

Метод погруженной границы

Долгов Д.А.

Кемеровский Государственный Университет

1 декабря 2013 г.

Описание задачи

- Клапан - часть сердца, образованная складками его внутренней оболочки (лепестками), обеспечивает односторонний ток крови.
- Для замены поврежденных могут использоваться искусственные клапаны, которым предъявляется множество требований.

 Описание задачи

- ❖ Клапан - часть сердца, образованная складками его внутренней оболочки (лепестками), обеспечивает односторонний ток крови.
- ❖ Для замены поврежденных могут использоваться искусственные клапаны, которым предъявляется множество требований.

Для оценки - каждый год проводится примерно 250 000 по восстановлению или замене поврежденных сердечных клапанов

Введение

- Механизмы ряда явлений, например, нелинейного искажения формы пульсовых волн, изучены недостаточно
- Существует прямая связь между гидродинамическими параметрами и развитием патологических изменений в сосудистых стенках, клапанах и т.д.
- Развитие различных методов измерения на моделях и в организмах позволяет выявить многочисленные детали, требующие объяснения

Введение

- Механизмы ряда явлений, например, нелинейного искажения формы пульсовых волн, изучены недостаточно
- Существует прямая связь между гидродинамическими параметрами и развитием патологических изменений в сосудистых стенках, клапанах и т.д.
- Развитие различных методов измерения на моделях и в организмах позволяет выявить многочисленные детали, требующие объяснения

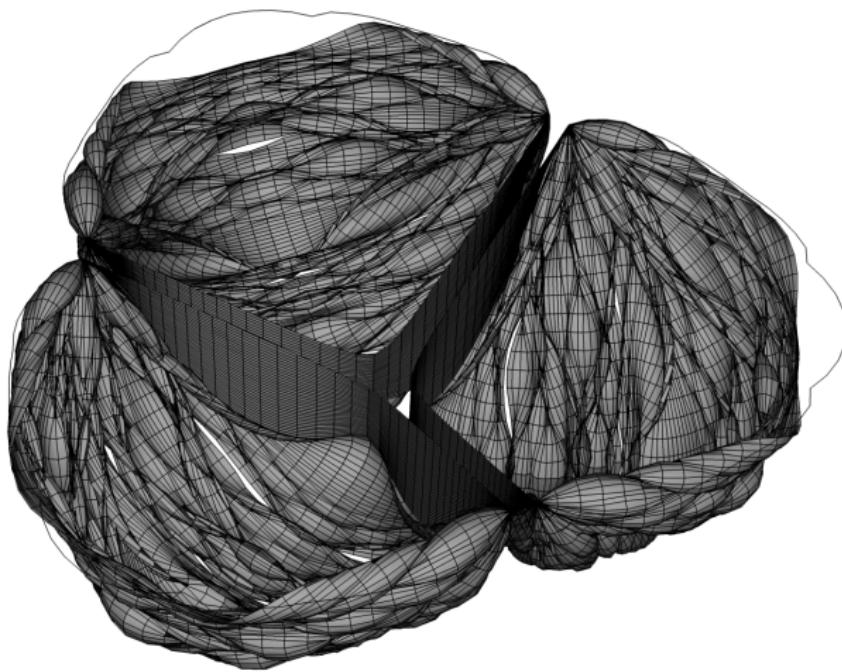
Введение

- Механизмы ряда явлений, например, нелинейного искажения формы пульсовых волн, изучены недостаточно
- Существует прямая связь между гидродинамическими параметрами и развитием патологических изменений в сосудистых стенках, клапанах и т.д.
- Развитие различных методов измерения на моделях и в организмах позволяет выявить многочисленные детали, требующие объяснения

Введение

- Создание клапанов требует решения большого количества задач (уменьшение тромбогенезиса, износа, градиента давления, увеличение безопасности и т.д.).
- Частично эти задачи можно решить с помощью математического моделирования

Построения расчетной области



Метод погруженной границы

- └ Построения расчетной области



Пример достаточно сложной модели клапана

Существующие методы

- Метод адаптивных сеток
- Метод конечных элементов
- Метод погруженной границы

Существующие методы

- Метод адаптивных сеток
- Метод конечных элементов
- Метод погруженной границы

Существующие методы

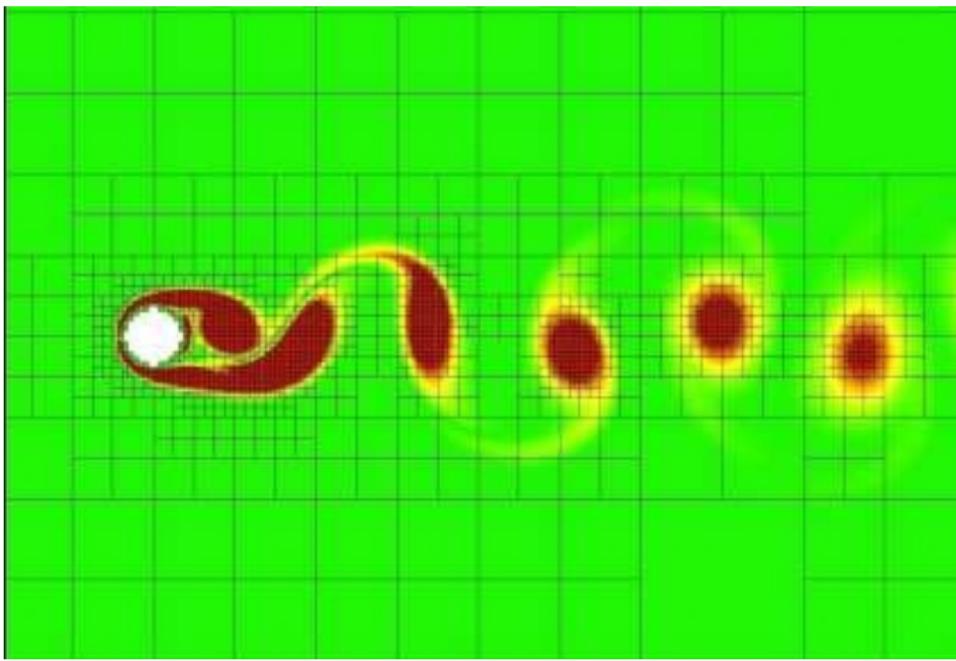
- Метод адаптивных сеток
- Метод конечных элементов
- Метод погруженной границы

- └ Существующие методы

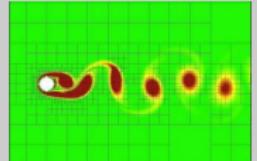
- Метод аддитивных сеток
- Метод конечных элементов
- Метод погруженной границы

Первые два будут рассмотрены обзорно, последний описан более подробно. Я собираюсь использовать его в работе, т.к. в теории он потребует наименьшей переделки текущей реализации программы

Метод адаптивных сеток



- └ Метод аддитивных сеток



Суть метода заключается в построении таких сеток, которые будут хорошо согласованы с расчетной областью и получаемым решением по каким-либо параметрам

Метод адаптивных сеток

- Геометрические адаптивные сетки
(Подстраиваются под границы)
- Динамические адаптивные сетки
(Подстраиваются под решение)

Метод адаптивных сеток

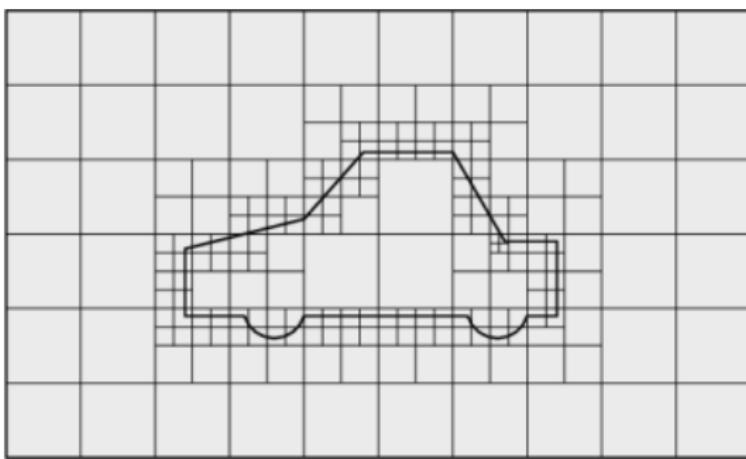
- Геометрические адаптивные сетки
(Подстраиваются под границы)
- Динамические адаптивные сетки
(Подстраиваются под решение)

```
graph TD; A[Метод погруженной границы] --> B[Метод адаптивных сеток]; B --> C1["Геометрические адаптивные сетки  
Подстраиваются под границы"]; B --> C2["Динамические адаптивные сетки  
Подстраиваются под решение"]
```

- Геометрические адаптивные сетки
(Подстраиваются под границы)
- Динамические адаптивные сетки
(Подстраиваются под решение)

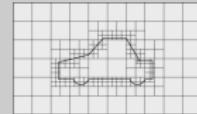
Геометрические - адаптируются к границам расчетной области, динамические - к получаемому решению, т.е. эти сетки могут «сгущаться» в нужных местах. Помимо этих свойств, подобные методы характеризуются множеством других особенностей - добавляются ли новые узлы или только перемещаются имеющиеся, сохраняется ли структурированность сетки или нет. Естественно, существует также множество алгоритмов адаптации, например таковой, где ребра сетки приравниваются к пружинам с жесткостью, зависящей от свойств среды. Но я не буду на этом особо останавливаться, это тема для отдельного большого разговора.

SnappyHexMesh utility (OpenFOAM)



В формате STL описывается поверхность границы, затем создается предварительная сетка, которая улучшается в несколько этапов.

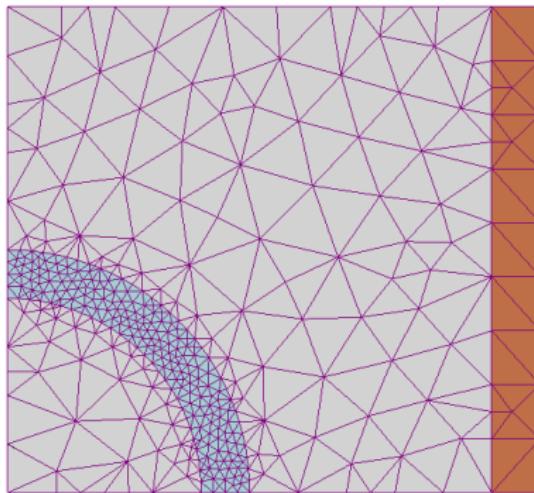
- └ SnappyHexMesh utility (OpenFOAM)



В формате STL описывается поверхность границы, затем создается предварительная сетка, которая улучшается в несколько этапов.

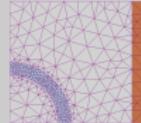
В заключении рассказа об адаптивных сетках замечу, что уже существуют достаточно хорошие «пакетные» реализации подобных механизмов. Один из них - утилита SnappyHexMesh, входящая в состав пакета OpenFOAM. На слайде приведен пример получения адаптивной сетки с его помощью

Метод конечных элементов



Сетки, используемые в МКЭ позволяют легко представить нужную область.

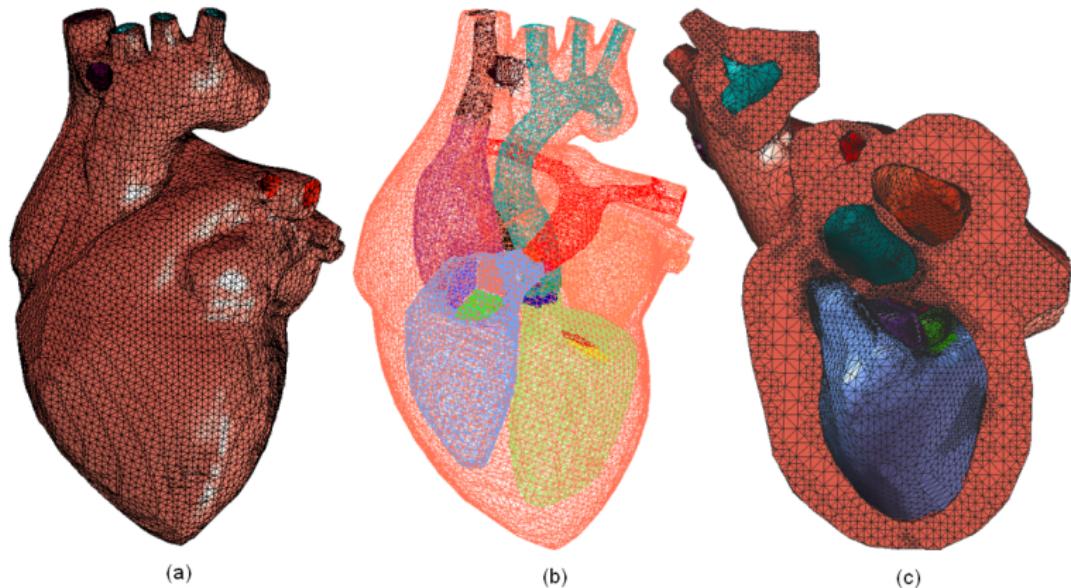
- └ Метод конечных элементов



Сетки, используемые в МКЭ позволяют легко представить нужную область.

Т.к. в МКЭ дискретизация области происходит с помощью локальных элементов (например, треугольников) - это позволяет легко смоделировать в расчете нужную геометрию области

Метод конечных элементов (3D)



- └ Метод конечных элементов (3D)



В случае 3х измерений дискретизация становится не такой очевидной, но тем не менее возможна. Опять же, не буду долго задерживаться на описании этого метода

Метод погруженной границы

Метод позволяет моделировать взаимодействие жидкости и погруженных в нее структур. Исходная версия была опубликована в работе «C.S. Peskin, Numerical Analysis of Blood Flow in the Heart, J. Comput. Phys. 25 (1977). Используется для моделирования биологических явлений.

Метод погруженной границы

Основная идея заключается в проведении расчета на обычной декартовой сетке. Сложная форма исследуемого объекта учитывается не при построении сетки, а на других этапах.

Вариации метода

- Оригинальный метод, который предложил C.S. Peskin
- Метод «фиктивных» ячеек (ghost cells)
- Метод «усеченных» ячеек (cut cells)

Вариации метода

- Оригинальный метод, который предложил C.S. Peskin
- Метод «фиктивных» ячеек (ghost cells)
- Метод «усеченных» ячеек (cut cells)

Вариации метода

- Оригинальный метод, который предложил C.S. Peskin
- Метод «фиктивных» ячеек (ghost cells)
- Метод «усеченных» ячеек (cut cells)

 Вариации метода

- Оригинальный метод, который предложил C.S. Peskin
- Метод «фиктивных» ячеек (ghost cells)
- Метод «усеченных» ячеек (cut cells)

Сравнивать я буду в основном первые два, т.к. последний используется с методом конечных объемов и я не стал его рассматривать. В кратце - его основная идея в разбиении ячеек, через которые проходит погруженная граница, и дальнейшей интерполяции полученных значений

Метод погруженной границы

В несжимаемую вязкую ньютоновскую жидкость помещены тонкие «волокна», которыми могут моделироваться сердечные клапаны, мышцы или искусственные клапаны. Они двигаются под влиянием течения жидкости и сами влияют на нее. Чтобы учесть влияние клапанов на течение, в уравнение Навье-Стокса вводится функция плотности силы $F(x, t)$

$$\rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + u \cdot \nabla u \right) = -\nabla p + \nu \Delta u + F \quad (1)$$

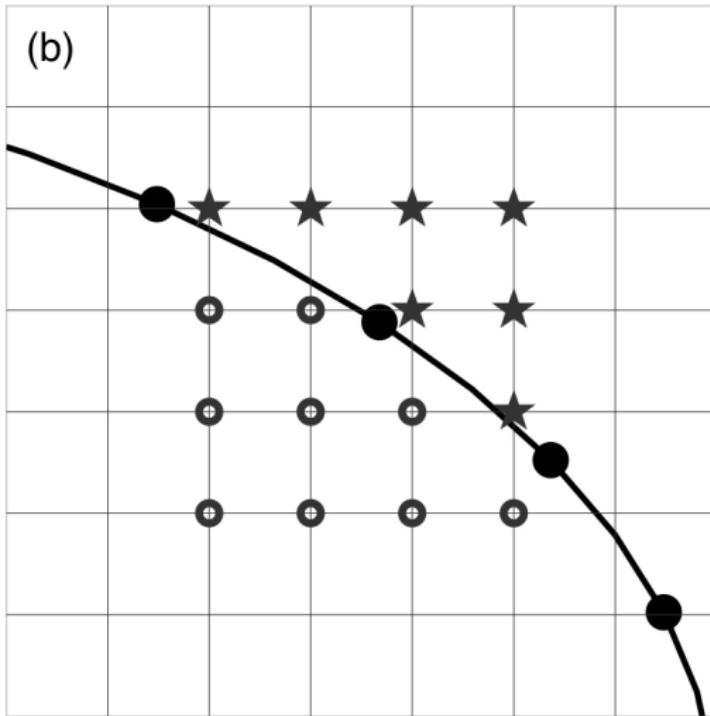
 Метод погруженной границы

В несжимаемую вязкую ньютоновскую жидкость помещены тонкие «волокна», которыми могут моделироваться сердечные клапаны, мышцы или искусственные клапаны. Они двигаются под влиянием течения жидкости и сами влияют на нее. Чтобы учесть влияние клапанов на течение, в уравнение Навье-Стокса вводится функция плотности силы $F(x, t)$

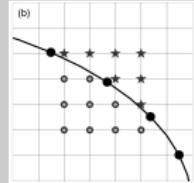
$$\rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + u \cdot \nabla u \right) = -\nabla p + \nu \Delta u + F \quad (1)$$

Используемые волокна состоят в конечном счете из безмассовых точек, которые движутся со скоростью жидкости и влияют на нее только посредством силы напряжения

Метод погруженной границы



- └ Метод погруженной границы



На картинке изображена схема получающейся в итоге сетки - черные круги, не совпадающие с узлами сетки, представляют погруженную границу, которая разделяет жидкость и твердую поверхность

Метод погруженной границы

Для расчета F , погруженная граница
представляется в лагранжевых координатах

$$\frac{dx_k}{dt} = u(x_k, t) = \int_{x \in \Omega} u(x, t) \delta(x - x_k) dv \quad (2)$$

$$F(x) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{N} \right) \sum_{k=1}^N f_k \delta(x - x_k) \quad (3)$$

$$f_k = f_k(x_1, x_2, \dots) \quad (4)$$


 Метод погруженной границы

Для расчета F , погруженная граница представляется в лагранжевых координатах

$$\frac{dx_k}{dt} = u(x_k, t) = \int_{x \in \Omega} u(x, t) \delta(x - x_k) dv \quad (2)$$

$$F(x) = \lim_{N \rightarrow \text{inf}} \left(\frac{1}{N} \right) \sum_{k=1}^N f_k \delta(x - x_k) \quad (3)$$

$$f_k = f_k(x_1, x_2, \dots) \quad (4)$$

Т.к. для вычисления силы напряжения используются параметры, связанные с погруженной границей, они должны расчитываться в Лагранжевых координатах. На представленных формулах, δ - дельта функция дирака, которая при переходе к численному решению заменяется дискретным аналогом. x_1, x_2, \dots - координаты точек погруженной границы, f_1, f_2, \dots - сила напряжения в точке

Метод погруженной границы

Для двух точек границы A, B , где T - напряжение связи между точками.

$$L_{AB} = \|x_B - x_A\| \quad (5)$$

$$\frac{1}{N}f_A = \sum_{B=1; B \neq A}^N T_{AB}(L_{AB}) \frac{x_B - x_A}{\|L_{AB}\|} \quad (6)$$

 Метод погруженной границы

Для двух точек границы A, B , где T - напряжение связи между точками.

$$L_{AB} = \|x_B - x_A\| \quad (5)$$

$$\frac{1}{N} f_A = \sum_{B=1, B \neq A}^N T_{AB}(L_{AB}) \frac{x_B - x_A}{\|L_{AB}\|} \quad (6)$$

В простейшем случае, погруженная граница моделируется набором точек и связей между ними

Метод погруженной границы

В двумерном случае для сердечного клапана

$$T(L) = (L - L_0)S, \quad L > L_0 \quad (7)$$

$$T(L) = 0, \quad L \leq L_0, \quad (8)$$

где S - коэффициент жесткости, L_0 - остаток длины клапана

 Метод погруженной границы

В двумерном случае для сердечного клапана

$$T(L) = (L - L_0)S, \quad L > L_0 \quad (7)$$

$$T(L) = 0, \quad L \leq L_0, \quad (8)$$

где S - коэффициент жесткости, L_0 - остаток длины клапана

В статьях, посвященных этому методу, разработано несколько способов моделировать различные ситуации - естественные аортальные, митральные клапаны, сердечные мышцы, искусственные клапаны.

Связь границы и жидкости

Т.к. точки на погруженной границе не совпадают с точками жидкости, возникает необходимость интерполяции скорости на границу и распределение плотности силы на точки жидкости

$$u_k = \sum_{ij} h^2 u_{ij} D_{ij}(x_k) \quad (9)$$

$$F_{ij} = \frac{1}{N} \sum_k f_k D_{ij}(x_k) \quad (10)$$

$D_{ij}(x_k)$ соответствует $\delta(x - x_k)$

Связь границы и жидкости

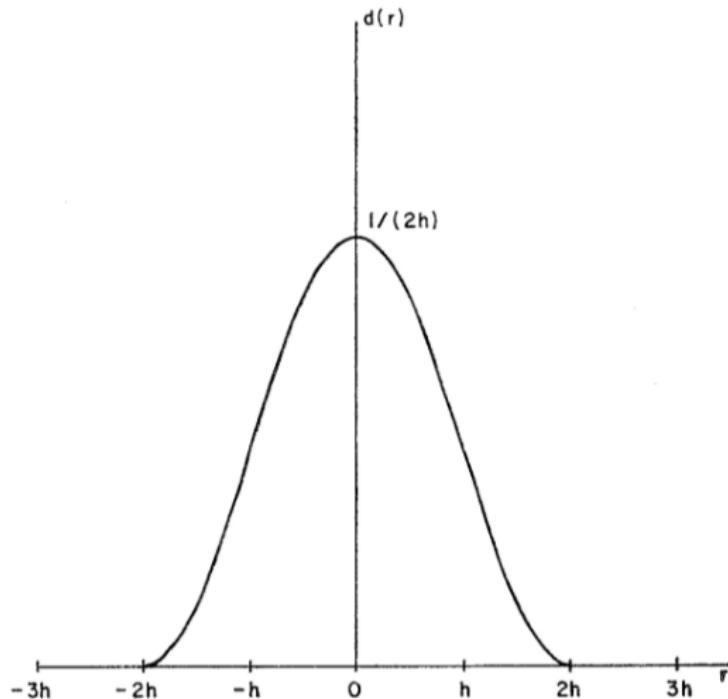
Для $\mathbf{x} = (x, y)$

$$D_{ij}(\mathbf{x}) = d(x - ih)(y - jh) \quad (11)$$

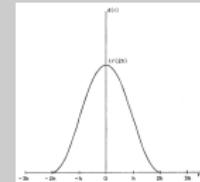
$$d(r) = \frac{1}{4h} \left(1 + \cos\left(\frac{\pi r}{2h}\right)\right), \quad \|r\| < 2h \quad (12)$$

$$d(r) = 0, \quad \|r\| \geq 2h \quad (13)$$

Связь границы и жидкости



- └ Связь границы и жидкости



Выбор дискретного представления дельта функции - один из ключевых моментов метода, было предложено несколько вариантов. Основная проблема в данном случае, чтобы дельта функция удовлетворяла определенным условиям, которые требуются для сходимости метода.

Твердые границы

Описанный подход хорошо подходит для моделирования гибких границ, в то время как для жестких приходится использовать его различные модификации.

 Твердые границы

Описанный подход хорошо подходит для моделирования гибких границ, в то время как для жестких приходится использовать его различные модификации.

Опять же, эти модификации разнообразны, например, рассматривать погруженную границу, как гибкую с чрезвычайно большим коэффициентом жесткости

Алгоритм

- Вычисление во всех точках силы $f(x_1, x_2, \dots)$ на основе деформации границы
- Распределение сил на узлы решетки и получение плотности силы $F(x, t)$
- Используя какой-либо метод, произвести расчет нового состояния жидкости с учетом F
- С помощью полученной скорости жидкости вычислить скорость движения точек границы
- Получение лагранжевых координат точек границы

Алгоритм

- Вычисление во всех точках силы $f(x_1, x_2, \dots)$ на основе деформации границы
- Распределение сил на узлы решетки и получение плотности силы $F(x, t)$
- Используя какой-либо метод, произвести расчет нового состояния жидкости с учетом F
- С помощью полученной скорости жидкости вычислить скорость движения точек границы
- Получение лагранжевых координат точек границы

Алгоритм

- Вычисление во всех точках силы $f(x_1, x_2, \dots)$ на основе деформации границы
- Распределение сил на узлы решетки и получение плотности силы $F(x, t)$
- Используя какой-либо метод, произвести расчет нового состояния жидкости с учетом F
- С помощью полученной скорости жидкости вычислить скорость движения точек границы
- Получение лагранжевых координат точек границы

Алгоритм

- Вычисление во всех точках силы $f(x_1, x_2, \dots)$ на основе деформации границы
- Распределение сил на узлы решетки и получение плотности силы $F(x, t)$
- Используя какой-либо метод, произвести расчет нового состояния жидкости с учетом F
- С помощью полученной скорости жидкости вычислить скорость движения точек границы
- Получение лагранжевых координат точек границы

Алгоритм

- Вычисление во всех точках силы $f(x_1, x_2, \dots)$ на основе деформации границы
- Распределение сил на узлы решетки и получение плотности силы $F(x, t)$
- Используя какой-либо метод, произвести расчет нового состояния жидкости с учетом F
- С помощью полученной скорости жидкости вычислить скорость движения точек границы
- Получение лагранжевых координат точек границы

Метод «фиктивных» ячеек

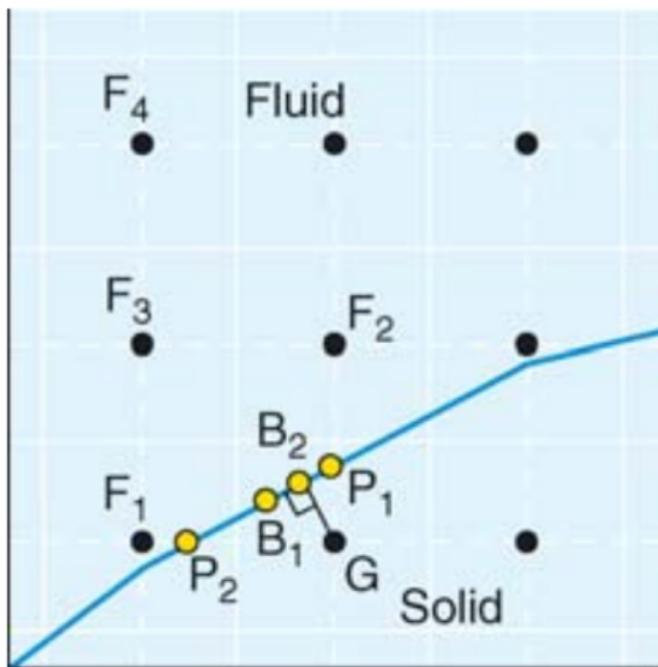
Альтернативный подход, в котором погруженная граница учитывается на этапе дискретизации с помощью «фиктивных» ячеек. Для каждой из таких ячеек используется интерполяционная схема, которая неявно учитывает условия на погруженной границе.

- └ Метод «фиктивных» ячеек

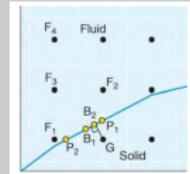
Альтернативный подход, в котором погруженная граница учитывается на этапе дискретизации с помощью «фиктивных» ячеек. Для каждой из таких ячеек используется интерполяционная схема, которая неявно учитывает условия на погруженной границе.

Фиктивной называется узел, относящийся к твердой поверхности и имеющий как минимум одну соседнюю точку, относящуюся к жидкости

Метод «фиктивных» ячеек



└ Метод «фиктивных» ячеек



На картинке схематично изображены действующие лица данного метода. В данном случае т. G будет являться «фиктивной», поэтому значение в этой точке вычисляется с помощью интерполяции точек F_1, F_2, F_3 (в линейном случае можно обойтись первыми двумя) и одной из точек на границе - B_1, B_2 (первая взята перпендикуляром, вторая - середина P_1, P_2). P_1, P_2 образованы пересечением границы с сеткой

Метод «фиктивных» ячеек

В простейшем случае используется билинейная (трилинейная для 3D) интерполяция

$$\phi = C_1x_1x_2 + C_2x_1 + C_3x_2 + C_4, \quad (14)$$

где коэффициенты выражаются с помощью 3-х точек жидкости и одной точки на погруженной границе.

 Метод «фиктивных» ячеек

В простейшем случае используется билinearная (трilinearная для 3D) интерполяция

$$\phi = C_1x_1x_2 + C_2x_1 + C_3x_2 + C_4, \quad (14)$$

где коэффициенты выражаются с помощью 3-х точек жидкости и одной точки на погруженной границе.

Здесь ϕ - значение некоторой переменной (например, скорость) в фиктивной ячейке, коэффициенты C_i определяются из значений этой переменной в окружающих точках жидкости. Нахождение коэффициентов C сводится к решению слагу с матрицей Вандермонда. Зачастую, для избежания некоторых негативных счетных эффектов, сначала вычисляют значение в точке, которая является образом, а затем в самой фиктивной ячейке.

Метод «фиктивных» ячеек

Подобная интерполяция хорошо подходит для ламинарных течений и для некоторых течений с высокими числами Рейнольдса. Для других случаев может быть использована интерполяция более высоких порядков.

Недостатки

- «Непрерывный» подход вносит некоторые ограничения, связанные со сходимостью. Он не всегда подходит для расчетов с большими числами Рейнольдса, т.к. описывает «смазанную границу»
- «Дискретный» подход обычно требует указания давления на погруженной границе и имеет некоторые сложности с моделированием движущихся погруженных границ.

Недостатки

- «Непрерывный» подход вносит некоторые ограничения, связанные со сходимостью. Он не всегда подходит для расчетов с большими числами Рейнольдса, т.к. описывает «смазанную границу»
- «Дискретный» подход обычно требует указания давления на погруженной границе и имеет некоторые сложности с моделированием движущихся погруженных границ.

- PETSc, the Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation
- hypre, библиотека высокопроизводительных предобуславливателей
- HDF5, библиотека, реализующая формат хранения научных данных HDF5
- Blitz++, высокопроизводительная библиотека для работы с массивами
- Silo, библиотека для работы с форматом визуализации и пост-обработки данных Silo

- PETSc, the Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation
- hypre, библиотека высокопроизводительных предобуславливателей
- HDF5, библиотека, реализующая формат хранения научных данных HDF5
- Blitz++, высокопроизводительная библиотека для работы с массивами
- Silo, библиотека для работы с форматом визуализации и пост-обработки данных Silo

- PETSc, the Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation
- hypre, библиотека высокопроизводительных предобуславливателей
- HDF5, библиотека, реализующая формат хранения научных данных HDF5
- Blitz++, высокопроизводительная библиотека для работы с массивами
- Silo, библиотека для работы с форматом визуализации и пост-обработки данных Silo

- PETSc, the Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation
- hypre, библиотека высокопроизводительных предобуславливателей
- HDF5, библиотека, реализующая формат хранения научных данных HDF5
- Blitz++, высокопроизводительная библиотека для работы с массивами
- Silo, библиотека для работы с форматом визуализации и пост-обработки данных Silo

- PETSc, the Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation
- hypre, библиотека высокопроизводительных предобуславливателей
- HDF5, библиотека, реализующая формат хранения научных данных HDF5
- Blitz++, высокопроизводительная библиотека для работы с массивами
- Silo, библиотека для работы с форматом визуализации и пост-обработки данных Silo

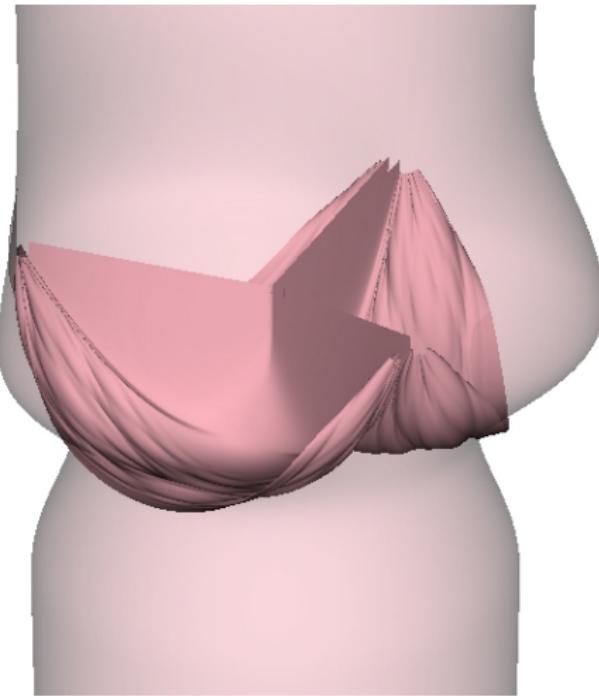


- PETSc, the Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation
- hypre, библиотека высокопроизводительных предобуславливателей
- HDF5, библиотека, реализующая формат хранения научных данных HDF5
- Blitz++, высокопроизводительная библиотека для работы с массивами
- Silo, библиотека для работы с форматом визуализации и пост-обработки данных Silo

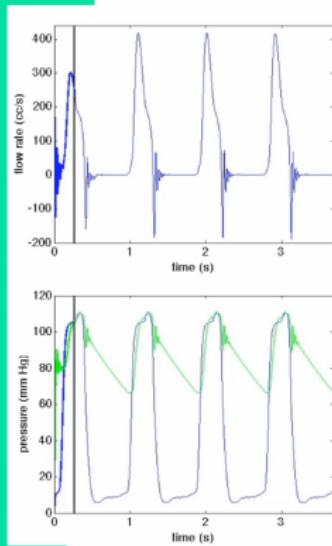
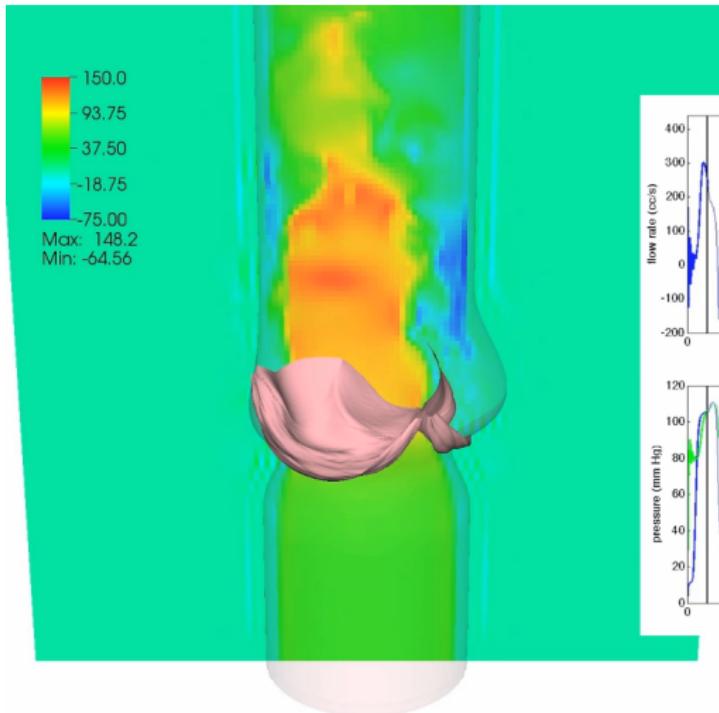
Основной вклад в разработку внесли сотрудники New York University School of Medicine. Библиотеки:

- PETSc is funded primarily by the United States Department of Energy, Office of Science, by the Advanced Scientific Computing Research (ASCR) Applied Mathematics Research and SciDAC programs
- hypre - Center for Applied Scientific Computing
- The Blitz++ project started at the Vision and Image Processing Lab in the Dept. of Systems Design Engineering at the University of Waterloo (Canada)

Аортальный клапан



Аортальный клапан



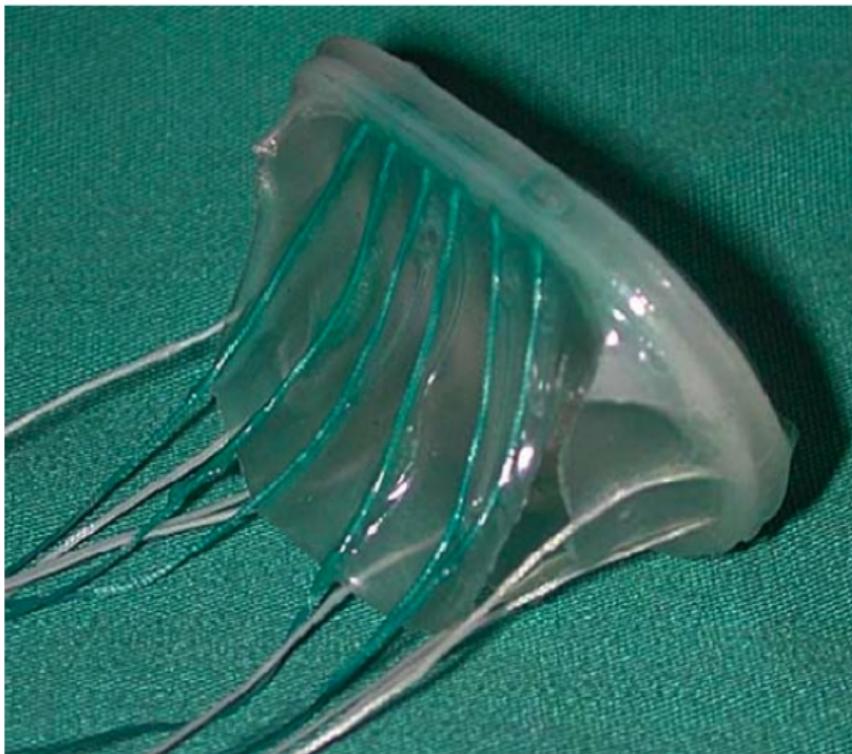
Аортальный клапан

Демонстрация движения клапана

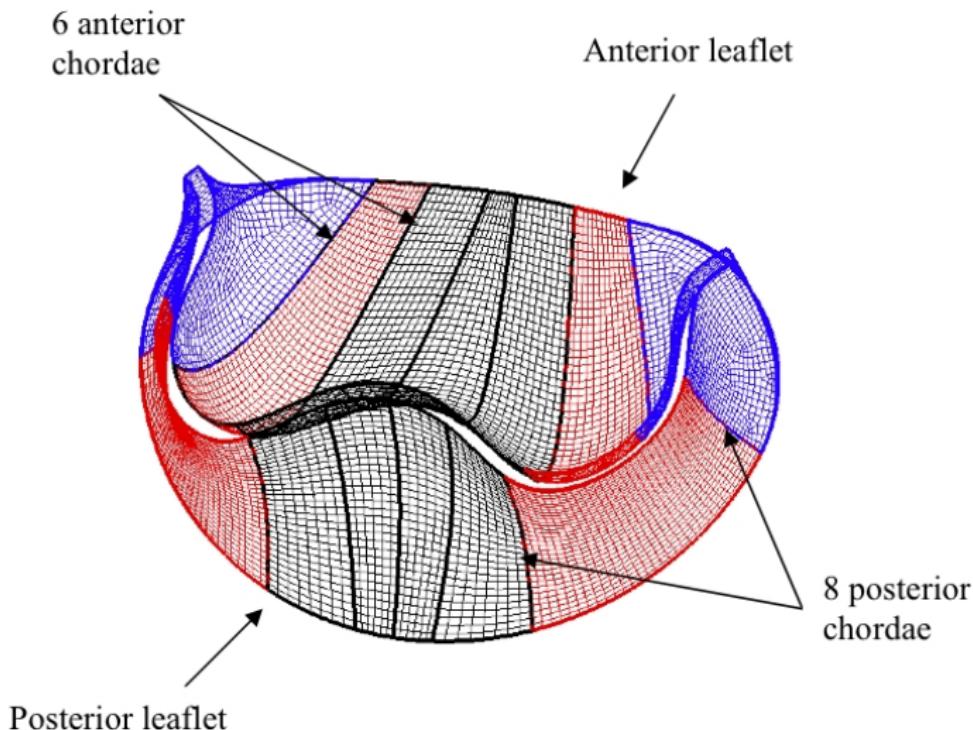
Аортальный клапан

Демонстрация течения жидкости

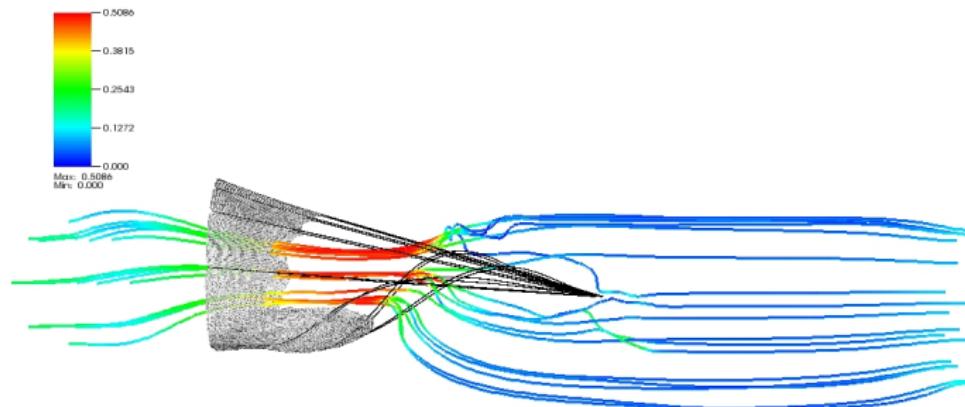
Митральный клапан (протез)



Митральный клапан (протез)



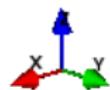
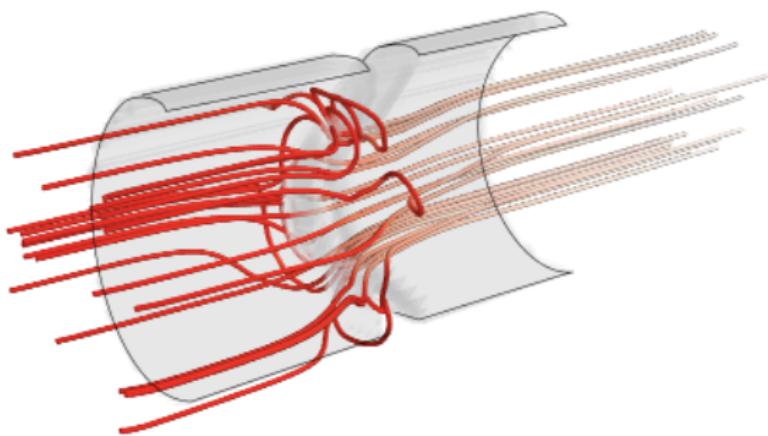
Митральный клапан (линии тока)



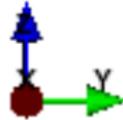
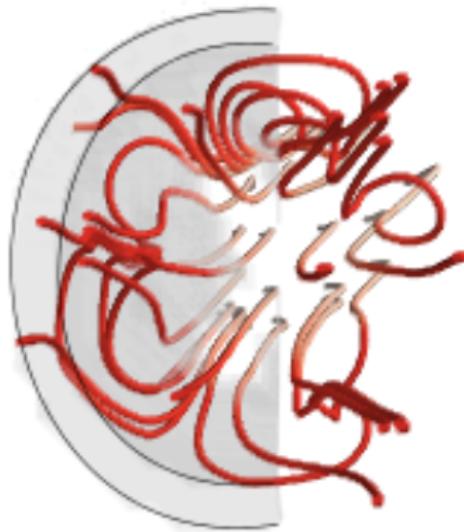
Митральный клапан

Демонстрация движения клапана

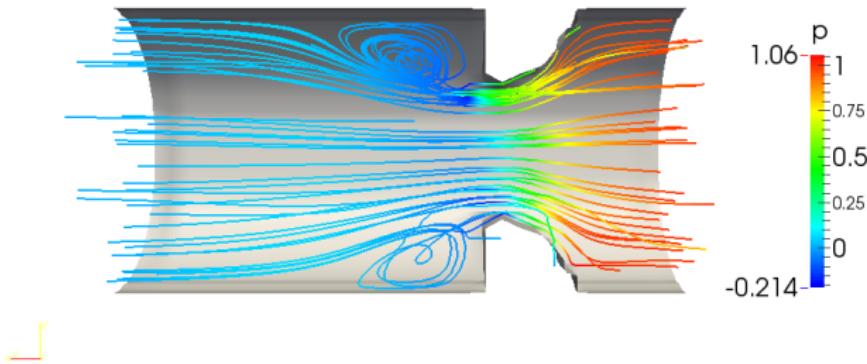
Без согласования

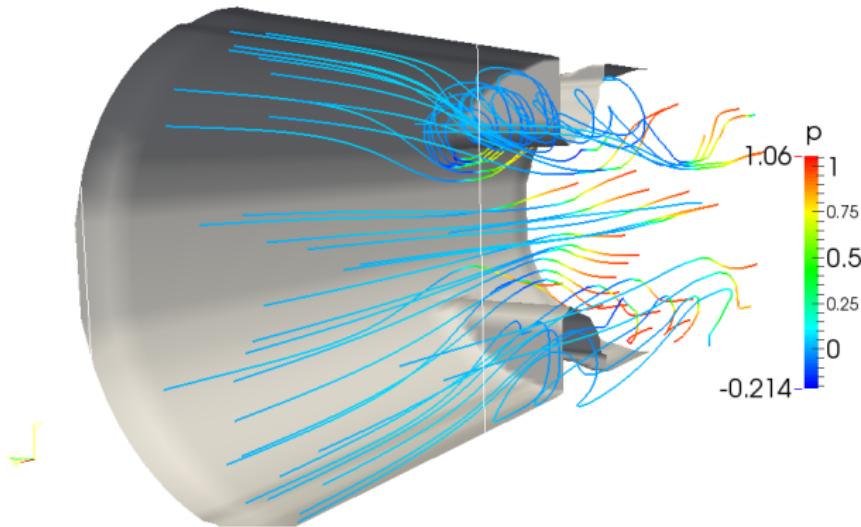


Без согласования

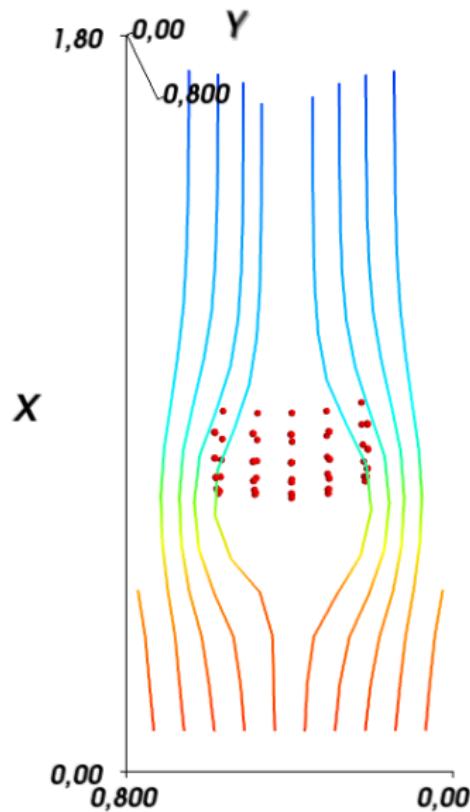


С согласованием

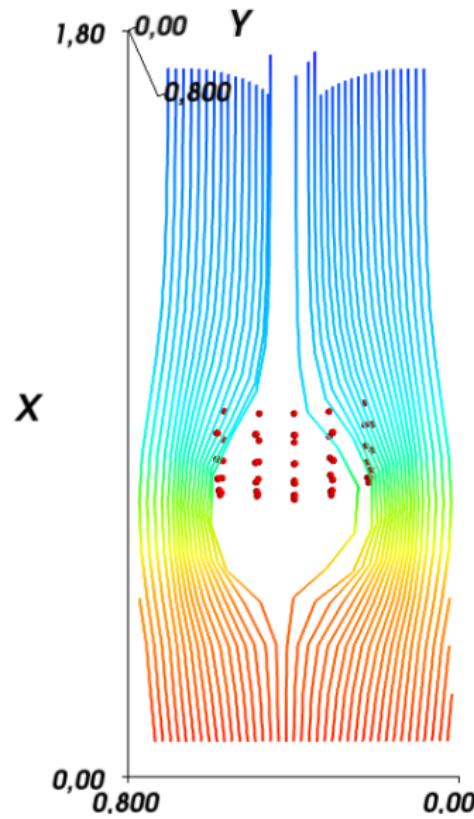




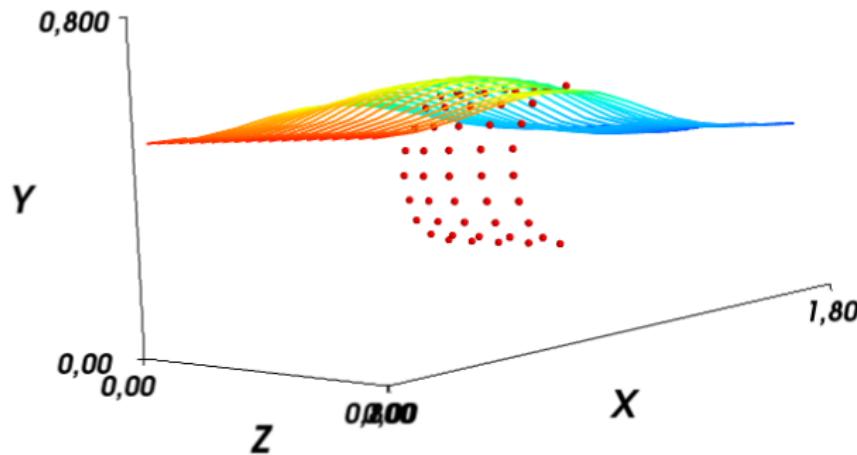
Погруженное препятствие



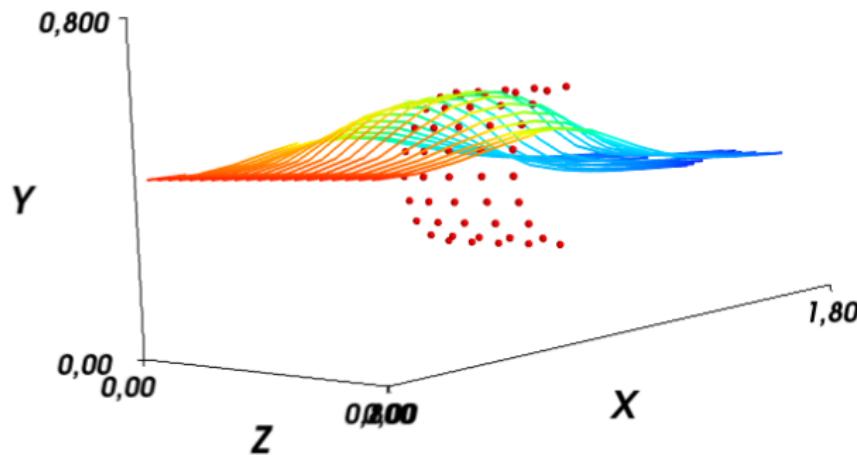
Погруженное препятствие



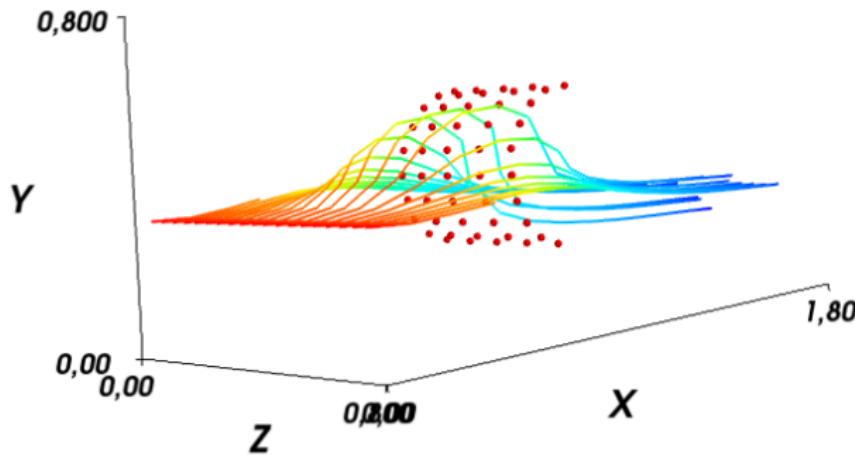
Проблема расчета



Проблема расчета



Проблема расчета



Дополнительная информация

- Peskin C.S., Numerical Analysis of Blood Flow in the Heart// JCP 25,220-252, (1977)
- Peskin C.S., The immersed boundary method, (1977)
- Mittal R, Iaccarino G, Immersed boundary method// ARFM, 37, 239-261, (2005)
- Bandringa H., Immersed boundary method, Groningen, (2010)

 Дополнительная информация

- Основная работа "непрерывного метода"(journal of computational physic)
- Более полная и развернутая
- Хороший обзор (Annual Review of Fluid Mechanics)
- Обзор в диссертационной работе

- Peskin C.S., Numerical Analysis of Blood Flow in the Heart// JCP 25,220-252, (1977)
- Peskin C.S., The immersed boundary method, (1977)
- Mittal R, Iaccarino G, Immersed boundary method// ARFM, 37, 239-261, (2005)
- Bandringa H, Immersed boundary method, Groningen, (2010)

Дополнительная информация

- Kruger T., Introduction to the immersed boundary method, (2011)
- Mital R., Seo J.H., A sharp-interface immersed boundary method with improved mass conservation and reduced spurious pressure oscillations// JCP, 230,7347-7363, (2011)
- Ghias R., Mital R., Dong H., A sharp interface immersed boundary method for compressible viscous flows// JCP, 225,528-553, (2007)

 Дополнительная информация

- Больше практики, но со спецификой другого метода расчета (Lattice Boltzmann method)
- О "дискретном"
- О "дискретном"

- Kruger T., Introduction to the immersed boundary method, (2011)
- Mital R., Seo J.H., A sharp-interface immersed boundary method with improved mass conservation and reduced spurious pressure oscillations// JCP, 230,7347-7363, (2011)
- Ghias R., Mital R., Dong H., A sharp interface immersed boundary method for compressible viscous flows// JCP, 225,528-553, (2007)