x_i}; \quad (2)$$

- закон сохранения энергии:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho C_p T_0) + \operatorname{div} (\rho C_p T_0 \mathbf{V}) = \operatorname{div} (K \operatorname{grad} T_0) + W^V + E^k + Q_V + \Phi + \frac{\partial P}{\partial t}. \quad (3)$$

Система уравнений (1)–(3) решается методом конечных элементов. Исследование поведения жидкости при конечно-элементном анализе основано на следующих допущениях:

1. Жидкость является ньютоновской.
2. Поведение жидкости не испытывает фазовых переходов.
3. Краевая задача постоянна.
4. При решении необходимо специально оговаривать: а) является ли поток ламинарным (по умолчанию) или турбулентным; б) является ли жидкость несжимаемой (по умолчанию) или сжимаемой по определенному закону (алгоритму).

Гидродинамический анализ в модуле ANSYS/FLOTRAN CAE-системы ANSYS на супер-ЭВМ «Скиф-Мономах» позволяет определить параметры движения жидкой среды, такие как: перепад давления, распределение скоростей, направление течения, подъемная сила и лобовое сопротивление, влияние нагрева и охлаждения. Анализ может быть применен для расчета параметров потока, распределения давления и температуры

в однофазной, вязкой жидкости. Жидкость может быть ньютоновской или неньютоновской.

Компоненты скорости, значения давления и температуры определяются на основе законов сохранения массы, количества движения и энергии. Для моделирования турбулентного движения имеется возможность использовать описание явления с помощью уравнений неразрывности и импульса. В качестве производных результатов вычисляются следующие параметры: коэффициент давления, общее давление и функции потока для движущейся среды, а также тепловой поток и коэффициент поверхностной теплоотдачи для задач тепломассопереноса.

Доступны следующие виды гидродинамического анализа:

- **Ламинарное течение** с полем скоростей, которое является плавным и упорядоченным; такое течение характерно для очень вязких, медленных потоков. Ламинарный поток считается несжимаемым, если плотность среды постоянна или если для ее сжатия требуется сравнительно мало энергии.

- **Турбулентное течение**, которое характеризуется достаточно высокими скоростями и сравнительно малой вязкостью среды, что приводит к возникновению быстрых флуктуаций скорости потока. Влияние этих флуктуаций на основной объем потока учитывается с помощью модели турбулентности, при этом граничные условия турбулентного потока удовлетворяются автоматически. Поток считается несжимаемым, если плотность постоянна или почти постоянна, а также если для сжатия среды требуется сравнительно мало энергии.

- **Теплообмен в потоке**, что дает возможность найти распределение температур в движущейся среде. В связанной задаче теплопередачи уравнение энергии решается для некоторой области, имеющей жидкую и твердую поверхности. При расчете свободной конвекции принимается, что движение среды порождается разностью давлений, которая обусловлена градиентом плотности, возникающим при изменении температуры.

- В случае **вынужденной конвекции** учитываются силы, приложенные извне к потоку. Теплопроводность происходит в слое жидкости, прилегающем к поверхности раздела, затем движением потока энергия уносится. Граничные условия для теплового анализа включают начальное распределение температуры, коэффициент теплоотдачи, тепловой поток и тепловое излучение.

Конечно-элементное представление системы уравнений для полностью связанной задачи движения сплошной среды имеет вид:

$$\begin{bmatrix} K_{xx} & K_{xy} & K_{xz} & -C_x & 0 \\ K_{yx} & K_{yy} & K_{yz} & -C_y & 0 \\ K_{zx} & K_{zy} & K_{zz} & -C_z & 0 \\ C_x^T & C_y^T & C_z^T & 0 & 0 \\ K_{Tx} & K_{Ty} & K_{Tz} & 0 & K_{xx} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} V_x \\ V_y \\ V_z \\ P \\ T \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} F_x \\ F_y \\ F_z \\ 0 \\ F_T \end{Bmatrix}.$$

Векторы V_x, V_y, V_z, P, T представляют собой пять основных степеней свободы в узлах конечно-элементной сетки: скорости потока, давления и температуры соответственно. В глобальной матрице коэффициентов подматрица K относится к взаимовлиянию процессов адвекции (механического переноса среды) и диффузии. Матрицы C образованы операторами градиентов давления и их транспозициями, а матрицы C^T – операторами дивергенции скорости. Наконец, векторы F в правой части системы относятся к вкладу поверхностных потоков, объемным силам, а в случае нестационарного течения – к влиянию предшествующей истории изменения параметров потока.

Для полностью связанной задачи общая система уравнений решается одновременно для всех узловых неизвестных. Если используется модель турбулентности, то расчетная модель требует включения в число основных переменных турбулентной кинетической энергии k и величины коэффициента турбулентной вязкости ε . При совместном способе решения по мере роста размера модели и ее усложнения чрезмерно растут затраты дисковой памяти и время работы центрального процессора. По этой причине в модуле ANSYS/FLOTRAN используется метод раздельного решения, при котором значения каждого из основных переменных определяются последовательно за счет выделения из общей системы изолированных систем уравнений. Этим достигается минимизация размерности матричных уравнений, решаемых в любой момент вычислительного процесса. Решение может быть стационарным или нестационарным. Граничные условия можно задавать переменными во времени.

Для проведения гидродинамического анализа используются четыре различных решателя. Метод обусловленных сопряженных градиентов применяется для решения уравнения давления в задачах движения несжимаемых сплошных сред. Метод сопряженных остаточных членов, при наличии или отсутствии обусловленности, обеспечивает решение таких несимметричных систем, как уравнение энергии, уравнение давления для сжимаемых сред или уравнения переноса для многокомпонентных смесей. Трехдиагональный матричный алгоритм можно использовать для эффективного приближенного решения любых систем уравнений. Для решения наиболее сложных несимметричных матричных систем, имеющих место в связанных задачах теплопереноса, используется метод обусловленного обобщенного минимума остаточных членов.

При численном моделировании движения крови и пластических масс возможно использование модели неньютоновской жидкости. Вязкость жидкости учитывается моделями Бингама, Карро или моделью с вязкостью, меняющейся по степенному закону. Кроме того, есть возможность применить модель вязкого поведения жидкости, заданную пользователем.

Существование конечных элементов программы ANSYS и модуля FLOTRAN в одной базе данных дает пользователю возможность выполнить последовательный анализ связанных задач. Это также позволяет решать задачи индукционного перемешивания и вычисления напряжений в процессе тепломассопереноса. Наличие элементов для гидроаэродинамического анализа дает возможность выполнить вслед за таким анализом прочностной или тепловой расчет. Сначала можно найти характеристики конвективного поведения среды, а затем выполнить подробный тепловой анализ конструкции, используя результаты предыдущего анализа в качестве граничных условий.

Задавать значения плотности, коэффициента теплопроводности и вязкости можно в табличной форме. Плотность можно ввести также как функцию давления.

Методика определения показателя гемолиза

Основными параметрами гемодинамики являются поле скоростей потока, максимальное и минимальное значение скорости внутри камеры, поле распределения давления, энергия турбулентности ENKE, показатель диссипации ENDS. По этим показателям можно судить о наличии застойных зон в камере, о возможности механического гемолиза при ударе потока крови о стенки искусственного желудочка, о характере теплообмена при диссипации турбулентных вихрей.

Подобный гидродинамический анализ требует построения конечно-элементных моделей ИЖ в специализированном модуле гидродинамического анализа ANSYS/FLOTRAN системы инженерного анализа ANSYS на супер-ЭВМ.

Методика определения показателя гемолиза состоит в следующем.

1. ENKE – кинетическая энергия турбулентности:

$$ENKE = \frac{1}{2} \rho v^2.$$

где ρ - плотность крови; v - вектор скорости турбулентного потока.

2. Касательные напряжения Рейнольдса:

$$\tau = 2\rho ENKE.$$

Повреждение крови от касательных напряжений есть функция от $\tau = 2\rho ENKE$ – амплитуда касательных напряжений Рейнольдса, действующих на кровяное тельце; t_{exp} – время воздействия поля касательных напряжений.

3. Скорость разрушения красных кровяных телец:

$$L = 3,62 \cdot 10^{-5} t_{\text{exp}}^{0,735} \tau^{2,416}.$$

4. Объем свободного гемоглобина:

$$f_{Hb} = H \left\{ 1 - \left[(1 - L^e)(1 - L^f) \right]^{\frac{Q \Delta t}{V}} \right\},$$

где V - общий объем крови; H - гематокрит; Q - объемная скорость потока (л/мин); $Time$ - простейший интервал времени (мин); L - скорость разрушения красных кровяных телец во время фазы заполнения (f) и фазы выброса (e) соответственно.

5. Определение показателя гемолиза НИН:

$$NIH = H(1 - H) \sigma \frac{V}{Q \Delta t} \left\{ 1 - \left[(1 - L_e)(1 - L_f) \right]^{\frac{Q \Delta t}{V}} \right\},$$

где H - гематокрит; σ - плотность гемоглобина в красных кровяных тельцах; V - общий объем крови; Q - объемная скорость потока (л/мин); Δt - простейший интервал времени (мин); L - скорость разрушения красных кровяных телец во время фазы заполнения (f) и фазы выброса (e).