

Informe pràctica

Modelització del tractament d'ablació cardíaca IVS

Mètodes Numèrics II

3r de Física

Universitat Autònoma de Barcelona

Autors:

Josep Rubí Bort
Marc Prades Alegre
Marc Pujol Ramon
Sara Fibla Salgado

Índex

1	Introducció teòrica	1
1.1	Presentació del problema	1
1.2	Model físic	1
1.3	Normalització	2
1.4	Solució analítica	2
2	Mètodes de resolució	3
2.1	Mètode d'Euler explícit	3
2.2	Mètode d'Euler implícit	3
3	Resultats i discussió	4
4	Conclusions	6
5	Annex	8
5.1	Annex 1: Mètode d'Euler explícit $\gamma = 0.51$	8
5.2	Annex 2: Mètode de Crank-Nicolson	8
5.3	Animació dels resultat	9
5.4	Codis de la pràctica	9
6	Bibliografia	9

1 Introducció teòrica

1.1 Presentació del problema

El tractament d'ablació cardíaca IVS és una intervenció que s'aplica quan el teixit que separa els dos ventricles del cor no és capaç de moure's de manera coordinada amb la resta de l'òrgan. Aquesta intervenció consisteix en introduir dos elèctrodes de polaritat oposada dins del cor, de forma que el teixit afectat quedi entremig d'aquests. Els elèctrodes generen una diferència de potencial alterna que induïx un corrent elèctric que, per efecte Joule, escalfa el teixit, amb l'objectiu de provocar la mort de les cèl·lules que el constitueixen. Per a que succeeixi això i no hi hagi perjudicis, el teixit ha d'arribar a una temperatura d'entre 50°C i 80°C.

En el cas que es vol estudiar, el gruix de la paret que separa els dos ventricles és de 2 cm i s'ha observat que el teixit afectat, al centre, té un gruix de 0,5 cm. El voltatge disponible (pic a pic) és de 40 V.

L'objectiu d'aquesta pràctica és determinar quina ha de ser la duració òptima del tractament perquè el teixit afectat estigui al màxim temps possible entre 50°C i 80°C però el teixit sa es mantingui per sota dels 50°C.

1.2 Model físic

Per reduir la complexitat del problema, s'aproximarà la geometria estudiada a un condensador planoparalel, on els elèctrodes són les dues plaques i l'espai entremig és el teixit que separa els ventricles. També s'assumirà que l'única font d'energia en forma de calor és l'efecte Joule causat pel corrent elèctric. Així doncs, per la llei de Fourier se sap que el camp de temperatures evolucionarà seguint l'equació

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \frac{P}{\kappa} \alpha. \quad (1.1)$$

On T és la temperatura, t és el temps, z és la posició en l'eix perpendicular a les plaques (agafant com a origen qualsevol de les dues plaques), P és la potència calorífica rebuda pel sistema (teixit) per unitat de volum, κ és la conductivitat tèrmica del teixit (estimada en 0.56 W m⁻¹ K⁻¹)^[1] i $\alpha = \frac{\kappa}{\rho c_v}$, essent ρ la densitat del teixit (estimada en 1081 kg m⁻³)^[1] i c_v la seva calor específica (estimada en 3686 J kg⁻¹ K⁻¹)^[1].

A més a més, se sap que inicialment tot el sistema estarà a la temperatura corporal (36.5 °C) i que els extrems es mantindran a temperatura fixa a causa d'estar en contacte amb una gran quantitat de sang. A la Fig 1.1 es mostra una representació del sistema.

La potència calorífica per unitat de volum es pot calcular utilitzant

$$R = \frac{l}{\sigma \cdot S}, \quad (1.2)$$

$$P = \frac{P_e}{v} = \frac{\left(\frac{V}{\sqrt{2}}\right)^2 \cdot \frac{1}{R}}{S \cdot l}. \quad (1.3)$$

On R és la resistència elèctrica del teixit, σ és la seva conductivitat (estimada en 0.472 S m⁻¹)^[1], l és la distància entre elèctrodes, S és la superfície del condensador, v és el volum

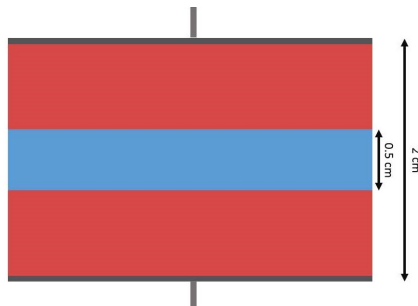


Fig. 1.1: Representació del sistema. El teixit afectat està en blau i el teixit sa en vermell. Imatge extreta del guió de la pràctica [1].

del condensador, P_e fa referència a la potència elèctrica dissipada i V és el voltatge pic a pic.

Per tant, resulta

$$P = \frac{\sigma V^2}{2 l^2} = \mathbf{944 \text{ kJ s}^{-1}\text{m}^{-3}}. \quad (1.4)$$

1.3 Normalització

Per normalitzar l'equació 1.1, s'escull una longitud característica del sistema (z_0) que serà 2 cm (distància entre elèctrodes). Les noves variables seran $t' = \frac{t}{t_0}$, $T' = \frac{T}{T_0}$, $z' = \frac{z}{z_0}$, on

$$t_0 = \frac{z_0^2}{\alpha} \approx 2846 \text{ s}, \quad (1.5)$$

$$T_0 = \frac{P z_0^2}{\kappa} \approx 674 \text{ K}. \quad (1.6)$$

I ara l'equació s'expressa com

$$\frac{\partial T'}{\partial t'} = \frac{\partial^2 T'}{\partial z'^2} + 1. \quad (1.7)$$

Aquesta normalització ratifica la viabilitat d'expressar l'equació inicial sense paràmetres lliures, i alhora permet obtenir expressions per un temps característic i una temperatura característica en funció de les dades inicials del problema i la longitud característica triada. Es pot observar que el paràmetre α (difusivitat tèrmica) relaciona la longitud característica amb el temps característic. És a dir, modifica l'escala de temps del problema.

1.4 Solució analítica

Segons el nostre model físic, les condicions de contorn seran $T'(0, t') = T'(1, t') = T'_c = \frac{T_c}{T_0} \approx 0.459$ (sent T_c la temperatura corporal en kelvin) i la condició inicial serà $T'(z', 0) = T'_c$. Es pot verificar que la solució a l'equació (1.7), amb aquestes condicions és

$$T'(z', t') = T'_c + 4 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1 - e^{-\pi^2 (2n-1)^2 t'}}{\pi^3 (2n-1)^3} \sin(\pi (2n-1) z'). \quad (1.8)$$

Es pot veure com aquesta solució compleix les condicions de contorn. Per $z' = 0$ la funció trigonomètrica s'anulla, comportant que s'anulli també tot el sumatori i quedi només el terme T'_c . El mateix passa per $z' = 1$, doncs $\sin(n\pi) = 0$ quan n és un nombre natural. Pel que fa a la condició inicial, per $t' = 0$ es té $e^0 = 1$ i tots els termes del sumatori es tornen a anular, quedant T'_c . Ara per veure que la solució proposada compleix la equació diferencial cal trobar la primera derivada respecte del temps i la segona respecte de l'espai. La primera derivada respecte del temps és

$$\frac{\partial T'(z', t')}{\partial t'} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{4}{(2n-1)\pi} e^{-(2n-1)^2 \pi^2 t'} \sin((2n-1)\pi z'). \quad (1.9)$$

Mentre que la segona derivada espacial és

$$\frac{\partial^2 T'(z', t')}{\partial z'^2} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{4}{(2n-1)\pi} (e^{-(2n-1)^2 \pi^2 t'} - 1) \sin((2n-1)\pi z'). \quad (1.10)$$

Només cal veure doncs que aquestes dues derivades són idèntiques excepte per un sumatori, que resulta ser la sèrie de Fourier de sinus de la funció $g(x)=1$.

2 Mètodes de resolució

2.1 Mètode d'Euler explícit

Per obtenir la solució numèrica utilitzant el mètode d'Euler explícit s'aproximaran les derivades de l'Equació (1.7). Per la derivada temporal s'utilitzarà una aproximació per la dreta (per comoditat, s'ha recuperat la notació inicial). D'aquesta forma s'obté l'equació¹

$$\frac{T_j^{k+1} - T_j^k}{\Delta t} = \frac{T_{j+1}^k - 2T_j^k + T_{j-1}^k}{\Delta z^2} + 1. \quad (2.1)$$

Ara, aïllant T_j^{k+1} i definint $\gamma = \Delta t / \Delta z^2$ s'obté l'equació

$$T_j^{k+1} = \gamma(T_{j+1}^k - T_{j-1}^k) + T_j^k(1 - 2\gamma) + \Delta t. \quad (2.2)$$

Com els valors de T_j^0 són coneguts per tot j (condicions inicials) i també es coneixen els valors de T_0^k i T_N^k per tot k (condicions de contorn), amb aquesta equació ja es pot iterar per trobar una solució numèrica.

2.2 Mètode d'Euler implícit

Ara per trobar la solució numèrica amb el mètode d'Euler implícit s'utilitzarà la derivada temporal per l'esquerra. D'aquesta forma s'obté l'equació

$$\frac{T_j^k - T_j^{k-1}}{\Delta t} = \frac{T_{j+1}^k - 2T_j^k + T_{j-1}^k}{\Delta z^2} + 1. \quad (2.3)$$

Si aquest cop s'aïlla T_j^k s'obté l'equació

$$T_j^k = \frac{\gamma(T_{j+1}^k - T_{j-1}^k) + T_j^{k-1} + \Delta t}{1 + 2\gamma}. \quad (2.4)$$

¹En tot moment els superíndexs fan referència als punts de temps, mentre que els subíndexs fan referència als punts d'espai. L'índex de temps va de 0 a n i l'índex d'espai va de 0 a N , on s'escull $N = 99$.

No obstant, en aquest cas les condicions inicials i de contorn no són suficients per trobar la solució numèrica iterant, doncs ara el valor de temperatura en un punt i en un instant de temps depèn del valor en el mateix instant de temps dels punts veïns. Ara es planteja un sistema d'equacions per cada punt de temps excepte l'instant inicial (per k des de 1 fins a n) on cada T_j^k (per j des de 1 fins a $N - 1$) és una incògnita i cadascuna de les $N - 1$ expressions que s'obtenen en aplicar l'equació (2.4) pels diferents punts d'espai és una equació. Per resoldre cadascun d'aquests n sistemes s'aplicarà una versió simplificada del mètode de Gauss-Seidel, que consistirà en proposar una solució aproximada pel sistema i trobar nous valors per cada T_j^k aplicant l'equació (2.4). Utilitzant aquests valors trobats com la nova solució aproximada es tornarà a repetir el procés. D'aquesta manera s'iterarà un cert nombre de cops fins que la variació de la solució estigui per sota d'una certa tolerància. Com a solució aproximada inicial, es prendrà la distribució de temperatures del temps anterior, ja que per continuïtat de la funció solució (veure funció analítica) se sap que dos instants de temps pròxims han de tenir distribucions de temperatura semblants.

3 Resultats i discussió

A la Fig 3.1 es mostren tres representacions gràfiques de la temperatura en funció de la posició en l'instant de temps $t = 71.1457$ s, obtingudes de tres maneres diferents²: En primer lloc, s'ha obtingut la solució mitjançant el mètode d'Euler explícit amb $\gamma = 0.25$. En segon lloc, s'ha fet el mateix per $\gamma = 0.49$, i finalment s'ha utilitzat la solució analítica.

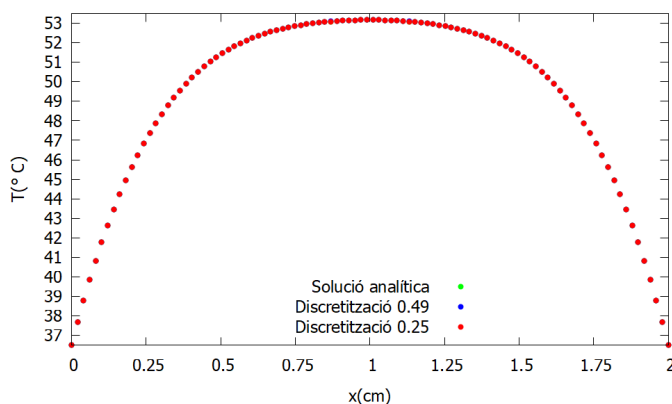


Fig. 3.1: Predicció de la distribució de la temperatura en funció de la posició en l'instant $t = 71.1457$ s (temps normalitzat més proper possible a 0.025) per la solució analítica, pel mètode d'Euler explícit amb $\gamma = 0.49$ i pel mateix mètode amb $\gamma = 0.25$.

El primer tret per destacar és que les tres prediccions són pràcticament idèntiques, doncs es pot veure que els punts de diferents colors estan superposats (el color vermell ressalta més en aquest cas, i oculta parcialment els altres colors). D'aquesta manera s'intueix que l'error serà d'ordre menor a 1°C pel mètode d'Euler explícit amb $\gamma = 0.25$ i $\gamma = 0.49$, com es veurà més endavant. En cas de no disposar de la solució analítica, per comprovar que el programa utilitzat va bé es podrien provar diversos valors de γ entre 0.25 i 0.49 i veure si les seves prediccions en el temps estudiat s'assimilen entre elles, com és el cas de $\gamma = 0.25$ i $\gamma = 0.49$.

²També s'ha utilitzat el mètode d'Euler explícit amb una discretització $\gamma = 0.51$, però s'ha vist que aquesta no convergia a la solució analítica. Per aquest motiu, s'ha decidit mostrar la seva representació a l'annex 5.1.

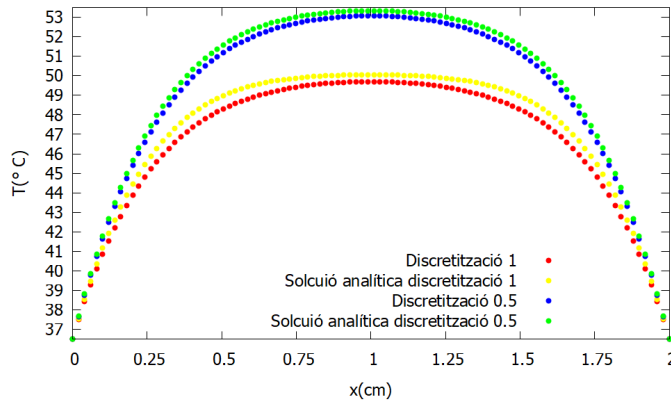


Fig. 3.2: Predicció de la distribució de la temperatura en funció de la posició pel mètode d'Euler implícit amb $\Delta t = 0.5 \Delta z$ ($t = 71.8717$ s) i el mateix mètode amb $\Delta t = \Delta z$ ($t = 57.4973$ s), incloent les solucions analítiques en aquests temps.

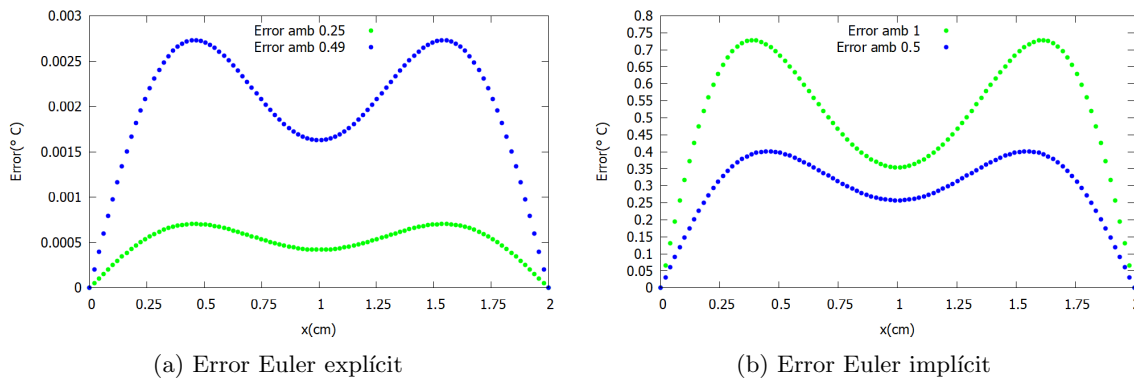


Fig. 3.3: Error mètode Euler explícit (Discretitzacions 0.25 i 0.49: $t = 71.1457$ s) i mètode Euler implícit (Discretització 0.5: $t = 71.8717$ s. Discretització 1: $t = 57.4973$ s).

A la Fig 3.2 es mostren quatre representacions gràfiques de la temperatura en funció de la posició, obtingudes mitjançant el mètode d'Euler implícit amb $\Delta t = 0.5 \Delta z$ (en $t = 71.8717$ s), el mateix mètode amb $\Delta t = \Delta z$ (en $t = 57.4973$ s)³ i amb la solució analítica per cadascun d'aquests temps.

Ara es poden diferenciar millor les prediccions numèriques respecte les analítiques, donant a entendre que l'error és més gran en el cas implícit que en l'explícit (amb les discretitzacions que s'han escollit) ja que les prediccions analítiques difereixen més de les altres.

Tot i que ja se n'ha parlat prèviament, a continuació es presenta un estudi més detallat de l'error numèric pels dos mètodes. A la Fig 3.3 es mostra una representació gràfica de l'error de temperatura ($|\text{Temperatura mètode} - \text{Temperatura analítica}|$) en cada posició pels instants de temps que han aparegut prèviament.

Es confirma que l'error associat al mètode explícit és menor que en el cas del mètode implícit, en el cas de les discretitzacions emprades. No obstant, s'ha intentat buscar una millora dels resultats (disminució de l'error) utilitzant el mètode implícit amb la

³El motiu pel qual aquest valor està tan allunyat dels 71 segons en què es representen els altres resultats és perquè la discretització temporal no permetia acostar-se més.

discretització $\Delta t = 0.25\Delta z$ i utilitzant també el mètode de Crank-Nicolson (Com podem veure a l'Annex 5.2), en el temps $t = 71.1457$ s. Els resultats es mostren a la Fig 3.4. En aquesta imatge també es representa la solució trobada amb el mètode d'Euler explícit (en el mateix temps) utilitzant la mateixa discretització.

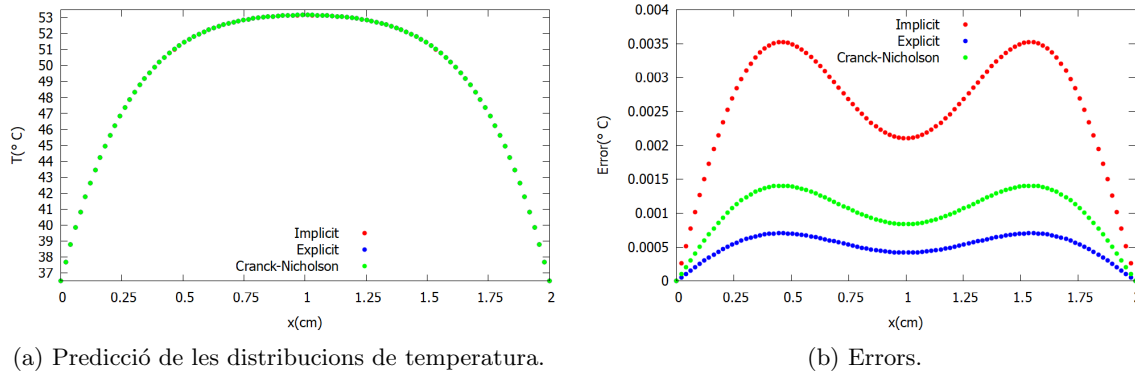


Fig. 3.4: Prediccions de les distribucions de temperatura i errors per $t = 71.1457$ s pels mètodes explícit, implícit i de Crank-Nicolson amb la discretització $\Delta t = 0.25\Delta z^2$.

Altra vegada, les distribucions de temperatura són gairebé idèntiques (punts superposats) i els errors són més similars entre si. Es pot comprovar doncs que amb aquesta discretització el mètode implícit dona una predicció amb molt menys error, i tant aquest mètode com el de Crank-Nicolson donen errors superiors als del mètode explícit.

Per trobar la solució al problema, utilitzant el mètode d'Euler explícit s'ha estudiat l'evolució temporal de la distribució de temperatures i s'ha observat que fins a l'instant $t = 58.0055$ s per $\gamma = 0.25$ i l'instant $t = 57.9126$ s per $\gamma = 0.49$, cada discretització prediu que la temperatura encara no supera els 50°C en cap punt de la zona sana del teixit. En efecte, el màxim de temperatura en aquesta regió (de 0 a 0.75 cm i de 1.25 a 2 cm) és de 49.976°C segons el mètode $\gamma = 0.49$ (amb un error de 0.0016°C) i 49.995°C segons el mètode $\gamma = 0.25$ (amb un error de 0.000696°C).

En el següent instant de temps permès per cada discretització temporal, $t = 58.0549$ s per $\gamma = 0.49$ i $t = 58.0776$ s per $\gamma = 0.25$, el màxim de temperatura en la zona sana és de 50.007°C segons el primer i 50.011°C segons el segon. Els errors màxims pels mètodes $\gamma = 0.49$ i $\gamma = 0.25$ en els seus respectius instants de temps són 0.002701°C i 0.000696°C respectivament. Per tant, es pot concloure que el mètode d'Euler explícit amb $\gamma = 0.49$ determina que el temps on la zona sana sobrepassa els 50°C està entre els 57.9126 s i 58.0549 s, mentre que el mateix mètode amb $\gamma = 0.25$ determina que aquest temps crític està entre 58.0055 s i 58.0776 s. Com la zona afectada (entre 0.75 cm i 1.25 cm) està sempre per sota de 80°C en aquests temps i en els anteriors, es pot afirmar que el temps òptim (solució del problema) serà el temps on la zona sana arribi just a 50°C . Juntant la informació obtinguda es pot assegurar que aquest temps òptim està entre 58.0055 s i 58.0549 s.

4 Conclusions

S'ha pogut concloure que el temps d'aplicació del voltatge altern per a que el tractament sigui el més eficient possible està entre 58.0055 s i 58.0549 s, tenint en compte que les

imperfeccions del model utilitzat poden fer disminuir la precisió d'aquest resultat. Per fer el model més realista, es podria tenir en compte la dependència de la conductivitat (σ) del teixit amb la temperatura, fent que la potència per unitat de volum (P) de l'equació (1.1) depengues de la temperatura. El mateix es podria fer amb la conductivitat tèrmica (κ), la permitivitat elèctrica (ϵ) i la calor específica (c_v). Una opció raonable seria fer l'aproximació d'una dependència lineal amb la temperatura ^[2], donat el rang de temperatures del problema (el teixit comença a temperatura corporal). L'equació seria de la forma

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha(T) \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \frac{P(T)\alpha(T)}{\kappa(T)}. \quad (4.1)$$

Finalment, s'ha vist que el mètode d'Euler explícit, per $\gamma < 0.5$, té l'avantatge que dona un error més petit que l'implícit pels casos que s'han estudiat, a banda de ser més senzill d'implementar. En canvi, té l'inconvenient que per $\gamma = 0.51$ no convergeix adequadament (5.1). L'implícit té l'avantatge que l'error és més petit que 1°C per totes les discretitzacions provades, no com l'explícit. L'inconvenient que té, però, és que l'error segueix sent més gran comparat amb el de l'explícit en alguns casos.

5 Annex

5.1 Annex 1: Mètode d'Euler explícit $\gamma = 0.51$

El mètode d'Euler explícit utilitzant la discretització $\gamma = 0.51$ en l'instant de temps $t = 71.088$ s dona el resultat que es pot observar en la Fig 5.1.

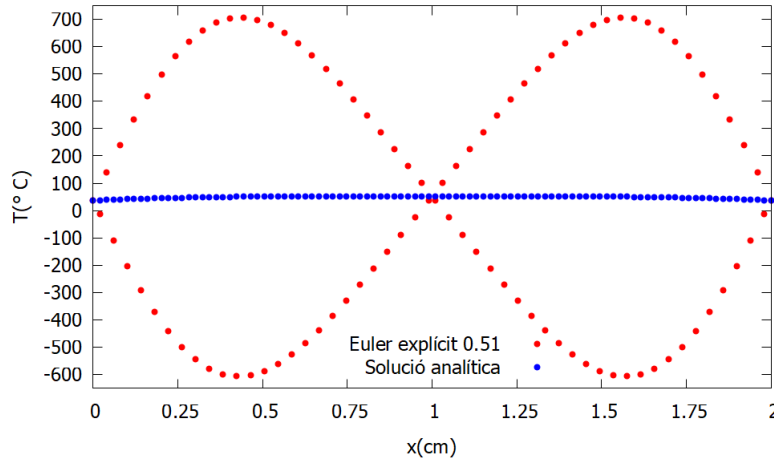


Fig. 5.1: Predicció de la distribució de temperatura pel mètode d'Euler explícit amb $\gamma = 0.51$, comparada amb la solució analítica.

Es pot veure que amb aquesta discretització l'error és més gran que 1°C en molts punts i les dues prediccions difereixen clarament. A més a més, hi ha prediccions sense sentit físic com el fet que hi hagi punts on la temperatura està per sota de -273°C . Per tant, aquest valor de γ no és adequat per resoldre el problema.

5.2 Annex 2: Mètode de Crank-Nicolson

Aquest mètode és una combinació entre el mètode d'Euler explícit i l'implícit [3]. Fent alguns canvis d'índex a les equacions (2.1) i (2.3), resulta

$$\frac{T_j^{k+1} - T_j^k}{\Delta t} = \frac{T_{j+1}^k - 2T_j^k + T_{j-1}^k}{\Delta z^2} + 1, \quad (5.1)$$

$$\frac{T_j^{k+1} - T_j^k}{\Delta t} = \frac{T_{j+1}^{k+1} - 2T_j^{k+1} + T_{j-1}^{k+1}}{\Delta z^2} + 1, \quad (5.2)$$

$$\boxed{\frac{T_j^{k+1} - T_j^k}{\Delta t} = \frac{1}{2} \left[\frac{T_{j+1}^k - 2T_j^k + T_{j-1}^k}{\Delta z^2} + \frac{T_{j+1}^{k+1} - 2T_j^{k+1} + T_{j-1}^{k+1}}{\Delta z^2} \right] + 1}. \quad (5.3)$$

On les equacions (5.1) i (5.2) són el mètode d'Euler explícit i implícit respectivament. Sumant-les, s'obté l'equació (5.3), que convé ser tractada amb la mateixa tècnica que en el mètode implícit, ja que en l'expressió apareix l'instant de temps actual i immediatament anterior.

5.3 Animació dels resultat

Per clarificar i veure el procés dels programes realitzats, es mostren, en format GIF, les animacions realitzades per cadascun dels mètodes i els seus errors respectius.

1. [GIF Euler Implícit](#)
2. [GIF Error Euler Implícit](#)
3. [GIF Euler Explícit](#)
4. [GIF Error Euler Explícit](#)
5. [GIF Crank-Nicolson](#)
6. [GIF Error Crank-Nicolson](#)

5.4 Codis de la pràctica

En aquest apartat annex s'inclouen tots els codis utilitzats comentats per realitzar els models explicats durant aquest guió. Tots ells han estat realitzats en llenguatge C/C++.

1. [Codi Mètode Euler Explícit](#)
2. [Codi Error Euler Explícit](#)
3. [Codi Mètode Euler Implícit](#)
4. [Codi Error Euler Implícit](#)
5. [Codi Mètode de Crank-Nicolson](#)
6. [Codi Error Crank-Nicolson](#)

6 Bibliografia

- [1] Guió de la pràctica (extret del Campus Virtual).
- [2] [Christian Rossmann, Dieter Haemmerich, *Review of temperature dependence of thermal properties, dielectric properties, and perfusion of biological tissues at hyperthermic and ablation temperatures.*](#)
- [3] [Wikipedia. *Crank-Nicolson method*](#), consultat Desembre 2022