

Modelització del tractament d'ablació cardíaca IVS

Isaac Baldi Garcia	Marcel López Freixes	Eira Jacas García	Núria Castillo Ariño
1667260	1668323	1666616	1669145

1 Introducció

En aquesta pràctica hem solucionat numèricament l'equació de difusió de la calor amb una font de calor externa. El problema es contextualitza en l'ablació cardíaca, que és un tractament mèdic que es basa en escalfar per efecte Joule el teixit biològic entre els ventricles del cor amb dos elèctrodes de polaritats oposades. Les condicions per a que el mètode sigui efectiu són que cap regió pot sobrepassar els 80 °C, per evitar trombosis, i que la regió de teixit sa no superi els 50 °C, quan comença la mort cel·lular. El nostre objectiu és trobar el temps màxim que podem aplicar una senyal de 40 V sense trencar aquestes condicions. Per fer-ho, estudiarem tres mètodes numèrics diferents per resoldre EDDPs: Euler explícit, Euler implícit i Crank-Nicolson. Compararem els seus errors numèrics a partir de la solució analítica per determinar quin és millor per solucionar el problema.

2 Modelització del problema

L'equació diferencial que caracteritza el problema és

$$c_v \rho \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla(\kappa \nabla T) + P_{\text{ext}} , \quad (1)$$

on P_{ext} representa la calor aportada al sistema per efecte Joule per unitat de temps i de volum.

Si simplifiquem el sistema a un espai cilíndricament simètric, ens queda que

$$c_v \rho \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + P_{\text{ext}} . \quad (2)$$

Podem trobar el valor de P_{ext} tenint en compte que la potència dissipada per efecte Joule en el cas d'un corrent altern és $P_{\text{Joule}} = \frac{(V_{\text{ef}})^2}{R} = \frac{V^2 A \sigma}{2L}$, on A és la secció del cilindre considerat. Per tant, dividint pel volum del sistema obtenim que $P_{\text{ext}} = \frac{V^2 \sigma}{2L^2}$.

2.1 Normalització

Definint $\hat{z} = \frac{z}{L}$, $\hat{T} = T \frac{\alpha}{\lambda L^2}$ i $\hat{t} = t \frac{\alpha}{L^2}$, on $\lambda = \frac{P_{\text{ext}}}{\rho c_v}$ i $\alpha = \frac{k}{\rho c_v}$ (difusivitat tèrmica), podem reescriure l'Eq. (2) com

$$\frac{\partial \hat{T}}{\partial \hat{t}} = \frac{\partial^2 \hat{T}}{\partial \hat{z}^2} + 1 . \quad (3)$$

Per tant, l'equació obtinguda no depèn de cap paràmetre addicional. Per altra banda, la difusivitat tèrmica compleix el rol d'adimensionalitzar la temperatura i el temps.

2.2 Condicions inicials i de contorn

Les condicions inicials del problema són tals que a $t = 0$ s la temperatura del teixit és $T_c = 36,5$ °C a tot arreu. Pel que fa a les condicions de contorn, la temperatura a les parets de la porció cilíndrica de teixit considerada es manté constant a $T_c = 36,5$ °C.

3 Solució analítica

Utilitzant la solució analítica proporcionada a l'annex del guió amb $q(x, t) = 1$, obtenim que

$$f(\hat{z}, \hat{t}) = \beta + \frac{4}{\pi^3} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1 - e^{-(2n-1)^2 \pi^2 \hat{t}}}{(2n-1)^3} \sin((2n-1)\pi \hat{z}), \quad (4)$$

on $\beta = \hat{T}(T_c)$. Quan l'implementem al nostre codi, però, agafarem 200 termes del sumatori, que ja és suficient, ja que la convergència de la solució respecte el nombre de termes del sumatori és molt ràpida.

4 Solució numèrica: mètode d'Euler explícit

Per aplicar el mètode numèric d'Euler explícit utilitzem l'aproximació per la dreta de la primera derivada i la central per la segona. Substituint a l'Eq. (3) i definint $\gamma = \frac{\Delta \hat{t}}{\Delta \hat{z}^2}$, si el superíndex és el temporal i el subíndex l'espacial, aïllant \hat{T}_j^{i+1} ens queda que

$$\hat{T}_j^{i+1} = \gamma (\hat{T}_{j+1}^i - 2\hat{T}_j^i + \hat{T}_{j-1}^i) + \hat{T}_j^i + \Delta \hat{t}, \quad (5)$$

que amb les condicions inicials i de contorn definides, ens permet trobar per cada temps el valor de la temperatura a cada posició a partir de les temperatures trobades al temps anterior.

Si grafiquem les solucions numèriques corresponents a cada valor de γ a $\hat{t} = t_a = 0,025$, obtenim

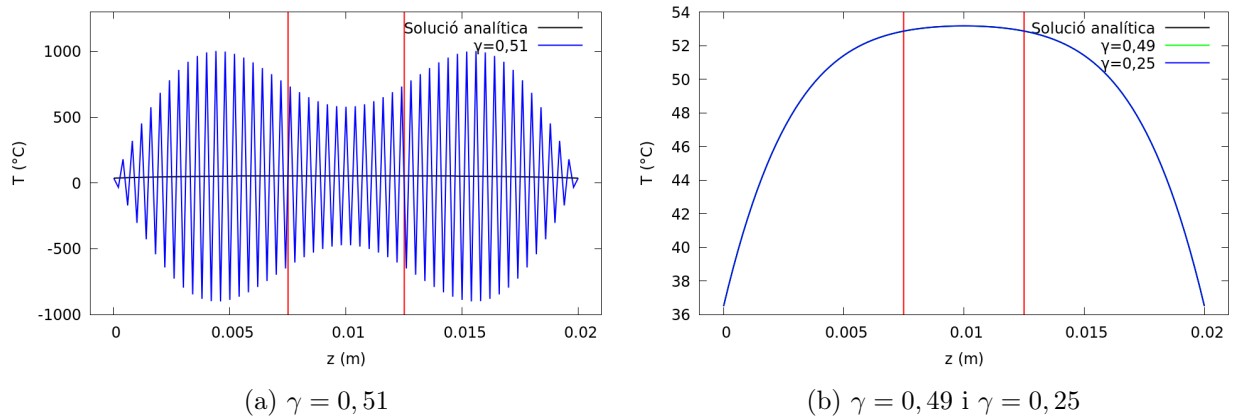


Figura 1: Solució numèrica pel mètode d'Euler explícit pels diferents valors de γ a $\hat{t} = t_a = 0,025$.

on les línies verticals vermelles representen els extrems del teixit malalt.

Podem veure com per $\gamma = 0,51$ la solució numèrica no té res a veure amb l'analítica, mentre que per $\gamma = 0,49$ i $\gamma = 0,25$ la solució numèrica és pràcticament igual a l'analítica. Això és degut a

que el mètode d'Euler per l'equació de difusió amb una font d'energia externa només funciona o és estable per a un mallat o discretització tal que $\gamma \leq 0,5$.

En cas de no conèixer la solució analítica, una possible estratègia per comprovar si el programa funciona correctament consisteix en verificar la coherència entre els valors numèrics i la formulació matemàtica. Es podria fer introduint els resultats obtinguts a l'Eq. (3) (aproximant les derivades) i verificant si la diferència entre les dues bandes de la igualtat és inferior a una tolerància predefinida.

5 Solució numèrica: mètodes implícits

Els mètodes numèrics implícits són aquells en què no és possible aïllar una variable (en aquest cas, la temperatura) en funció de variables calculades en passos anteriors (en aquest cas, temporals). En aquest problema, implementarem el mètode d'Euler implícit i el de Crank-Nicolson.

La resolució numèrica del problema es planteja, per cada pas temporal n , com un sistema lineal d'equacions algebraiques on les incògnites són les temperatures en cada punt espacial j . La representació matricial del sistema corresponent a cada mètode es dona a la secció A de l'Annex.

Remarquem que, per les condicions inicials i de contorn, $\hat{T}_j^1 = \hat{T}_1^n = \hat{T}_N^n = \beta$, pel que són valors coneguts i no incògnites. Així doncs, per a T_2^n i T_{N-1}^n cal utilitzar expressions modificades.

Per a la resolució del sistema i l'anàlisi dels resultats, hem optat pel mètode de Gauss-Seidel, preferible respecte el de Jacobi després de comparar-los a la secció B.

5.1 Mètode d'Euler implícit

En aquest mètode utilitzem l'aproximació per l'esquerra de la primera derivada (aquí és on recau la diferència amb el mètode explícit) i la central per la segona. Substituint a l'Eq. (3) i aïllant \hat{T}_j^n , ens queda que

$$\hat{T}_j^n = \frac{1}{1+2\gamma} \left[\gamma \left(\hat{T}_{j+1}^n + \hat{T}_{j-1}^n \right) + \hat{T}_j^{n-1} + \Delta t \right] . \quad (6)$$

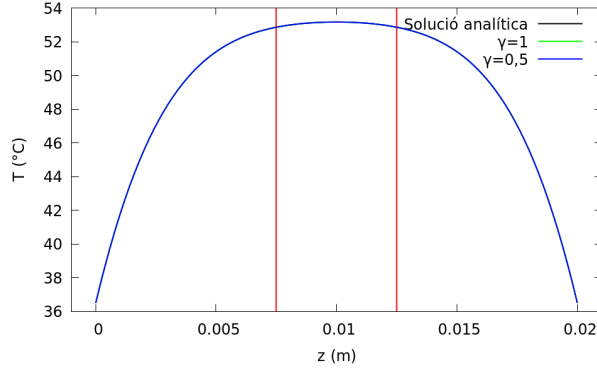
A la Fig. 2a es presenten els resultats obtinguts utilitzant les diferents discretitzacions temporals. Com es pot veure a la gràfica, les solucions numèriques són pràcticament iguals a l'analítica en ambdós casos.

5.2 Mètode de Crank-Nicolson

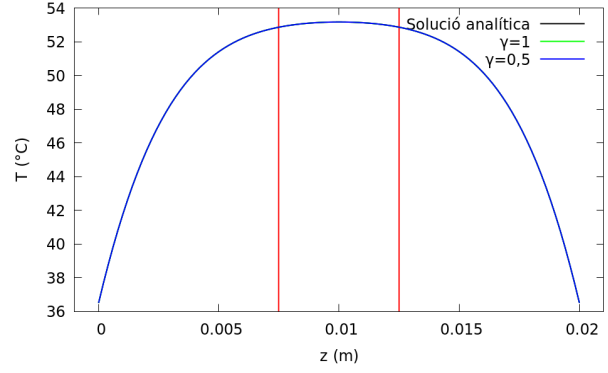
En aquest mètode la primera derivada s'aproxima per l'esquerra (per la dreta s'obté el mateix resultat). En canvi, la segona derivada espacial es calcula per l'aproximació central, prenent la mitjana temporal entre els dos passos considerats en la primera derivada temporal (aquí és on recau la diferència amb els mètodes d'Euler). Substituint a l'Eq. (3) i aïllant \hat{T}_j^n , ens queda que

$$\hat{T}_j^n = \frac{1}{1+\gamma} \left[\Delta t + \hat{T}_j^{n-1}(1-\gamma) + \frac{\gamma}{2} \left(\hat{T}_{j+1}^n + \hat{T}_{j-1}^n + \hat{T}_{j+1}^{n-1} + \hat{T}_{j-1}^{n-1} \right) \right] . \quad (7)$$

A la Fig. 2b es presenten els resultats obtinguts utilitzant les diferents discretitzacions temporals. Com en el cas anterior, s'observa que les solucions numèriques són pràcticament iguals a l'analítica en ambdós casos.



(a) Solucions pel mètode d'Euler implícit.

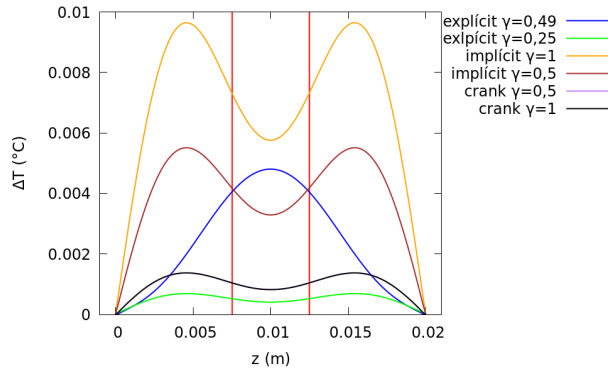


(b) Solucions pel mètode de Crank-Nicolson.

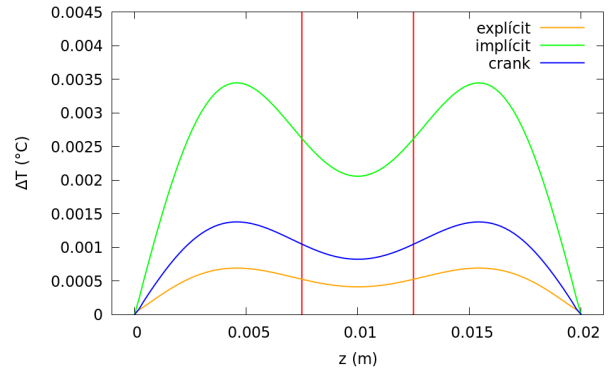
Figura 2: Solucions numèriques dels mètodes implícits pels diferents valors de γ , a $\hat{t} = t_a = 0,025$.

6 Comparació dels mètodes

Ens disposem a comparar els diferents mètodes per escollir quin implementarem per solucionar el problema. Per fer-ho, compararem els errors numèrics obtinguts en cada cas a partir de la solució analítica. Amb aquest propòsit presentem la Fig. 3.



(a) Mallats suggerits al guió.



(b) $\gamma = 0,25$.

Figura 3: Comparació dels errors corresponents als diferents mètodes i mallats.

En general, considerant cada mètode per separat, si reduim el tamany de l'interval de la discretització temporal, és a dir, si reduim el valor de γ , l'error és més petit, com era d'esperar si tenim en compte la definició de derivada. Remarquem que, pel mètode de Crank-Nicolson, les dues solucions numèriques presenten errors gairebé idèntics, fent-los difícils de distingir al gràfic. A més, en general, l'error creix a mesura que ens apropem al centre del teixit, però arriba un punt, en tots els casos menys el mètode explícit per $\gamma = 0,49$, en el que comença a disminuir fins arribar a un mínim relatiu just al centre del teixit.

Pel que fa a la comparació entre els mètodes, el mètode de Crank-Nicolson és més exacte que el d'Euler implícit independentment del mallat. Això és degut al fet que el de Crank-Nicolson utilitza els valors de la funció (la temperatura) en més punts veïns per a avaluar-la en una certa posició i temps. Aquesta informació addicional li permet capturar millor les variacions locals de la funció.

Per altra banda, el mètode d'Euler explícit per $\gamma = 0,49$ és més exacte als extrems de l'interval espacial que els altres dos mètodes amb independència del mallat, però a mesura que ens apropem al centre, el seu error supera al de Crank-Nicolson i just en la porció de teixit malalt supera també al d'Euler implícit amb $\gamma = 0,5$. Pel que fa al mètode explícit amb $\gamma = 0,25$, ha resultat ser el més exacte. Ara bé, tenint en compte la tendència de l'error a disminuir amb el valor de γ , només té sentit comparar els tres mètodes utilitzant un mateix mallat, que hem escollit que sigui $\gamma = 0,25$ (Fig. 3b). Fent això, però, el mètode més exacte ha seguit sent l'explícit, pel que podem concloure que en general aquest mètode és el que millors resultats dona en aquest cas. Això és degut a que en els mètodes implícits, a part d'assumir un error degut a l'aproximació numèrica de les derivades, introduïm un error addicional a l'utilitzar un procés iteratiu per trobar la solució dels sistemes d'equacions que cal resoldre per cada pas temporal.

A part de ser el més exacte, el mètode d'Euler explícit també és més senzill d'implementar i és més ràpid computacionalment perquè no requereix resoldre sistemes d'equacions, a diferència dels mètodes implícits. Tanmateix, un inconvenient és que la seva estabilitat ve condicionada per la discretització temporal que s'implementi; si aquesta no és prou petita, com ja hem vist, la solució divergirà. En canvi, els mètodes implícits que hem analitzat són incondicionalment estables.

7 Solució al problema

Tenint en compte la discussió anterior, hem resolt el problema amb el mètode d'Euler explícit amb un mallat tal que $\gamma = 0,25$. Si ens fixem en la solució numèrica trobada per $\gamma = 0,25$ representada a la Fig. 1b, es veu com per $\hat{t} = t_a = 0,025$, la zona sana supera els 50°C , és a dir, que el temps que busquem és menor al corresponent a $\hat{t} = t_a = 0,025$ i, per tant, per solucionar el problema és suficient amb utilitzar el codi emprat en aquest cas imposant que en el pas temporal on les condicions que garanteixen l'eficiència del tractament es violin, s'aturi el mètode i es retorni el valor del temps que correspon a aquest pas. Fent això, obtenim un valor pel temps màxim que podem estar fent el tractament sense trencar les condicions que garanteixen la seva eficiència d'aproximadament 58 segons.

8 Millora del model

8.1 Dependència de les conductivitats tèrmica i elèctrica amb la temperatura

Per a un cilindre de secció S i longitud L , la relació de la resistivitat r_R amb la resistència R és:

$$r_R = RS/L . \quad (8)$$

En materials no cristal·lins, com el teixit biològic, R varia poc amb la temperatura¹. Per aquest motiu, inicialment s'ha considerat constant. Tanmateix, per millorar el model podem tenir en compte aquesta dependència, fent una expansió de Taylor a primer ordre al voltant de $T = T_c$:

$$R \approx R_0(1 + \gamma(T - T_c)) , \quad (9)$$

on γ és el canvi de resistència per grau.

Substituint a l'Eq. (8) i utilitzant que la conductivitat és la inversa de la resistivitat, podem realitzar un desenvolupament de Taylor a primer ordre al voltant de $T = T_c$, obtenint que

$$\sigma_R(T) \approx \sigma_0(1 - k(T - T_c)) , \quad (10)$$

¹http://scielo.sld.cu/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1815-59282020000100044

on hem definit $\sigma_0 = \frac{L}{R_0 S}(1 + \gamma T_c)^{-1}$ i $k = \frac{\gamma}{1 + \gamma T_c}$. L'expressió per a la conductivitat tèrmica té la mateixa forma, amb els corresponents paràmetres equivalents.

Adicionalment, podem sumar-li a r_R la contribució de les impureses del material r_I , de manera que la resistivitat total serà $r = r_R + r_I$. Ambdós factors influiran en la resolució de l'Eq. (1).

8.2 Discretització no uniforme a prop dels extrems del teixit malalt

El model proposat per a descriure aquest problema utilitza per a tots els mètodes numèrics una discretització uniforme de l'espai i el temps. Per descomptat una discretització espacial que ofereixi intervals menors milloraria el model, ara bé, el temps de càlcul també augmentaria. Podria interessar-nos, doncs, tenir una discretització no uniforme que ofereixi més precisió únicament als límits del teixit malalt per tal de tenir una major precisió a l'hora de determinar en quin temps es violen les condicions que garanteixen l'eficiència del problema sense augmentar considerablement el temps de càlcul.

9 Animació

Un cop hem implementat els mètodes, hem representat els resultats en un gif on es pot veure l'evolució del camp de temperatura en dues dimensions al llarg del temps. El nostre problema només depèn d'una dimensió espacial però per fer el gif més representatiu del sistema d'electrodes que narra el problema, hem extès el camp de temperatures a una segona dimensió espacial. Per generar els gifs hem calculat el camp de temperatures en diferents temps equiespaiats i hem convertit aquestes dades en una seqüència d'imatges que hem transformat en un gif. En els gifs veiem clarament com en els extrems dret i esquerra del camp, on hi hauria els electrodes, la temperatura es manté a la temperatura corporal i, en canvi, al mig, on hi hauria el teixit malalt, la temperatura va augmentant amb el temps. Al gif anomenat 'animacio1.gif' podem veure com la calor viatja a través del teixit, en el gif anomenat 'animacio2.gif' podem veure com a partir dels aproximadament 58 segons, hi ha parts del teixit que superen els 50 °C i es trenquen les condicions d'eficiència del tractament, com esperavem tenint en compte la solució del problema.

10 Conclusió

La comparativa de l'error numèric associat a cada mètode i mallat ens ha permès concloure que el mètode d'Euler explícit és el més exacte per aquest problema en condicions òptimes d'estabilitat ($\gamma \leq 0,5$), tal com s'ha observat en la comparativa amb el mallat corresponent a $\gamma = 0,25$. Aquesta precisió es deu a la manca d'errors addicionals associats a la resolució iterativa necessària en els mètodes implícits per resoldre el sistema d'equacions que es planteja a cada pas temporal. El mètode de Crank-Nicolson ofereix un error lleugerament superior al mètode explícit però menor al d'Euler implícit, ja que el mètode de Crank-Nicolson utilitza més punts veïns per a avaluar la funció en una posició i un moment donats.

Pel que fa la solució del problema hem obtingut que el temps òptim és d'aproximadament 58 segons.

A més, hem proposat diferents millores al model relacionades amb la dependència de les conductivitats elèctrica i tèrmica amb la temperatura i la no uniformitat del mallat espacial per una millor distinció del teixit malalt i sa.

Annexos

A Matrius dels sistemes d'equacions

Per al mètode d'Euler implícit, la representació matricial del sistema d'equacions corresponent és la següent:

$$\begin{pmatrix} (2\gamma+1) & -\gamma & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -\gamma & (2\gamma+1) & -\gamma & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -\gamma & (2\gamma+1) & -\gamma & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & -\gamma & (2\gamma+1) & -\gamma \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & -\gamma & (2\gamma+1) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{T}_2^n \\ \hat{T}_3^n \\ \vdots \\ \hat{T}_{N-2}^n \\ \hat{T}_{N-1}^n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Delta t + \beta\gamma + \hat{T}_2^{n-1} \\ \Delta t + \hat{T}_3^{n-1} \\ \vdots \\ \Delta t + \hat{T}_{N-2}^{n-1} \\ \Delta t + \beta\gamma + \hat{T}_{N-1}^{n-1} \end{pmatrix} \quad (11)$$

Per al mètode de Crank-Nicolson, la representació matricial del sistema d'equacions corresponent és la següent:

$$\begin{pmatrix} (\gamma+1) & -\frac{\gamma}{2} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -\frac{\gamma}{2} & (\gamma+1) & -\frac{\gamma}{2} & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \ddots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & -\frac{\gamma}{2} & (\gamma+1) & -\frac{\gamma}{2} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & -\frac{\gamma}{2} & (\gamma+1) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{T}_2^n \\ \hat{T}_3^n \\ \vdots \\ \hat{T}_{N-2}^n \\ \hat{T}_{N-1}^n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_2^{n-1} + \frac{\gamma}{2}\beta \\ f_3^{n-1} \\ \vdots \\ f_{N-2}^{n-1} \\ f_{N-1}^{n-1} + \frac{\gamma}{2}\beta \end{pmatrix} \quad (12)$$

$$\text{on } f_j^n = \frac{\gamma}{2}\hat{T}_{j+1}^n + (1-\gamma)\hat{T}_j^n + \frac{\gamma}{2}\hat{T}_{j-1}^n + \Delta\hat{t}$$

B Comparació del mètode de Jacobi i el mètode de Gauss-Seidel

La resolució numèrica de sistemes d'equacions lineals per mètodes directes, com el de Gauss-Jordan, resulta molt laboriós quan la dimensió del sistema és gran. Per tant, es recorre a mètodes iteratius.

En aquesta assignatura se n'han presentat dos: el de Jacobi i el de Gauss-Seidel. Per a seleccionar el mètode que implementarem, comparem l'error numèric associat a cadascun d'ells en un cas concret: el mètode d'Euler implícit amb $\gamma = 1$. A continuació es presenten els resultats obtinguts.

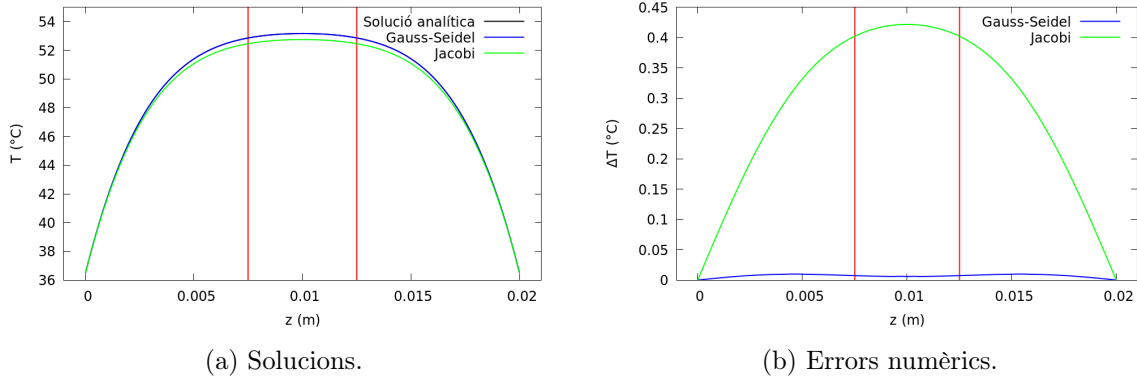


Figura 4: Solucions del mètode d'Euler implícit amb $\gamma = 1$ a $\hat{t} = t_a$, per diferents mètodes iteratius.

En la Fig. 4a s'aprecia que, a prop dels extrems, les solucions que proporcionen ambdós mètodes són molt similars a la solució analítica. Tanmateix, en la zona central la solució obtinguda pel mètode de Jacobi presenta una lleugera desviació.

Aquest fet es reflecteix en la gràfica de l'error. Tot i que en els dos casos l'error és petit (es manté inferior a 0,5 °C), en el mètode de Gauss-Seidel és significativament inferior.

En conclusió, hem escollit el mètode de Gauss-Seidel per resoldre el problema, ja que involucra menor error i, a més, millor eficiència computacional.