# 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 второй.

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

15 декабря 2022 г.

## Аннотация

Данный отчет посвящен результатам исследований в рамках второго этапа (2022 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
- Апробация разработанных алгоритмов совместной регистрации изображений разной модальности (ПКТ и КТ-ангиографии)
- Апробация алгоритмов обработки ПКТ-данных пациентов для автоматизированной идентификации ишемических участков миокарда
- Разработка методов усвоения данных ПКТ для краевых условий в терминальных артериях в рамках редуцированной модели кровотока

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

- Метод автоматического детектирования линий креплений нативного клапана и проведения линий пришивания новых створок
- Метод моделирования контакта с учётом самопересечений.
- Исследование механических свойств нативного перикарда и обработанного перикарда человека
- Проведение натурного эксперимента на образце свиного аортального клапана для валидации результатов математической модели закрытия аортального клапана.

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

- Разработка методов учета геометрии и близости бифуркаций сосудов для редуцированной гемодинамической модели кровотока
- Верификация методов учета геометрии и близости бифуркаций редуцированной модели на основе трехмерных детальных расчетов кровотока
- Апробация методов автоматизированной сегментации КТ/МРТ-данных с выделением легочных артерий, полой вены, камер сердца и построения расчетных сеток

- Сбор клинических данных по пациентам со сложными пороками сердца

Задача 1.4. Персонализированные модели подсистем опорно-двигательного аппарата

- Анализ имеющейся информации относительно анатомических и морфологических ориентиров для сухожилий коленного сустава
- Разработка и апробация алгоритма на примере медицинских KT-изображений коленного сустава
- Построение персонализированной биомеханической редуцированной модели коленного сустава
- Выявление влияния различных мягкотканных стабилизирующих структур на движение надколенника

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

- Внедрение в динамический блок криволинейной вертикальной координаты, огибающих рельеф и ряда горизонтально явных - вертикально неявных схем интегрирования по времени.
- Испытание блока на идеализированных тестовых задачах (обтекание горы Шара, бароклинная неустойчивость, идеализированный тропический циклон).
- Оценка параллельной эффективности, точности, сравнение с зарубежными аналогами.
- Реализация обратного каскада кинетической энергии в рамках модели ПЛАВ. Оценка спектра модели.

Задача 2.2. Развитие вычислительных технологий для моделирования Мирового океана

- Реализация возможности расчета динамики модели океана как в z, так и в z\* системе координат.
   Подключение модели термодинамики морского льда.
- Разработка программной реализации динамики океана, блока переноса трассеров на графических процессорах с использованием гибридного подхода MPI/OpenMP/CUDA. Тестирование программной реализации.
- Реализация в модели океана нового пакета физических параметризаций различной вычислительной сложности, в частности, крупномасштабной турбулентности и конвекции.
- Проведение численных экспериментов с новой версией модели океана по протоколу OMIP. Сравнение с результата моделирования с данными наблюдений и других моделей Мирового океана.

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

- Проведение дополнительных расчетов с вихреразрешающими моделями турбулентности над поверхностями городского типа с различными конфигурациями обтекаемых объектов. Уточнение предложенной параметризации турбулентного масштаба длины на основе этих расчетов. Включение параметризаций в модели RANS и их тестирование.
- Обобщение предложенных аппроксимаций турбулентного масштаба длины на случай устойчивостратифицированных течений в городской среде. Включение разработанных параметризаций турбулентности в модели RANS и их тестирование на основе сравнения с данными вихреразрешающего моделирования.
- Проведение тестовых LES-расчетов конвективно-сдвиговой турбулентности в пограничном слое атмосферы над поверхностями городского типа. Анализ результатов моделирования и разработка сценариев численных экспериментов при различных значениях определяющих параметров.
- Реализация различных стохастических моделей лагранжева переноса частиц взвеси и пассивных трассеров в RANS модели городской среды (в частности, будут адаптированы к сложной геометрии стохастические лагранжевы модели).
- Проведение расчетов лагранжева переноса частиц в идеализированной городской среде. Сравнение результатов с данными LES и DNS моделей.

Задача 2.4. Разработка модели динамики морского льда

- Тестовые расчеты по краткосрочному прогнозу состояния льда. Начальные поля (сплоченность и толщина льда, скорость дрейфа) будут взяты базы данных из оперативной системы TOPAZ-4, которая является частью европейского проекта Copernicus. Сравнение результатов прогноза с данными TOPAZ-4.
- Расширение функционала модели динамики льда за счет добавления других солверов уравнения динамики: EVP, aEVP. Также будет добавлен оптимизированный солвер adaptive-mEVP, сокращающий число итераций mEVP метода за счет нестационарного выбора оптимального параметра итерации. Модификация граничных условий на береговом контуре (замена условия прилипания на условие скольжения с трением).
- Реализация различных параметризаций прочности льда

По результатам исследований были получены следующие научные результаты:

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

- Апробированы алгоритмы совместной регистрации изображений разной модальности путём сопоставления патологических перфузионных зон с наличием атеросклеротических поражений в снабжающих их коронарных артериях. Проведена апробация алгоритмов обработки ПКТ-данных пациентов для автоматизированной идентификации ишемических участков миокарда. Разработан алгоритм зональной сегментации перфузионных областей левого желудочка, соответствующих видимым на КТ концевым коронарным артериям, а также расчёта перфузионного индекса TPR для каждой из зон. Результаты анализа индивидуализированных патологических зон микроциркуляции аналогичны результатам, полученным при анализе патологических стандартных зон, определённых автоматически компьютерным томографом, что подтверждает апробацию алгоритма совместной регистрации через независимое исследование. Преимущество предложенного алгоритма заключается в возможности индивидуализации расположения перфузионных зон в зависимости от структуры коронарных артерий конкретного пациента и качества КТ данных.
- Разработаны методы усвоения данных ПКТ для краевых условий в терминальных артериях в рамках редуцированной модели кровотока. Предложенный алгоритм обработки ПКТ-данных пациентов используется для идентификации зон перфузии миокарда, соответствующих конкретным коронарным артериям. Затем в рассчитанных зонах миокарда производятся вычисления индекса TPR. Полученный индекс затем используется для модификации краевых условий в терминальных артериях модели кровотока. Анализ результатов показал, что учет данных о проницаемости поврежденного микроциркуляторного русла повышает точность численного воспроизведения фракционного резерва кровотока в магистральных коронарных артериях По результатам работы опубликована статья [10] (см. список ниже)

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

По результатам тестирования алгоритм автоматического детектирования линий креплений нативных створок аортального клапана не является робастным, поэтому был реализован алгоритм полуавтоматического проведения линий пришивания новых створок в веб-интерфейсе. Отметим, что при проведении операций по неокуспидизации аортального клапана линии крепления нативных створок, как правило, и используются в качестве линий пришиваний новых створок аортального клапана. Был разработан новый графический интерфейс для полуавтоматического проведения на основе опорных точек, задаваемых хирургом на поверхности корня аорты. По опорным точкам, используя алгоритм Катмулла-Рома, автоматически строится пространственная кривая, соединяющая все опорные точки. При этом гарантируется, что все опорные точки лежат на поверхности аорты. Интерфейс дает возможность редактировать, удалять и передвигать опорные точки, а также сохранять координаты опорных точек в формате, необходимом для построения численной модели закрытого состояния аортального клапана.

- Согласно результатам оптической когерентной эластографии, химическая обработка глутаральдегидом и растяжение в рамках протокола подготовки образцов во время операции по неокуспидизации аортального клапана ("референтные растягивающие усилия") существенно повышают жесткость материала. Причем обработанный и растянутый образец демонстрирует более однородное пространственное распределение со значительно более высокими, чем у нативного и просто обработанного образцов, значениями упругого модуля. Перетянутый образец (сильно больше "референтных растягивающих усилий") оказался мягче растянутого по стандартному протоколу (300-600 кПа против 600-700 кПа). Возможно, это является следствием внутренних повреждений при приложении больших растягивающих усилий. По результатам работы подготовлена и принята в печать статья [3] (см.список ниже).
- Было показано, что для построения таблично заданных определяющих соотношений (data-driven constitutive equations) использование функций отклика (частные производные упругого потенциала) является наиболее целесообразным для описания механического поведения гиперупругих материалов. Также, согласно численным экспериментам, было получено, что виртуальная оценка коаптации створок аортального клапана должна обязательно решаться в рамках нелинейной теории упругости. По результатам работ были подготовлены статьи [4,5] (см. список ниже).
- Реализован геометрический алгоритм для моделирования контактного взаимодействия тонкостенных структур, который может быть использован для динамических и статических постановок задач нелинейной упругости. Алгоритм гарантирует отсутствие пересечений и самопересечений упругих тел, если они отсутствовали в начальной конфигурации. Реализован робастный метод отыскания столкновений между парами отрезок-отрезок и точка-треугольник, вершины которых движутся по линейным траекториям. Помимо этого, был разработан и реализован метод виртуального анатомически корректного вшивания новых створок аортального клапана. При решении задачи о размещении произвольных шаблонов лепестков клапана продемонстрирована робастность алгоритма для моделирования контактного взаимодействия. По результатам работы опубликована статья [6] (см. список ниже).

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

В отчетном периоде получен метод учета геометрии и близости бифуркаций сосудов для редуцированной модели кровотока с использованием нейронной сети. Нейросеть на входе получает давления на границах втекания и вытекания, а также геометрические параметры бифуркации и приближает значения потоков на границах втекания и вытекания. Для обучения были сгенерированы данные путем решения стационарного уравнения Навье-Стокса. Средняя относительная ошибка приближения потоков нейросетью составила около 5%, максимальное отклонение при тестировании достигало 22%. На следующем этапе будет продолжена работа по снижению максимальных отклонений ориентировочно до 10%. Повышение точности планируется достичь за счет перехода к физически-информированной (physics-driven) архитектуре нейронной сети. Дальнейшее развитие нейросети и верификация редуцированной модели будут проведены в рамках работ, запланированных на 2023 год: "Разработка редуцированной модели кровотока, учитывающей персонализированные краевые условия и персонализированную геометрию расположения сосудов после операции Фонтена. Валидация редуцированной модели кровотока"

– Усовершенствован и апробирован на КТ данных пациентов с тяжелыми пороками сердца предложенный на предыдущем этапе метод автоматизированной сегментации КТ/МРТ данных с выделением легочных артерий, полой вены, камер сердца. Алгоритм сегментации реализован в программе ITK-SNAP. Отработана методика построения расчетных тетраэдральных сеток.

#### Задача 1.4. Персонализированные модели подсистем опорно-двигательного аппарата

- Разработана биомеханическая редуцированная модель коленного сустава, позволяющая исследовать разные аспекты движения надколенника: влияние на движение мягкотканных стабилизирующих структур, контактные силы на артикуляционных поверхностях пателлофеморального сустава, влияние индивидуальных анатомических особенностей на движение надколенника.
- Проведенные численные эксперименты пассивного (без дополнительной активации мышц) сгибания колена подтвердили антагонистическое влияние структур MPFL, MPTL и LR: при удалении латеральных структур наблюдалось значительное медиальное смещение надколенника, при удалении медиальных – латеральное. Результаты моделирования соответствуют клиническим наблюдениям и подтверждают корректность работы модели для данного эксперимента.

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

Внедрение криволинейной системы координат, огибающей рельеф, в негидростатический динамический блок позволило моделировать взаимодействие атмосферных течений с орографией. Реализация схем интегрирования по времени с неявностью по вертикали позволила увеличить шаг по времени до 50 раз по сравнению с использованием полностью явных методов. Повышение шага по времени и учет взаимодействия с рельефом позволили провести ряд численных экспериментов по моделированию идеализированной атмосферы, входящих в стандартный набор тестов проекта по сравнению динамических блоков моделей атмосферы (DCMIP). Качество полученных численных решений соответствует современному мировому уровню как для негидростатических течений (эксперимент "обтекание горы Шара"), так и для крупномасштабных гидростатических течений (эксперименты "бароклинная неустойчивость "волны Россби, возбужденные орографией"). Численные решения во всех экспериментах близки к эталонным. Замеры параллельной эффективности программного комплекса разрабатываемого негидростатического динамического ядра подтверждают сильную масштабируемость как минимум до 4000 вычислительных ядер на системе CrayXC-40 (наибольшее число ядер доступное для нас в данный момент времени). В результате анализа спектра кинетической энергии модели атмосферы ПЛАВ были настроены пространственный масштаб стохастической добавки в поле завихренности и значение коэффициента, регулирующего долю возвращаемой кинетической энергии, эти значения одинаковы для всех вертикальных уровней модели. Рисунок 1.8 (глава 2.1) в приложении показывает заметное увеличение кинетической энергии на масштабах от 400 до 2000 км (волновые числа от 20 до 100; шаг сетки – около 80 км). Аналогично работе (Wedi, 2014), применение параметризации ОПКЭ в модели ПЛАВ позволяет приблизить спектр кинетической энергии к зависимости  $k^{(-5/3)}$ , где k волновое число. По результатам работы опубликованы статьи [2,7] (см. список ниже).

Задача 2.2. Развитие вычислительных технологий для моделирования Мирового океана

Реализована возможность расчета динамики океана с использованием вертикальной координаты z\*. Выполнены расчеты, верифицирующие корректность реализации новой вертикальной координаты. Разработана гидростатическая модель динамики океана для выполнения расчетов на массивно-параллельных вычислительных системах, включающих графические процессоры. Программная реализация модели основана на использовании гибридного MPI-OpenMP-CUDA подхода. Показана возможность ускорения расчетов динамики океана и переноса трассеров, по сравнению с выполнением вычислением на центральном процессоре. Рассмотрена возможность использования половинной точности для расчета переноса пассивной примеси. Показано, что такой подход при применении алгоритмов компенсационного суммирования позволяет верно воспроизвести первые и вторые моменты распределения поля концентрации в турбулентном течении Куэтта, а также ускорить расчеты на графических ускорителях.

Разрабатываемая модель общей циркуляции океана дополнена набором как известных, так и развиваемых при участии коллектива проекта физических параметризаций различной вычислительной сложности. Набор параметризаций включает схемы вертикального перемешивания для устойчивой стратификации и конвекции, блок приземного слоя для расчета потоков импульса и тепла над морской поверхностью, параметризации горизонтального подсеточного переноса и крупномасштабной турбулентности. Выполнен расчет по протоколу ОМІР на 1 цикл (50 лет). Сделано сравнение с данными наблюдений, приведенных в климатологических атласах (World Ocean Atlas, 2018) и с результатами расчетов модели Земной системы ИВМ РАН по протоколу ОМІР. По результатам работы опубликована статья [12] (см. список ниже)

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

– На основе анализа данных вихреразрешающего моделирования показано, что, при быстром охлаждении поверхности, во внешнем течении (в пограничном слое атмосферы над городской средой) поддерживается развитая турбулентность с относительно невысокими значениями числа Ричардсона. Показано, что при достижении некоторых предельных значений разности температур подстилающая поверхность-атмосфера достигается асимптотический режим, в котором отрицательный поток тепла в "свободную атмосферу"определяется только скоростью ветра и масштабом длины, связанным с геометрией обтекаемых объектов. Показано, что в этом режиме происходит существенное накопление примесей вблизи поверхности. По результатам работы опубликована статья [1] (см. п.1.7). По результатам вихреразрешающего моделирования проведено тестирование и настройка многослойных моделей RANS с предложенным авторами турбулентным масштабом длины.

- На основе результатов LES-моделирования предложена и реализована модификация турбулентного масштаба длины для турбулентных замыканий в многослойных моделях RANS городского слоя при устойчивой стратификации, при которой характерны наиболее высокие концентрации загрязнений в городской атмосфере (ночные и зимние условия). Показано, что полученная аппроксимация имеет преимущество перед стандартной K-epsilon моделью. Выявлены дефекты предложенной модели и намечены способы их устранения.
- Вихреразрешающая модель подготовлена для проведения серий расчетов сдвигово-конвективного пограничного слоя атмосферы над поверхностями городского типа при заранее заданных значениях отношения скорости трения к конвективному масштабу скорости Дирдорфа. Реализован и протестирован алгоритм вычислений с моделью, позволяющий поддерживать пограничный слой в статистически стационарном состоянии.
- Реализованы и протестированы стохастические модели переноса частиц для многослойных RANSмоделей городского слоя. Модели дополнены процедурами накопления и обработки данных для сравнения с результатами LES-моделирования.
- Проведены расчеты переноса примесей в городской среде и в пограничном слое атмосферы над городом при помощи лагранжева переноса частиц в LES-модели и в упрощенных стохастических моделях. По анализу данных LES выявлены возможные причины ошибок стохастических моделей при нейтральной стратификации, а именно – отклонения распределений флуктуаций лагранжевой скорости частиц от нормального распределения внутри городского слоя и в слое шероховатости над ним и влияние на перенос стационарной по времени компоненты течения при обтекании объектов.

Задача 2.4. Разработка модели динамики морского льда

– Был проведен тестовый запуск модели в Арктическо - Северо-Атлантическом регионе, который продемонстрировал согласованность с данными TOPAZ-4 на коротком временном интервале, когда термодинамические эффекты не играют большой роли. Более того, за счет того, что треугольная сетка разрабатываемой модели сгущается в области с высокой сплоченностью морского льда, удалось получить более подробную картину так называемых "Линейных Кинематических Особенностей", которая не наблюдалась в данных TOPAZ-4, что свидетельствует о высоком качестве разработанного кода. Анализ тестовых расчетов для длительных временных интервалов показал необходимость включения термодинамики льда (задача 2023), которая была реализована в этом году досрочно (см.два последних результата).

- Реализован adaptive-mEVP солвер, который является оптимизированной по числу итераций версией стандартного mEVP солвера. В наборе доступных солверов также имеется классический EVP солвер, хотя он является устаревшим и не рекомендуется для практического использования.
- Предложена проекционная форма постановки задачи о дрейфе льда с граничными условиями на береговом контуре, отличными от условий прилипания. Такой подход является новинкой в мировой практике, поэтому полученные численные результаты носят предварительный характер и нуждаются в детальном исследовании. С точки зрения численной реализации разработанный программный код позволяет легко учитывать различные постановки граничных условий.
- Сделан подробный анализ результатов краткосрочного прогноза состояния морского льда под действием модельного форсинга в виде медленно движущегося циклона (появившийся недавно "стандартный" тест), проанализированы поля сплоченности, завихренности поля скорости, сдвига поля скорости и дивергенции поля скорости. Сравнение с результатами наиболее передовых моделей динамики льда (CICE, FESIM, MITgcm) показало, что существующая версия конечноэлементной модели недостаточно точно воспроизводит длинные и узкие структуры, известные как "Линейные Кинематические Особенности". Алгоритм и программная реализация модели были усовершенствованы и разработан совершенно новый динамический блок модели морского льда на треугольной CD-сетке. В частности, реализованы и протестированы схемы переноса скаляров на произвольной поверхности. Использование CD сеток является хорошей альтернативой стандартным А-сеткам с точки зрения разрешающей способности Линейных Кинематических Особенностей. В программном коде на языке C++ применяется нестандартный подход численного решения уравнений в локально-декартовом базисе, который делает код универсальным для любой геометрии (плоскость, сфера, геоид).
- Была разработана, протестирована и валидирована на реальных данных измерений библиотека термодинамики морского льда со снегом, с учетом соляных карманов и проникающей радиации, применение которой в связке с блоком динамики значительно совершенствует прогностическую систему. В подготовленной публикации[8] (см.пункт список ниже) дается подробное описание физических, вычислительных аспектов написанного кода, а также проводится сравнение 1D и 0D реализаций. Разработанная на языке C++ библиотека может быть оптимизирована под использование графических ускорителей (CUDA), а также может подключаться как внешний модуль к другим моделям океана, льда и климата. По результатам работы опубликованы статьи [8, 11]
- Сделан анализ предполагаемой схемы параметризации торошения и расчета прочности морского льда (аналогичной CICE и SI3), предложена оптимизация с учетом распределения льда по градациям толщины в окраинных морях Северного Ледовитого океана. Результаты работы использованы при моделировании ледового покрова Белого моря.

Результаты, полученные в рамках проекта на данном этапе, опубликованы в следующих статьях в журналах, индексируемых в базах данных "Сеть науки" (Web of Science) или "Скопус" (SCOPUS):

- Glazunov A.V., Mortikov E.V., Debolsky A.V. Studies of Stable Stratification Effect on Dynamic and Thermal Roughness Lengths of Urban-Type Canopy Using Large-Eddy Simulation. Journal of the Atmospheric Sciences, 80(1), 31-48 (2022 r.) https://doi.org/10.1175/JAS-D-22-0044.1
- Shashkin V.V., Goyman G.S., Tolstykh M.A. Summation-by-parts finite-difference shallow water model on the cubed-sphere grid. Part I: Non-staggered grid. Journal of Computational Physics, Volume 474, 2023, 111797 https://doi.org/10.1016/j.jcp.2022.111797
- Zaitsev V.Yu., Sovetsky A.A., Matveyev A.L., Matveev L.A., Shabanov D., Salamatova V.Yu., Karavaikin P. A., Vassilevski Yu.V. Application of compression optical coherence elastography for characterization of human pericardium: a pilot study. Journal of Biophotonics (2022 r.) https://doi.org/10.1002/jbio.202200253
- 4. Vassilevski Yu.V., Liogky A.A., Salamatova V.Yu. How material and geometrical non-linearity influences diastolic function of an idealized aortic valve. Continuum Mechanics and Thermodynamics (2022 Γ.)
- 5. Salamatova V.Yu. Data-driven constitutive Modeling via conjugate pairs and response functions. Mathematics,10(23), 4447 (2022 Γ.) https://doi.org/10.3390/math10234447
- Liogky A.A. Computational mimicking of surgical leaflet suturing for virtual aortic valve neocuspidization. Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling, vol. 37, no. 5, 2022, pp. 263-277 (2022 r.) https://doi.org/10.1515/rnam-2022-0023
- Alipova K.A., Goyman G.S., Tolstykh M.A., Mizyak V.G., Rogutov V.S. Stochastic perturbation of tendencies and parameters of parameterizations in the global ensemble prediction system based on the SL-AV model. Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling, 37(6), 331–347 (2022 r.) https://doi.org/10.1515/rnam-2022-0027
- Sergey S. Petrov, Vladimir K. Zyuzin, Nikolay G. Iakovlev. The new sea ice thermodynamics code for the INM RAS Earth System model: the design and comparison of one- and zero-dimensional setups with the observational data. Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling (2023 r.)
- Каравайкин П.А., Легкий А.А., Данилов А.А., Саламатова В.Ю., Куличкин А.С. Математическое моделирование замыкательной функции аортального клапана после неокуспидизации. Кардиология и сердечно-сосудистая хирургия. 2022;15(4):369-376. (2022 г.) https://doi.org/10.17116/kardio202215041
- 10. Василевский Ю.В., Симаков С.С., Гамилов Т.М., Саламатова В.Ю., Добросердова Т.К., Копытов Г.В., Богданов О.Н., Данилов А.А., Дергачев М.А., Добровольский Д.Д., Косухин О.Н., Ларина Е.В., Мелешкина А.В., Мычка Е.Ю., Харин В.Ю., Чеснокова К.В., Шипилов А.А. Персонализация математических моделей в кардиологии: трудности и перспективы. Компьютерные

исследования и моделирование, № 4, т. 14, с. 911-930 (2022 г.) https://doi.org/10.20537/2076-7633-2022-14-4-911-930

- Chernov Ilya, Tolstikov Alexey, Baklagin Vyacheslav, Iakovlev Nikolay. Winter Ice Dynamics in a Semi-Closed Ice-Covered Sea: Numerical Simulations and Satellite. Data Fluids (2022 r.) https://doi.org/10.3390/flui
- 12. Blagodatskikh D.V., Onoprienko V.A., Mortikov E.V., Iakovlev N.G. Comparative computational performance of two different techniques for calculation of the sea surface height in a climate ocean model. International Young Scientists School and Conference on Computational Information Technologies for Environmental Sciences (CITES 2021) 22/11/2021 26/11/2021 Moscow, Russia, 1023, 012010 (2022 r.) https://doi.org/10.1088/1755-1315/1023/1/012010

## Оглавление

Аннотация	i
Оглавление	xii
1. Биомеханика	<b>2</b>
Задача 1.1. Разработка неинвазивных методов диагностики ишемической болезни серд-	
ца (ИБС)	<b>2</b>
1.1.1 Клинический сбор данных ПКТ, их статистическая обработка	2
1.1.2 Апробация разработанных алгоритмов совместной регистрации изображений разной мо-	
дальности (ПКТ и КТ-ангиографии)	4
1.1.3 Апробация алгоритмов обработки ПКТ-данных пациентов для автоматизированной иден-	7
тификации ишемических участков миокарда	1
риях в рамках редуцированной модели кровотока	11
Задача 1.2. Виртуальный персонализированный раскрой створок аортального клапана	L
при его реконструкции из аутоперикарда	14
1.2.1 Метод автоматического детектирования линий креплений нативного клапана и проведе-	14
ния линии пришивания новых створок	14
1.2.2 метод моделирования контакта с учетом самопересечении	10
1.2.5 Исследование механических своисть нативного перикарда и обработанного перикарда	22
1.2.4 Проведение натурного эксперимента на образце свиного аортального клапана для вали-	 95
дации результатов математической модели закрытия абртального клапана	20
Задача 1.3. Предсказательное моделирование одножелудочковой коррекции врожден-	
ных пороков сердца у детей (операция Фонтена)	31
1.3.1 Разработка методов учета геометрии и близости бифуркаций сосудов для редуцирован-	
ной гемодинамической модели кровотока	32
1.3.1.1 Генерация 3D расчетных сеток	32
1.3.1.2 Генерация данных для обучения нейросети	34
1.3.1.3 Построение и обучение нейросети на полученных данных	34
1.3.1.4 Включение нейросети в одномерную модель для расчета гемодинамики в бифур-	0-
	37
1.5.2 Апрооация методов автоматизированной сегментации к1/мг1-данных с выделением перочных артерий полой вены камер серлиа и построения расчетных сеток	38

Задача 1.4. Персонализированные модели подсистем опорно-двигательного аппарата	46
1.4.1 Анализ имеющейся информации относительно анатомических и морфологических ори- ентиров для сухожилий коленного сустава	46
1.4.2 Разработка и апробация алгоритма на примере медицинских КТ-изображений коленного	
сустава	46
1.4.3 Построение персонализированной биомеханической редуцированной модели коленного	
сустава	47
1.4.3.1 Инструмент для построения персонализированной биомеханической редуцирован-	
ной модели коленного сустава	47
1.4.3.2 Базовая модель коленного сустава	48
1.4.3.3 Модификация базовой модели	49
1.4.4 Выявление влияния различных мягкотканных стабилизирующих структур на движение надколенника	54

#### 2. Геофизика

 $\mathbf{59}$ 

Задача 2.1. Разработка негидростатической модели сжимаемой атмосферы для задач	i
прогноза погоды и моделирования климата	<b>59</b>
2.1.1 Динамический блок модели атмосферы в трехмерных криволинейных координатах, оги-	
бающих рельеф	59
2.1.1.1 Уравнения динамики негидростатиеской сжимаемой атмосферы	60
2.1.1.2 Приближение мелкой атмосферы и трехмерные криволинейные координаты	60
2.1.1.3 Адвективный оператор для контравариантных компонент вектора скорости ветра	64
2.1.1.4 Схема интегрирования по времени с неявностью по вертикали	65
2.1.1.5 Численные эксперименты	66
2.1.1.5.1 Обтекание горы типа Шара	66
2.1.1.5.2 Бароклинная неустойчивость	67
2.1.1.6 Сильная масштабируемость программного комплекса динамического ядра	69
2.1.2 Параметризация обратного каскада кинетической энергии	70
Задача 2.2. Развитие вычислительных технологий для моделирования Мирового океа-	
на.	75
2.2.1 Реализация возможности расчета динамики модели океана как в z, так и в z* системе	
координат. Подключение модели термодинамики морского льда	75
2.2.2 Разработка программной реализации динамики океана, блока переноса трассеров на гра-	
фических процессорах с использованием гибридного подхода MPI/OpenMP/CUDA. Те-	00
стирование программнои реализации	82
2.2.3 Реализация в модели океана нового пакета физических параметризации различнои вы-	06
числительной сложности, в частности, крупномасштаюной туроулентности и конвекции .	00
2.2.4 Проведение численных экспериментов с новои версиеи модели океана по протоколу ОмпР.	
Сравнение результата моделирования с данными наолюдении и других моделей мирово- го океана	89
	00
Задача 2.3. Разработка эффективных вычислительных технологий для прогнозирова-	
ния и диагноза состояния атмосферы в городской среде	94
2.3.1 Дополнительные расчеты с вихреразрешающими моделями турбулентности над поверх-	
ностями городского типа с различными конфигурациями обтекаемых объектов	94

2.3.2 Турбулентный масштаб длины для многослойных RANS моделей городской среды, его обобщение для устойчиво-стратифицированных течений; тестирование и настройка RANS	•
по данным LES	98
2.3.3 Тестовые LES-расчеты конвективно-сдвиговой турбулентности	00
2.3.4 Стохастические модели лагранжева переноса частиц для RANS модели городской среды.	
Сравнение результатов стохастических моделей с данными LES	01
Задача 2.4. Разработка модели динамики морского льда 10	08
2.4.1 Анализ результатов прогноза состояния Арктического морского льда	08
2.4.2 Решение уравнений динамики морского льда на треугольной CD-сетке	09
2.4.3 Разработка универсальной библиотеки термодинамики льда со снегом	13
2.4.3.1 Основные уравнения	13
2.4.3.2 Граничные условия	14
2.4.3.3 Параметризация теплоемкости, теплопроводности и энтальпии	15
2.4.3.4 Краткое описание численной реализации	15
2.4.3.5 Результаты численных экспериментов	16
2.4.3.5.1 Искусственный форсинг	16
2.4.3.5.2 Валидация кода на реальных данных	17
2.4.3.6 Выводы по проделанной работе	20

# 1. Биомеханика

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

Клинический сбор данных ПКТ, их статистическая обработка. Апробация разработанных алгоритмов совместной регистрации изображений разной модальности (ПКТ и КТангиографии. Апробация алгоритмов обработки ПКТ-данных пациентов для автоматизированной идентификации ишемических участков миокарда. Разработка методов усвоения данных ПКТ для краевых условий в терминальных артериях в рамках редуцированной модели кровотока

#### 1.1.1 Клинический сбор данных ПКТ, их статистическая обработка

В рамках работ на данном этапе продолжены клинический сбор данных ПКТ (перфузионная компьютерная томография) и их статистическая обработка. Сбор данных производился в соответствии с протоколом, утверждённым в рамках работ на предыдущем этапе исследований. На базе Института персонализированной кардиологии НЦМУ «Цифровой биодизайн и персонализированное здравоохранение» ФГАОУ ВО «ПМГМУ им. И.М.Сеченова» были собраны ПКТ данные у 17 пациентов (в дополнение к собранным в прошлом году).

Первичная обработка данных ПКТ исследования проводится с помощью программного пакета (рабочая станция Vitrea), встроенного в компьютерный томограф (рис. 1.1).

Для анализа отбиралась наиболее информативная серия поперечных срезов миокарда ЛЖ (левого желудочка), на которой обнаруживается наименьшее количество двигательных артефактов во всей области миокарда ЛЖ. Проводилась оценка серий томографических срезов, полученных во время объемной КТ сердца в фазу покоя и при фармакологической пробе с АТФ (аденозинтрифосфат). Оценка перфузии миокарда ЛЖ проводилась путём сравнения изображений, полученных в фазу покоя и стресса, визуально на предмет наличия или отсутствия локальной гипоперфузии и путем вычисления



Рис. 1.1: Интерфейс программы для обработки данных ПКТ.

полуколичественных показателей перфузии. Качественная оценка перфузии миокарда ЛЖ проводится визуально на предмет выявления участков относительной гипоперфузии миокарда ЛЖ. Полуколичественная оценка перфузии миокарда ЛЖ проводится путем вычисления показателей перфузии в фазах покоя и нагрузки: ослабление плотности (ОП) миокарда ЛЖ — DD, индекс перфузии (ИП) миокарда ЛЖ — AP, и индекса КТП (КТП – компьютерная томография перфузии) — *TPR* [1]. Вычисление перечисленных полуколичественных показателей перфузии миокарда ЛЖ проводится согласно приведенным ниже формулам:

$$DD = \rho_c - \rho_n,\tag{1.1}$$

где DD — ОП миокарда ЛЖ,  $\rho_c$  — средняя плотность контрастированного миокарда ЛЖ (в единицах Хаунсфилда),  $\rho_n$  — плотность нативного миокарда ЛЖ (в единицах Хаунсфилда);

$$AP = \frac{DD_m}{DD_a},\tag{1.2}$$

где *АР* — индекс перфузии (ИП) миокарда ЛЖ, *DD<sub>m</sub>* — ОП миокарда ЛЖ, *DD<sub>a</sub>* — среднее ОП миокарда ЛЖ;

$$TPR = \frac{AP_{end}}{AP_{epi}},\tag{1.3}$$

где *TPR* — индекс КТП (transmural perfusion ratio), *AP<sub>end</sub>* — субэндокардиальный ИП (один сегмент в субэндокардиальном слое миокарда ЛЖ), *AP<sub>epi</sub>* — субэпикардиальный ИП (весь эпикардиальный слой миокарда ЛЖ на уровне оцениваемого сегмента).

Используются следующие пороговые значения дефекта перфузии:

2,5-0,99 – норма;

0,99-0,97 – умеренный;

0,97-0,94 – умеренно выраженный;

0,94-0,60 – выраженный;

0,60-0,20 – перфузия отсутствует/инфаркт.

Перечисленные выше полуколичественные показатели перфузии миокарда ЛЖ вычисляются с помощью программного обеспечения компьютерного томографа автоматически. Согласно приведенным формулам, вычисление TPR происходит после предварительного расчета промежуточных полуколичественных показателей – ОП и ИП миокарда ЛЖ, затем показатель TPR выводится на экран компьютера как конечный результат полуколичественного анализа перфузии миокарда ЛЖ.

Результаты вычисления показателей перфузии миокарда ЛЖ графически представляются в виде перфузионных полярных карт на экране рабочей станции Vitrea в зависимости от степени ослабления рентгеновской плотности контрастированного миокарда ЛЖ в покое и при нагрузке. Анализ и расшифровка данных карт приводились на прошлом этапе исследования. Пример подобных карт представлен на рис. 1.2.

# 1.1.2 Апробация разработанных алгоритмов совместной регистрации изображений разной модальности (ПКТ и КТ-ангиографии)

Протокол проведения ПКТ, как правило, состоит из двух фаз: фаза покоя и фаза стресса. Так как снимки в этих фазах записываются со значительным временным промежутком между ними, то неизбежно возникает смещение снимков друг относительно друга из-за движений пациента. Структура сосудов в свою очередь восстанавливается из снимков КТ-ангиографии, поэтому при привязке коэффициентов трансмуральной перфузии (TPR) к сегментам коронарной сети смещения снимков могут приводить к неверной идентификации ишемических участков миокарда.

На рис. 1.3 изображены два наложенных изображения ПКТ для двух фаз. Фаза покоя изображена красным цветом, а фаза стресса – зеленым. При совпадении наложенных изображений они отображаются желтым цветом. При отличиях – красным цветом изображены области, в которых интенсивность фазы покоя выше, а зеленым – области, в которых интенсивность фазы стресса выше.



Рис. 1.2: Перфузионные карты индекса TPR в покое и при стрессе (при введении ATФ). В некоторых случаях миокард делится на 16 зон, при этом 17-я зона в центре делится между зонами 13, 14, 15 и 16.



Рис. 1.3: Два наложенных ПКТ-изображения в фазе покоя (красный цвет) и фазе стресса (зеленый цвет) без совмещения координат: аксиальный, коронарный и сагиттальный срезы.

Для повышения качества привязки коэффициентов TPR к сегментам коронарной сети изображения ПКТ для двух фаз приводятся к единой системе координат. Для автоматизации совмещения ПКТ снимков был использован пакет с открытым кодом Greedy [2, 3]. С его помощью можно строить как аффинные преобразования, так и диффеоморфные отображения. В качестве минимизируемой метрики может быть использована L<sup>2</sup>-норма разности изображений или нормированная взаимная корреляция двух изображений [4].

На практике аффинного преобразования координат может быть недостаточно. На рис. 1.4 и 1.5 изображены наложенные ПКТ-изображения с аффинным преобразованием для совмещения координат и использованием L<sup>2</sup>-нормы и нормированной взаимной корреляции. В обоих случаях заметны небольшие точности при совмещении.

При использовании диффеоморфного отображения для совмещения координат (см. рис. 1.6 и 1.7) снимки ПКТ совмещаются очень хорошо, особенно в области сердца. Результаты, полученные при



Рис. 1.4: Два наложенных ПКТ-изображения в фазе покоя (красный цвет) и фазе стресса (зеленый цвет) с аффинным преобразованием для совмещения координат и использованием  $L^2$ -нормы: аксиальный, коронарный и сагиттальный срезы.



Рис. 1.5: Два наложенных ПКТ-изображения в фазе покоя (красный цвет) и фазе стресса (зеленый цвет) с аффинным преобразованием для совмещения координат и использованием нормированной взаимной корреляции: аксиальный, коронарный и сагиттальный срезы.

использовании L<sup>2</sup>-нормы и нормированной взаимной корреляции в качестве минимизируемого функционала, оказываются близкими. В случае конкретно этого пациента в итоге был выбран функционал с L<sup>2</sup>-нормой, так как в этом случае диффеоморфное отображение получилось более гладким в области миокарда (ср. рис. 1.8 и 1.9).



Рис. 1.6: Два наложенных ПКТ-изображения в фазе покоя (красный цвет) и фазе стресса (зеленый цвет) с диффеоморфным отображением для совмещения координат и использованием  $L^2$ -нормы: аксиальный, коронарный и сагиттальный срезы.

Стоит также отметить, что вычисление  $L^2$ -нормы является более простой задачей, поэтому время для регистрации изображений с  $L^2$ -нормой в качестве функционала заметно меньше, чем при использовании нормированной взаимной корреляции. Так, среднее время совмещения двух ПКТ снимков с размерами  $512 \times 512 \times 640$  вокселей для поиска аффинного преобразования составляет примерно 1.5 минуты для  $L^2$ -нормы и 7 минут для нормированной взаимной корреляции. Время построения диффеоморфного отображения составляет примерно 9.5 минут для  $L^2$ -нормы и 15 минут для нормированной



Рис. 1.7: Два наложенных ПКТ-изображения в фазе покоя (красный цвет) и фазе стресса (зеленый цвет) с диффеоморфным отображением для совмещения координат и использованием нормированной взаимной корреляции: аксиальный, коронарный и сагиттальный срезы.



Рис. 1.8: Диффеоморфное отображение для совмещения координат двух ПКТ-изображений в фазе покоя и фазе стресса с использованием L<sup>2</sup>-нормы: аксиальный, коронарный и сагиттальный срезы.



Рис. 1.9: Диффеоморфное отображение для совмещения координат двух ПКТ-изображений в фазе покоя и фазе стресса с использованием нормированной взаимной корреляции: аксиальный, коронарный и сагиттальный срезы.

взаимной корреляции. Время измерялось при использовании компьютера с 8-ядерным процессором и 32Гб оперативной памяти.

### 1.1.3 Апробация алгоритмов обработки ПКТ-данных пациентов для автоматизированной идентификации ишемических участков миокарда

Анализ изображений в виде полярной карты позволяет визуализировать все стенки миокарда ЛЖ на одном изображении (рис. 1.2). Таким образом, можно оценить дефекты перфузии. Для определения дефектов перфузии обычно используют стандартные 17-сегментные или 16-сегментные модели [5]. При помощи такого разбиения можно определить, к какой из ветвей относится участок желудочка, однако это не позволяет определить конкретный сегмент коронарной сети, в которой возникают проблемы. Такая сегментация миокарда является идеализированной моделью.

Структура коронарных артерий и сегментов миокарда может зависеть от индивидуальных особенностей пациента, что не учитывается в модели стандартной сегментации миокарда, и поэтому в рамках работ на данном этапе строится сегментация миокарда в зависимости от участков коронарных артерий для конкретного пациента. Это позволит точнее определить зоны коронарного кровоснабжения и проблемные участки.

По данным КТ проводится сегментация левого желудочка [6]. Проводим сегментацию в программе ITK-SNAP, используя полуавтоматический метод активных контуров. Метод состоит в выделении некоторой замкнутой поверхности, находящейся внутри сегментируемой области, которая будет использоваться при сегментации. Затем моделируется расширение этой поверхности, пока она не достигнет предполагаемой границы. В качестве критерия, принадлежит ли воксель области, используется диапазон интенсивностей (150-450 HU). В итоге получаем интересующую нас область левого желудочка, ограниченного плоским сечением, проходящим через плоскость митрального клапана (рис. 1.10).



Рис. 1.10: Левый желудочек

Затем необходимо вычислить среднее значение интенсивности на внешней стенке желудочка. Разделим интенсивности во внутренней части на среднее значение интенсивности на внешней части. Получаем значение TPR в каждом вокселе желудочка (рис. 1.11).

Построим сегментацию желудочка, в зависимости от расстояния до коронарных артерий.



Рис. 1.11: Распределение TPR в левом желудочке

Сегментация коронарных артерий производилась с помощью фильтра сосудистости Франжи [7, 8]. Фильтр сосудистости Франжи сопоставляет каждому вокселю меру сосудистости. Чем вероятнее воксель лежит внутри трубчатой структуры, тем выше мера сосудистости. Поскольку необходимо просегментировать желудочек в зависимости от частей коронарных артерий, то разобьем коронарные артерии на части геометрически. Будем делить коронарные артерии на сегменты в месте ветвления. Сегментацию будем проводить в ITK-SNAP, разбивая коронарные артерии на сегменты плоскостями.

Когда коронарная артерия ветвится в первый раз, делим её на два сегмента. Далее для каждого вокселя желудочка вычислим расстояние до каждого из сегментов коронарных артерий и отнесем воксель к тому сегменту, до которого расстояние меньше. Далее берем одну из рассматриваемых ветвей и в месте ветвления аналогично делим коронарную ветвь на сегменты. Аналогично делим область, которая относится к данной ветви, на сегменты. Таким образом, построено разбиение желудочка на зоны в зависимости от сегментов коронарных артерий (рис. 1.12).

Проведём анализ предложенного метода оценки перфузии с данными компьютерного томографа на пяти случаях.

Пациент 1. Для рассматриваемого пациента потенциальные сегменты коронарных артерий, в которых могут возникнуть проблемы, это латеральный сегмент третьей ветви тупого края и вторая ветвь тупого края. Значения TPR вычисленные томографом и нашим алгоритмом отличаются, но качественные результаты совпадают, т.е. проблемные зоны определяются одинаково.

Пациент 2. В связи с плохим качеством КТ-снимков удалось построить лишь три сегмента коронарной артерии, соответственно, только три сегмента перфузии. По результатам вычисленных нами TPR проблемных участков коронарных артерий для данного пациента не наблюдается, дефекты перфузии отсутствуют. По результатам TPR, вычисленного томографом, дефекты перфузии отсутствуют, что качественно совпадает с результатом наших вычислений.



РИС. 1.12: Разбиение левого желудочка на зоны согласно расстоянию до сегментов коронарных артерий

Пациент 3. По результатам вычисленных нами TPR, значение TPR в одном из сегментов ниже, чем в других (соответствует дистальной части передней нисходящей артерии). По результатам TPR, вычисленного томографом, значение TPR в той же области ниже, чем в других, что качественно совпадает с результатом наших вычислений.

Пациент 4. Дефекты перфузии отсутствуют. По результатам вычисленных нами TPR проблемных участков коронарных артерий для данного пациента не наблюдается, дефекты перфузии отсутствуют. По результатам TPR, вычисленного томографом, дефекты перфузии отсутствуют, что качественно совпадает с результатом наших вычислений.

Пациент 5. Дефекты перфузии отсутствуют. По результатам вычисленных нами TPR проблемных участков коронарных артерий для данного пациента не наблюдается, дефекты перфузии отсутствуют. По результатам TPR, вычисленного томографом, дефекты перфузии отсутствуют, что качественно совпадает с результатом наших вычислений.

Результаты предложенного алгоритма оценки TPR совпадают с дефектами перфузии, выявленными томографом. Следует отметить, что в трёх случаях из пяти дефекты перфузии отсутствовали, поэтому в дальнейшем необходимо рассмотреть больше случаев для верификации алгоритма.

### 1.1.4 Разработка методов усвоения данных ПКТ для краевых условий в терминальных артериях в рамках редуцированной модели кровотока

В рамках работ на предыдущем этапе проекта была предложена редуцированная модель коронарного кровотока, разработанная на основе модели квазиодномерной гемодинамики [9]. Это модель течения вязкой несжимаемой жидкости по эластичным трубкам.

Для каждой эластичной трубки записываются законы сохранения массы и импульса:

$$\partial S_k / \partial t + \partial (S_k u_k) / \partial x = 0, \qquad (1.4)$$

$$\partial u_k / \partial t + \partial \left( u_k^2 / 2 + p_k / \rho \right) / \partial x = f_{fr} \left( S_k / S_k^0, u_k \right), \tag{1.5}$$

где t — время; x — координата вдоль сосуда;  $\rho$  — плотность крови (предполагается постоянной и равной 1 г/см<sup>3</sup>); k — номер сосуда;  $S_k$  — поперечное сечение сосуда;  $S_k^0$  — поперечное сечение сосуда при нулевом давлении;  $u_k$  — линейная скорость потока, осредненная по поперечному сечению;  $P_k$  — давление в сосуде, отсчитываемое от атмосферного;  $f_{fr}$  — сила вязкого трения

$$f_{tr}(S_k, u_k, S_k^0) = -\frac{4\pi\mu u_k}{S_k^2} \left(\frac{S_k}{S_k^0} + \frac{S_k^0}{S_k}\right),$$
(1.6)

*μ* — динамическая вязкость крови (предполагается равной 4 мПа·с).

В качестве граничных условий на выходе из терминальных артерий используется условие

$$R_k Q_k = p_k - p_v, \tag{1.7}$$

где  $p_v$  — центральное венозное давление (по умолчания 8 мм рт ст);  $p_k$  — давление на конце терминальной артерии,  $p_k = p_k(S_k)$ ;  $Q_k$  — поток крови через терминальную артерию,  $Q_k = S_k u_k$ ;  $R_k$  сопротивление k-й области микроциркуляцию.

В рамках работ на данном этапе также было предложено модифицировать сопротивления в соответствии со значениями TPR в сегменте миокарда, снабжаемом коронарной артерией. Для учёта затруднённой перфузии каждое значение сопротивления *R<sub>k</sub>* умножается на коэффициент *α<sub>k</sub>*.

$$\alpha_k = \begin{cases} 1, TPR \ge 1.4\\ a + b \exp\left(c \cdot TPR_k\right), TPR < 1.4 \end{cases}$$
(1.8)

 $TPR_k$  — значение TPR соответствующей области миокарда. Коэффициенты a, b, c идентифицируются из соображений  $\alpha_k = 1$  при  $TPR_k = 1.4$  и  $\alpha_k = 4$  при  $TPR_k = 0.2$ . Значение  $\alpha_k = 2$  соответствует

*TPR*<sub>k</sub> = 0.6, что обозначает переходную область от серьёзных нарушений перфузии к критическим.

$$a = 2 + 2/\sqrt{3}, \quad b = \sqrt{\frac{(4-a)^3}{2-a}}, \quad c = 5\ln\frac{4-a}{b}.$$
 (1.9)

Поток крови при *TPR* < 0.2 при подобной корректировке становится практически нулевым, что соответствует полному поражению ткани.

На прошлом этапе использовались значения TPR стандартного разбиения левого желудочка на 16 (или 17) сегментов (рис. 1.2). При этом необходимо строить сопоставление каждого терминального сосуда с соответствующей зоной, а также вводить в сеть сосудов дополнительные виртуальные артерии, снабжающие зоны миокарда, в которых сосуды отсутствуют. Эти действия сложно автоматизировать, кроме того введение виртуальных сосудов может вносить дополнительную погрешность при расчётах.

Благодаря разработанному алгоритму идентификации поражённых участков миокарда (раздел 1.1.3) зоны миокарда индивидуализируются в зависимости от строения коронарных артерий. Это позволяет автоматизировать процесс определения граничных условий. Реализован программный интерфейс, приписывающий каждой терминальной коронарной артерии индвидулизированное значение TPR. Тестовый случай, рассмотренный на прошлом этапе, был перерассчитан, произведена оценка гемодинамического индекса FFR. Отклонения при использовании нового алгоритма составили менее 1%. В дальнейшем планируется задавать граничные условия с помощью индивидулизированной оценки сегментов левого желудочка.

## Литература

- CT-based myocardial perfusion imaging-practical considerations: acquisition, image analysis, interpretation, and challenges. / Mehra V.C., Ambrose M., Valdiviezo-Schlomp C. et al. // Cardiovasc Transl Res. - 2011. - Vol. 4, no. 4. - Pp. 437-48.
- [2] Fast Automatic Segmentation of Hippocampal Subfields and Medial Temporal Lobe Subregions In 3 Tesla and 7 Tesla T2-Weighted MRI / P. A. Yushkevich, J. Pluta, H. Wang et al. // Alzheimer's & Dementia. - 2016. - Vol. 12, no. 7.
- [3] Yushkevich P. Greedy: Very fast greedy diffeomorphic registration code. URL: https://github.com/ pyushkevich/greedy.
- [4] Tsai D.-M., Lin C.-T. Fast normalized cross correlation for defect detection // Pattern Recognition Letters. - 2003. - Vol. 24, no. 15. - Pp. 2625-2631.
- [5] Cerqueira M. D. Standardized myocardial segmentation and nomenclature for tomographic imaging of the heart: A statement for healthcare professionals from the Cardiac Imaging Committee of the Council on Clinical Cardiology of the American Heart Association // Journal of Cardiovascular Magnetic Resonance. - 2002. - no. 4. - Pp. 203-210.
- [6] Yushkevich P., Gerig G. ITK-SNAP medical image segmentation tool. URL: http://www.itksnap. org/.
- [7] Frangi R. F. Multiscale Vessel Enhancement Filtering // Lecture Notes in Computer Science. 2000.
- [8] Gamilov T.M. Kopylov Ph. Yu. Pryamonosov R.A. Simakov S.S. Virtual fractional flow reserve assessment in patient-specific coronary networks by 1D hemodynamic model // Rus. J. Num. Anal. Math. Mod. – 2015. – Vol. 30, no. 5. – Pp. 269–276.
- [9] Computational Analysis of Haemodynamic Indices in Synthetic Atherosclerotic Coronary Netwroks / Sergey Simakov, Timur Gamilov, Fuyou Liang, Philipp Kopylov // Mathematics. — 2021. — Vol. 9, no. 18.

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

Метод автоматического детектирования линий креплений нативного клапана и проведения линий пришивания новых створок. Метод моделирования контакта с учётом самопересечений. Исследование механических свойств нативного перикарда и обработанного перикарда человека. Проведение натурного эксперимента на образце свиного аортального клапана для валидации результатов математической модели закрытия аортального клапана

### 1.2.1 Метод автоматического детектирования линий креплений нативного клапана и проведения линий пришивания новых створок

Алгоритм детектирования анатомических особенностей корня аорты, основанный на анализе кривизны поверхности, подробно был описан в отчете за прошлый отчетный период (2021 год). В качестве входных данных алгоритм использует воксельную маску внутренней поверхности корня аорта и вычисляет соответствующее поле гауссовой кривизны *K* [1].

Автоматическое детектирование линий крепления нативного клапана не дало практически надежный результат. Зачастую удается выделить только полосу отрицательной кривизны в области соединения синусов и аорты, в которых находятся линии крепления, и нет возможности однозначно их индефицировать. Отметим, что при проведении операции линии крепления используются, как правило, как линии пришивания новых створок аортального клапана. Таким образом, для решения задачи об определении линии пришивания был разработан графический интерфейс полуавтоматического проведения линии пришивания хирургом. Линии пришивания являются необходимыми входными данными для виртуальной оценки коаптации неоклапана.

Общий вид интерфейса для проведения линий пришивания новых створок представлен на рис. 2.1. Интерфейс состоит из диалога установки опорных точек линии пришивания и трехмерного изображения внутренней поверхности корня аорты. Внутренняя поверхность корня аорты является результатом автоматической сегментации корня аорты на основе КТ-изображений с контрастом и триангулирована с помощью алгоритма марширующих кубов.



Рис. 2.1: Диалог полуавтоматического проведения линии пришивания аортального клапана на поверхности аорты

Диалог установки опорных точек линии пришивания вызывается из пункта главного меню приложения "PickPoints dialog". В процессе указания точек нажатием левой кнопкой мыши, поверхность аорты фиксируется в пространстве, то есть отключается возможность поворота и приближения/удаления аорты в 3D окне. Это дает возможность поставить опорные точки линии пришивания на неподвижной аорте.

Режим работы диалога по умолчанию — это установка опорных точек. Для этого пользователь должен щелкнуть левой кнопкой мыши с нажатым модификатором Cntrl на выбранной точке поверхности аорты. Алгоритм трассировки лучей находит пересечение луча, выходящего из камеры в точку клика и поверхности аорты [2]. В этом месте устанавливается полупрозрачный призматический "пин" высотой 6 мм. Острый конец "пина" указывает на место пересечения луча и поверхности аорты; центральная линия "пина" направлена вдоль нормали к треугольной грани поверхности, на которую попала точка пересечения. Если луч, ведущий из камеры, пересекает насколько треугольных граней, то выбирается ближайшая из них. В списке диалога появляется новая строка с номером опорной точки и ее координатами. По умолчанию данная точка помечена как активная и основание соответствующего призматического "пина" подсвечено синим цветом. Таким образом пользователь может последовательно ставить опорные точки вдоль линии пришивания. Начиная с четвертой опорной точки включается алгоритм Катмулла-Рома, который строит аппроксимирующую кривую в пространстве, проходящую через все опорные точки [3]. Эта кривая и есть линия пришивания нативного клапана. В качестве примера, она изображена на рис. 2.1 тонкой зеленой линией, проходящей через опорные точки. Сами опорные точки всегда лежат на поверхности аорты, однако линия пришивания может отклоняться от поверхности аорты, как показано на рис. 2.2а.

При необходимости повернуть аорту в пространстве, диалог необходимо сделать неактивным, нажав тот же пункт меню "PickPoints dialog" при этом становятся доступными вращение и перемещение аорты в пространстве. При повторном вызове диалога, установленные опорные точки появляются в списке в том же порядке, в котором они были установлены. Таким образом, можно обозначить линии пришивания клапана по всей поверхности аорты.

Диалог также допускает два других режима работы — выбор опорной точки и движение точки. В режиме выбора пользователь должен щелкнуть по призматическому "пину" выбранной точки, который подсвечивается синим цветом, а сама точка становится выделенной в списке. Выделенную точку можно удалить, нажав кнопку "Remove point" или переименовать с помощью кнопки "Rename point". Можно также очистить весь список опорных точек, нажав кнопку "Remove all points". В режиме движения точки, пользователь может захватить "пин" любой опорной точки и начать перемещать его по поверхности аорты. Новое положения опорной точки автоматически перестраивает линию пришивания клапана. При движении курсора, которое приводит к выходу опорной точки за поверхность аорты, точка остается в крайнем допустимом положении на поверхности и дальше не сдвигается. Важной функциональностью диалога является сохранение опорных точек в файле по кнопке "Save" и чтение точек из файла по кнопке "Load Points from file". XML-формат сохранения опорных точек в файле показан на рис. 2.2b. При чтении опорных точек из файла автоматически строится линия пришивания на поверхности аорты.

Подробная инструкция по проведению линию пришивания в разработанном веб-интерфейсе представлена на <u>видео</u> (https://youtu.be/ALQaAnAokNE). Ознакомиться с интерфейсом можно по <u>ссылке</u> (https://dodo.inm.ras.ru/ guerman/OZ-050/index.php) (логин: doctor1 пароль: 11111).

#### 1.2.2 Метод моделирования контакта с учётом самопересечений

В рамках работы над разработкой метода моделирования контакта с учётом самопересечений:



Рис. 2.2: a) линия пришивания нативного клапана внутри аорты; b) XML файл с сохраненными координатами опорных точек линии пришивани

- Была налажена работа с методами сторонней библиотеки [4], предназначенными для работы с иерархиями осевыровненных параллелепипедов.
- Были реализованы классические геометрические алгоритмы вычисления расстояний между произвольными парами сеточных примтивов: точка, отрезок, треугольник.
- Был реализован специальный надёжный алгоритм проверки наличия столкновения пары примитивов точка-треугольник или отрезок-отрезок на заданной линейной траектории, основанный на анализе знаков некоторого кубического полинома, предложенный в работе [5].
- Были реализованы эффективные алгоритмы для отыскания всех пар сеточных примитивов, расстояние между которыми не превосходит заданной величины, где алгоритмы из первого пункта выступили в виде "широкой" фазы отбора пар примитивов, а из второго пункта в качестве "узкой".
- Были реализован эффективный алгоритм для отыскания всех пар типа точка-треугольник или отрезок-отрезок, пересекающихся на линейной траектории, где алгоритмы из первого пункта выступили в виде "широкой" фазы отбора пар примитивов, а из третьего пункта в качестве "узкой".
- Был модифицирован для применимости в решении статических задач упругости и реализован надёжный алгоритм для моделирования контатов с учётом самопересечений из работы [6].
- Предложены и реализованы дополнительные силы отталкивания, которые определены на дискретном уровне между сеточными примитивами.

В отчёте прошлого года (2021 г.) был проведён краткий обзор существующих подходов к моделированию контактов. Принимая во внимание требование робастности алгоритма и отсутствие ограничений на допустимые деформации сетки, описывающие упругие тела, для реализации был выбран геометрический алгоритм, описанный в работе [6]. Исходно алгоритм формулируется в контексте решения динамических задач упругости, поэтому его пришлось модифицировать также для применения в статических задач. Ниже приведена модификация алгоритма, предложенная для решения статических задач.

Определения и обозначения, используемые для описания алгоритма. Будем считать, что деформация упругого тонкостенного тела описывается законом движения его срединной поверхности. Данная срединная поверхность определяется как триангулированная поверхность.

- Вектором состояния **x** модели будем называть вектор из координат всех вершин триангулированных поверхностей упругих тел. Координаты для вершины *n* будем обозначать соответствующим нижним индексом *n* у вектора состояния, т.е. **x**<sub>n</sub>.

- Множество сеточных элементов триангулированных поверхностей каждого из типов: вершина, ребро, грань (треугольник), — обозначим как  $\mathcal{V}, \mathcal{R}, \mathcal{F}$ , соответственно. Обозначим  $\mathcal{M} = \mathcal{V} \cup \mathcal{R} \cup \mathcal{F}$  и для всех элементов  $e \in \mathcal{M}$  определим множество их вершин  $\mathcal{N}(e)$ .

- Обозначим область пространства  $\mathbb{R}^3$ , занимаемую элементом *e*, т.е. выпуклую оболочку его вершин, для модели в состоянии **x** как  $e(\mathbf{x}) = \operatorname{conv}(\{\mathbf{x}_n\}_{n \in \mathcal{N}(e)})$ .

- Для точки  $\mathbf{p} \in e(\mathbf{x})$  введём операцию вычисления вектора её барицентрических координат на элементе *e* в состоянии  $\mathbf{x}$ , как  $w^e = W(e, \mathbf{x}, \mathbf{p})$ . Компоненту этого вектора, ассоциированную с узлом  $n \in \mathcal{N}(e)$ , обозначим как  $w_n^e$ . Также пусть функция  $PW(w^e, \mathbf{x})$  возвращает точку на элементе *e* с барицентрическими координатами  $w^e$ . И кроме того определим операцию  $M(e, \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{p}) = PW(W(e, \mathbf{x}_1, \mathbf{p}), \mathbf{x}_2)$ .

- Для всех вершин n также зададим вспомогательную величину  $m_n$ , которая задаётся по формуле: если n — подвижная вершина, то  $m_n = \sum_{T \in T(n)} |A_p(T)|$ , иначе берётся за  $m_n = \infty$ . Здесь  $\sum_{T \in T(n)} |A_p(T)|$  является суммой площадей треугольников, разделяющих вершину n, вычисленная в недеформированной конфигурации.

- Для произвольной пары элементов  $e_1 \in \mathcal{M}, e_2 \in \mathcal{M}$  в состоянии модели **x** определим функцию Nearest $(e_1, e_2, \mathbf{x})$ , возвращающую любую пару точек  $(\mathbf{p_1}, \mathbf{p_2})$  из множества  $\underset{\mathbf{p_1} \in e_1(\mathbf{x}), \mathbf{p_2} \in e_2(\mathbf{x})}{\operatorname{arg\,min}} ||\mathbf{p_1} - \mathbf{p_2}||$ , а функцию расстояния между этими элементами обозначим dist $(e_1, e_2, \mathbf{x})$ .

- Пусть *S* - множество таких векторов состояния, что модель в этих состояниях не имеет персечений и самопересечений.

- Пусть  $Pair \subset (\mathcal{V} \otimes \mathcal{F}) \cup (\mathcal{R} \otimes \mathcal{R})$  - множество, пар сеточных элементов типа вершина-грань или ребро-ребро таких, что элементы из пары не имеют общих вершин. Также введём специальное множество  $ColPair(\mathbf{x}, \Delta \mathbf{x}) = \{(e_1, e_2) \in Pair : \min_{a \in [0,1]} [dist(e_1, e_2, \mathbf{x} + a\Delta \mathbf{x})] = 0\}$  - множество пар элементов, испытывающих столкновение на линейной траектории из  $\mathbf{x} \in \mathbf{x} + \Delta \mathbf{x}$ .

Критерий контакта сеточных элементов. Реальные тонкостенные структуры обладают некоторой ненулевой толщиной. Пусть H(e) - локальная толщина тонкостенной структуры на сеточном элементе e. Тогда если элементы  $e_1$  и  $e_2$  принадлежат триангуляциям срединных поверхностей разных упругих тел или же одного тела, но геодезическое расстояние между элементами  $e_1$  и  $e_2$  велико относительно

толщины тела, то можно ввести  $H(e_1, e_2) = \frac{1}{2}(H(e_1) + H(e_2))$  - расстояние, на котором пара элементов должна начать отталкиваться при сближении. Однако, если сеточные элементы  $e_1$  и  $e_2$  принадлежат триангулированной поверхности одного и того же тела, и геодезическое расстояние  $d_{geo}^0(e_1, e_2)$  между ними порядка или меньше толщины тела в начальной (недеформированной конфигурации), то такой критерий контакта перестаёт работать, поскольку просто близко расположенные в самой структуре точки не являются контактирующими, а непосредственно эту структуру формируют. Поэтому нами предложено в этом случае использовать критерий  $H(e_1, e_2) = \alpha_H d_{geo}(e_1, e_2)$ , где  $0 \le \alpha_H < 1$  задаваемый пользователем параметр. Таким образом,

$$H(e_1, e_2) = \begin{cases} \min\left(\alpha_H d_{geo}^0(e_1, e_2), \frac{1}{2}(H(e_1) + H(e_2))\right), \ e_1 \ u \ e_2 \ npuhadae \ mpuan \ synau \ odhoro \ meaa \\ \frac{1}{2}(H(e_1) + H(e_2)), \ uhau \ e \end{cases}$$
(2.1)

Силы отталкивания. Определение контактного взаимодействия через критерий оценки расстояния между сеточными элементами позволяет ввести на дискретном уровне искусственные силы отталкивания. Наиболее удобно эти силы определять через потенциалы отталкивания между сеточными элементами:

$$\mathcal{W}_{repulsion}^{e_1e_2}(\mathbf{x}) = K_r \int_{\text{dist}(e_1, e_2, \mathbf{x})}^{+\infty} f^{e_1e_2}(\xi) d\xi, \ \forall (e_1, e_2) \in Pair,$$

где  $K_r$  — коэффициент, регулирующий максимальную силу отталкивания, и  $f^{e_1e_2}(d) = g\left(\frac{d}{H(e_1,e_2)}\right)$  при  $g(x) = \max(1-x,0)$ . Силы отталкивания задаются как  $\left(\mathbf{F}_{repulsion}^{e_1e_2}\right)_n = -\frac{\partial \mathcal{W}_{repulsion}^{e_1e_2}}{\partial \mathbf{x}_n}(\mathbf{x})$ .

Введение таких сил требуется для повышения надёжности решения нелинейной алгебраической системы, возникающей в результате дискретизации задачи нелинейной упругости. Такой эффект достигается за счёт того, что в этом случае сближение сеточных элементов не только корректируется на уровне алгоритма устранения пересечений, но и штрафуется на уровне невязки самой нелинейной системы.

Описание контактного алгоритма. Пусть задан вектор состояния  $\mathbf{x} \in S$  и предложен некоторый сдвиг  $\Delta \mathbf{x}$  вектора состояния, переводящий его в новое состояние  $\mathbf{x}_{pred} = \mathbf{x} + \Delta \mathbf{x}_{pred}$ . Задача алгоритма построить такой модифицированный сдвиг  $\Delta \mathbf{x}_{cor}$ , который по возможности мало отличается от  $\Delta \mathbf{x}_{pred}$  и при этом  $\mathbf{x}_{cor} = \mathbf{x} + \Delta \mathbf{x}_{cor} \in S$ .

Отметим следующую геметрическую особенность: если  $\mathbf{x} \in S$  и  $\mathbf{x} + \Delta \mathbf{x}_{pred} \notin S$ , то на линейной траектории  $\mathbf{x}_l(a) = \mathbf{x} + a\Delta \mathbf{x}_{pred}$ ,  $a \in [0; 1]$  обязательно найдётся пара сталкивающихся между собой сеточных элементов  $(e_1, e_2) \in Pair$ . Этот факт и определяет идею самого метода, которая состоит в том, чтобы получить такое  $\Delta \mathbf{x}_{cor} = \text{RmContact}(\mathbf{x}, \Delta \mathbf{x}_{pred})$ , чтобы на линейной траектории между состояниями  $\mathbf{x}$  и  $\mathbf{x} + \Delta \mathbf{x}_{cor}$  не произошло ни одного столкновения пар упомянутого типа.

Конечный результат представлен в виде алгоритма 1. Фактически его можно представить в виде трёх этапов: 1) воздействие на близко расположенные части триангулированных поверхностей (см. также алг. 2); 2) разрешение столкновений на линейной траектории и 3) робастный, но не точный, алгоритм разрешения столкновений. Заметим, что мы не приводим описание для функций последнего этапа алгоритма: CollectImpactZones и MoveImpactZonesAsRigidBodies, — поскольку оно совпадает с соответствующим описанием в оригинальной версии метода [6].

Algorithm	1	Алгоі	литм	VCT	ранения	пе	ресечений	и	самонег	есечений	
	-	1101101	JELLINI	$y \cup r$	panomn	110	pooo iommi	тı	oumonop	NOOD IOIIIIII	

function RMCONTACT (начальная конфигурация  $\mathbf{x} \in \mathcal{S}$ , сдвиг  $\Delta \mathbf{x}_{pred}$ )  $\Delta \mathbf{x}_{cor} = \Delta \mathbf{x}_{pred}$ ⊳ модифицируем сдвиг пар близких элементов for  $(e_0, e_1) \in Pair$  такие, что  $dist(e_0, e_1, \mathbf{x}) < H(e_0, e_1)$  do  $\Delta \mathbf{x}_{cor} = \text{ApplyInelasticShift}((e_0, e_1), \mathbf{x}, \Delta \mathbf{x}_{cor})$  $\Delta \mathbf{x}_{cor} = \text{ApplyElasticShift}((e_0, e_1), \mathbf{x}, \Delta \mathbf{x}_{cor})$ end for  $n \leftarrow 1$ while  $n \leq N_{CCD}$  maxits if  $ColPair(\mathbf{x}, \Delta \mathbf{x}_{cor}) \neq \emptyset$  do  $CPairs = ColPair(\mathbf{x}, \Delta \mathbf{x}_{cor})$ for  $(e_0, e_1) \in CPairs$  do if пара  $(e_0, e_1)$  испытывает столкновение на лин. траектории из **x** в **x** +  $\Delta \mathbf{x}_{cor}$  then ⊳ удаляем первое столкновение пары Пусть  $\mathbf{x}_l(a) = \mathbf{x} + a\Delta \mathbf{x}_{cor}$ Находим  $a^* = \min\{a \in [0, 1] : dist(e_1, e_2, \mathbf{x}_l(a)) = 0\}$  и устанавливаем  $\mathbf{x}^* \leftarrow \mathbf{x}_l(a^*)$ Находим любую точку соприкосновения объектов  $\mathbf{p}^* = \mathbf{p}_1(\mathbf{x}^*) = \mathbf{p}_2(\mathbf{x}^*)$ Находим  $a^{**} = \min\{a \in [0, a^*] : ||M(e_1, \mathbf{x}^*, \mathbf{x}_l(a), \mathbf{p}^*) - M(e_2, \mathbf{x}^*, \mathbf{x}_l(a), \mathbf{p}^*)|| < H(e_0, e_1)\}$  $\Delta \mathbf{x}_{cor} = a^{**} \Delta \mathbf{x}_{cor} + (1 - a^{**}) \cdot \text{ApplyInelasticShift}((e_0, e_1), \mathbf{x}_l(a^{**}), (1 - a^{**}) \Delta \mathbf{x}_{cor})$ end if end for  $n \leftarrow n+1$ end while ⊳ если столкновения не были удалены, используем неточный, но робастный алгоритм  $n \leftarrow 1$ while  $n \leq N_{FailSafe\ maxits}$  и  $ColPair(\mathbf{x}, \Delta \mathbf{x}_{cor}) \neq \emptyset$  do  $IZs = \text{CollectImpactZones}(\mathbf{x}, \Delta \mathbf{x}_{cor})$  $\Delta \mathbf{x}_{cor} = \text{MoveImpactZonesAsRigidBodies}(IZs, \mathbf{x}, \Delta \mathbf{x}_{cor})$  $n \leftarrow n+1$ end while if  $n > N_{FailSafe maxits}$  then return Сообщение о неуспехе else return  $\Delta \mathbf{x}_{cor}$ end if end function

Построение множеств *Pair* и *ColPair*. В рамках работы алгоритма приходится совершать множество поисков пар геометрических элементов, расположенных ближе, чем заданное расстояние *d*. Данный поиск был организован с помощью двухфазного подхода. На первой, называемой "широкой", фазе использовались иерархии осевыровненных параллелепипедов (AABB), охватывающих геометрические Algorithm 2 Алгоритмы сдвига пар сеточных объектов

ргосеdure DISTRIBUTESHIFT(элемент *e*, воздействие  $\mathbf{I}_r$ , положение воздействия  $w^e$ , сдвиг  $\Delta \mathbf{x}$ ) for all  $n \in N(e)$  do  $\Delta \mathbf{x}_n = \Delta \mathbf{x}_n + \frac{w_n^e}{m_r} \mathbf{I}_r$ end for end procedure function APPLYINELASTICSHIFT(napa  $(e_0, e_1) \in Pair$ , состояние **x**, сдвиг  $\Delta \mathbf{x}$ ) Находим ближайшие точки  $(\mathbf{p}_0, \mathbf{p}_1) = \text{Nearest}(e_0, e_1, \mathbf{x})$  $w^{e_0} = W(e_0, \mathbf{x}, \mathbf{p}_0), \ w^{e_1} = W(e_1, \mathbf{x}, \mathbf{p}_1)$  $\Delta v_r = -\left(PW(w^{e_0}, \Delta \mathbf{x}) - PW(w^{e_1}, \Delta \mathbf{x})\right) \cdot \frac{\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_1}{||\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_1||}$ if  $\Delta v_r > 0$  then  $\mathbf{I}_{r} = \Delta v_{r} \left( \sum_{n \in N(e_{0})} \frac{(w_{n}^{e_{0}})^{2}}{m_{n}} + \sum_{n \in N(e_{1})} \frac{(w_{n}^{e_{1}})^{2}}{m_{n}} \right)^{-1} \frac{\mathbf{p}_{0} - \mathbf{p}_{1}}{||\mathbf{p}_{0} - \mathbf{p}_{1}||}$ DistributeShift(e<sub>0</sub>,  $\mathbf{I}_{r}, \mathbf{w}^{e_{0}}, \Delta \mathbf{x}$ ), DistributeShift(e<sub>1</sub>,  $-\mathbf{I}_{r}, \mathbf{w}^{e_{1}}, \Delta \mathbf{x}$ ) end if return  $\Delta \mathbf{x}$ end function function APPLYELASTICSHIFT (пара  $(e_0, e_1) \in Pair$ , состояние **x**, сдвиг  $\Delta \mathbf{x}$ ) Находим ближайшие точки  $(\mathbf{p}_0, \mathbf{p}_1) = \text{Nearest}(e_0, e_1, \mathbf{x})$  $w^{e_0} = W(e_0, \mathbf{x}, \mathbf{p}_0), w^{e_1} = W(e_1, \mathbf{x}, \mathbf{p}_1)$  $\Delta v_r = -\left(PW(w^{e_0}, \Delta \mathbf{x}) - PW(w^{e_1}, \Delta \mathbf{x})\right) \cdot \frac{\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_1}{||\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_1||}$  $d = H(e_0, e_1) - ||\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_1||$ ▷ K<sub>es</sub> ∈ [0,1] параметр задаваемый пользователем if  $\Delta v_r > -K_{es}d$  then  $\mathbf{I}_r = (K_{es}d + \Delta v_r) \frac{\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_1}{||\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_1||}$ DistributeShift(e<sub>0</sub>,  $\mathbf{I}_r, \mathbf{w}^{e_0}, \Delta \mathbf{x}$ ), DistributeShift(e<sub>1</sub>,  $-\mathbf{I}_r, \mathbf{w}^{e_1}, \Delta \mathbf{x}$ ) end if return  $\Delta \mathbf{x}$ end function

объекты и расширенных на расстояние *d* по всем направлениям, в результате которых отыскивались пары-кандидаты, т.е. такие пары геометрических объектов, которые могут оказаться на расстоянии меньше *d*. Структуры для работы с AABB иерархиями были подключены из библиотеки [4]. На следующей, "узкой", фазе производится отыскание фактического расстояния между парами-кандидатами с помощью классических геометрических алгоритмов. Помимо отыскания расстояний между элементами, также требовалось определять те пары элементов, которые сталкиваются на линейных траекториях. Этот процесс также включал в себя две фазы, где на узкой фазе строилась иерархия осевыровненных праллелпипедов, включающих линейные траектории соответствующих объектов и отыскиваются пары-кандидаты, т.е. такие пары геометрических элементов, которые могут пересекаться. Затем на "узкой" фазе производилось тестирование на наличие столкновений в парах-кандидатах посредством исследования специального кубического полинома с помощью реализованного точного алгоритма, описанного в работе [5].
Апробация контактного алгоритма. Реализованный алгоритм по устранению пересечений и самопересечений продемонстрировал отличные результаты в рамках решения задачи о размещении шаблонов лепестков клапана внутри аорты, исчерпывающее описание которой подробно изложено в опубликованной работе:

Liogky A. A. Computational mimicking of surgical leaflet suturing for virtual aortic valve neocuspidization //Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. – 2022. – T. 37. – №. 5. – C. 263-277. DOI: 10.1515/rnam-2022-0023

## 1.2.3 Исследование механических свойств нативного перикарда и обработанного перикарда человека

Для исследования механических свойств образцов перикарда, аналогичных используемым для операции неокуспидизации аортального клапана, был использован метод компрессионной оптической когерентной эластографии (ОКЭ). В компрессионном подходе оценивание модуля Юнга основано на первоначальной визуализации локальных осевых (продольных) деформаций  $\varepsilon_{11}$  в биоткани. Если такие деформации производятся нажатием на ткань (компрессией) ОКТ зондом и при этом ткань может достаточно свободно расширяться в латеральном направлении, то упругий отклик ткани определяется модулем Юнга:  $\sigma_{11} = E \varepsilon_{11}$ , где  $\sigma_{11}$  — величина аксиального напряжения, создаваемого при такой компрессии. Поскольку для биологических тканей коэффициент Пуассона очень близок к 0.5, с высокой точностью для модуля Юнга E имеет место соотношение: E = 3G, где G — модуль сдвига материала. Для количественной оценки модуля Юнга непосредственно измеряется создаваемое в среде напряжение. Это напряжение (давление) может оцениваться с помощью измерения силы, прикладываемой к ткани зондом с известной площадью. Практически удобным вариантом является использование так называемых калибровочных слоев из слаборассеивающего свет материала (например, силикона) с известным модулем Юнга. Такой калибровочный слой толщиной 150-300 микрон помещается между ОКТ зондом и исследуемой тканью и служит оптическим датчиком давления, позволяя по измеренной в слое деформации оценивать давление, оказываемое на него и на ткань. Метод количественной компрессионной ОКЭ с использованием калибровочных слоев и различные возможности его применения подробно описаны в [7]. Метод реализован на ОКТ сканерах, разработанных и изготовляемых в ИПФ РАН (единственное в России место, где производятся ОКТ приборы).

Для исследования механических свойств нативного/обработанного перикарда методом компрессионной ОКЭ было выполнены сравнительные измерения для 4 типов образцов человеческих перикардов. Образцы различались методом подготовки. Все образцы, кроме одного, были обработаны глутаральдегидом по технике Озаки (Ozaki) согласно протоколу при проведении хирургической операции по

неокуспидизации аортального клапана [8]. При подготовке различных образцов варьировались растягивающие усилия, приложенные к биоматериалу во время его химической фиксации, причем за "референтные" принимались усилия в рамках стандартного протокола подготовки аутоперикарда во время хирургической операции. Результатом химической обработки является дополнительный кросс-линкинг между волокнами матрикса перикарда, что ожидаемо должно приводить к повышению его упругого модуля (жесткости) по сравнению с необработанной тканью. Механическое растягивание должно дополнительно приводить к изменению механических свойств образца. Таким образом, ОКЭ-метод был использован для исследования разницы механических свойств четырех типов образцов: (i) необработанный; (ii) химически обработанный в растворе (0,625% раствор глютеральдегида на 10 минут), но нерастянутого; (iii) химически обработанного стандартным образом и растянутого в соответствии со стандартным протоколом, применяемым при приготовлении заготовок сердечных клапанов для имплантирования; (iv) химически обработанного стандартным образом, но подвергнутого заведомо слишком сильному растяжению.

Для выполнения измерений в качестве калибровочного материала был выбран силикон с величиной упругого модуля 100 кПа. Один и тот же калибровочный слой применялся во всех описываемых измерениях, так что наблюдаемые относительные различия были объективными и не зависели от возможной погрешности (порядка +/-5%) оценивания абсолютной величины модуля Юнга силикона. Для удобства и воздания более равномерного нагружения при компрессии под исследуемый образец перикарда также помещался аналогичный слой силикона, так что измерения проводились на образцах сэндвичного типа силикон-перикард-силикон. Исследуемые силиконовые образцы, сохранявшиеся в физиологическом растворе с консервирующим агентом, во время измерений были влагонасыщенными, так что физраствор служил смазкой, обеспечивая при компрессии достаточно свободное проскальзывание на границах силикона как с перикардом, так и выходным стеклянным окном ОКТ-зонда. Используемый ОКТ зонд при получении структурных изображений позволял выполнять сканирование по двум горизонтальным направлениям и получать трехмерные изображения исследуемой области с горизонтальным размером 3.3 × 3.3 мм. Примеры таких трехмерных изображений приведены на рис. 2.3 (верхний ряд) для всех четырех типов образцов. На поверхности необработанного перикарда видны небольшие неровности (остатки прилегающей ткани), а на химически обработанном, но не растянутом образце видна приповерхностная складка.

Следующий ряд на рис. 2.3 показывает двумерные (по глубине и одной горизонтальной координате) изображения, которые были получены при реализации компрессионной ОКЭ. В ходе компрессии получалось несколько сотен таких кадров, для которых находилась разность фаз, характеризующая вертикальное (осевое) межкадровое смещение рассеивателей. Это вертикальное смещение рассеивателей относительно ОКТ-зонда зависит от глубины и равно нулю непосредственно в области контакта калибровочного силикона и выходного окна ОКТ-зонда (хотя в боковых направлениях частицы ткани при компрессии смещаются). Вертикальный градиент таких межкадровых вариаций пропорционален вертикальной компоненте деформации, которая, в свою очередь определяется искомой величиной модуля Юнга материала. Модуль Юнга силикона не зависит от созданной в нем деформации, некоторые образцы перикарда демонстрировали заметную нелинейность связи «напряжение-деформация» (полученные для этих образцов нелинейные кривые показаны на рис. 2.4). Поэтому при получении оценки модуля Юнга перикарда следует учитывать, для какой величины давления эта оценка получена. На рис. 2.3 такие оцененные распределения модуля Юнга показаны для величины созданного давления 8 кПа. Прежде чем обсуждать различия кривых «напряжение-деформация», отметим, что на приведенных в нижнем ряду на рис. 2.3 распределениях модуля Юнга четко видно, что самое малое его значение характерно для необработанного перикарда (150-200 кПа при выбранном давлении 8 кПа). Химически обработанный (чтобы вызвать кросс-линкинг в ткани) нерастянутый по протоколу образец демонстрирует более высокие значения модуля Юнга, но пространственно существенно неоднородное распределение (от 200-300 кПа для областей со значениями выше 500 кПа). Обработанный и растянутый образец демонстрирует более однородное пространственное распределение с значительно более высокими, чем у первых двух образцов значениями порядка 600-700 кПа. Наконец, для перетянутого образца значения модуля Юнга оказались несколько ниже, чем для химически обработанного и растянутого по протоколу (300-600 кПа). Возможно, перетянутый образец, испытал уже механические повреждения, приведшие к снижению модуля Юнга.

Эти выводы из карт распределения модуля Юнга на рис. 2.3 согласуются и с формой кривых «напряжениедеформация» и «модуль-деформация», приведенных на рис. 2.4. Наиболее линейным оказалось поведение обработанного перетянутого образца, у которого в этом же диапазоне давлений до 8 кПа усредненный модуль упругости меняется на величину чуть более 10% (в пределах 400-450 кПа). Обработанные нерастянутый и растянутый по протоколу образцы демонстрируют выраженную нелинейность, которая в переделах изменения давления до 8 кПа приводит к изменению величины упругого модуля до 4-7 раз. При этом основные изменения происходят на начальном этапе деформирования, а при возрастании деформации фактически переходят в квазилинейный режим деформирования с возросшим значением модуля упругости. Такое поведение встречается и для других структурно-неоднородных материалов, например, горных пород с системой трещин, являющихся податливыми включениями, снижающими величину упругого модуля материала. При возрастании давления на материал имеющиеся в нем трещины постепенно закрываются, так что при достаточно большой величине давления упругость такой породы определяется уже упругими свойствами однородного материала-матрицы. В результате после участка начального возрастания при дальнейшем повышении деформации упругий модуль такого структурного материала асимптотически выходит на более высокую величину, характерную для однородного материала-матрицы. По-видимому, аналогичный механизм может отвечать и за нелинейное поведение, показанное на рис. 2.4 для необработанного образца, обработанного образца без растяжения и обработанного и подвергнутого умеренному растяжению. По-видимому, в таких образцах имеются узкие неплотности, по упругим свойствам напоминающие трещины. При умеренных сжимающих деформациях они постепенно закрываются, так что при еще более высоких деформациях упругие свойства такой ткани определяются модулем ее материала-матрицы, в котором неплотности уже закрыты. Аналогичное нелинейное поведение наблюдалось и для образов роговицы глаза, т.е.



Рис. 2.3: Примеры ОКТ-визуализации образцов перикарда 4-х типов. Верхний ряд - структурные объемные (трехмерные) изображения со свободной поверхностью перикарда (верхний ряд). Средний ряд – примеры двумерных структурных изображений в сэндвичной конфигурации, когда между выходным окном ОКТ-зонда и перикардом помещался свой калибровочного слаборассеивающего силикона. Нижний ряд – карты распределения жесткости (модуля Юнга), полученные на основе анализа деформаций в слое силикона и находящемся под ним перикардом.

ткани, матрица которой состоит из почти чистого коллагена, между волокнами которого имеются неплотности, постепенно закрывающиеся с ростом прилагаемого давления (см. например, [9]).

# 1.2.4 Проведение натурного эксперимента на образце свиного аортального клапана для валидации результатов математической модели закрытия аортального клапана

Исследование проведено на 20 сердцах. Сердца извлекались из туш домашних свиней (Sus scrofa domesticus) породы Ландрас массой 110-250 кг на скотобойне в соответствии с Информационно-техническим справочником по наилучшим доступным технологиям ИТС 43–2017 [10]. Сердца извлекались в составе органокомплекса органов грудной полости, вместе с крупными сосудами, лёгкими, трахеей, пищеводом, париетальным перикардом и париетальной плеврой. В дальнейшем сердца изолировались из органокомплексов. Для этого отсекались лёгкие по корню с оставлением участков лёгочных вен, лёгочных артерий, париетальный перикард по артериальной и венозной складкам перехода, восходящая аорта по проксимальному краю устья плечеголовного ствола, лёгочный ствол проксимальнее его бифуркации. Отсекалась верхушка сердца с оставлением базальных отделов с начальными участками крупных



Рис. 2.4: Примеры полученных кривых «напряжение-деформация» для исследованных образцов 4-х типов. Правая панель показывает зависимости модуля Юнга от деформации соответствующего образца, полученные путем дифференцирования гладких аппроксимирующих кривых.

сосудов. Далее выполнялась герметизация корня аорты, мультиспиральная компьютерная томография с контрастным усилением корня аорты. Полученные изображения использовались для построения неструктурированной треугольной сетки и дальнейшего численного эксперимента. На образцах сердец выполнялись все этапы неокуспидизации аортального клапана по методике Oзаки (Ozaki) [8]. Выполнялась поперечная аортотомия, высекались все три створки нативного аортального клапана. Далее с помощью реплик с оригинальных сайзеров Oзаки (Ozaki) [11] подбирались шаблоны неостворок. Размеры шаблонов, соответствующие полученным измерениям, для всех образцов сердец представлены в таблице 2.1. Затем выполнялось высечение неостворок из предварительно обработанного глутаральдегидом лоскута париетального перикарда. Последовательно неостворки фиксировались к аортальному кольцу, формировались три неокомиссуры. После визуальной оценки неоклапана герметизировался корень аорты, восстанавливалась целостность восходящей аорты. Корень аорты наполнялся раствором желатина под давлением, близким к диастолическому. На желудочковой поверхности неостворок отмечались проксимальные границы зон коаптации на каждой неостворке. Далее неостворки, фотографировались (рис. 2.5), выполнялось морфометрическое исследование с определением параметров замыкательной функции аортального неоклапана.

**Измерение** длин коаптации и площадей зоны коаптации в серии натурных экспериментов. Длина коаптации (иногда называется высотой коаптации) определяется как расстояние между свободным краем створки и проксимальной границей зоны коаптации двух соседних створок. При эхокардиографии, как правило, определяется длина коаптации в центральной зоне смыкания всех трёх створок. Учитывая неравномерную ширину зоны коаптации на створках аортального клапана, в своём анатомическом исследовании L. De Kerchove и соавт. разделяли центральную длину коаптации и



Рис. 2.5: Развёртки неостворок, используемые для морфометрического исследования (слева направо: левая коронарная створка, правая коронарная створка, некоронарная створка)



Рис. 2.6: Измерение максимальной боковой длины коаптации слева и справа от центра (указаны стрелками)

боковую длину коаптации [12]. Считается, что в нативном аортальном клапане и после реконструкции аортального клапана центральная длина коаптации должна превышать 4 мм [13]. Такая длина коаптации в совокупности с другими параметрами обеспечивает низкий риск рецидивирующей или вновь возникшей аортальной регургитации в послеоперационном периоде. Выборки центральных длин коаптации имеют признаки распределения, отличного от нормального, поэтому для их обработки использованы непараметрические критерии. Боковая длина коаптации определена как максимальная длина коаптации слева и справа от центральной длины коаптации (см. рис. 2.6).

Площадь зоны коаптации рутинно в клинической практике не определяется, однако в эксперименте может служить надёжным показателем, характеризующим замыкательную функцию аортального клапана, в том числе после неокуспидизации. Не существует достаточного количества данных, позволяющих установить нормальные значения данного показателя. Можно ориентироваться на результаты анатомического исследования L. De Kerchove и соавт. [12], которые получили в неизменённом аортальном клапане среднюю для всех трёх створок площадь коаптации в 122 ± 21 мм<sup>2</sup>.

Результаты измерения длин коаптации и площадь зон коаптации в натурном эксперименте представлены в представлены в таблице 2.2. В таблицах принято сокращение: ЛКС - левая коронарная створка, ПКС - правая коронарная створка, НКС - некоронарная створка.

No. образца	ЛКС	ПКС	HKC	No. образца	ЛКС	ПКС	HKC
1	21	17	27	2	25	21	21
3	21	23	15	4	29	25	25
5	31	33	29	6	29	27	27
7	31	27	29	8	31	33	29
9	27	27	27	10	25	21	19
11	21	25	21	12	29	25	25
13	29	29	25	14	33	31	25
15	33	33	33	16	27	27	29
17	27	27	25	18	31	29	31
19	27	25	29	20	31	29	29

ТАБЛИЦА 2.1: Номера шаблонов, использованных для выкраивания неостворок.

ТАБЛИЦА 2.2: Измеренные в натурном эксперименте различные характеристики зоны коапации. Результаты представлены в виде медианы и межквартильного размаха.

Параметр		Натурный эксперимент
	ЛКС	11,737 (9,809 - 11,497)
Центральная длина коаптации (мм)	ПКС	$13,702\ (11,69-14,900)$
	HKC	10,536 (9,535 - 11,581)
	ЛКС	13,657 (11,748 - 15,147)
Максимальная длина коаптации слева от центра (мм)	ПКС	$16,274 \ (14,504 - 19,072)$
	HKC	13,687(12,827-14,822)
	ЛКС	14,453 (13,598 - 15,604)
Максимальная длина коаптации справа от центра (мм)		$15,392\ (13,702-16,871)$
	HKC	$13,339\ (11,9-14,357)$
	ЛКС	414,016 (360,602 - 451,689)
Площадь зон коаптации неостворок (мм <sup>2</sup> )	ПКС	419,268 (389,414 - 540,467)
	HKC	360,038 (323,622 - 403,839)

По результатам работ опубликована статья:

Каравайкин П. А. и др. Математическое моделирование замыкательной функции аортального клапана после неокуспидизации //Kardiologia i Serdechno-Sosudistaya Khirurgia. - 2022. - Т. 15. - №. 4. с. 369-376

# Литература

- Kronenberger M. Wirjadi O. Freitag J., Hagen H. Gaussian curvature using fundamental forms for binary voxel data // Graphical Models. - 2015. - Vol. 82. - Pp. 123-136.
- [2] Masson Terrence. CG 101: a computer graphics industry reference. 1999.
- [3] Catmull Edwin, Rom Raphael. A class of local interpolating splines // Computer aided geometric design.
   Elsevier, 1974. Pp. 317–326.
- [4] Coumans Erwin et al. Bullet Physics SDK. URL: http://bulletphysics.org.
- [5] Fast and exact continuous collision detection with bernstein sign classification / Min Tang, Ruofeng Tong, Zhendong Wang, Dinesh Manocha // ACM Transactions on Graphics (TOG). - 2014.
   Vol. 33, no. 6. - Pp. 1-8.
- [6] Bridson Robert, Fedkiw Ronald, Anderson John. Robust treatment of collisions, contact and friction for cloth animation // Proceedings of the 29th annual conference on Computer graphics and interactive techniques. — 2002. — Pp. 594–603.
- [7] Strain and elasticity imaging in compression optical coherence elastography: the two-decade perspective and recent advances / Vladimir Y Zaitsev, Alexander L Matveyev, Lev A Matveev et al. // Journal of biophotonics. — 2021. — Vol. 14, no. 2. — P. e202000257.
- [8] Aortic valve reconstruction using self-developed aortic valve plasty system in aortic valve disease / Shigeyuki Ozaki, Isamu Kawase, Hiromasa Yamashita et al. // Interactive cardiovascular and thoracic surgery. - 2011. - Vol. 12, no. 4. - Pp. 550-553.
- [9] Manually-operated compressional optical coherence elastography with effective aperiodic averaging: demonstrations for corneal and cartilaginous tissues / AA Sovetsky, AL Matveyev, LA Matveev et al. // Laser Physics Letters. - 2018. - Vol. 15, no. 8. - P. 085602.
- [10] ИТС 43–2017. Информационно-технический справочник по наилучшим доступным технологиям. Убой животных на мясокомбинатах, мясохладобойнях, побочные продукты животноводства. — 2018.
- [11] Ozaki Shigeyuki. Instrument of patterning cusp for cardiac valve reconstruction and component thereof.
  2011. US Patent App. 12/758,844.

- [12] Free margin length and coaptation surface area in normal tricuspid aortic valve: an anatomical study / Laurent De Kerchove, Mona Momeni, Gaby Aphram et al. // European Journal of Cardio-Thoracic Surgery. - 2018. - Vol. 53, no. 5. - Pp. 1040-1048.
- [13] Impact of postoperative cusp configuration on midterm durability after aortic root reimplantation. / Shunsuke Miyahara, Atsushi Omura, Toshihito Sakamoto et al. // The Journal of Heart Valve Disease.
   2013. – Vol. 22, no. 4. – Pp. 509–516.

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

Разработка методов учета геометрии и близости бифуркаций сосудов для редуцированной гемодинамической модели кровотока. Апробация методов автоматизированной сегментации KT/MPT-данных с выделением легочных артерий, полой вены, камер сердца и построения расчетных сеток

На следующих этапах проекта планируется моделирование кровотока при проведении операции Фонтена и оптимизация параметров операции при помощи редуцированной (одномерной) сетевой модели кровообращения. Основным недостатком разработанной в настоящее время модели является довольно грубое описание областей соединения сосудов. Используемые приближения (непрерывность полного давления, закон Пуазейля) хорошо себя зарекомендовали при моделировании кровотока в разветвленных сосудистых сетях с большим количеством небольших (относительно аорты) сосудов. Однако, при рассмотрении локальных областей соединений крупных сосудов, характерных, в том числе, для региона проведения операции Фонтена, точность таких приближений недостаточна. Одним из основных параметров, влияющих на кровоток вблизи области соединений сосудов (бифуркации, трифуркации, анастомозы и др.), является угол, под которым каждый из сосудов входит или выходит из этой области. Проблема учета угла разветвления в области бифуркации в одномерных моделях до сих пор рассматривалась крайне редко. Существующие способы решения данной проблемы также недостаточно точны. Существует многомасштабный подход, при котором поток в области соединения сосудов рассчитывается с помощью трехмерной модели, которая затем соединяется с одномерной. Такой подход требует существенных вычислительных затрат при проведении массовых вычислений большого количества конфигураци и имеет свои сложности с постановкой граничный условий в областях соединения одномерной и трехмерной моделей. С другой стороны, алгоритм такого многомасштабного моделирования рассматривает одномерную и трехмерную модели как независимые модули, каждый из которых может быть заменен какой-то другой моделью. В связи с этим в рамках данного проекта был предложен подход, состоящий в замене трехмерной области соединения сосудов параметрической зависимостью между гемодинамическими параметрами (давления, потоки, скорости) на входах и выходах из области соединения в зависимости от углов разветвления и диаметров входящих и исходящих сосудов. Данная параметрическая зависимость строится с помощью нейросети, обучение которой производится на данных моделирования кровотока в области соединения с помощью трехмерной модели. Далее полученная параметрическая зависимость будет использоваться в качестве граничных условий в области соединения сосудов в одномерной сетевой динамической модели. Данный подход, насколько нам известно, предложен впервые. На данном этапе рассматривалась модель бифуркации сосудов, т.е. разделение одного сосуда на два. На следующих этапах будут рассматриваться более сложные области соединения, характерные для проведения операции Фонтена.

# 1.3.1 Разработка методов учета геометрии и близости бифуркаций сосудов для редуцированной гемодинамической модели кровотока

В рамках данного исследования предложен метод учета геометрии бифуркации сосудов в одномерной модели гемодинамики с использованием нейросети. Стык сосудов в бифуркации характеризуется углом стыковки сосудов и их диаметрами. Предложено построить и обучить нейросеть, которая, исходя из давлений на границах бифуркации и ее геометрии, могла бы предсказать потоки крови на границах. Построение такого метода включает следующие шаги:

- Определение набора бифуркаций, гемодинамика в которых будет моделироваться нейросетью. Построение 3D расчетных сеток.
- Генерация данных для обучения нейросети.
- Построение и обучение нейросети на полученных данных.
- Включение нейросети в одномерную модель для расчета гемодинамики в бифуркации сосудов.

## 1.3.1.1 Генерация 3D расчетных сеток

Для автоматизации построения сеток для бифуркаций разработан генератор сеток на основе библиотеки GMSH [1]. На вход генератору подаются: углы, под которыми направлены сосуды, их длины и диаметры. Предполагается, что первый сегмент соответствует родительскому сосуду, а все остальные – дочерние. Расчётная область определяется как объединение нескольких криволинейных трубок, каждая из которых плавно соединяет родительский сегмент с дочерним. Для достижения плавности переходов используется сглаженная центральная линия, построенная как B-сплайн пятой степени с контрольными точками, лежащими на родительском и дочернем сегментах, см. рис. 3.1a. На каждом

В-сплайне расставляются вершины с постоянным шагом, примерно равным половине диаметра сосуда. В построенных вершинах вычисляется касательное направление к В-сплайну и в перпендикулярной плоскости строится окружность с диаметром, соответствующем заданному сегменту. Набор окружностей задаёт остов будущей трубки, см. рис. 3.16. Поверхность трубки параметризуется с помощью В-сплайна второй степени.

После объединения всех криволинейных трубок участки поверхности отмечаются отдельными материалами, соответствующими боковой поверхности, входящему сечению и нескольким выходящим сечениям, см. рис. 3.1в. При построении неструктурированной сетки используется равномерный шаг сетки, заданный пользователем, см. рис. 3.1г. После построения сетки запускается дополнительная оптимизация сетки из пакета Ani3D [2]. В ходе оптимизации также переразбиваются тетраэдры, все вершины которых лежат на границе области. Это свойство в дальнейшем способствует стабильности используемых численных методов.



Рис. 3.1: Иллюстрация работы генератора сеток: а)сглаженная центральная линия; b) набор окружностей, задающий остов будущей трубки; c) расставление меток на поверхностях сетки; d) построение неструктурированной сетки.

Перед началом генерации данных для обучения нейросети определяется набор геометрий бифуркаций, на которых эти данные будут рассчитаны. В данном исследовании предполагалось, что диаметры входящих и выходящих сосудов одинаковые, меняется лишь угол стыковки сосудов (угол между центральными линиями материнской и соответственной дечерней ветви). Шаг изменения угла составляет 5° и изменяется от 0° до 90° для каждой дочерней ветви. Примеры расчетных сеток приведены на рисунке 3.2. Диаметр сосудов на данном этапе считается постоянным во всех трех сосудах и равен 1 см, длины сосудов 2 см.



Рис. 3.2: Примеры расчетных сеток с углами стыковки дочерних веток: a)0 и 65°; b)20 и 45°; c)25 и 0°; d)80 и 65°.

## 1.3.1.2 Генерация данных для обучения нейросети

При генерации данных для обучения нейросети предполагается, что давление на границах бифуркации известно, а потоки необходимо рассчитать. Далее в каждой бифуркации решается стационарное уравнение Навье-Стокса с условиями Неймана на границах втекания и вытекания и условием прилипания (Дирихле) на стенке. В результате получается распределение потоков в бифуркации, в том числе и на границах.

При выборе диапазона давлений на границах предполагалось, что бифуркация имитирует бифуркацию аорты, а, следовательно, характерные значения потока крови лежат в диапазоне от -50 до 300 мл/с. В этом случае характерный перепад давления между границей втекания и границами вытекания варьируется от -0.3 до 2 мм рт ст.

### 1.3.1.3 Построение и обучение нейросети на полученных данных

Течение жидкости в бифуркации на данном этапе задается пятью параметрами:  $p_1$ ,  $p_2$ ,  $p_3$  - давления на входящей и выходящих границах; a1 и a2 — углы стыковки сосудов (меньший угол между центральными линиями материнского и дочерних сосудов). Построенная нейросеть должна приближать три параметра  $q_1$ ,  $q_2$ ,  $q_3$  — потоки на границах втекания и вытекания. Входные и выходные параметры связаны между собой, таким образом, предполагается, что существует функция  $f(p_1, p_2, p_3, a1, a2) \rightarrow$  $(q_1, q_2, q_3)$ . Поиск такой функции f осуществляется методами глубокого обучения (Deep Leaning), позволяющие приближать произвольные функции при наличии достаточного количества данных.

Задача предсказания потоков по набору входных параметров - задача регрессии. Входные параметры задачи - действительные числа, набор данных не зависит от времени (не является временным рядом), поэтому в качестве базовой архитектуры используется "Нейронная сеть с прямой связью" (feedforward neural network (FNN)). Эта архитектура предполагает последовательное соединение слоев нейросети. На каждом слое все входные переменные умножаются на коэффициенты (веса модели), суммируются и обрабатываются функцией активации (произвольная функция  $f(x_1, ..., x_n) \rightarrow y$ ). Выходное значение функции активации является входным на следующем слое и так далее (см.рис. 3.3).



Рис. 3.3: Архитектура нейронной сети FNN.

Данная архитектура описывает лишь способ связи слоев нейронной сети. Помимо способа связи слоев нейросеть настраивается с помощью большого количества "гиперпараметров": функция активации после каждого слоя, функция ошибки, количество образцов данных, используемых для одной итерации обучения, шаг обучения (или "Скорость обучения") и т.д. Таким образом, в рамках задачи используется архитектура FNN, которая будет итеративно модифицироваться для достижения лучшего качества приближения.

Для обучения нейросети было сгенерировано 3200 строк данных (см.разделы 1.3.1.1,1.3.1.2). 80% данных использовалось для обучения, 20% - для валидации модели.

Нейросеть обучается путем минимизации функции ошибки. В рамках текущей задачи в качестве функции ошибки используется относительная ошибка - среднее отклонение предсказанных потоков ( $q_1$ ,  $q_2$ ,  $q_3$ ) от реальных в %.

В данной работе модели обучались с разными комбинациями параметров: размером батча (сколько строк данных используется для одной итерации обучения) и скоростью обучения (learning rate - коэффициент, влияющий на скорость корректировки весов модели).

Первая используемая модель нейронной сети FNN имеет следующую структуру (см. рис. 3.4a):

- 1 скрытый слой;
- ReLu (rectified linear unit) используется в качестве функции активации.

Модель была обучена всего на 10 эпохах (эпоха - один полный проход по всем данным) для обнаружения наличия сходимости. Зависимость функциии ошибки от итерации обучения представлена на рис. 3.5. Как на валидационном наборе (левый график на рисунке 3.5), так и на тестовом (правый график на рисунке 3.5) ошибка уменьшается с каждой итерацией, а, значит, нейронная сеть способна обнаружить связь входных и выходных данных. Обученная модель нейронной сети FNN будет использоваться в качестве опорной для дальнейших сравнений.

Ошибка модели FNN на валидационном наборе:

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



Рис. 3.4: Структура нейронной сети: a) модель FNN; b)модель FNN с дропаутом.



РИС. 3.5: Зависимость функциии ошибки от итерации обучения нейронной сети FNN.

- Средняя относительная (%) ошибка = 30.76%;
- Максимальная относительная ошибка (%) = 80.63%.

Также в работе использовалась модель нейронной сети FNN с дропаутом. Эта модель идентична предыдущей, но использует дропаут (dropout) - метод регуляризации искусственных нейронных сетей. Данный метод нужен для проведения длительного обучения нейронной сети без риска ее переобучения (сверхприспособления к входным данным). Структура модели представлена на рисунке 3.4b, обучение проводилось на 250 эпохах, зависимость функциии ошибки от итерации обучения приведена на рисунке 3.6.

Ошибка модели FNN с дропаутом на валидационном наборе:

- Средняя относительная (%) ошибка = 5.06%;
- Максимальная относительная ошибка (%) = 21.93%.

Таким образом, модель FFN достигла неплохого качества приближения при полученной средней относительной ошибке. В то же время максимальная относительная ошибка достигает 21,93%, что может



РИС. 3.6: зависимость функциии ошибки от итерации обучения нейронной сети FNN с дропаутом.

существенно повлиять на корректность гемодинамических расчетов. Верификация методов учета геометрии и близости бифуркаций редуцированной моделью на основе трехмерных детальных расчетов кровотока не дала положительных результатов и не приведена в отчете. На следующем этапе будет продолжена работа по снижению максимальных отклонений ориентировочно до 10%. Повышение точности планируется достичь за счет перехода к физически-информированной архитектуре нейронной сети.

## 1.3.1.4 Включение нейросети в одномерную модель для расчета гемодинамики в бифуркации сосудов

Рассмотрим подробно расчет течения жидкости в бифуркации. Пусть стыкуются три сосуда  $\Omega_1, \Omega_2, \Omega_3$  точками  $x_1, x_2, x_3$  соответственно. Течение жидкости в сосудах описывается стандартной 1D моделью гемодинамики, основанной на законах сохранения массы и импульса [3]. Третьим уравнением модели является уравнение состояния, показывающее зависимость давления от сечения сосуда. Течение жидкости в точке стыковки сосудов рассчитывается нейронной сетью. В начальный момент времени предполагается, что скорость крови во всей области равна 0. Предположим, что решение известно при  $t = t_n$ . Для расчета гемодинамики при  $t = t_{n+1}$  предложен следующий итерационный (i - номер итерации) алгоритм:

- Шаг 1. i = 0. Интегрируем 1D задачу при  $t = t_{n+1}$  в областях  $\Omega_1, \Omega_2, \Omega_3$ . Решение (u, S) в точках  $x_1, x_2, x_3$  получаем путем экстраполяции значений в этих точках с предыдущих шагов по времени либо путем решения стандартной системы уравнений в узле (непрерывность интеграла Бернулли и сохранение массы). Так получаем значения давлений  $p_1^0, p_2^0, p_3^0$  в точках  $x_1, x_2, x_3$ .
- Шаг 2. Нейронная сеть с входыми параметрами  $p_1^i, p_2^i, p_3^i$  и геометрическими параметрами бифуркации рассчитывает значения потоков  $q_1^{i+1}, q_2^{i+1}, q_3^{i+1}$  в точках  $x_1, x_2, x_3$ .
- Шаг 3. Точки  $x_1, x_2, x_3$  являются граничными для областей  $\Omega_1, \Omega_2, \Omega_3$ . В силу того, что система уравнений 1D модели гемодинамики является гиперболической, она может интегрироваться вдоль

характеристик, а следовательно, в каждой из этих точек должно выполняться условие совместности  $u_k^{i+1} = a_k S_k^{i+1} + b_k$  [3], где  $a_k, b_k$  - коэффициенты, k = 1, 2, 3. Кроме того, по определению потока жидкости в каждой из этих точек имеем условие

$$q_k^{i+1} = u_k^{i+1} S_k^{i+1}.$$

В точках  $x_1, x_2, x_3$  имеем квадратное уравнение для скоростей:

$$a_k(u_k^{i+1})^2 + b_k u_k^{i+1} - q_k^{i+1} = 0.$$

Решив его и выбрав подходящий корень, из условия совместности получаем значение  $S_k^{i+1}$ , а из уравнения состояния модели  $p_k^{i+1}$ . Таким образом, получили значения  $p_1^{i+1}, p_2^{i+1}, p_3^{i+1}$ .

Шаг 4. Если  $|p_k^{i+1} - p_k^i| < \epsilon$ , то алгоритм завершается, можно переходить к расчету следующего шага по времени. В противном случае i = i + 1, происходит возврат к шагу 2.

Данный алгоритм требует проверки сходимости при реальных расчетах.

# 1.3.2 Апробация методов автоматизированной сегментации КТ/МРТданных с выделением легочных артерий, полой вены, камер сердца и построения расчетных сеток

Для предсказательного моделирования операции Фонтена необходимы численные расчеты течения крови в области сердца реального пациента. Геометрия крупных сосудов (нижней и верхней полых вен, легочных артерий), полостей камер сердца, а, возможно, и других близлежащих сосудов (аорты, вены азигос, коронарных артерий, легочных вен и т.д.) должны быть получены путем сегментации КТ/МРТ снимков данного пациента перед операцией.

Ручная сегментация всего сердца и крупных близлежащих сосудов трудоемка. В то же время полностью реализация автоматической сегментации очень сложна, если вообще возможна [4]. Во-первых, геометрия сердца и близлежащих крупных сосудов сложная, и может существенно отличаться как между индивидами, так и у одного человека в разное время и при разных условиях. Особенно эти различия очевидны при наличии патологий. Во-вторых, некоторые границы между анатомическими структурами практически не различимы. Это происходит из-за отсутствия физических границ (например, камеры сердца, разделяемые клапанами), тонких стенок (например, сосудов) или сходных интенсивностей и текстур у разных тканей. В-третьих, из-за движения сердца на изображении есть вероятность появления артефактов, шума, негладких границ, что может потребовать дополнительной предобработки изображений. Методы автоматической сегментации, как правило, используют базовую модель. Часть алгоритмов использует анатомические атласы – сегментация или несколько сегментаций изображений некоторой области для конкретных пациентов. Другие методы строят статистическую форму по некоторому множеству тренировочных сегментаций. В обоих случаях далее необходимо найти отображение атласа или статистической формы на соответствующие изображения произвольного пациента (процесс регистрации). Форма сердца и конфигурация сосудов пациентов со сложными врожденными пороками различаются между собой и существенно отличаются от нормы. В связи с этим, упомянутые выше методы оказываются малоэффективны.

В данной работе для сегментации сердца используется автоматизированный алгоритм. В его основе лежит метод растущей змейки (snake evolution) [5]. Змейка – замкнутая поверхность. Изначально она инициализируется вручную путем отметки на MPT/KT снимках круга (в трехмерном пространстве шара/шаров) в области интереса. Далее этот круг автоматически разрастается, пока поверхность не станет аппроксимировать сегментируемый орган. Разрастание змейки происходит, исходя из «скорости» каждой точки змейки в каждый момент времени. «Скорость» в свою очередь зависит от формы змейки (кривизны) в данной точке и интенсивности (однородности) изображения в окрестности. Изначально змейка может инициализироваться несколькими кругами (шарами), каждый из которых начинает расти и впоследствии сливается с остальными.

Перед началом сегментации вручную проводится настройка контраста медицинских изображений для получения максимально возможной видимости контуров сосудов, органов и других тканей. Далее реализуется следующий алгоритм:

- Среди всех сосудов/органов, требующих сегментации, визуально определяется наиболее четкий сосуд/орган: он будет отсегментирован первым. В таком случае цвет из области с худшей контрастностью при сегментации не будет затекать на уже отсегментированные более четко визуализируемые органы и сосуды. Область интереса определяется.
- Выполняется настройка метода. Во-первых, выбирается метод пресегментации: контраст переднего изображения и фона ("thresholding") или метод контуров ("edge attraction"). Во-вторых, вручную устанавливаются параметры выбранного метода.
- Вручную инициализируется сегментируемый сосуд/орган путем постановки шаров в области интереса. Количество шаров зависит от размера органа/контраста изображения/чёткости контуров. На практике оказывается, что их количество не превышает 10, а чаще всего меньше.
- Запускается автоматизированная часть алгоритма: змейка начинает разрастаться и продолжает это делать до остановки пользователем.
- Проводится ручная корректировка в случае, если при автосегментации ошибочно попадает "цвет" в соседние сосуды/органы (ошибочно окрашенная область очищается) либо какие-то части остаются неокрашенными (добавляем "цвет" в невыделенные части нужного сосуда/органа).
- Переходим к сегментации следующего сосуда/органа пункту 1.

Описанный алгоритм полностью реализован в программе ITK-SNAP[5]. Для апробации алгоритма были использованы данные компьютерной томографии четырех пациентов с тяжелыми пороками сердца. Для более полной демонстрации работы алгоритма пациенты выбирались максимально разные по возрасту и анатомии. Среди них двое пациентов перенесли операцию Фонтена, одному сформирован двунаправленный каво-пульмональный анастомоз, один пациент не был оперирован:

$\mathbb{N}^{\underline{o}}$	Возраст (лет)	Состояние
1	18	Кровообращение Фонтена, две верхние полые вены
2	17	Кровообращение Фонтена, одна верхняя полая вена
3	6	ДКПА
4	12	до операции

При запуске алгоритма с учетом четкости контуров сосудов/органов использовался следующий порядок сегментации (пункт 1 алгоритма): 1 - аорта; 2 - верхняя и нижняя полые вены, кондуит; 3 лёгочные вены и артерии; 4 - предсердия; 5 - желудочки; 6 - остальные менее крупные артерии и вены.

Полученные результаты сегментации представлены на рисунках 3.7-3.10 a-d, расшифровка сокращений, используемых для обозначения цветов на рисунках, приведена в таблице 3.1. Результаты сегментации оценивались экспертом врачом-рентгенологом и являются анатомически корректными.



Рис. 3.7: Пациент 1. Сегментация: a) вид спереди; b) вид сзади; c) аорта и камеры сердца; d) кавапульмональное соединение; e) поверхностная расчетная сетка; f) срез тетраэдральной расчетной сетки.





Рис. 3.8: Пациент 2. Сегментация: a) вид спереди; b) вид сзади; c) аорта и камеры сердца; d) кавапульмональное соединение; e) поверхностная расчетная сетка; f) срез тетраэдральной расчетной сетки.

Используемый автоматизированный метод сегментации существенно ускоряет процесс выделения камер сердца и сосудов по сравнению с ручным режимом и показал свою эффективность в применении к КТ данным пациентов с тяжелыми пороками сердца.

Несмотря на преимущества, метод имеет ряд ограничений и недостатков. Качество работы алгоритма сильно зависит от качества медицинских снимков, а именно от контрастированности изображения органов (артерий, вен, желудочков, предсердий и т.д.), поскольку это является одним из первых и ключевых этапов метода.

Наибольшие сложности возникали с дифференциацией лёгочных вен и артерий в местах, где сосуды лежат в миллиметрах друг от друга. В этом случае алгоритм ошибочно воспринимает два сосуда как одно целое. Для избежания данной проблемы необходимо было проводить ручную пре-сегментацию в нескольких срезах, отделив лёгочные вены от лёгочных артерий.

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



Рис. 3.9: Пациент 3. Сегментация: a) вид спереди; b) вид сзади; c) аорта и камеры сердца; d) двунаправленный кавопульмональный анастомоз; e) поверхностная расчетная сетка; f) срез тетраэдральной расчетной сетки

При сегментации камер сердца выделяются участки, заполненные жидкостью. Для этого отдельно регулируется контрастность снимков, чтобы получить неоднородную структуру желудочков, не выделив при этом миокард.

Ввиду того, что при реализации алгоритма необходимо идентифицировать структуры, требуется участие врача или специалиста в анатомии. Однако участие специалиста в ходе реализации алгоритма позволяет отслеживать корректность сегментации, что крайне важно для пациентов с пороками сердца, поскольку практически каждый случай является анатомически уникальным.

Для предсказательного моделирования операции Фонтена необходимо построить сетки в расчетной области. Областью интереса являются полые вены и легочные артерии. В некоторых случаях для расчетов могут понадобиться камеры сердца при моделировании фенестраций, а также различных техник операций, не заключающихся во вставке экстракардиального кондуита. Перед построением сетки сегментация сосудов и полостей сердца была дополнительно сглажена с использованием программной библиотеки Convert3D [6]. Сглаживание сегментации основано на рекурсивном фильтре Гаусса [7]. Параметр сглаживания для полостей сердца был равен 5 мм, а для сосудов – 2 мм. Дополнительное



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

Рис. 3.10: Пациент 4. Сегментация: a) вид спереди; b) вид сзади; c) аорта и камеры сердца; d) полые вены и легочные артерии; e) поверхностная расчетная сетка; f) срез тетраэдральной расчетной сетки.

е.

f.

d.

сглаживание используется для восстановления непрерывности сегментации и для сглаживания границ между материалами.

Для построения неструктурированной тетраэдральной расчетной сетки используется метод Делоне с весами, реализованный в открытом пакете вычислительной геометрии CGAL [8, 9]. Область задаётся неявно с помощью сегментированного изображения. Границы между разными материалами дополнительно сглаживаются с помощью весового изображения [10]. Параметр сглаживания при вычислении весового изображения был равен размеру одного вокселя сегментированного изображения.

На рисунках 3.7-3.10 e-f изображены построенные квазиравномерные неструктурированные сетки для четырех пациентов. Количество вершин и тетраэдров, а также время построения сетки приведены в таблице 3.2.

43

ТАБЛИЦА 3.1: Расшифровка сокращений, используемых для обозначения цветов на рисунках 3.7-3.10.

Аорта
Верхняя полая вена
Кондуит
Нижняя полая вена
Правая легочная вена
Левая легочная вена
Легочная вена
Правая легочная артерия
Левая легочная артерия
Легочная артерия
Левый желудочек
Правый желудочек
Левое предсердие
Правое предсердие
Единственное предсердие/предсердие
Единственный желудочек
Дефект перегородки
Коронарный синус
Правая коронарная артерия
Левая коронарная артерия

ТАБЛИЦА 3.2: Характеристики построенных расчетных тетраэдральных сеток: количество вершин и тетраэдров, время построения.

Пациент	Количество вершин	Количество тетраэдров	Время
1	105281	577381	46 секунд
2	178662	1005872	88 секунд
3	78395	414621	35 секунд
4	88859	485541	41 секунда

# Литература

- Geuzaine C., Remacle J.-F. Gmsh: a three-dimensional finite element mesh generator with built-in preand post-processing facilities. International Journal for Numerical Methods in Engineering // Linear Algebra and its Applications. - 2009. - Vol. 79, no. 11. - Pp. 1309-1331.
- [2] Vassilevski Yu., Lipnikov K. An adaptive algorithm for quasioptimal mesh generation // Computational Mathematics and Mathematical Physics. — 1999. — Vol. 39, no. 9. — P. 1468–1486.
- [3] Kholodov A., Simakov S. Computational study of oxygen concentration in human blood under low frequency disturbances. // Mathematical models and computer simulations. — 2009. — Vol. 1, no. 2. — Pp. 283–295.
- [4] Zhuang X. Challenges and methodologies of fully automatic whole heart segmentation: a review // J Healthc Eng. — Vol. 4, no. 3.
- [5] User-guided 3D active contour segmentation of anatomical structures: Significantly improved efficiency and reliability / P. Yushkevich, J. Piven, H. Hazlett et al. // Neuroimage. — 2006. — Vol. 31, no. 3. — Pp. 1116–28.
- [6] Yushkevich P. Convert3D ITK-based Image Manipulation Tool // J Healthc Eng.
- [7] Deriche R. Recursively implementating the Gaussian and its derivatives // [Research Report] RR-1893.
   1993. P. 24.
- [8] Rineau L., M. Yvinec. Laurent Rineau and Mariette Yvinec. A generic software design for Delaunay refinement meshing // Comput. Geom. Theory Appl. - 2007. - Vol. 38. - P. 100-110.
- [9] CGAL, Computational Geometry Algorithms Library.
- [10] Weighted labels for 3d image segmentation / D. Stalling, M. Zöckler, O. Sander, Hans-Christian Hege. - 1998.

# Задача 1.4. Персонализированные модели подсистем опорно-двигательного аппарата

Анализ имеющейся информации относительно анатомических и морфологических ориентиров для сухожилий коленного сустава Разработка и апробация алгоритма на примере медицинских КТ-изображений коленного сустава Построение персонализированной биомеханической редуцированной модели коленного сустава Выявление влияния различных мягкотканных стабилизирующих структур на движение надколенника

# 1.4.1 Анализ имеющейся информации относительно анатомических и морфологических ориентиров для сухожилий коленного сустава

Данный раздел овещён в отчете по первому этапу гранта РНФ 21-71-30023 в разделе "Анализ имеющейся информации относительно анатомических и морфологических ориентиров для сухожилий коленного сустава", в подразделе "Краткий обзор существующих алгоритмов сегментации связок и сухожилий".

# 1.4.2 Разработка и апробация алгоритма на примере медицинских КТ-изображений коленного сустава

Данный раздел овещён в отчете по первому этапу гранта РНФ 21-71-30023 в разделе "Разработка и апробация алгоритма на примере медицинских КТ-изображений коленного сустава", в подразделах "Сухожилие четырёхглавой мышцы бедра", "Сухожилие подколенной мышцы", "Сухожилие двуглавой мышцы бедра".

# 1.4.3 Построение персонализированной биомеханической редуцированной модели коленного сустава

## 1.4.3.1 Инструмент для построения персонализированной биомеханической редуцированной модели коленного сустава

В качестве инструмента для разработки персонализированной биомеханической редуцированной модели коленного сустава использовалось свободно-распространяемая библиотека OpenSim [1]. Методы библиотеки позволяют создавать модели скелетно-мышечных структур и проводить динамические симуляции движений. Ниже описаны основные элементы модели в OpenSim, конкретные примеры которых будут приведены в разделе 1.4.3.2:

- Кости. Твёрдые несжимаемые тела, для каждого из которых заданы масса, координаты центра масс, тензор инерции, а также собственная система координат. Визуализация костей осуществляется при помощи отображения поверхностной сетки, предоставленной пользователем. Структура поверхностной сетки не влияет на результаты моделирования.
- 2. Суставы. Ограничения, принятые для задания положения твёрдых тел относительно друг друга. Взаимное положение твёрдых тел в модели OpenSim может быть представлено в виде иерархической структуры, где каждое тело, кроме специального тела ground, имеет своего родителя. Для определения начала координат и ориентации тела относительно тела ground необходимо задание для каждого тела векторов перемещения и матриц поворота относительно системы отсчёта родительского тела. В OpenSim доступен функционал для реализации суставов с различным числом степеней свободы.
- 3. Силы.
  - (a) Мышцы. Структуры, заданные координатами точек крепления к костям, а также промежуточными точками, обеспечивающими корректность геометрии. В мышцах возникают силы, приводящие в движение твёрдые тела. В OpenSim реализованы несколько мышечных моделей типа Хилла, подробное описание которых приведено в [2].
  - (b) Связки. Структуры, заданные координатами точек крепления к костям. В связках возникают силы, приводящие в движение твёрдые тела.
  - (c) Контактные силы. Силы, характеризующие взаимодействие между заданными пользователем контактными поверхностями.
  - (d) Bushing force. Сила, пропорциональная смещению двух систем координат. Ее можно представить как состоящую из 3 линейных и 3 вращательных пружинных амортизаторов, которые действуют вдоль или вокруг осей систем координат.

- 4. Ограничивающие объемы. Элементы, задающие объёмы, в которых не может оказаться мышца или связка во время движения.
- 5. Маркеры. Виртуальные точки, координаты которых заданы в системе отсчёта некоторого тела. Использование маркеров необходимо для проведения экспериментов, масштабирования модели, а также определения координат нужных точек модели в интерфейсе.

#### 1.4.3.2 Базовая модель коленного сустава

При построении персонализированной биомеханической редуцированной модели коленного сустава за основу была взята находящаяся в открытом доступе модель коленного сустава [3], разработанная при помощи платформы OpenSim. Ниже она будет называться "базовой".

Модель состоит из четырех твердых тел (тазовой кости (pelvis), бедренной кости (femur), большой берцовой кости (tibia), надколенника (patella)) и двух суставов: сочленение бедренной кости и большой берцовой кости (тибиофеморальный сустав), а также сочленение бедренной кости и надколенника (пателлофеморальный сустав). Иерархическая структура модели коленного сустава продемонстрирована на рисунке 4.1: корнем дерева является специальное тело ground, вершинами графа (выделены прямоугольниками) – твердые тела в собственных системах координат, ребрами графа – суставы, задающие вектор перемещения и матрицу поворота для перехода от собственной системы координат родительского тела к собственной системе координат дочернего тела.



Рис. 4.1: Представление структуры модели [3] в виде дерева.

Тибиофеморальный сустав представлен суставом с шестью степенями свободы, пателлофеморальный – суставом с одной степенью свободы. Надколенник при сгибании колена движется по заданной траектории, контакт между надколенником и большой берцовой костью отсутствует. Основным предназначением модели [3] является исследование тибиофеморального сустава и оценка возникающих в нем при движении нагрузок. Анализ возможного использования этой модели для исследования движения надколенника, т.е. пателлофеморального сустава, продемонстрировал ряд существенных недостатков, часть из которых проиллюстрирована на рисунках 4.2:

- 1. Наличие у надколенника только одной степени свободы при движении;
- 2. Нереалистичный размер надколенника по отношению к бедренной кости;
- 3. Отсутствие ограничивающих объёмов для структур, влияющих на движение надколенника.



Рис. 4.2: Некоторые недостатки коленной модели [3] для задачи исследования движения надколенника: одна степень свободы движения надколенника, нереалистичное движение надколенника (a), отсутствие ограничивающих объёмов для структур, влияющих на движение надколенника (б), нереалистичный размер надколенника по отношению к бедренной кости (в).

В ходе данной работы модель [3] была преобразована для исследования движения надколенника. Более подробно преобразования описаны в разделе 1.4.3.3.

### 1.4.3.3 Модификация базовой модели

Основной целью модификации базовой модели коленного сустава является получение модели, позволяющей проводить изучение движения надколенника при пассивном сгибании колена методом прямого моделирования.

Набор твердых тел в модифицированной модели коленного сустава совпадает с набором твердых тел в базовой модели. По согласованию с врачами-ортопедами в разрабатываемую модель коленного сустава входят связка надколенника (PT), латеральная коллатеральная связка (LCL), связка подколенной мышцы (PFL), медиальная коллатеральная связка (MCL), задняя крестообразная связка (PCL), передняя крестообразная связка (ACL), косая подколенная связка (CAP), медиальная пателлофеморальная связка (MPFL), медиальная пателлотибиальная связка (MPTL), латеральный ретинакулум (LR).

Все связки, кроме медиальной пателлофеморальной связки (MPFL), медиальной пателлотибиальной связки (MPTL) и латерального ретинакулума (LR) представлены в базовой модели коленного сустава. Связки MPFL, MPTL, LR были добавлены в ходе данной работы. Ниже подробно рассмотрены проведённые модификации базовой модели коленного сустава:

1. Добавление новых степеней свободы.

В базовую модель коленного сустава были добавлены новые возможные направления движения надколенника: смещения и вращения относительно осей x,y,z соответственно. Изменение положения надколенника при сгибании производится под действием сил: растяжения/сжатия мягкотканных стабилизирующих структур, контактного взаимодействия артикуляционных поверхностей, амортизационных сил. Пример данных, описывающих вращение и смещение надколенника во время движения, приведён в исследовании [4]. Графики зависимостей вращения надколенника относительно осей x, y, z и смещения относительно оси у в зависимости от угла сгибания коленного сустава, полученные в результате усреднения соответствующих наборов данных для 8 пациентов, представлены на рисунке 4.3.



Рис. 4.3: Зависимости от угла сгибания коленного сустава [4]: (a) вращения надколенника вокруг оси z (patellar flexion), (б) смещения надколенника вдоль оси у (lateral translation), (в) вращения надколенника вокруг оси у (lateral tilt), (г) вращения надколенника вокруг оси х (lateral rotation).

Рассмотрение зависимостей смещений и вращений надколенника от угла сгиба для различных пациентов (рисунок 4.4) демонстрирует, что для одних траекторий могут быть выявлены общие закономерности (например, для смещения сначала движение в медиальном, а затем в латеральном направлении), для других – индивидуальные особенности в случае каждого пациента, объясняемые формой артикуляционных поверхностей пателлофеморального сустава.



Рис. 4.4: Зависимость смещений и вращений надколенника от угла сгиба для различных пациентов

Учитывая значительные отличия в движениях надколенника по определенным направлениям, трудно выделить объективный критерий корректности его движения в модифицированной модели. На практике контроль за корректностью движения надколенника проводился врачамиортопедами.

2. Масштабирование надколенника.

Для получения реалистичных размеров надколенника было проведено масштабирование поверхностной сетки надколенника с учетом данных о соотношениях между размером надколенника и расстоянии между наружными мыщелками бедренной кости, приведенных в [5]. Коэффициент масштабирования был выбран равным 0.65 по каждой из осей х,у,z. Ранее, в разделе 1.4.3.1, было указано, что изменение поверхностной сетки, соответствующей некоторому твердому телу, влияет только на визуализацию этого тела в графическом интерфейсе. В данной работе масштабированная сетка надколенника была использована для построения контактной поверхности, форма которой непосредственно определяет взаимодействие между твёрдыми телами.

3. Добавление контактных поверхностей.

Для предотвращения взаимного проникновения надколенника и бедренной кости в модель было добавлено контактное взаимодействие между бедренной костью и надколенником. Контактные поверхности бедренной кости (рисунок 4.5) были заимствованы из модели [3]. Контактная поверхность надколенника была построена с использованием открытых библиотек Paraview [6] и Gmsh [7]. Основные этапы построения сетки для контактной поверхности:

- Выделение треугольников поверхностной сетки надколенника, соответствующих области контакта с бедренной костью (в ручном режиме, в интерфейсе программы Paraview).
- Построение "надстройки" заданной высоты над выделенной областью (автоматически, с использованием скрипта Gmsh).
- Проверка правильной ориентации нормалей.

Визуализация полученной контактной поверхности приведена на рисунке 4.5в, поверхностных сеток для надколенника – на рисунке 4.6.



Рис. 4.5: Медиальная и латеральная части контактной поверхности бедренной кости (a,б), контактная поверхность надколенника (в)



Рис. 4.6: Построение контактной поверхности надколенника при помощи Paraview и Gmsh: внутренняя поверхность надколенника (a), надколенник с контактной поверхностью (б), контактная поверхность (в)

4. Добавление нового типа взаимодействия.

Для реализации более реалистичного движения надколенника в модель была добавлена сила, являющаяся аналогом пружинного амортизатора при взаимодействии надколенника и бедренной кости (bushing force). Введенние данного типа взаимодействия позволяет, в частности, отразить в модели упругость контактных поверхностей.

5. Добавление новых мягкотканных стабилизирующих структур.

Медиальная пателлофеморальная связка (MPFL) расположена на внутренней стороне колена и соединяет надколенник с бедренной костью. Медиальная пателлотибиальная связка (MPTL) расположена на внутренней стороне колена и соединяет надколенник с большеберцовой костью. Представление этих связок в модифицированной модели изображено на рисунках 4.7a, б.

Различные данные о значениях коэффициентов жесткости и длине связок MPFL и MPTL в состоянии покоя могут быть найдены в источниках [8], [9], [10]. По согласованию с врачами-ортопедами



Рис. 4.7: Добавление в модель стабилизаторов надколенника: медиальная пателлофеморальная связка (а), медиальная пателлотибиальная связка (б), латеральная поддерживающая связка (в).

значения коэффициентов жесткости для этих связок были приняты равными 4000 из-за анатомической схожести MPFL, MPTL с sMCL (поверхностная часть медиальной коллатеральной связки).

Латеральная поддерживающая связка надколенника (латеральный ретинакулум) расположен на внешней стороне колена и соединяет надколенник с бедренной, малоберцовой и большеберцовой костями. Сложная структура ретинакулума [11] отражена в модели путем представления этой связки в виде четырёх компонент (рисунок 4.7в). На данном этапе исследования предполагается, что каждая из компонент обладает коэффициентом жесткости 1000.

6. Добавление ограничивающих тел.

Задание ограничивающих тел необходимо для предотвращения проникновения мягкотканных стабилизирубщих структур в твёрдые тела при движении. Возможное проникновение связок или мышц в твёрдые тела может существенно повлиять на результаты моделирования, поскольку возникающие в связках и мышцах силы зависят от их относительного удлинения. При отсутствии в модели ограничивающих тел относительная длина связок и мышц может быть рассчитана некорректно. В OpenSim существует возможность задать ограничивающие объёмы в виде примитивов (цилиндров, сфер, эллипсоидов), которые должны максимально точно быть приближены к поверхности твёрдых тел. В модицицированной модели ограничивающие тела были введены для связок MPFL, MPTL, LR. Во всех случаях они представляли из себя эллипсоиды, форма и положение которых были подобраны в ручном режиме в графическом интерфейсе OpenSim. На рисунке 4.8 приведены примеры двух эллипсоидов: эллипсоид на рисунке 4.8a приближает латеральный мыщелок бедренной кости, поэтому служит ограничивающим телом сразу для трех компонент латерального ретинакулума, эллипсоид на рисунке 4.86 служит ограничивающим объёмом для четвертой компоненты латерального ретинакулума, чтобы предотвратить её пересечение с большеберцовой костью.

Чтобы избежать численной неустойчивости при расчёте оптимального положения связки или мышцы на поверхности ограничивающего объёма-эллипсоида, в OpenSim можно выбрать один

из трех алгоритмов для расчёта. В данной работе был использован алгоритм "средней точки", в котором производится поиск плоскости прохождения связки или мышцы путём поиска точки на поверхности эллипсоида, максимально близкой к середине отрезка, соединяющего точки крепления данной мышцы или связки. Данный метод является неустойчивым в случае, если отрезок проходит близко к центру эллипсоида. Эта особенность накладывает ограничения на выбор положения и размеров эллипсоила.



Рис. 4.8: Добавление в модель ограничивающих объемов для компонент латерального ретинакулума: предотвращение пересечения с бедренной костью (a), предотвращение пересечения с большеберцовой костью (б).

# 1.4.4 Выявление влияния различных мягкотканных стабилизирующих структур на движение надколенника

Для выявления влияния различных мягкотканных стабилизирующих структур на движение надколенника было реализовано моделирование пассивного сгибания коленного сустава. Модель, описанная в разделе 1.4.3.3, представлена как система твердых тел, к которым приложены некоторые силы. Положение тел относительно друг друга и системы координат тела ground описывается вектором обобщенных координат  $\bar{q}$ , скорости тел относительно друг друга и системы координат тела ground задаются вектором обобщенных скоростей  $\dot{\bar{q}}$ . Состояние системы в некоторый момент времени t задается системой уравнений в обобщенных координатах. Forward dynamics – инструмент библиотеки OpenSim, позволяющий вычислить, как меняются обобщенные координаты и обобщенные скорости с течением времени в зависимости от приложенных к телам сил и моментов. Воспользовавшись вторым законом Ньютона, получим зависимость ускорений обобщенных координат  $\bar{q}$  в зависимости от сил и крутящих моментов:

$$\ddot{\bar{q}} = [M(\bar{q})]^{-1} \{ \tau + C(\bar{q}, \dot{\bar{q}}) + G(\bar{q}) + F \},\$$

где  $\bar{q}, \dot{\bar{q}}, \ddot{\bar{q}} \in R^{\mathbb{N}}$  - вектор обобщенных координат, вектор обобщенных скоростей и вектор и обобщенных ускорений, соответственно,  $C(\bar{q}, \dot{\bar{q}}) \in R^{\mathbb{N}}$  – вектор Кориолисовых и центростремительных сил,  $G(\bar{q}) \in$   $R^{\mathbb{N}}$ - вектор гравитационных сил,  $M(\bar{q}) \in R^{\mathbb{N} \times \mathbb{N}}$  – матрица масс системы,  $\tau$  – крутящий момент, F – другие силы.

При этом пользователем могут быть заданы следующие параметры: начальное состояние модели, отрезок интегрирования по времени, максимальное число шагов интегрирования, минимальный и максимальный шаг интегрирования, максимальная допустимая ошибка интегрирования, также возможен выбор метода интегрирования. По умолчанию для интегрирования системы используется метод Рунге-Кутты-Мерсона.

После построения модифицированной модели, настройка параметров была проведена таким образом, чтобы получить движение надколенника в норме. Контроль траектории движения осуществлялся врачами-ортопедами. На данном этапе работы были последовательно проведены симуляции движений надколенника при сгибании для случаев:

- 1. Полное отключение связки MPFL;
- 2. Полное отключение связки LR;
- 3. Отключение компонент связки LR с креплением к бедренной кости;
- 4. Отключение компонент связки LR с креплением к берцовой кости.

Результаты моделирования продемонстрировали сходство с реальными ситуациями полной или частичной дисфункцией рассмотренных связок. Наиболее явно его можно наблюдать при рассмотрении латерального смещения надколенника.

# Литература

- Delp SL Anderson FC Arnold AS Loan P Habib A John CT Guendelman E Thelen DG. OpenSim: open-source software to create and analyze dynamic simulations of movement // IEEE Transactions on Biomedical Engineering. - 2007. - Nov. - Vol. 54. - Pp. 1-1.
- [2] 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.
- [3] Schmitz Anne, Piovesan D. Development of an Open-Source, Discrete Element Knee Model // IEEE Transactions on Biomedical Engineering. - 2016. - 06. - Vol. 63. - Pp. 1-1.
- [4] Amis Andrew, Senavongse Wongwit, Bull Anthony. Patellofemoral kinematics during knee flexionextension: An in vitro study // Journal of orthopaedic research : official publication of the Orthopaedic Research Society. - 2006. - 12. - Vol. 24. - Pp. 2201-11.
- [5] THE SHAPE OF PATELLA RELATIVE TO FEMORAL EPICONDYLAR AXIS / K. Osano, R. Nagamine, M. Takayama, M. Kawasaki // Orthopaedic Proceedings. - 2016. - Vol. 98-B, no. SUPP\_9. - Pp. 104-104.
- [6] Ayachit Utkarsh. The ParaView Guide: A Parallel Visualization Application. Clifton Park, NY, USA: Kitware, Inc., 2015.
- [7] Geuzaine Christophe, Remacle Jean-François. Gmsh: A 3-D finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities // International Journal for Numerical Methods in Engineering. 2009. Vol. 79. Pp. 1309 1331.
- [8] Biomechanical Evaluation of the Medial Stabilizers of the Patella / Matthew Laprade, Samantha LaPrade, Zachary Aman et al. // The American Journal of Sports Medicine. — 2018. — 03. — Vol. 46. — P. 036354651875865.
- [9] Medial patellotibial ligament and medial patellomeniscal ligament: anatomy, imaging, biomechanics, and clinical review / Betina Hinckel, Riccardo Gobbi, Camila Kaleka et al. // Knee Surgery, Sports Traumatology, Arthroscopy. - 2017. - 03. - Vol. 26.
- [10] Kim Kwang, Hsu B.S., Woo Savio. Tensile Properties of the Medial Patellofemoral Ligament: The effect of specimen orientation // Journal of Biomechanics. - 2013. - 01. - Vol. 47.

[11] The lateral patellar retinaculum defect: anatomical study using ultrasound / Antoine Moraux, Stefano Bianchi, François Tassery, Thomas Corroller // Skeletal Radiology. — 2019. — 03. — Vol. 48. — Pp. 1–6.
2. Геофизика

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

Внедрение в динамический блок криволинейной вертикальной координаты, огибающей рельеф и ряда горизонтально явных - вертикально неявных схем интегрирования по времени. Испытание блока на идеализированных тестовых задачах. Оценка параллельной эффективности, точности, сравнение с зарубежными аналогами. Реализация обратного каскада кинетической энергии в рамках модели ПЛАВ. Оценка спектра модели

### 2.1.1 Динамический блок модели атмосферы в трехмерных криволинейных координатах, огибающих рельеф

В рамках данной задачи в 2022 г. была реализована версия динамического блока модели негидростатической сжимаемой атмосферы, включающая описание рельефа поверхности Земли и схемы интегрирования по времени с неявностью по вертикали. Для описания взаимодействия атмосферы и орографии внедрена трехмерная криволинейная система координат. По горизонтали используется преобразование координат равноугольная кубическая сфера [1], которое позволяет строить квазиравномерные сетки на сфере. Поверхности уровня вертикальной координаты совпадают с рельефом на нижней границе атмосферы и сглаживаются до горизонтальных к верхней границе атмосферы. Дополнительно, используется приближение мелкой атмосферы, в рамках которого увеличение расстояния до центра сферы по мере подъема от ее поверхности считается пренебрежимо малым (а также вводится ряд упрощений в дифференциальные операторы и метрические слагаемые уравнений динамики [2]). Данный раздел посвящен описанию динамического блока. В разделе 2.1.1.1 приводится решаемая система уравнений, в разделе 2.1.1.2 описывается трехмерная криволинейная система координат, в разделе 2.1.1.3 выведены формулы для тенденций адвективного оператора вектора ветра в используемой системе координат, обосновывается выбор прогностических переменных для описания поля ветра. Раздел 2.1.1.4 посвящен описанию схемы интегрирования по времени с неявностью по вертикали.

#### 2.1.1.1 Уравнения динамики негидростатиеской сжимаемой атмосферы

Динамика негидростатической атмосферы описывается уравнениями Эйлера. В декартовых координатах, в плоскости,касательной к поверхности Земли, эту систему можно записать следующим образом:

$$\frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t} = -\boldsymbol{v} \circ \nabla \boldsymbol{v} - C_p \theta \nabla P + \boldsymbol{F}_{cori} + \boldsymbol{g}, \qquad (1.1a)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = -\boldsymbol{v} \cdot \nabla \theta, \qquad (1.1b)$$

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\boldsymbol{v} \cdot \nabla P - \frac{R}{C_v} P \nabla \cdot \boldsymbol{v}, \qquad (1.1c)$$

где  $\boldsymbol{v} = (u, v, w)^T$  – вектор скорости ветра,  $\boldsymbol{v} \circ \nabla \boldsymbol{v} = u \frac{\partial}{\partial x} \boldsymbol{v} + v \frac{\partial}{\partial y} \boldsymbol{v} + w \frac{\partial}{\partial x} \boldsymbol{v}$ ,  $\theta$  – потенциальная температура,  $P = (p/p_0)^{\kappa}$  – функция давления Экснера,  $\boldsymbol{F}_{cori}$  – сила Кориолиса,  $\boldsymbol{g}$ – вектор ускорения свободного падения.

Выбор прогностических переменных позволяет добиться оптимальных свойств численной дисперсии звуковых, инерционно-гравитационных и Россби волн [3] при использовании разнесенной сетки типа Чарни-Филлипса по вертикали и типа «С» по горизонтали [4]. Вертикальная координата, основанная на высоте над поверхностью, выбрана для упрощения будущего обобщения динамического ядра на случай глубокой атмосферы.

#### 2.1.1.2 Приближение мелкой атмосферы и трехмерные криволинейные координаты

Пусть  $\alpha$ ,  $\beta$  – горизонтальные координаты на сфере – координаты на грани кубсферы (см. Рис. 1.1). Вертикальная координата –  $\eta \in [0,1]$ . Высота над уровнем моря – h, высота гор –  $h_s(x,y)$ . Будем считать, что  $h(\alpha,\beta,\eta) \in [h_s(\alpha,\beta), H]$ , где H – верхняя граница атмосферы. Пример преобразования вертикальной координаты:

$$h(\alpha, \beta, \eta) = h_s(\alpha, \beta) + (H - h_s(\alpha, \beta)) \eta.$$
(1.2)

При использовании такого преобразования нижняя координатная поверхность  $\eta = 0$  совпадает с высотой гор. При увеличении  $\eta$  координатные поверхности сглаживаются до горизонтальных (см. Рис. 1.2).



Рис. 1.1: Пример сетки кубическая сфера



Рис. 1.2: Уровни вертикальной системы координат, огибающей рельеф

В разрабатываемом динамическом ядре используется приближение «мелкая атмосфера», в котором трехмерный вектор координат (α, β, η) преобразуется в область с названием «цилиндр, построенный на сфере»:  $S \times [0, H]$ , где S - сфера. Вертикальная координата фиктивно отщеплена от горизонтальных. Приближение «мелкой атмосферы» пренебрегает увеличением расстояния от данного вертикального уровня до центра сферы при подъеме от ее поверхности.

Положение точки описывается вектором из четырех компонент: (x, y, z, h), где x, y, z - трехмерный вектор, лежащий на сфере S. Преобразование координат задается как

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \\ h \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_{\mathcal{C}}(\alpha, \beta) \\ y_{\mathcal{C}}(\alpha, \beta) \\ z_{\mathcal{C}}(\alpha, \beta) \\ h(\alpha, \beta, \eta) \end{pmatrix} = \mathcal{S}(\alpha, \beta, \eta).$$
(1.3)

Используемое преобразование координат можно представить как произведение вертикального и горизонтального (кубичекая сфера) преобразований:

$$S = \mathcal{HV} \tag{1.4}$$

$$\mathcal{V}\begin{pmatrix}\alpha\\\beta\\\eta\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\alpha\\\beta\\h(\alpha,\beta,\eta)\end{pmatrix}$$
(1.5)

$$\mathcal{H}\begin{pmatrix} \alpha\\ \beta\\ h \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x\\ y\\ z\\ h(\alpha, \beta, \eta) \end{pmatrix}$$
(1.6)

где x, y, z – координаты на сфере, h – высота над уровнем моря.

Матрицы ковариантных векторов для вертикального и горизонтального преобразований будут, соответственно,

$$V = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ h_{\alpha} & h_{\beta} & h_{\eta} \end{pmatrix}, \quad H = \begin{pmatrix} x_{\alpha} & x_{\beta} & 0 \\ y_{\alpha} & y_{\beta} & 0 \\ z_{\alpha} & z_{\beta} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$
 (1.7)

Для полного трехмерного преобразования матрица ковариантных векторов:

$$S = HV = (\mathbf{a}_{\alpha}, \mathbf{a}_{\beta}, \mathbf{a}_{\eta}) = \begin{pmatrix} x_{\alpha} & x_{\beta} & 0\\ y_{\alpha} & y_{\beta} & 0\\ z_{\alpha} & z_{\beta} & 0\\ h_{\alpha} & h_{\beta} & h_{\eta} \end{pmatrix},$$
(1.8)

где вектор  $a_{\eta}$  – чисто вертикальный.

Метрический тензор преобразования  ${\mathcal S}$  задается как

$$Q_S = V^T H^T H V = V^T Q_H V, (1.9)$$

где матрица  $Q_H$  – метрический тензор двумерной кубической сферы:

$$Q_H = \begin{pmatrix} q_{11} & q_{12} & 0\\ q_{12} & q_{22} & 0\\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$
(1.10)

Обратный метрический тензор (контравариантный метрический тензор):

$$Q_S^{-1} = V^{-1} Q_H^{-1} V^{-T} = \begin{pmatrix} q^{11} & q^{12} & q_S^{13} \\ q^{12} & q^{22} & q_S^{23} \\ q_S^{13} & q_S^{23} & q_S^{33} \end{pmatrix},$$
(1.11)

$$q_S^{13} = -\frac{(h_\alpha q^{11} + h_\beta q^{12})}{h_\eta},\tag{1.12}$$

$$q_S^{23} = -\frac{h_\alpha q^{12} + h_\beta q^{22}}{h_n},\tag{1.13}$$

$$q_S^{33} = \frac{h_\alpha (h_\alpha q^{11} + h_\beta q^{12}) + h_\beta (h_\alpha q^{12} + h_\beta q^{22}) + 1}{h_n^2},$$
(1.14)

где  $q^{11}, q^{12}, q^{22}$  – компоненты горизонтального контравариантного метрического тензора.

Контравариантные базисные вектора для мелкой атмосферы:

$$(\mathbf{a}^{\alpha}, \mathbf{a}^{\beta}, \mathbf{a}^{\eta}) = (\mathbf{a}_{\alpha}, \mathbf{a}_{\beta}, \mathbf{a}_{\eta})Q_{S}^{-1} = \begin{pmatrix} x^{\alpha} & x^{\beta} & \frac{h_{\alpha}x^{\alpha} + h_{\beta}x^{\beta}}{h_{\eta}} \\ y^{\alpha} & y^{\beta} & \frac{h_{\alpha}y^{\alpha} + h_{\beta}y^{\beta}}{h_{\eta}} \\ z^{\alpha} & z^{\beta} & \frac{h_{\alpha}z^{\alpha} + h_{\beta}z^{\beta}}{h_{\eta}} \\ 0 & 0 & \frac{1}{h_{\eta}} \end{pmatrix},$$
(1.15)

где  $x^{\alpha}, x^{\beta}, y^{\alpha}, y^{\beta}, z^{\alpha}, z^{\beta}$  – компоненты контравариантных векторов горизонтального преобразования  $\mathcal{H}$ . Важно, что горизонтальные (первые два) контравариантных вектора имеют нулевую четвертую

63

компоненту и совпадают с контравариантными компонентами горизонтального преобразования.

#### 2.1.1.3 Адвективный оператор для контравариантных компонент вектора скорости ветра

Распишем оператор адвекции вектора ветра  $\boldsymbol{v} \circ \nabla \boldsymbol{v}$ , через его контравариантные компоненты  $(v^{\alpha}, v^{\beta}, v^{\eta})$  в трехмерной криволинейной системе координат, описанной в разделе 2.1.1.2:

$$\boldsymbol{v} \circ \nabla \boldsymbol{v} = v^{\alpha} \frac{\partial}{\partial \alpha} (v^{\alpha} \mathbf{a}_{\alpha} + v^{\beta} \mathbf{a}_{\beta} + v^{\eta} \mathbf{a}_{\eta}) + v^{\beta} \frac{\partial}{\partial \beta} (v^{\alpha} \mathbf{a}_{\alpha} + v^{\beta} \mathbf{a}_{\beta} + v^{\eta} \mathbf{a}_{\eta}) + v^{\eta} \frac{\partial}{\partial \eta} (v^{\alpha} \mathbf{a}_{\alpha} + v^{\beta} \mathbf{a}_{\beta} + v^{\eta} \mathbf{a}_{\eta}) =$$

$$= \mathbf{a}_{\alpha} \boldsymbol{v} \cdot \nabla v^{\alpha} + \mathbf{a}_{\beta} \boldsymbol{v} \cdot \nabla v^{\beta} + \mathbf{a}_{\eta} \boldsymbol{v} \cdot \nabla v^{\eta} + v^{\alpha} v^{\alpha} \frac{\partial \mathbf{a}_{\alpha}}{\partial \alpha} + v^{\alpha} v^{\beta} \frac{\partial \mathbf{a}_{\beta}}{\partial \alpha} + v^{\alpha} v^{\eta} \frac{\partial \mathbf{a}_{\eta}}{\partial \alpha} +$$

$$+ v^{\beta} v^{\alpha} \frac{\partial \mathbf{a}_{\alpha}}{\partial \beta} + v^{\beta} v^{\beta} \frac{\partial \mathbf{a}_{\beta}}{\partial \beta} + v^{\beta} v^{\eta} \frac{\partial \mathbf{a}_{\eta}}{\partial \beta} + v^{\eta} v^{\alpha} \frac{\partial \mathbf{a}_{\alpha}}{\partial \eta} + v^{\eta} v^{\beta} \frac{\partial \mathbf{a}_{\beta}}{\partial \eta} + v^{\eta} v^{\eta} \frac{\partial \mathbf{a}_{\eta}}{\partial \eta}, \quad (1.16)$$

где

$$\boldsymbol{v} \cdot \nabla v^{i} = v^{\alpha} \frac{\partial v^{i}}{\partial \alpha} + v^{\beta} \frac{\partial v^{i}}{\partial \beta} + v^{\eta} \frac{\partial v^{i}}{\partial \eta}.$$
(1.17)

Вклад адвективных слагаемых в тенденции контравариантных компонент скорости можно получить из уравнения (1.16), умножив его скалярно на  $\mathbf{a}^i$ . Согласно уравнению (1.8) горизонтальные ковариантные компоненты (первый и второй столбцы) совпадают с ковариантными векторами горизонтального преобразования в первых трех компонентах. Горизонтальные контравариантные вектора имеют нулевую четвертую компоненту (1.15). Следовательно, выражения типа  $\frac{\partial \mathbf{a}_{\xi}}{\partial \zeta} \mathbf{a}^{\chi}$ , где  $\xi, \zeta, \chi \in [\alpha, \beta]$  – символы Кристофеля для двумерной кубической сферы:

$$\frac{\partial \mathbf{a}_{\xi}}{\partial \zeta} \mathbf{a}^{\chi} = \Gamma^{hor,\chi}_{\xi,\zeta}, \quad \xi, \eta, \chi \in [\alpha,\beta].$$
(1.18)

Далее, производная всех трех ковариантных векторов по  $\eta$  дает не 0 только в четвертой компоненте, которая равна нулю в горизонтальных контравариантных векторах, таким образом:

$$\frac{\partial \mathbf{a}_{\xi}}{\partial \eta} \mathbf{a}^{\chi} = 0, \quad \xi, \chi \in [\alpha, \beta].$$
(1.19)

Кроме того, вектор  $a_\eta$  имеет только четвертую ненулевую компоненту, следовательно:

$$\frac{\partial \mathbf{a}_{\eta}}{\partial \xi} \mathbf{a}^{\chi} = 0, \quad \xi, \chi \in [\alpha, \beta].$$
(1.20)

Таким образом, тенденции оператора адвекции для компонент  $v^{\alpha}$ ,  $v^{\beta}$  имеют вид:

$$-\frac{\partial v^{\alpha}}{\partial t} = \left(v^{\alpha}\frac{\partial v^{\alpha}}{\partial \alpha} + v^{\beta}\frac{\partial v^{\alpha}}{\partial x_{\beta}} + v^{\eta}\frac{\partial v^{\alpha}}{\partial \eta}\right) + v^{\alpha}v^{\alpha}\Gamma^{hor\alpha}_{\alpha,\alpha} + 2v^{\alpha}v^{\beta}\Gamma^{hor\alpha}_{\beta,\alpha} + v^{\beta}v^{\beta}\Gamma^{hor\alpha}_{\beta,\beta}, \tag{1.21}$$

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

$$-\frac{\partial v^{\beta}}{\partial t} = \left(v^{\alpha}\frac{\partial v^{\beta}}{\partial \alpha} + v^{\beta}\frac{\partial v^{\beta}}{\partial \beta} + v^{3}\frac{\partial v^{\beta}}{\partial \eta}\right) + v^{\alpha}v^{\alpha}\Gamma^{hor\beta}_{\alpha,\alpha} + 2v^{\alpha}v^{\beta}\Gamma^{hor\beta}_{\beta,\alpha} + v^{\beta}v^{\beta}\Gamma^{hor\beta}_{\beta,\beta}, \tag{1.22}$$

выражения для символов Кристофеля двумерной кубической сферы  $\Gamma^{hor}$  приведены, например, в [5].

Тенденция компоненты  $v^{\eta}$ , в отличие от тенденций горизонтальных компонент, будет включать символы Кристофеля трехмерного преобразования, в которые входят вторые производные орографии, вычислять которые не желательно, из-за шумного характера поля орографии. Решить проблему можно, рассматривая эволюцию истинной вертикальной скорости  $w = v_{\eta}/h_{\eta}$ . В рамках приближения мелкой атмосферы w – скалярное поле, поэтому

$$-\frac{\partial w}{\partial t} = \boldsymbol{v}\nabla w = v^{\alpha}\frac{\partial w}{\partial \alpha} + v^{\beta}\frac{\partial w}{\partial \beta} + v^{\eta}\frac{\partial w}{\partial \eta}.$$
(1.23)

Таким образом, в качестве переменных, описывающих трехмерное поле ветра в системе координат раздела 2.1.1.2 выбраны горизонтальные контравариантные компоненты  $v^{\alpha}$ ,  $v^{\beta}$  и истинная вертикальная скорость w.

#### 2.1.1.4 Схема интегрирования по времени с неявностью по вертикали

В глобальных моделях атмосферы шаг сетки по вертикали гораздо меньше шага по горизонтали. Характерный шаг по вертикали для перспективных моделей – порядка 10 м у поверхности и порядка сотен метров в большей части атмосферы. Горизонтальное разрешение будет величиной порядка единиц километров.

Сжимаемая негидростатическая формулировка уравнений допускает распространение звуковых волн по вертикали. Характерная скорость звука в земной атмосфере – около 300 м/с, таким образом, при использовании полностью явной схемы интегрирования, максимальный шаг по времени согласно условию Куранта, будет ~ 0.1 с. Максимальный шаг по времени можно существенно увеличить, если интегрировать слагаемые, ответственные за вертикальное распространение звуковых волн, неявно. Система уравнений, которую потребуется решать, распадется на независимые системы уравнений для каждого вертикального столба ячеек сетки. Решение таких систем уравнений не оказывает отрицательного влияния на параллельную эффективность, так как в моделях атмосферы применяется декомпозиция области только по горизонтали.

Приведем описание вертикально-неявной схемы интегрирования по времени, реализованной в динамическом блоке. Для простоты будем рассматривать случай декартовой геометрии.

Перепишем систему уравнений (1.1) в виде

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = A_e(\psi) + A_i(\psi), \qquad (1.24)$$

где  $\psi = (\boldsymbol{v}, \theta, P)$  – вектор состояния,  $A_e$  – слагаемые, интегрируемые явно,  $A_i$  – слагаемые, интегрируемые неявно. В «неявную» часть выделяется вертикальная компонента градиента давления и верикальная производная в дивергенции:

$$A_i(u, v, w, \theta, P)^T = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -C_p \theta \frac{\partial P}{\partial z} & 0 & -\frac{R}{C_v} P \frac{\partial w}{\partial z} \end{pmatrix}^T.$$
 (1.25)

Для интегрирования системы в такой форме используются схемы из класса аддитивных методов Рунге-Кутты с двойной таблицей Бутчера. Мы используем схемы 3-го и 4-го порядка из работы [6] и схемы второго порядка из работы [7]. Для A<sub>e</sub> применяется явный метод, для A<sub>i</sub> – диагонально неявный.

На каждой стадии метода Рунге-Кутты требуется решать уравнение вида

$$\psi - \Delta t A_i(\psi) = R, \tag{1.26}$$

где R – вектор правой части. Это уравнение нелинейное, решается методом Ньютона. Матрица Якоби оператора  $A_i$  на k-ой итерации (приближение  $w = w^k$ ,  $P = P^k$ ):

$$J\begin{pmatrix}\delta w\\\delta P\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -C_p\theta\frac{\partial}{\partial z}\\ -\frac{R}{C_v}P^k\frac{\partial}{\partial z} & -\frac{R}{C_v}\frac{\partial w^k}{\partial z} \end{pmatrix}\begin{pmatrix}\delta w\\\delta P\end{pmatrix}.$$
(1.27)

Уравнение вида  $(I - \Delta t J)\delta\psi = R$  сводится к одному уравнению типа Гельмгольца для поправки вертикальной скорости  $\delta w$ . В случае применения пространственной аппроксимации второго порядка для  $\partial/\partial z$  на разнесенной сетке, для каждого вертикального столба ячеек сетки требуется решить трехдиагональную систему уравнений. Для решения нелинейной системы (1.26), как правило, требуется 1-2 итерации решения линеаризованной системы.

#### 2.1.1.5 Численные эксперименты

#### 2.1.1.5.1 Обтекание горы типа Шара

Данный тест был предложен проектом по сравнению динамических блоков моделей атмосферы (DCMIP) в качестве стандартного эксперимента [8]. На планете с радиусом в 500 раз меньше радиуса Земли изначально задано поле ветра типа «твердое вращение» с максимальной скоростью 20 м/с. Поток обтекает особенность рельефа циркулярного типа (высота поверхности зависит только от удаления от центра горы), сечение которой вдоль экватора показано на Рис. 1.3.

Эффекты обтекания рельефа (сжатие воздуха с наветренной стороны, разрежение с подветренной) порождают звуковые волны, а затем формирование квазистационарного гравитационно-волнового ответа на орографию. Поле вертикальной скорости на экваторе через 3600 с моделирования показано на рисунке 1.4. Хорошо различимы два пучка волн с разным волновым числом по вертикали и горизонтали, возникшие в результате взаимодействия потока с огибающей и внутренними колебаниями рельефа.

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



Рис. 1.3: Высота горы типа Шара, сечение вдоль экватора



Рис. 1.4: Поле вертикальной скорости в эксперименте обтекание горы типа Шара через 3600 с. Слева – схема 2-го порядка аппроксимации по вертикали, справа – схема 4-го порядка аппроксимации

На рисунке 1.4 представлено численное решение разработанного динамического блока на разнесенной сетке типа «С» по горизонтали и Чарни-Филлипса по вертикали. По горизонтали используется аппроксимация 4-го порядка точности, по вертикали 2-го и 4-го порядков,  $\Delta x = 333$  м,  $\Delta z = 500$  м. Решение хорошо согласуется с результатами других авторов. Использование схемы 4-го порядка аппроксимации по вертикали приводит к повышению амплитуды волны.

#### 2.1.1.5.2 Бароклинная неустойчивость

Данный эксперимент был предложен в [9] и использовался для тестирования таких моделей атмосферы как ICON [10], MPAS [11], ENDGAME [12] и многих других. Начальные условия эксперимента – поле скорости ветра с двумя струйными течениями в тропосфере Северного и Южного полушарий находится в неустойчивом геострофическом равновесии. Малое возмущение скорости ветра, наложенное в

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



Рис. 1.5: Поле приземного давления (гПа) после 9 дней интегрирования в эксперименте бароклинная неустойчивость. Сверху - численное решение представленного динамического ядра на сетке с горизонтальным разрешением 100 км, снизу – численное решение модели ПЛАВ на сетке аналогичного разрешения.

районе оси струйного течения в Северном полушарии приводит к развитию бароклинной неустойчивости. Возмущения растут в линейном режиме до, примерно, 7-8 дня эксперимента, после чего происходит обрушение волны и переход решения в хаотический режим.

На рисунке 1.5 представлено поле приземного давления после 9 дней моделирования в численном решении разрабатываемого динамического ядра на сетке с разрешением около 100 км по горизонтали и 500 м по вертикали. Для сравнения приводится решение модели ПЛАВ на сетке с аналогичным разрешением. Решения хорошо согласуются. Отметим, что в решении предложенного динамического ядра не наблюдается ложного развития неустойчивости в Южном полушарии из-за эффекта отпечатка сетки. На рисунке 1.6 сравнивается завихренность на уровне 850 гПа после 9 дней интегрирования в численном решении разрабатываемого динамического ядра и модели ПЛАВ. Амплитуда и детализация



Рис. 1.6: Поле завихренности на уровне 850 гПа после 9 дней интегрирования в эксперименте бароклинная неустойчивость. Сверху - численное решение представленного динамического ядра на сетке с горизонтальным разрешением 100 км, снизу – численное решение модели ПЛАВ на сетке аналогичного разрешения.

поля несколько выше в численном решении предложенного динамического блока, что потенциально говорит о более высоком эффективном разрешении по сравнению с моделью ПЛАВ.

#### 2.1.1.6 Сильная масштабируемость программного комплекса динамического ядра

Параллельная эффективность программного комплекса разрабатываемого динамического ядра исследовалась на вычислительной системе Cray XC-40 Главного вычислительного центра Росгидромета. Замеры проводились для двух конфигураций динамического ядра: с разнесением переменных типа «С» по горизонтали и без него. Разнесение переменных по вертикали типа Чарни-Филлипса в обоих случаях, размерность сетки 6 × 512 × 512 × 30 точек (разрешение около 20 км по горизонтали, 30 вертикальных уровней). Результаты представлены на рисунке 1.7.

Конфигурация без разнесения переменных по горизонтали масштабируется в сильном смысле как минимум до 4608 вычислительных ядер, эффективность при этом составляет более 100%. Конфигурация с разнесением переменных по горизонтали масштабируется как минимум до 4000 вычислительных ядер

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



Рис. 1.7: Сильная масштабируемость программного комплекса динамического ядра. Слева - на сетке без разнесения переменных по горизонтали, справа - на сетке с разнесением переменных типа «С». Прямая черная линия – линейной ускорение.

с эффективностью 70%. По сравнению с конфигурацией без разнесения переменных по горизонтали, при использовании разнесенной сетки типа «С» требуются дополнительные интерполяции компонент вектора скорости ветра для перехода между ковариантными и контравариантными компонентами векторов, а также для вычисления силы Кориолиса, адвективных тенденций. Эти факторы приводят к снижению параллельной эффективности относительно конфигурации с неразнесенной сеткой.

#### 2.1.2 Параметризация обратного каскада кинетической энергии

В глобальной модели атмосферы ПЛАВ [13] (разрешение 0,9 × 0,72 градуса по долготе и широте соответственно, 96 вертикальных уровней) применяется фильтрация поля относительной завихренности с использованием бигармонического оператора

$$\tilde{\omega}_k + \nu_k \Delta^2 \tilde{\omega}_k = \omega_k, \tag{1.28}$$

где  $\omega_k$ ,  $\tilde{\omega}_k$  – поле отсносительной завихренности на вертикальном модельном уровне k до и после процедуры фильтрации, соответственно;  $\nu_k$  – коэффициент фильтрации на уровне k;  $\Delta$  – горизонтальный оператор Лапласа. Применение данной процедуры фильтрации приводит к диссипации кинетической энергии в модели.

Для компенсации потери кинетической энергии, а также учета неопределенности, возникающей изза невозможности воспроизвести обратный каскад кинетической энергии из неразрешаемых сеткой масштабов, реализована стохастическая параметризация обратного перераспределения кинетической

70

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



Рис. 1.8: Спектр кинетической энергии модели ПЛАВ для контрольного эксперимента (красный) и эксперимента со стохастической параметризацией обратного каскада кинетической энергии (синий) на уровне 500 гПа для прогноза на 120 часов, а также теоретическая асимптотическая оценка наклона кривой спектра (зеленый)

энергии. Идея данной параметризации заключается в том, чтобы добавлять в поле относительной завихренности стохастическую добавку, компенсирующую потерю кинетической энергии. Подобная стохастическая параметризация была реализована для спектральной модели Европейского центра среднесрочных прогнозов погоды [14]. Наш алгоритм основан на работе [15].

Для формирования такой стохастической добавки генерируется двумерное случайное поле  $\xi_{stoch}$ , которое в каждой точке имеет распределение  $\xi_{i,j} \sim \mathcal{N}(0, s_{i,j}^{-1})$ , где i, j – индексы горизонтальных точек,  $s_{i,j}$  - площадь расчетной ячейки. Случайное поле  $\xi$  используется для генерации случайной функции тока  $\psi = D \circ \xi$ , где  $D_k = \sqrt{\nu_k(\nabla \tilde{\omega}_k \circ \nabla \tilde{\omega}_k)}$ ,  $\circ$  – операция поэлементного умножения векторов,  $\nabla$  – горизонтальный оператор градиента. Далее к полученной функции тока  $\psi$  применяется процедура бигармонической фильтрации для задания масштаба пространственной корреляции данного поля

$$\hat{\psi}_k + \mu_k \Delta^2 \hat{\psi}_k = \psi_k, \tag{1.29}$$

где  $\mu_k$  – коэффициент фильтрации на уровне k, который определяет характерный пространственный масштаб корреляции на данном уровне. Случайная добавка к полю относительной завихренности получается как

$$\hat{\omega}_k = -\Delta \hat{\psi}_k. \tag{1.30}$$

В итоге поле относительной завихренности модифицируется следующим образом

$$\omega_k = \tilde{\omega}_k - \alpha_k \frac{(\nabla \omega_k, \nabla \omega_k)}{(\hat{\omega}_k, \hat{\psi}_k)} \hat{\omega}_k, \qquad (1.31)$$

где коэффициент  $\alpha_k$  – настроечный параметр, который позволяет регулировать долю возвращаемой кинетической энергии. Отметим, что случайное поле скоррелировано только по пространству, а корреляция по времени отсутствует.

Описанный выше алгоритм реализован в глобальной модели атмосферы ПЛАВ. Была проведена настройка коэффициента фильтрации и коэффициента, регулирующего долю возвращаемой кинетической энергии. Выполнены численные эксперименты для исследования влияния указанных коэффициентов на спектр кинетической энергии модели.

В результате анализа спектра кинетической энергии модели атмосферы ПЛАВ выбраны значения коэффициента фильтрации  $\nu = 2$  и коэффициента, регулирующего долю возвращаемой кинетической энергии,  $\alpha = 2$ , эти значения одинаковы для всех вертикальных уровней модели. Рисунок 1.8 показывает заметное увеличение кинетической энергии на масштабах от 400 до 2000 км (волновые числа от 20 до 100; шаг сетки – около 80 км). Аналогично работе [16], применение параметризации обратного перераспределения кинетической энергии позволяет приблизить спектр кинетической энергии модели ПЛАВ к зависимости  $k^{-5/3}$ , где k – волновое число.

## Литература

- Rančić M., Purser R. J., Mesinger F. A global shallow-water model using an expanded spherical cube: Gnomonic versus conformal coordinates // Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society. — 1996. — Vol. 122, no. 532. — Pp. 959-982. — URL: https://rmets.onlinelibrary.wiley.com/doi/ abs/10.1002/qj.49712253209.
- [2] Holton J. R. An introduction to dynamic meteorology. Fourth edition. Elsevier Academic Press, 2004. — Vol. 88 of Int. Geophys. Ser.
- [3] Thuburn John, Woollings T.J. Vertical discretizations for compressible Euler equation atmospheric models giving optimal representation of normal modes // Journal of Computational Physics. 2005.
   03. Vol. 203. Pp. 386-404.
- [4] Arakawa A, Lamb V. Computational design of the basic dynamical processes of the UCLA general circulation model // Methods of Computational Physics. New York: Academic Press, 1977. Vol. 17. Pp. 173–265.
- [5] Ullrich Paul A., Jablonowski Christiane, van Leer Bram. High-order finite-volume methods for the shallow-water equations on the sphere // Journal of Computational Physics. 2010. Vol. 229, no. 17. Pp. 6104 6134. URL: http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999110002317.
- [6] Ascher Uri M., Ruuth Steven J., Spiteri Raymond J. Implicit-Explicit Runge-Kutta Methods for Time-Dependent Partial Differential Equations // Appl. Numer. Math. — 1997. — Vol. 25, no. 2-3. — P. 151-167. — URL: https://doi.org/10.1016/S0168-9274(97)00056-1.
- [7] Efficient IMEX Runge-Kutta methods for nonhydrostatic dynamics / A Steyer, C. J Vogl, M. Taylor, O. Guba // ArXiv. - 2019.
- [8] Dynamical Core Model Intercomparison Project (DCMIP) Test Case Document / P. A. Ullrich,
   C. Jablonowski, J. Kent et al. 2012. URL: http://earthsystemcog.org/site\_media/docs/
   DCMIP-TestCaseDocument\_v1.7.pdf.
- [9] 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.

[10] 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.

74

- [11] A Multiscale Nonhydrostatic Atmospheric Model Using Centroidal Voronoi Tesselations and C-Grid Staggering / W. C. Skamarock, J. B. Klemp, M. G. Duda et al. // Mon. Wea. Rev. - 2012. - Vol. 140. - Pp. 3090-3105.
- [12] A new dynamical core for the Met Office's global and regional modelling of the atmosphere / T. Davies, M. Cullen, A. Malcolm et al. // Quart. J.Roy. Met.Soc. - 2005. - Vol. 131. - Pp. 1759-1782.
- [13] Многомасштабная глобальная модель атмосферы ПЛАВ: результаты среднесрочных прогнозов погоды / М.А. Толстых, Р.Ю. Фадеев, В.В. Шашкин и др. // Метеорология и Гидрология. — 2018. — Т. 11. — С. 90–99.
- [14] A Spectral Stochastic Kinetic Energy Backscatter Scheme and Its Impact on Flow-Dependent Predictability in the ECMWF Ensemble Prediction System / J. Berner, G. J. Shutts, M. Leutbecher, T. N. Palmer // Journal of the Atmospheric Sciences. - 2009. - Vol. 66, no. 3. - Pp. 603-626.
- [15] Perezhogin Pavel A. Testing of kinetic energy backscatter parameterizations in the NEMO ocean model // Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. - 2020. - Vol. 35, no. 2. -Pp. 69-82.
- [16] Wedi Nils P. Increasing horizontal resolution in numerical weather prediction and climate simulations: illusion or panacea? // Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences. - 2014. - Vol. 372, no. 2018. - P. 20130289.

# Задача 2.2. Развитие вычислительных технологий для моделирования Мирового океана.

Реализация возможности расчета динамики модели океана как в z, так и в z\* системе координат. Подключение модели термодинамики морского льда. Разработка программной реализации динамики океана, блока переноса трассеров на графических процессорах с использованием гибридного подхода MPI/OpenMP/CUDA. Тестирование программной реализации. Реализация в модели океана нового пакета физических параметризаций различной вычислительной сложности, в частности, крупномасштабной турбулентности и конвекции. Проведение численных экспериментов с новой версией модели океана по протоколу OMIP. Сравнение с результата моделирования с данными наблюдений и других моделей Мирового океана

## 2.2.1 Реализация возможности расчета динамики модели океана как в z, так и в z\* системе координат. Подключение модели термодинамики морского льда

Реализована возможность выполнять расчет динамики океана, используя как z-вертикальные координаты, так и координату  $z^*$ .

Уравнения динамики океана при использовании вертикальной координаты  $z^*$  содержат как общие со случаем *z*-координат слагаемые, так и отличные. Ниже приведены уравнения динамики горизонтальных компонент импульса океана при использовании обобщенной вертикальной координаты, скобками выделены слагаемые, отличающиеся от случая регулярной *z*-координаты:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{u}{e_3} \frac{\partial e_3}{\partial t} = + \left( f + \frac{1}{e_1 e_2} \left( v \frac{\partial e_2}{\partial i} - u \frac{\partial e_1}{\partial j} \right) \right) v$$

$$- \frac{1}{e_1 e_2 e_3} \left( \frac{\partial (e_2 e_3 u u)}{\partial i} + \frac{\partial (e_1 e_3 v u)}{\partial j} \right) - \frac{1}{e_3} \frac{\partial (\omega u)}{\partial k}$$

$$- \frac{1}{e_1} \frac{\partial}{\partial i} \left( \frac{p_s + p_h}{\rho_o} \right) + g \frac{\rho}{\rho_o} \sigma_1 + D_u^{\mathrm{U}} + F_u^{\mathrm{U}},$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{v}{e_3} \frac{\partial e_3}{\partial t} = - \left( f + \frac{1}{e_1 e_2} \left( v \frac{\partial e_2}{\partial i} - u \frac{\partial e_1}{\partial j} \right) \right) u$$

$$- \frac{1}{e_1 e_2 e_3} \left( \frac{\partial (e_2 e_3 u v)}{\partial i} + \frac{\partial (e_1 e_3 v v)}{\partial j} \right) - \frac{1}{e_3} \frac{\partial (\omega v)}{\partial k}$$

$$- \frac{1}{e_2} \frac{\partial}{\partial j} \left( \frac{p_s + p_h}{\rho_o} \right) + g \frac{\rho}{\rho_o} \sigma_2 + D_v^{\mathrm{U}} + F_v^{\mathrm{U}},$$
(2.1)

где u, v – компоненты скорости течения вдоль горизонтальных осей сетки 1 и 2, координаты точек по осям этих сеток не зависят от положения вдоль оси 3. При использовании вертикальной координаты  $z^*$  направление оси 3 близко к вертикальному. Символами e1, e2, e3 обозначены длины координатных векторов, f – парметр Кориолиса,  $\omega$  – компонента скорости вдоль оси 3, g - ускорение свободного падения,  $\rho$  – аномалия плотности,  $\rho_0$  – характерное значение плотности (для приближения гидростатики),  $\sigma_1, \sigma_2$  – проекции наклона вертикальной оси на ось 1 и 2 соответственно,  $p_s, p_h$  – давления, связанные с аномалией плотности и аномалией уровня соответственно,  $D_{u,v}^U, F_{u,v}^U$  – силы вертикального и горизонтального перемешивания вдоль осей 1 и 2.

Реализован расчет измененного уравнения неразрывности

$$\frac{\partial e_3}{\partial t} + e_3 \chi + \frac{\partial \omega}{\partial s} = 0 \quad , \quad \chi = \frac{1}{e_1 e_2 e_3} \left[ \frac{\partial \left( e_2 e_3 u \right)}{\partial i} + \frac{\partial \left( e_1 e_3 v \right)}{\partial j} \right], \tag{2.2}$$

координат вертикальных уровней, длин вертикальных координатных векторов и их производных по времени на основе формулы положения уровней:

$$z^{*}(i,j,t) = H(i,j) * \frac{z - \eta(i,j,t)}{H(i,j) + \eta(i,j,t)}$$
(2.3)

В расчетах величин по формулам 2.2 и 2.3 использовано соотношение с вертикальной скоростью *w* (поперек поверхностей постоянного геопотенциала)

$$\omega = w - e_3 \frac{\partial z}{\partial t} - \sigma_1 u - \sigma_2 v \tag{2.4}$$

для постановки граничных условий на  $\omega$  и кинематического условия на  $\frac{\partial \eta}{\partial t}$ .

При расчете с использованием вертикальной координаты *z* используются более простые структуры данных, учитывающие одинаковые значения глубины уровней для всех вертикальных столбцов модели.

Вычислительные алгоритмы используют более простую структуру данных для более эффективного доступа к памяти и увеличения производительности расчета.

Помимо возможности расчета на сетке  $z^*$  и на сетке z с эффективным использованием структуры данных, реализована возможность выполнить расчет на регулярной вертикальной сетке z, используя при этом структуры данных и алгоритмы расчетов такие же, как и в случае расчета на сетке  $z^*$ . Отличие между расчетом в этом режиме и на сетке  $z^*$  состоит только в использовании другого алгоритма расчета глубины вертикальных уровней. Расчет получается менее эффективным, чем при использовании обычного режима для сетки z, и используется в качестве инструмента верификации новых алгоритмов модели.

Для верификации работы модели с использованием координат  $z^*$  были выполнены расчеты 1 года динамики океана в постановке, аналогичной MIT GCM tutorial\_global\_oce\_latlon [1], на сетке размером  $180 \times 90 \times 15$  ячеек с использованием вертикальных координат z и координат  $z^*$ . На рисунках 2.1 и 2.2 приводятся результаты расчета модели для уровней глубин 28.5 м и 1893.3 м.

Результаты расчета с использованием координат  $z^*$  отличаются от результатов на сетке z не сильно. Разница результатов приведена на рисунках 2.3 и 2.4. В случае более высокого вертикального разрешения модели и приливного форсинга в реузльтатах расчета ожидается более существенная разница.

Была подключена библиотека термодинамики льда, разрабатываемая в рамках данного проекта Петровым С. С., Зюзиным В. К. и Яковлевым Н. Г. в Институте вычислительной математики им. Г.И.Марчука РАН, см. раздел 2.4. Реализована модель образования льда из переохлажденной жидкости [2], используемая для инициализации столба льда алгоритмом библиотеки.



РИС. 2.1: Результаты расчета модели, уровень глубины 28.5 м



Рис. 2.2: Результаты расчета модели, уровень глубины 1893.3 м



Рис. 2.3: Разница результатов расчета модели для случае<br/>в $z^{\ast}$ иz,уровень глубины 28.5 м



Рис. 2.4: Разница результатов расчета модели для случае<br/>в $z^{\ast}$ иz,уровень глубины 1893.3 м

## 2.2.2 Разработка программной реализации динамики океана, блока переноса трассеров на графических процессорах с использованием гибридного подхода MPI/OpenMP/CUDA. Тестирование программной реализации

В рамках проекта разработана программная реализация динамики океана и блока переноса трассеров на основе гибридного MPI-OpenMP-CUDA подхода, допускающая возможность проведения расчетов на суперкомпьютерах, включающих графические процессоры (GPU, Graphics Processing Unit). Библиотека MPI используется для декомпозиции вычислительной области и организации обменов данными между MPI-процессами, каждый из которых может выполняться как на ядрах центрального процессора, так и на графическом ускорителе. Для выполнения обменов данными между параллельными процессами вычислительная область дополняется фиктивными узлами, содержащими после синхронизации значения с соседних процессов. Ширина фиктивной области, как правило, определяется шириной шаблона дискретизации по пространству. Для реализации, в частности, итерационных алгоритмов допускается увеличение числа фиктивных узлов, что позволяет уменьшить число точек синхронизации (и, как следствие, накладных расходов на пересылку сообщений) за счет увеличения объема пересылаемых данных и дополнительных вычислений. Использование гибридного подхода MPI-OpenMP улучшает внутриузловое масштабирование программной реализации и эффективность счета на процессорах с NUMA архитектурой. Асинхронные функции MPI и возможность выделения нескольких нитей OpenMP на один MPI процесс также позволяют перекрыть выполнение вычислений и операций обменов данными между параллельными процессами. Реализованные вычислительные и коммуникационные процедуры модели поддерживают выполнение в параллельной области OpenMP, где используется поддержка "orphan" директив в интерфейсе OpenMP [3] – допускается, что директивы синхронизации и распределения работы могут не входить в лексический контекст параллельной области. Такой подход позволяет минимизировать число точек синхронизации нитей.

Программная реализация на графических процессорах предполагает наличие двух уровней параллелизма в программе: распределение данных между отдельными графическими процессорами и внутренний параллелизм отдельных устройств, состоящих из большого числа вычислительных ядер. Для вычислений на графических процессорах применяется технология программирования CUDA (Compute Unified Device Architecture), см. [4]. В рамках CUDA используется следующая структура: нити группируются в блоки, которые составляют вычислительную сетку, что позволяет распределять расчеты между всей совокупностью нитей, при этом сам механизм соответствия элемента-нити конкретному вычислительному ядру на уровне программы не требует явного описания. Дискретные аппроксимации операторов описываются в виде функций, где каждая нить вычисляет значение сеточного оператора в отдельных узлах или наборе узлов сетки. Эффективность выполнения расчетов на графических процессорах снижается при большом числе точек синхронизации, что сокращает вычисления, которые можно провести с данными в "быстрой" памяти устройства (регистры, кэш, разделяемая между нитями память). Поэтому в целях оптимизации вычислений реализация нескольких сеточных операторов по возможности объединяется в одну функцию, выполняемую на графическом процессоре. Отметим, что операции копирования данных между оперативной памятью и памятью графического ускорителя могут значительно замедлять расчеты. По этой причине в программной реализации практически все расчеты, в том числе с данными небольшой размерности, выполняются на графическом процессоре, а центральный процессор используется лишь для организации вычислений, обменов данными между MPI процессами, операций ввода-вывода и т.п.

В программной реализации разделены "высокоуровневые" компоненты модели (алгоритм интегрирования уравнений по времени, итерационные алгоритмы решения систем линейных уравнений и т.д.) от "низкоуровневых" (сеточные операторы, векторные и матричные операции), реализация которых отличается для вычислительных систем различной архитектуры (например, для центральных процессоров и графических ускорителей). Данный подход упрощает возможность последующей оптимизации программного кода под конкретные системы, в том числе для разных поколений графических ускорителей. Подобная архитектура рассматривается, в частности, при разработке следующего поколения океанической модели NEMO [5].

Программная реализация на основе гибридной технологии MPI-OpenMP-CUDA для вычислительных систем, включающих графические ускорители, выполнена для новой версии модели динамики океана в z системе координат, разработанной и верифицированной на прошлом этапе выполнения проекта. В модели динамики рассматривается примитивная система трехмерных уравнений крупномасштабной гидротермодинамики океана в приближении Буссинеска и гидростатики, см. [6]. Уравнения включают параметризации горизонтального подсеточного переноса в виде операторов диффузии (с постоянными или зависящими от широты коэффициентами) и вертикального перемешивания, записанного с помощью градиентного приближения. Система уравнений дополняется упрощенным уравнением состояния морской воды [7]. На поверхности океана задано линеаризованное кинематическое условие для вертикальной компоненты скорости. Численная модель реализована в криволинейной ортогональной системе координат на сфере. Используются как регулярные широтно-долготные сетки, так и сетки с несимметрично-смещенными полюсами. В частности, рассматриваются двухполюсные сетки с произвольным расположением полюсов, полученные с помощью конформных отображений [8], а также сетки на основе полуаналитического преобразования [9], сохраняющие симметричность координатных линий относительно экватора в низких широтах.

Конечно-разностные схемы второго порядка точности используются для пространственной аппроксимации уравнений на сетке "C" по классификации Аракавы. Пространственная аппроксимация обеспечивает выполнение законов сохранения для первых и вторых моментов дискретной системы. Метод интегрирования уравнений по времени основан на полунеявном подходе, в котором баротропный градиент давления и вертикальная диффузия аппроксимируются неявной схемой, а остальные члены (за исключением диссипативных) рассчитываются явной схемой Адамса-Башфорта третьего порядка точности. Для решения эллиптического уравнения относительно отклонения уровня океана от невозмущенной поверхности используется предобусловленный стабилизированный метод бисопряженных градиентов. В качестве предобуславливателя рассматривается несколько итераций метода Якоби, что представляется достаточным в силу диагонального преобладания матрицы системы уравнений.

В блоке переноса трассеров реализован набор схем для аппроксимации двумерного и трехмерного уравнений переноса и диффузии, включающий центрально-разностные схемы второго порядка точности в дивергентной и кососимметричной форме, а также монотонные схемы до третьего порядка точности [10–12].

Для верификации программной реализации на основе MPI-OpenMP-CUDA рассматривались численные эксперименты по воспроизведению переноса скаляра в декартовой системе координат и в криволинейной системе координат на сфере [13]. С помощью набора тестов, предложенных в [13, 14], показано выполнение геострофического баланса в дискретной системе уравнений динамики, в том числе в расчетах на графических процессорах.

Для оценки эффективности и масштабируемости программной реализации, времени счета модели на графических ускорителях проведены вычислительные эксперименты на суперкомпьютере СКЦ МГУ "Ломоносов-2" (Nvidia Tesla K40, Nvidia Tesla P100, Nvidia Tesla V100), и кластере ЦКП "Центр данных ДВО РАН" (Nvidia Tesla A100). На рисунке 2.5 приведено ускорение алгоритма трехмерного переноса примеси при явной аппроксимации диффузионных слагаемых на графических ускорителях, по сравнению с временем счета на центральном процессоре, в зависимости от размерности вычислительной сетки. Отметим, что для двумерного переноса на сетках высокого разрешения удается достичь ускорения до 40 раз, по сравнению с временем выполнения расчетов на одном ядре центрального процессора.

Рассматривалась возможность оптимизации вычислений за счет явного использования разделяемой между нитями памяти (shared memory) в функциях CUDA при реализации различных разностных схем. Показано, что данная оптимизация позволяет ускорить расчет двумерного переноса на процессорах Nvidia Tesla P100 архитектуры Pascal (см. рис. 2.6, слева), тогда как на графических ускорителях последних поколений (V100, A100), напротив, может приводить к увеличению времени выполнения вычислений, в особенности для реализации трехмерного оператора переноса (рис. 2.6, справа). Отметим, что использование разделяемой памяти, в частности, при реализации сеточных операторов усложняет разработку и отладку программного кода для графических ускорителей.

Для блока динамики при шаге сетки в 0.5 градуса и использовании 80 уровней по вертикали ускорение на архитектуре Pascal и Volta, по сравнению с расчетами на одном 14-ядерном процессоре (Intel Xeon E5-2697 v3), составляло 5 и 10 раз соответственно.

Для оценки возможности дальнейшей оптимизации программной реализации динамики океана для архитектуры GPU изучалась возможность расчета переноса примеси с использованием половинной точности (FP16), арифметические операции в которой поддерживаются на аппаратном уровне в современных графических ускорителях. Показано [15], что результаты численного моделирования переноса



РИС. 2.5: Ускорение реализации трехмерного переноса трассера на графических процессорах, по сравнению с выполнением вычислений на центральном процессоре.



Рис. 2.6: Отношение времени счета при использовании разделяемой между нитями памяти (shared memory) в функциях CUDA к времени счета для версии программного кода с использованием глобальной памяти. Приведена оценка для двумерного переноса трассера на GPU архитектуры Pascal (слева) и для трехмерного переноса трассера на процессоре Nvidia Tesla A100 (справа) при использовании различных схем дискретизации уравнения.

пассивной примеси в турбулентном течении Куэтта в FP16 (первые и вторые моменты гидродинамических полей: дисперсия, поток концентрации скаляра и вертикальное распределение концентрации примеси) значимым образом не отличаются от результатов, полученных в расчетах с одинарной точности (FP32), при условии использования алгоритмов компенсационного суммирования, например, алгоритма Кэхэна. В сравнении с одинарной точностью время вычислений в FP16 на графических ускорителях уменьшается вплоть до 1.5 раз (рис. 2.7а), время MPI обменов и накладных расходов на подготовку сообщений уменьшается вплоть до 1.6 раз (рис. 2.7b) за счет уменьшения объема пересылаемых данных.



РИС. 2.7: Ускорение расчетов переноса пассивной примеси и MPI обменов при использовании полуточности для хранения переменных и выполнения вычислений, по сравнению с одинарной точностью.

Планируется, что на следующем этапе выполнения проекта разработанная модель динамики океана для массивно-параллельных вычислительных систем, включающих графические ускорители, будет дополнена реализацией набора физических параметризаций, модели морского льда и блоком расчета поверхностных потоков.

## 2.2.3 Реализация в модели океана нового пакета физических параметризаций различной вычислительной сложности, в частности, крупномасштабной турбулентности и конвекции

В развиваемой в рамках проекта модели Мирового океана реализован набор физических параметризаций, который включает схемы вертикального перемешивания при устойчивой стратификации и конвекции, блок приземного слоя для расчета потоков импульса и тепла над морской поверхностью, параметризации горизонтального подсеточного переноса и крупномасштабной турбулентности. Данный набор параметризаций, имеющих различную вычислительную сложность, позволит настраивать конфигурации модели общей циркуляции океана в зависимости от пространственного разрешения и постановки экспериментов.

Для параметризации вертикального перемешивания на прошлом этапе выполнения проекта в модели были реализованы замыкания, основанные на градиентном приближении: вычислительно простые схемы первого порядка и двухпараметрические модели, в которых решаются прогностические уравнения для определения кинетической энергии турбулентности и скорости ее диссипации, а коэффициенты диффузии рассчитываются из соотношений подобия. Схемы первого порядка включают эмпирические замыкания [16, 17], в которых используются постоянные коэффициенты турбулентной вязкости при нейтральной стратификации и определяются поправки на устойчивость среды в виде зависимостей от градиентного числа Ричардсона. В модели океана также реализовано замыкание первого порядка, полученное из локального обобщения теории подобия Монина-Обухова на случай непостоянных по высоте потоков, которое (см. [18] и отчет за 2021 г.) аппроксимирует стационарные решения двухпараметрического замыкания. Для случая устойчивой стратификации двухпараметрические замыкания включают функции устойчивости, согласованными с замыканиями второго порядка, допускающими поддержание турбулентного перемешивания при любой устойчивости [19–21].

Для верного воспроизведения конвективного режима схемы вертикального перемешивания были дополнены возможностью учета противоградиентной поправки к турбулентным потокам, которая позволяет учесть процессы нелокального переноса [22]. В двухпараметрической модели были реализованы функции устойчивости [23, 24], учитывающие распределение третьих моментов и корреляций градиента давления и температуры по данными вихреразрешающего моделирования конвективного пограничного слоя. Реализованные параметризации вертикального перемешивания позволяют воспроизвести заглубление перемешанного слоя, согласованное с данными лабораторных экспериментов [25], для случая проникающей конвекции с предписанным потоком плавучести на поверхности (рис. 2.8, слева). При расчете растущего конвективно-сдвигового пограничного слоя получено хорошее согласие с данными вихреразрешающего моделирования для вертикального распределения потока тепла (рис. 2.8, справа).

Для воспроизведения конвективного перемешивания при использовании, в частности, эмпирических схем первого порядка [16, 17] в модели океана реализован алгоритм мгновенного конвективного приспособления, а также возможность задания постоянных коэффициентов диффузии в случае неустойчивого распределения плотности.

В модели реализован набор параметризаций приземного слоя для расчета поверхностных потоков импульса, явного и скрытого тепла. Используются как известные универсальные функции Бусинджера-Дайера [27], так и функции, построенные по данным измерений в рамках проекта SHEBA (Surface Heat Budget of the Arctic Ocean), см., например, [28, 29]. Для асимптотического описания режима свободной конвекции используются поправки, предложенные в работе [30], что позволяет избежать занижения



Рис. 2.8: Толщина перемешанного слоя в эксперименте по воспроизведению проникающей конвекции (слева) и распределение потока тепла для растущего конвективно-сдвигового пограничного слоя (справа). Черная линия — результаты расчета с помощью реализованной схемы вертикального перемешивания, красная линия — данные вихреразрешающего моделирования, синяя линия — аналитическая оценка [26] толщины конвективного пограничного слоя, не учитывающая вовлечение.

турбулентных потоков при малых скоростях ветра. Для задания аэродинамической шероховатости водной поверхности используется дополнение формулы Чарнока [31], учитывающая, что морская поверхность является не полностью шероховатой, а термическая шероховатость оценивается согласно работе [30].

Для параметризации горизонтального переноса в уравнениях движения и переноса трассеров используются операторы диффузии с постоянными или зависящими от пространственных координат коэффициентами. Помимо возможности задания эмпирических и постоянных по времени коэффициентов, в модели океана реализована модель Смагоринского [32] для двумерной жидкости, в которой предполагается выполнение локального баланса сдвиговой генерации подсеточной кинетической энергии турбулентных пульсаций и скорости ее диссипации, а масштаб длины (масштаб фильтра) определяется локальным сеточным разрешением. Операторы диффузии второго порядка могут быть также дополнены бигармоническим оператором, который более эффективно подавляет высокочастотные гармоники и в меньшей степени влияет на крупномасштабную компоненту решения.

Реализованы алгоритмы изонейтральной диффузии трасеров на основе поворота оси симметрии трансверсально-изотропного тензора диффузии к направлению градиента плотности [33]. Использование изонейтральной диффузии уменьшает перенос трасеров поперек изопикн, что лучше согласуется с данными наблюдений.

Для уменьшения избыточного наклона изонейтральных поверхностей реализована параметризация вихревого переноса трасеров [34]. Использование данного механизма делает вычислительный алгортим более устойчивым и позволяет лучше воспроизводить субантарктическую динамику.

## 2.2.4 Проведение численных экспериментов с новой версией модели океана по протоколу ОМІР. Сравнение результата моделирования с данными наблюдений и других моделей Мирового океана

Выполнен расчет по протоколу ОМІР на 1 цикл (50 лет).

Приводятся средние месячные поля температуры и солености для июля на горизонтах 30 м и 1500 м, полученных в результате расчетов развиваемой модели – на рис. 2.9, взятых из атласа климатологические средние значения температуры [35] и солености [36] – на рис. 2.10, и полученных в результате расчета текущей версии модели океана Земной системы ИВМ РАН по протоколу ОМІР – на рис. 2.11.



Рис. 2.9: Результаты расчета модели. Сверху - температура, снизу - соленость. Слева - глубина 30 м, справа - глубина 1500 м



Рис. 2.10: Климатологические средние. Сверху - температура, снизу - соленость. Слева - глубина 30 м, справа - 1500 м



Рис. 2.11: Результаты расчета текущей версии модели Земной системы ИВМ РАН. Сверху - температура, снизу - соленость. Слева - глубина 30 м, справа - 1500 м

## Литература

- [1] Adcroft Alistair et al. MITgcm User Manual. URL: https://doi.org/10.5281/zenodo.1409237 (online; accessed: 2022-12-04).
- Mellor George L, Kantha Lakshmi. An ice-ocean coupled model // Journal of Geophysical Research: Oceans. - 1989. - Vol. 94, no. C8. - Pp. 10937-10954.
- [3] Chapman B., Jost G., van der Pas R. Using OpenMP. Portable shared memory parallel programming.
   Cambridge: MIT Press, 2008. P. 378.
- [4] Параллельные вычисления на GPU. Архитектура и программная модель CUDA: учебное пособие / А.В. Боресков, А.А. Харламов, Н.Д. Марковский et al. — М.: Изд-во Московского университета, 2012. — Р. 336.
- [5] Portable multi- and many-core performance for finite-difference or finite-element codes application to the free-surface component of NEMO (NEMOLite2D 1.0) / A. R. Porter, J. Appleyard, M. Ashworth et al. // Geosci. Model Dev. – 2018. – Vol. 11, no. 8. – Pp. 3447–3464.
- [6] Математическое моделирование Земной системы / Е.М. Володин, В.Я. Галин, А.С. Грицун et al. — М.: МАКС Пресс, 2016. — Р. 328.
- [7] 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.
- [8] Murray R.J. Explicit generation of orthogonal grids for ocean models // J. Comp. Phys. 1996. Vol. 126, no. 2. P. 251-273.
- [9] Madec G., Imbard M. A global ocean mesh to overcome the North Pole singularity // Climate Dynamics.
   1996. Vol. 12, no. 6. Pp. 381–388.
- [10] Holland W.R., Chow J.C. and Bryan F.O. Application of a Third-Order Upwind Scheme in the NCAR Ocean Model // J. Climate. - 1998. - Vol. 11, no. 6. - Pp. 1487-1493.
- [11] Leveque R.J. High-Resolution Conservative Algorithms for Advection in Incompressible Flow // SIAM Journal on Numerical Analysis. - 1996. - Vol. 33, no. 2. - Pp. 627-655.

- [12] Zalesak S. T. Fully multidimensional Flux-Corrected Transport algorithms for fluids // J. Comp. Phys.
   1979. Vol. 31. Pp. 335–362.
- [13] A standard test set for numerical approximations to the shallow water equations in spherical geometry / D.L. Williamson, J.B. Drake, J.J. Hack et al. // J. Comp. Phys. 1992. Vol. 102, no. 1. Pp. 211-224.
- [14] Galewsky J., Scott R.K., Polvani L.M. An initial-value problem for testing numerical models of the global shallow-water equations // Tellus. - 2004. - Vol. 56A. - Pp. 429-440.
- [15] Гащук Е.М., Мортиков Е.В., Дебольский А.В. Реализация схемы переноса пассивной примеси на графических ускорителях при использовании половинной точности // Суперкомпьютерные дни в России: Труды международной конференции. 26-27 сентября 2022 г., Москва. — М.: МАКС Пресс, 2022. — Рр. 157–158.
- [16] Munk W.H., Anderson E.R. Notes on a theory of the thermocline // J. Marine Res. 1948. Vol. 7.
   P. 276–295.
- [17] Pacanowski R., Philander S. Parameterization of vertical mixing in numerical models of tropical oceans // J. Phys. Oceanogr. - 1981. - Vol. 11. - Pp. 1443-1451.
- [18] О моделировании скорости диссипации кинетической энергии турбулентности / Е.В. Мортиков, А.В. Глазунов, А.В. Дебольский et al. // Доклады Академии Наук. — 2019. — Vol. 489, no. 4. — Pp. 414-418.
- [19] Островский Л.А., Троицкая Ю.И. Модель турбулентного переноса и динамика турбулентности в стратифицированном сдвиговом потоке // Изв. АН СССР. Физика атмосферы и океана. 1987.
   Vol. 23, по. 10. Рр. 1031–1040.
- [20] A Hierarchy of Energy- and Flux-Budget (EFB) Turbulence Closure Models for Stably-Stratified Geophysical Flow / S.S. Zilitinkevich, T. Elperin, N. Kleeorin et al. // Bound.-Layer Meteorol. — 2013. — Vol. 146. — Pp. 341–373.
- [21] Dissipation rate of turbulent kinetic energy in stably stratified sheared flows / S. Zilitinkevich,
   O. Druzhinin, A. Glazunov et al. // Atmos. Chem. Phys. 2019. Vol. 19. Pp. 2489-2496.
- [22] Third-order transport and nonlocal turbulence closures for convective boundary layers / S. Zilitinkevich, V.M. Gryanik, V.N. Lykossov, D.V. Mironov // J. Atmos. Sci. - 1999. - Vol. 56. - Pp. 3463-3477.
- [23] Kantha L.H., Clayson C.A. An improved mixed layer model for geophysical applications // J. Geophys. Res. - 1994. - Vol. 99. - Pp. 25235-25266.
- [24] Ocean turbulence. Part I: One-point closure model momentum and heat vertical diffusivities / V.M. Canuto, A. Howard, Y. Cheng, M.S. Dubovikov // J. Phys. Oceanogr. – 2001. – Vol. 31, no. 6. – Pp. 1413–1426.

- [25] Willis G.E., Deardorff J.W. A laboratory model of the unstable planetary boundary layer // J. Atmos. Sci. - 1974. - Vol. 31. - Pp. 1297-1307.
- [26] Turner J.S. Buoyancy effects in fluids. Cambridge Univ. Press, 1973.
- [27] Flux profile relationships in the atmospheric surface layer / J.A. Businger, J.C. Wyngaard, I. Izumi, E.F. Bradley // J. Atmos. Sci. - 1971. - Vol. 28. - Pp. 181-189.
- [28] SHEBA flux-profile relationships in the stable atmospheric boundary layer / A.A. Grachev, E.L. Andreas, C.W. Fairall et al. // Bound.-Layer Meteorol. - 2007. - Vol. 124. - Pp. 315-333.
- [29] New Modified and Extended Stability Functions for the Stable Boundary Layer based on SHEBA and Parametrizations of Bulk Transfer Coefficients for Climate Models / V.M. Gryanik, C. Lupkes, A. Grachev, D. Sidorenko // J. Atmos. Sci. - 2020. - Vol. 77, no. 8. - Pp. 2687-2716.
- [30] Казаков А.Л., Лыкосов В.Н. О параметризации взаимодействия атмосферы с подстилающей поверхностью при численном моделировании атмосферных процессов // Тр. Зап. Сиб. НИИ. — 1982. — Vol. 55. — Рр. 3–20.
- [31] Зилитинкевич С.С. Динамика пограничного слоя. Л.: Гирдрометеоиздат, 1974. Р. 291.
- [32] Smagorinsky J. General circulation experiments with the primitive equations I: The basic experiment // Monthly Weather Review. — 1963. — Vol. 91, no. 3. — Pp. 99–164.
- [33] Redi Martha H. Oceanic isopycnal mixing by coordinate rotation // Journal of Physical Oceanography.
   1982. Vol. 12, no. 10. Pp. 1154–1158.
- [34] Gent Peter R, Mcwilliams James C. Isopycnal mixing in ocean circulation models // Journal of Physical Oceanography. - 1990. - Vol. 20, no. 1. - Pp. 150-155.
- [35] World ocean atlas 2018, volume 1: Temperature / MM Locarnini, AV Mishonov, OK Baranova et al. 2018.
- [36] World ocean atlas 2018, volume 2: Salinity / MM Zweng, D Seidov, TP Boyer et al. 2019.
# Задача 2.3. Разработка эффективных вычислительных технологий для прогнозирования и диагноза состояния атмосферы в городской среде

Проведение дополнительных расчетов с вихреразрешающими моделями турбулентности над поверхностями городского типа с различными конфигурациями обтекаемых объектов. Уточнение предложенной параметризации турбулентного масштаба длины на основе этих расчетов. Включение параметризаций в модели RANS и их тестирование. Обобщение предложенных аппроксимаций турбулентного масштаба длины на случай устойчивостратифицированных течений в городской среде. Включение разработанных параметризаций турбулентности в модели RANS и их тестирование на основе сравнения с данными вихреразрешающего моделирования. Проведение тестовых LES-расчетов конвективносдвиговой турбулентности в пограничном слое атмосферы над поверхностями городского типа. Анализ результатов моделирования и разработка сценариев численных экспериментов при различных значениях определяющих параметров. Реализация различных стохастических моделей лагранжева переноса частиц взвеси и пассивных трассеров в RANS модели городской среды. Проведение расчетов лагранжева переноса частиц в идеализированной городской среде. Сравнение результатов с данными LES и DNS моделей

### 2.3.1 Дополнительные расчеты с вихреразрешающими моделями турбулентности над поверхностями городского типа с различными конфигурациями обтекаемых объектов

Были продолжены работы по вихреразрешающему моделированию стратифицированных турбулентных течений над поверхностями городского типа и работы по статистической обработке и обобщению результатов этого моделирования.

Проведены дополнительные расчеты и обработка данных моделирования устойчиво-стратифицированных течений над поверхностями с относительно невысокой плотностью заполнения крупными объектами (см. схему экспериментов на рис.3.1, а также, работу [1] и отчет за 2021 год по Задаче 2.3). Расчеты проводились в широком диапазоне значений параметра h/L, где h – высота "зданий", а L – масштаб Обухова. На основе анализа данных моделирования показано, что при быстром охлаждении поверхности во внешнем течении (в пограничном слое атмосферы над городской средой) поддерживается развитая турбулентность с относительно невысокими значениями числа Ричардсона. Этот эффект обусловлен существенным снижением коэффициента теплообмена между атмосферой и поверхностью в целом при сильной устойчивости (термический параметр шероховатости  $z_{0t}$  уменьшается, а динамический параметр шероховатости  $z_{0u}$  слабо зависит от стратификации, см. также [2, 3]). Показано, что при достижении некоторых предельных значений разности температур  $(T-T_s)$  (здесь: T-средняя температура воздуха на некотори высоте над городской средой, а  $T_s$  - темепратура поверхности "земли"), достигается асимптотический режим в котором отрицательный поток тепла в "свободную атмосферу" перестает зависеть от разности температур (T – T<sub>s</sub>) и определяется только скоростью ветра и масштабом длины, связанным с геометрией обтекаемых объектов. На рисунке 3.2а представлены значения обратного числа Стентона  $\ln(z_{0u}/z_{0t})$  в зависимости от "балкового" числа Ричардсона  $Ri_B$ , где:

$$Ri_{B} = \frac{g}{T_{0}} \frac{T - T_{s}}{U^{2}} z'.$$
(3.1)

Здесь: z' = z - D; D - высота вытеснения; z - высота над уровнем "земли";  $\frac{g}{T_0}$  - параметр плавучести; U и T средняя скорость ветра и температура на высоте z; z > h, где h - высота "городского" слоя. Значения  $\ln(z_{0u}/z_{0t})$ , полученные в серии расчетов с LES-моделью, отмечены на рис.3.2а черными символами; черная сплошная и цветные пунктирные линии указывают область определения (слева от кривых) системы уравнений для вычисления поверхностных потоков тепла и импульса (см. [4]) с использованием линейных универсальных функций безразмерных градиентов температуры и скорости [5] теории подобия Монина-Обухова [6]. На рис.3.2b,с цветными символами показаны значения параметра устойчивости  $\kappa z'/L$  и потокового числа Ричардсона  $R_f$  по данным модели. Из рисунка видно, что значения  $\kappa z'/L$  относительно невелики, а потоковое число Ричардсона  $R_f < 0.2$  (для сравнения см. данные измерений [7, 8]). По данным этой серии расчетов значения параметра устойчивости  $\kappa z'/L$  достигают некоторого максимального предельного значения при больших значениях  $Ri_B$ . Это означает, что в турбулентном течении над городской средой масштаб Обухова не может быть меньше некоторого значения  $L_{min} \sim h$ , не зависимо от разности температур воздух-земля.

Правильный расчет поверхностного потока тепла и касательного напряжения трения имеет решающее значение для надежной работы численных моделей атмосферы. Известна проблема, присущая большинству параметризаций приземного слоя, которая проявляется как чрезмерное ослабление взаимодействия между модельной атмосферой и поверхностью при больших значениях Ri<sub>B</sub>. В частности, это отчетливо проявляется в численных моделях прогноза погоды над урбанизированной территорией [9].

Задача 2.3. Разработка эффективных вычислительных технологий для прогнозирования и диагноза состояния атмосферы в городской среде 96



Рис. 3.1: Схема постановки численных экспериментов. (a,b,c) – конфигурация обтекаемых объектов. (d) – схематическое представление граничных условий и внешнего воздействия. (e) – визуализация мгновенного состояния температурных аномалий в ЕХРЗ при  $h/L_{fix} = 2.0$  (фрагмент области, обведенный на рис.1с пунктиром); изолиниями и цветом на сечениях изображен нормированный дефект температуры  $(\overline{T} - T_s)/T_*$ ; изоповерхность -  $(\overline{T} - T_s)/T_* = 80$ .

Обнаруженный в наших расчетах эффект позволяет существенно скорректировать схемы взаимодействия устойчиво стратифицированных турбулентных течений с поверхностью путем параметризации роста обратного числа Стентона, что является физически обоснованной альтернативой использованию универсальных функций, не имеющих предельного числа Ri<sub>B</sub> (см., например, [10, 11]).

Более подробно результаты, изложенные выше, и результаты, описанные в отчете по проекту за 2021 год, представлены в работе [12], опубликованной в журнале "Journal of the Atmospheric Sciences" при поддержке данного проекта.

Проведено моделирование переноса пассивной примеси статифицированными турбулентными течениями, описанными в работе [12]. Расчеты проводились по аналогии с расчетами, представленными в статье [1]. Задавался постоянный поток концентрации примеси на поверхности и отрицательный

Задача 2.3. Разработка эффективных вычислительных технологий для прогнозирования и диагноза состояния атмосферы в городской среде 97



Рис. 3.2: (а) - обратное число Стентона ln(z<sub>0u</sub>/z<sub>0t</sub>) в зависимости от числа Ричардсона Ri<sub>B</sub> (3.1); черные символы - результаты LES, открытые символы - те же значения Ri<sub>B</sub> при значениях ln(z<sub>0u</sub>/z<sub>0t</sub>) для нейтральной стратификации; критические кривые (сплошная и пунктирные линии) указывают область определения (слева от кривых) системы уравнений для вычисления поверхностных потоков тепла и импульса с использованием линейных универсальных функций безразмерных градиентов температуры и скорости; цветом указаны значения z'/L, полученные, как физически корректные решения системы уравнений. (b) - значения параметра устойчивости кz'/L на критической кривой в зависимости от Ri<sub>B</sub>;
(c) - потоковое число Ричардсона R<sub>f</sub> на критической кривой; цветные символы на (b) и (c) - значения кz'/L и R<sub>f</sub>, полученные в LES. Все результаты представлены для высоты z/h = 1.64.

объемный форсинг, удаляющий линейный временной тренд средней (по всей расчетной области) концентрации. На рис.3.3 представлены обезразмеренные профили средней концентрации примеси в зависимости от стратификации и конфигурации поверхности. Профили построены осреднением по горизонтали и по времени за десять единиц безразмерного времени  $tU_*/L_z$  для течений, находящихся в статистически-стационарном состоянии (см. [12]). Из рис.3.3 видно, что по мере увеличения устойчивости концентрация примеси растет, причем при максимальных значениях h/L (черные кривые) происходит существенное накопление примеси вблизи поверхности. Предполагается, что данные, полученные в этих расчетах с LES-моделью, будут использованы для проверки и настройки RANS-моделей переноса-диффузии примесей в городском пограничном слое.

Помимо расчетов, описанных выше, были проведены расчеты при нейтральной и устойчивой стратификации для поверхностей городского типа с большой плотностью заполнения объектами ( $S_b/S_s=1/4$ , где  $S_b$  - площадь поверхности, занятой "зданиями", а  $S_s$  - суммарная площадь поверхности). Вычисления проводились для массива разнесенных кубов (см., [13–15]) и для упорядоченных аналогичным образом прямоугольных параллелепипедов с отношением сторон h/l = 2, где l – длина стороны основания. На основании этих расчетов было обнаружено, что характерные особенности теплообмена устойчиво-стратифицированных течений с поверхностями городского типа, выявленные в работе [12], типичны и для более "плотной" городской среды. При этом, предельный режим при котором ограничивается теплообмен и происходит накопление примесей внутри городской среды достигается при меньшей устойчивости (при значениях  $h/L \sim 0.5$ ).

Задача 2.3. Разработка эффективных вычислительных технологий для прогнозирования и диагноза состояния атмосферы в городской среде 98



Рис. 3.3: Безразмерные дефекты концентрации скаляра  $(S-S_{top})/S_*$ . EXP1, EXP2 и EXP3 - различные конфигурации поверхности (рис. 3.1). Зеленые кривые - нейтральная стратификация, данные из работы [1]. Различным цветом указана величина параметра устойчивости h/L.



Рис. 3.4: Средняя скорость ветра в устойчиво-стратифицированном течении над поверхностью городского типа.

### 2.3.2 Турбулентный масштаб длины для многослойных RANS моделей городской среды, его обобщение для устойчиво-стратифицированных течений; тестирование и настройка RANS по данным LES

В работе [1], на основе размерностных соображений и требований выполнения известных асимптотик вблизи поверхности "земли" и на высоте "городского слоя", нами был предложен турбулентный масштаб длины  $l_T^n$  для многослойных RANS-моделей городской среды при нейтральной стратификации

$$l_T^n = \left(\frac{1}{\kappa z} + \frac{1}{c_D D_u}\right)^{-1}, \quad z < \langle h \rangle;$$

$$l_T^n = \kappa \left(z - D_u\right), \quad z \ge \langle h \rangle.$$
(3.2)

Здесь *к* - постоянная Кармана; *D<sub>u</sub>* - высота вытеснения, *c<sub>D</sub>* – однопараметрическая линейная функция следующего вида:

$$c_D = \kappa \left[ \left( \frac{\langle h \rangle}{D_u} \right)^2 - \frac{\langle h \rangle}{D_u} \right] + c_1 \left[ \frac{\langle h \rangle - z}{D_u} \right], \qquad (3.3)$$

 $c_1 \approx 0.4$  – константа, значение которой было выбрано на основе сравнений результатов LES и RANS.

Обобщение этого турбулентного масштаба на случай стратифицированных турбулентных течений было выполнено на основе результатов работ [3, 16]. В этих работах по данным LES и метеорологических измерений было показано, что для течений над поверхностями со сложной геометрией поправка, связанная с устойчивой стратификацией, может быть учтена при вычислении турбулентного масштаба длины  $l_T$  следующим образом:

$$l_T = \left(\frac{1}{l_T^n} + c'_u \frac{1}{\Lambda}\right)^{-1},\tag{3.4}$$

где  $l_T^n$  – вычисленный или измеренный турбулентный масштаб над той же поверхностью при нейтральной стратификации,  $\Lambda$  – масштаб Обухова,  $c'_u \approx 5$  – универсальная константа. Мы применили этот подход для вычисления значений l<sub>T</sub> в многослойной модели RANS городского пограничного слоя (см. описание модели в работе [1]). На рис.3.4 приведено сравнение результатов LES и различных RANS моделей. Изображены нормированные профили средней скорости ветра. Результаты K-l модели RANS получены с использованием масштаба (3.2),(3.4). Масштаб Обухова вычислялся либо по значениям потоков тепла и импульса на текущей высоте  $\Lambda = L(z)$  (синие кривые), либо по значениям потоков на высоте "городского слоя"  $\Lambda = L(h)$  (зеленые кривые). Для сравнения, на тех же рисунках приводится скорость ветра, вычисленная при помощи стандартной  $K - \varepsilon$  модели RANS с набором констант, обеспечивающим правильное решение при моделировании устойчиво-стратифицированного течения над плоской поверхностью (см. [17]). Во всех RANS-моделях одинаковым образом учтена генерация турбулентной кинетической энергиии и объемное сопротивление (см. [1]) внутри слоя 0 < z < h. Из рис. 3.4 видно, что  $K - \varepsilon$  модель приводит к существенным ошибкам не только внутри "городского слоя", но и в пограничном слое над ним. Результаты моделей, построенных на основе предложенного масштаба турбулентности, близки к результатам LES над "городской средой". Модель с использованием "локального" масштаба Обухова (синие кривые) более точно воспроизвела градиент скорости на удалении от поверхности. Однако, внутри "городского слоя" все протестированные модели приводят к излишнему промешиванию и завышают среднюю скорость у поверхности. Ошибка увеличивается по мере увеличения статической устойчивости. По-видимому, данный недостаток моделей связан с тем, что при их построении не учитывается эффект увеличения коэффициента объемного сопротивления с ростом устойчивости (см. [12]). В дальнейшем планируется более подробно изучить физические причины этого явления при помощи LES-моделирования и попытаться построить соответствующую параметризацию зависимости объемного сопротивления от стратификации для моделей RANS.

Задача 2.3. Разработка эффективных вычислительных технологий для прогнозирования и диагноза состояния атмосферы в городской среде 100

#### 2.3.3 Тестовые LES-расчеты конвективно-сдвиговой турбулентности

Для достоверного анализа данных LES-моделирования турбулентных течений над городской средой и систематизации результатов необходимо проведение расчетов в широком диапазоне определяющих параметров. Для того, чтобы избежать вычислительно-дорогостоящих расчетов ансамбля реализаций, удобно проводить моделирование течений, находящихся в статистически-стационарных состояниях с заданными заранее определяющими параметрами. Для устойчивого пограничного слоя алгоритм проведения таких расчетов был предложен нами в работе [12], где температура поверхности вычислялась по осредненному потоку импульса над "городским слоем" и заданному масштабу Обухова. В тестовых расчетах сдвигово-конвективных АПС с предписанной геострофической скоростью ветра  $U_g$  нами было проверено, что аналогичный подход применим и для течений этого типа. В ходе таких расчетов (путем вариации температуры поверхности или пересчета поверхностного потока тепла) удается поддерживать заданные значения параметра  $U_*/w_*$  (один из ключевых параметров для сдвигово-конвективных АПС), где  $U_*$  -скорость трения на поверхности (которая неизвестна заранее), а  $w_*$  - конвективный масштаб скорости Дирдорфа [18].

Высота пограничного слоя  $z_i$  в этих расчетах фиксировалась добавлением в модель крупномасштабной скорости оседания  $w_d$ , величина которой вблизи верхней границы АПС и выше вычисляется из соотношения  $w_d dT_a/dz = -c_iQ_s/z_i$ , где  $z_i$  - высота АПС,  $Q_s$  - кинематический поток температуры на поверхности,  $dT_a/dz$  - градиент потенциальной температуры в свободной атмосфере над погранслоем,  $c_i = 0.2$  - коэффициент вовлечения (отношение абсолютной величины отрицательного потока тепла на верхней границе АПС к поверхностному потоку тепла). Тесты над плоской поверхностью показали, что промоделированный таким образом стационарный конвективный АПС по своим статистическим характеристикам (дисперсия компонент скорости и температуры, пространственные спектры флуктуаций скорости и температуры, средние профили) очень близок к характерному в природной среде растущему по высоте пограничному слою (см., например, [19]). Таким образом, была подготовлена технология проведения серий LES-расчетов конвективных и конвективно-сдвиговых пограничных слоев атмосферы над поверхностями городского типа, позволяющая задавать определяющие параметры таких турбулентных течений и поддерживать пограничный слой в равновесном состоянии с этими заданными параметрами.

Отметим, что проведение таких расчетов потребует значительно бо́льших вычислительных затрат, чем моделирование нейтрально- и устойчиво-стратифицированных течений. Это обусловлено требованием соблюдения отношений характерных пространственных масштабов. Для явного представления геометрии "зданий" необходимы подробные сетки с шагом ~ 1м, а высота конвективного АПС составляет ~ 1км, при этом, размеры расчетной области по горизонтали должны, как минимум, в четыре раза превышать высоту АПС. По нашим оценкам, для достоверного воспроизведения городского конвективного АПС с соблюдением всех соотношений масштабов потребуются расчеты с количеством узлов сеток ~ 10<sup>9</sup>. Расчеты подобного типа потребуют использования нескольких тысяч вычислительных ядер.

### 2.3.4 Стохастические модели лагранжева переноса частиц для RANS модели городской среды. Сравнение результатов стохастических моделей с данными LES



Рис. 3.5: Средняя концентрация примеси, переносимой от точечного источника, в нейтральностратифицированном (вверху) и устойчиво-стратифицированном (внизу) течении над поверхностью городского типа. Изображены изолинии обезразмеренной концентрации, проинтегрированной по направлению, перпендикулярному направлению ветра. Конфигурация поверхности соответствует EXP3 на рис.3.1

При помощи LES-модели, совмещенной с блоком переноса лагранжевых частиц (см. описание в [20] и [21]), была выполнена серия расчетов переноса частиц взвеси и безынерционных трассеров в нейтральнои устойчиво-стратифицированных турбулентных течениях над поверхностями городского типа, описанными выше. В каждом из таких численных экспериментов одновременно рассчитывались траектории нескольких десятков миллионов частиц. Пример результатов таких расчетов изображен на рис.3.5, где приведены изолинии обезразмеренной концентрации примеси в шлейфах за точечными источниками, расположенными вблизи поверхности "земли". Лагранжев подход позволяет вычислить средние характеристики примеси на расстояниях больших, чем размер расчетной области модели (см. [21]). Предварительно LES-модель была дополнена процедурами статистической обработки характеристик лагранжева переноса, необходимыми для тестирования стохастических моделей. В частности, в ходе расчетов производится накопление и вычисление плотностей вероятности лагранжевых скоростей и совместных плотностей вероятности лагранжевых скоростей частиц. Вычисление этих характеристик необходимо для проверки предположений, лежащих в основе стохастических лагранжевых моделей [22], применимость которых для описания дисперсии трассеров в городской среде не является очевидной. На настоящий момент авторам проекта известна лишь одна работа [23], в которой стохастическая лагранжева модель первого порядка (модель, основанная на решении обобщенного уравнения Ланжевена) была использована для переноса частиц в городском слое без явного представления зданий. Статистические характеристики турбулентности для нее задавались на основе осреднения и интерполяции данных натурных наблюдений. Тестирование данной модели также выполнялось путем сравнения с данными прямых измерений в природной среде, что в силу вариативности метеорологических параметров в городе и погрешностей измерений не является исчерпывающим методом проверки моделей.

Целью проведенных нами исследований было оценить возможность применения распространенных в литературе лагранжевых стохастических моделей в сочетании с многослойными моделями RANS городской среды, а также, наметить пути устранения их собственных погрешностей за исключением ошибок, привносимых неточностью воспроизведения турбулентности в RANS. Расчеты со стохастическими моделями проводились с использованием осредненных эйлеровых характеристик турбулентности, полученных в LES. Тестировался следующий набор моделей.

• Модель случайных смещений (модель нулевого порядка):

$$dx_{i}^{p} = u_{i}^{(p)}dt + \frac{\partial K_{si}^{(p)}}{\partial x_{i}}dt + \sqrt{2K_{si}^{(p)}}\xi_{i}^{p}.$$
(3.5)

Здесь: $u_i^{(p)}$  и  $K_{si}^{(p)}$  - интерполяции средней скорости течения и коэффициента турбулентной диффузии в позицию частицы;  $\xi_i^p$  - случайный гауссов шум с единичной дисперсией. Коэффициенты диффузии в горизонтальных направлениях считались равными  $K_{si} = K_{s3}(\sigma_j^4/\sigma_3^4)$ , где  $\sigma_i^2 = \left\langle u_i'^2 \right\rangle$ - дисперсия соответствующей компоненты скорости.

Модели первого порядка, основанные на решении уравнения Ланжевена:

• Модель переноса частиц изотропной турбулентностью:

$$du'_{i}^{p} = -\frac{u'_{i}^{p}}{T_{L}^{i}}dt + \sqrt{C_{0}\varepsilon}\xi_{i}^{p}.$$
(3.6)

• Модель, удовлетворяющая условию "хорошего перемешивания" Томсона [24] в вертикальном направлении (по горизонтальным координатам применяется модель 3.6):

$$dw^{p} = \left(-\frac{w^{p}}{T_{L}^{w}} + \frac{1}{2}\frac{\partial\sigma_{w}^{2}}{\partial z}\left(1 + \frac{(w^{p})^{2}}{\sigma_{w}^{2}}\right)\right)dt + \sqrt{C_{0}\varepsilon}\xi_{3}^{p}.$$
(3.7)

В уравнениях (3.6, 3.7) лагранжевы масштабы времени декорреляции  $T_L^i$  для различных компонент скорости оцениваются следующим образом:

$$T_L^i = \frac{2\sigma_i^2}{C_0\varepsilon},\tag{3.8}$$

где ε - средняя скорость диссипации по данным LES, C<sub>0</sub> - универсальная константа Колмогорова для структурной функции второго рода лагранжевой скорости. В большинстве расчетов мы задавали значение C<sub>0</sub> = 6 (значение соответствующее инерционному интервалу турбулентности при очень больших числах Рейнольдса), так как обнаружили, что принятая в большинстве работ по данной теме настройка стохастических моделей за счет изменения величины C<sub>0</sub> не приводит к универсальному улучшению результатов при различной стратификации.

Тестирование моделей показало следующие результаты:

- Модель (3.6) приводит к существенным ошибками и накоплению концентрации частиц в "городском слое". Таким образом, в данной задаче необходимо использование моделей, удовлетворяющих критерию Томсона [24].
- При устойчивой стратификации модели (3.5) и (3.7) правильно описывают среднюю концентрацию частиц как внутри городской среды, так и над ней, однако несколько завышают скорость переноса примеси, вброшенной одномоментно, внутри "городского слоя". Отмеченный дефект может быть связан с отсутствием отрицательной корреляции между вертикальной и продольной компонентами скорости в этих моделях, которая производит турбулентный поток массы по горизонтали, направленный против среднего течения.
- При нейтральной стратификации модели (3.5) и (3.7) обладают недостаточным перемешиванием по вертикали и приводят к завышенным концентрациям примеси вблизи поверхности.

Отмеченные недостатки стохастических моделей можно видеть на рис.3.6.

Было отмечено, что модели (3.5) и (3.7) незначительно отличаются между собой. Это оправдывает применение простой модели случайных смещений и эйлеровых моделей переноса-диффузии скаляров, которой данная модель эквивалентна (см. [22]), при устойчивой стратификации.

Ошибки стохастической модели при нейтральной стратификации могут быть связаны с существенным отклонением плотностей вероятности турбулентных флуктуаций лагранжевой скорости частиц от нормальных распределений (см. рис.3.7). Кроме того, при дополнительной обработке результатов моделирования было обнаружено, что стационарная компонента течения, возникающая при обтекании объектов, вносит существенный вклад в перенос частиц как внутри городского слоя, так и непосредственно над ним, особенно при нейтральной стратификации. Правильно учесть эффекты, связанные с переносом частиц пространственно-неоднородным средним течением, в стандартных стохастических моделях не удается. Предполагается, что отмеченные дефекты стохастических моделей будут корректироваться на следующем этапе выполнения проекта с применением результатов анализа данных LES, полученных в 2022 году.



Рис. 3.6: Концентрация примеси, вброшенной одномоментно, из точечного источника вблизи поверхности через 10 единиц безразмерного времени t U \* /h. Изображены значения обезразмеренной средней концентрации в слое 0 < z/h < 1/16 на линии вдоль направления ветра от источника; a,b,c - устойчивая стратификация при h/L=0.75; e,f,g - нейтральная стратификация. LSM - модель 3.7,RDM - модель 3.5



Neutral stratification, Lagrangian velocity joint PDFs, z/h: [1.5,2], x/h [4,8], [20,24], [36,40]

Рис. 3.7: Совместные плотности вероятности продольной и вертикальной компонент скорости лагранжевых трассеров при нейтральной стратификации над городской поверхностью. PDF получены осреднением по времени и в интервалах расстояний от источника, указанных над рисунком. Вычтено среднее значение эйлеровой скорости течения на соответствующих высотах. Флуктуации лагранжевой скорости нормированы на СКО соответствующих компонент эйлеровой скорости. Среднее значение лагранжевой скорости показано желтым значком. Пунктирные изолинии - нормальное распределение с той же корреляцией между компонентами и нулевым средним.

## Литература

- Glazunov A. 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. - Feb. - Vol. 8, no. 4. - P. 100-116. - URL: https://superfri.org/index.php/superfri/article/view/420.
- [2] Glazunov A. V. Numerical simulation of stably stratified turbulent flows over flat and urban surfaces // Izv. Atmos. Ocean. Phys. (Engl. Transl.). - 2014. - Vol. 50, no. 3. - Pp. 236-245. - https: //doi.org/10.1134/S0001433814030037.
- [3] 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.
- [4] Kazakov A. L., Lykosov V. N. On the parameterization of the atmosphere interaction with the underlying surface in numerical modelling of atmospheric processes // Proc West Siberian Reg Sci Res Hydromet Inst. - 1982. - Vol. 55. - Pp. 3-22. - (in russian).
- [5] Flux-profile relationships in the atmospheric surface layer / J. Businger, J. Wyngaard, Y. Izumi,
   E. Bradley // J. Atmos. Sci. 1971. Vol. 28, no. 2. Pp. 181-189. https://doi.org/10.
   1175/1520-0469(1971)028%3C0181:FPRITA%3E2.0.C0;2.
- [6] Monin A., Obukhov A. Basic laws of turbulent mixing in the surface layer of the atmosphere // Contrib. Geophys. Inst. Acad. Sci. USSR. - 1954. - Vol. 151, no. 163. - P. e187.
- [7] Outlier problem in evaluating similarity functions in the stable atmospheric boundary layer / A. Grachev, E. Andreas, C. Fairall et al. // Boundary-Layer Meteorology. 2012. Vol. 144, no. 2. Pp. 137-155. https://doi.org/10.1007/s10546-012-9714-9.
- [8] The critical Richardson number and limits of applicability of local similarity theory in the stable boundary layer / A. Grachev, E. Andreas, C. Fairall et al. // Boundary-Layer Meteorology. — 2013. — Vol. 147, no. 1. — Pp. 51–82. — https://doi.org/10.1007/s10546-012-9771-0.

- [9] Jeričević Amela, Grisogono Branko. The critical bulk Richardson number in urban areas: verification and application in a numerical weather prediction model // Tellus A: Dynamic Meteorology and Oceanography. - 2006. - Vol. 58, no. 1. - Pp. 19-27.
- [10] Louis J-F. A parametric model of vertical eddy fluxes in the atmosphere // Boundary-Layer Meteorology.
   1979. Vol. 17, no. 2. Pp. 187–202. https://doi.org/10.1007/BF00117978.
- [11] New modified and extended stability functions for the stable boundary layer based on SHEBA and parametrizations of bulk transfer coefficients for climate models / V. M. Gryanik, C. Lüpkes, A. Grachev, D. Sidorenko // J. Atmos. Sci. 2020. Vol. 77, no. 8. Pp. 2687-2716. https://doi.org/10. 1175/JAS-D-19-0255.1.
- [12] Glazunov Andrey, Mortikov Evgeny, Debolskiy Andrey. Studies of stable stratification effect on dynamic and thermal roughness lengths of urban-type canopy using large-eddy simulation // Journal of the Atmospheric Sciences. - 2022. - URL: https://journals.ametsoc.org/view/journals/atsc/aop/ JAS-D-22-0044.1/JAS-D-22-0044.1.xml.
- [13] Cheng H., Castro I. P. Near wall flow over urban-like roughness // Boundary-Layer Meteorology. 2002. — Vol. 104, no. 2. — Pp. 229–259. — https://doi.org/10.1023/A:1016060103448.
- [14] Xie Z., Castro I. P. LES and RANS for turbulent flow over arrays of wall-mounted obstacles // Flow, Turbulence and Combustion. - 2006. - Vol. 76, no. 3. - Pp. 291-312. - https://doi.org/10.1007/ s10494-006-9018-6.
- [15] Mean flow and turbulence statistics over groups of urban-like cubical obstacles / O. Coceal, T. G. Thomas, I. P. Castro, S. E. Belcher // Boundary-Layer Meteorology. - 2006. - Vol. 121, no. 3. - Pp. 491-519. - https://doi.org/10.1007/s10546-006-9076-2.
- [16] Barskov K. V. Glazunov A. V. Repina I.A. et al. On the Applicability of Similarity Theory for the Stable Atmospheric Boundary Layer over Complex Terrain // Izv. Atmos. Ocean. Phys. - 2018. - Vol. 54, no. 5. - Pp. 462 - 471.
- [17] Modeling of the dissipation rate of turbulent kinetic energy / EV Mortikov, AV Glazunov, AV Debolskiy et al. - 2019. - Vol. 489, no. 2. - Pp. 1440-1443.
- [18] Deardorff James W et al. Convective velocity and temperature scales for the unstable planetary boundary layer and for Rayleigh convection // J. atmos. Sci. - 1970. - Vol. 27, no. 8. - Pp. 1211-1213.
- [19] Глазунов АВ, Дымников ВП. Пространственные спектры и характерные горизонтальные масштабы флуктуаций температуры и скорости в конвективном пограничном слое атмосферы // Известия Российской академии наук. Физика атмосферы и океана. — 2013. — Vol. 49, по. 1. — Pp. 37–37.

Задача 2.3. Разработка эффективных вычислительных технологий для прогнозирования и диагноза состояния атмосферы в городской среде 107

- [20] Large-eddy simulation and stochastic modeling of Lagrangian particles for footprint determination in the stable boundary layer / A. Glazunov, Ü. Rannik, V. Stepanenko et al. // Geoscientific Model Development. - 2016. - Vol. 9, no. 9. - Pp. 2925-2949. - https://doi.org/10.5194/gmd-9-2925-2016.
- [21] Glazunov A. V. Numerical simulation of turbulence and transport of fine particulate impurities in street canyons // Numerical methods and programming. - 2018. - Vol. 19. - Pp. 17-37. - https: //doi.org/10.26089/NumMet.v19r103.
- [22] Thomson DJ, Wilson JD. History of Lagrangian stochastic models for turbulent dispersion // Lagrangian modeling of the atmosphere. - 2013. - Pp. 19-36.
- [23] Stöckl Stefan, Rotach Mathias W, Kljun Natascha. Including the urban canopy layer in a Lagrangian particle dispersion model // Boundary-Layer Meteorology. - 2022. - Vol. 185, no. 1. - Pp. 1-34.
- [24] Thomson DJ. Criteria for the selection of stochastic models of particle trajectories in turbulent flows // Journal of fluid mechanics. - 1987. - Vol. 180. - Pp. 529-556.

# Задача 2.4. Разработка модели динамики морского льда

Тестовые расчеты по краткосрочному прогнозу состояния льда. Начальные поля (сплоченность и толщина льда, скорость дрейфа) взяты из базы данных оперативной системы TOPAZ-4, которая является частью европейского проекта Copernicus. Сравнение результатов прогноза с данными TOPAZ-4. Расширение функционала модели динамики льда за счет добавления других солверов уравнения динамики. Разработка локально-одномерной модели термодинамики льда и снега с учетом соляных карманов и проникновения радиации

# 2.4.1 Анализ результатов прогноза состояния Арктического морского льда

В 2022 году был запущен эксперимент, начальное состояние и форсинг которого описаны в прошлогоднем отчете по Задаче 2.4. В качестве расчетной области используется Арктический регион, находящийся выше 45 широты. Была использована триангуляция замкнутой области с островами, построенная по данным береговой линии, со сгущением в области с потенциально высокой сплоченностью морского льда. Начальные данные, взятые из системы европейского прогноза TOPAZ-4 ([1]) - сплоченность, толщина, начальная скорость морского льда были интерполированы на модельную сетку. Также на модельную сетку были интерполированы данные форсинга, согласованные с TOPAZ-4 : скорость ветра на высоте 10 м., скорость течения океана в верхнем погранслое.

Версия модели на стандартной А-сетке была запущена с шагом по времени 1 час на 2 месяца. Результаты моделирования сплоченности морского льда в конечный момент времени представлены на Puc.4.2. Стоит отметить наличие Линейных Кинематических Особенностей (ЛКО, линий низкой сплоченности), которые изначально отсутствовали в данных. Этот факт связан с тем, что данные прогноза TOPAZ-4 распространяются на сетке с грубым разрешением, а количество и качество разрешения Линейных Кинематических Особенностей существенно зависит от пространственного разрешения. Наличие подобных структур на сетке с мелким шагом сведетельствует о хорошем качестве построенной модели.

Более подробный анализ полученных результатов выявил, что сравнение с данными TOPAZ-4 не корректно на большом временном интервале, поскольку к разрабатываемой модели пока не подключен термодинамический блок. Интегральная масса льда сохраняется во всей расчетной области, что, очевидно, не так в реальности и TOPAZ-4. Для решения этой проблемы и более качественного сравнения разрабатана и подключена независимая библиотека термодинамики морского льда с проникающей радиацией, соляными карманами и (опционально) снегом (см.раздел 2.4.3).

# 2.4.2 Решение уравнений динамики морского льда на треугольной CD-сетке

Наиболее естественным подходом в реализации численного конечно-элементного решения уравнений динамики морского льда на треугольных сетках является использование сеток типа А. Сетка типа А подразумевает использование значений физических скаляров (масса, толщина, сплоченность) и компонент векторов (скорость дрейфа), определенных в вершинах треугольной сетки. На этой сетке естественным образом формулируется непрерывный метод Галеркина для пространственной аппроксимации второго порядка. Данный подход уже реализован и протестирован в программном коде модели. На Рис. 4.1 представлены значения деформации сдвига скорости льда в логарифмическом масштабе в модельном эксперименте с искусственным форсингом на треугольной сетке типа А. Видно, что в численном решении возникают концентрические и радиальные структуры ЛКО. На Рис. 4.2 представлены результаты расчета модельной сплоченности Арктического льда спустя один месяц моделирования с реальным форсингом (скорость ветра, скорость воды), которые повторно подтверждают наличие описанных струкртур. Отметим, что количество и качество подобных структур существенно зависит от пространственного разрешения, что было описано в прошлогоднем отчете по Задаче 2.4. ЛКО характеризуются областями с большой внутренней деформацией и низкой слоченностью, что делает их разрешение крайне важным для качественного описания тепло- и массообмена между атмосферой и океаном. В недавно вышедшей работе [2] было проведено сравнение ведущих мировых моделей динамики морского льда на разрешающую способность ЛКО. Главным результатом данной работы является вывод о том, что модели, использующие треугольные сетки типа CD и прямоугольные сетки типа С дают "ультраразрешение" ЛКО (Рис.4.3). Данный результат связан с тем, что согласно формуле Эйлера для плоских графов, на треугольной сетке количества вершин, ребер и треугольников относятся в среднем как 1:2:3. Таким образом, определяя компоненты скорости на ребрах вместо вершин, в 2 раза увеличивается количество степеней свободы для скоростей, а определяя скаляры на треугольниках вместо вершин, в 3 раза увеличивается количество степеней свободы для скаляров. В результате,



Рис. 4.1: Значения деформации сдвига скорости льда в модельном эксперименте с искусственным форсингом.



Рис. 4.2: Значения сплоченности Арктического морского льда в эксперименте с реальным форсингом TOPAZ4.

используя CD-дискретизацию вместо стандартной А-дискретизации удается получить "ультраразрешение" ЛКО на одной и той же треугольной сетке. Данные рассуждения побудили нас к началу раз-



Figure 4: The number of the detected LKFs from the shear deformation field presented in Figure 3 and 5 on quadrilateral □ and triangular △ meshes. The subscript 1, 2, 3 and 4 refer to the simulations carried out in the framework of CICE, Gascoigne, FESOM and MITgcm respectively.

Рис. 4.3: Зависимость количества Линейных Кинематических Особенностей от пространственного разрешения для различных треугольных и прямоугольных сеток.

работки версии модели с CD-дискретизацией. Основная трудность этого подхода состоит в том, что базисные функции имеют разрывную природу. Для аппроксимации компонент скоростей, ассоциированных с ребрами, используется базисная функция Крузье-Равиар, а для скаляров, ассоциированных с треугольниками, – постоянная на треугольнике базисная функция, см. Рис.4.4. Система уравнений динамики морского льда включает в себя уравнения переноса сплоченности и массы льда, которые выражают закон сохранения сплоченности (с дополнительным ограничением свеху, равным 1) и массы морского льда. Простейшая формулировка пространственной дискретизации методом Галеркина с базисными функциями  $\psi$  для скоростей и  $\kappa$  для скаляров (см. Рис. (4.4)) второго порядка аппроксимации по пространству приводит к конечно-объемным схемам против потока. Наиболее популярными



**Три** степени свободы, **Три** степени свободы, **Одна** степень свободы, ассоциированные с вершинами ассоциированные с серединами ребер ассоциированная с барицентром

Рис. 4.4: Различные базисные функции на треугольнике.

конечно-объемными схемами переноса на треугольной сетке типа CD являются схемы типа MUST [3] и MUSCL [4], которые на данный момент реализованы и протестированы в рамках разрабатываемой модели.

Для реализации численного решения уравнения баланса импульса с использованием описанных конечных элементов необходимо реализовать регуляризированный метод Галеркина [5]. Работа по данной тематике ведется в настоящий момент и будет продолжаться в 2023 году.

Еще одной существенной особенностью разрабатываемого кода, которая отличает его от кода других крупных мировых ледовых моделей, является парадигма решения уравнений в локально-декартовом базисе. Идея заключается в том, чтобы численно решать возникающие уравнения локально в специально построенном базисе. Введем базисы, ассоциированные с вершинами, ребрами и треугольниками, как показанно на Рис. (4.5). Основными преимуществами данного подхода являются:

- 1. Отсутствие проблемы особой точки на полюсе, что позволяет без проблем считать "задачу аквапланеты";
- 2. Универсальный код для любой геометрии (плоскость, сфера, геоид);
- 3. Хорошая согласованность с методом конечных элементов.

Однако данный подход не лишен недостатков, среди основных можно выделить:



Рис. 4.5: Элементные базисы на треугольной сетке.

- 1. Дополнительные вычисления для перевода компонент векторов и тензоров в другой базис;
- 2. Локальный элементный базис не всегда совпадает с локальным географическим базисом, что вносит дополнительную ошибку аппроксимации.

В данный момент готовится публикация по реализации численного решения системы уравнений динамики морского льда на треугольной сетке типа CD в локально-декартовом базисе, которая выйдет в 2023 году.

С физической точки зрения определение прочности льда в рамках парадигмы вязко-пластичной реологии связано с определением режима дрейфа – при низкой прочности лед ведет себя как идеальный газ, при большой – как очень вязкая среда. В промежуточных режимах прочность связана с режимом пластичного течения, что параметрически описывает процесс торошения.

С математической и программистской точки зрения задача вычисления прочности льда не имеет большой сложности, достаточно на каждом треугольнике сделать либо вычисление нелинейной функции от средней толщины льда и его сплоченности (обычно это линейная функция по толщине и экспоненциальная по сплоченности – именно такая параметризация используется в существующей версии нашей модели), либо связать прочность льда со скоростью диссипации кинетической энергии – что также легко делается. В наиболее физически обоснованных моделях морского льда типа CICE и SI3 вычисление прочности делается вместе с вычислением параметров торошения – а именно перераспределения массы льда из одной в градации по толщине в другую. С математической точки зрения это также не представляет большой сложности, однако обоснованно может быть сделано в рамках модели с несколькими градациями льда по толщине.

Исследование параметризаций прочности проводилось в рамках модели динамики Белого моря. Оказалось, что в окраинных морях Северного Ледовитого океана использование стандартной параметризации, построенной на распределении толщины льда в центральной части Северного Ледовитого океана со средней толщиной льда 3м, и для модели с небольшим количеством градаций по толщине – неприменимо. Для случая Белого моря эти параметры (наиболее важный параметр в данном случае –  $\mu$ , отвечающий за скорость экспоненциального затухания на хвосте распределения функции плотности вероятности толщины льда) были подобраны так, чтобы воспроизвести наблюдаемое состояние не очень толстого льда. Описание стандартной параметризации достаточно громоздкое, и может быть найдено в работе [6]. Там же обсуждаются неопределенности в предложенной параметризации.

Результаты расчетов опубликованы в журнале из Q2. Дальнейшая работа по уточнению параметризации прочности выходит за рамки проекта РНФ, так как представляет задачу механики морского льда.

# 2.4.3 Разработка универсальной библиотеки термодинамики льда со снегом

В 2022 году была подготовлена и принята в печать публикация Петров С.С., Зюзин В.К., Яковлев H.Г. «The new sea ice thermodynamics code for the INM RAS Earth System model: the design and comparison of one- and zero-dimensional setups with the observational data» в «Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling». Ниже кратко описаны основные результаты проделанной работы.

#### 2.4.3.1 Основные уравнения

Закон сохранения энтальпии выражается нелинейным уравнением диффузии тепла с проникающей радиацией

$$\rho \left. \frac{\partial E}{\partial t} \right|_{z} = \rho c \left. \frac{\partial T}{\partial t} \right|_{z} = \frac{\partial}{\partial z} \left( k \frac{\partial T}{\partial z} + R \right), \tag{4.1}$$

где E - энтальпия,  $\rho$  - плотность, T - температура, c - теплоемкость, k - теплопроводность, R - количество коротковолнового излучения, проникающего в толщу. Поскольку толщина льда/снега меняется во времени, уравнение (4.1) определено на открытом подвижном интервале ( $z_b$ ,  $z_{su}$ ), где  $z_b$  и  $z_{su}$  координаты нижней и верхней поверхности льда для оси z, направленной вверх. Естественный подход к решению задачи состоит в том, чтобы разделить процессы диффузии тепла и процессы плавления/намерзания в численной реализации. После каждого обновления толщины льда температурный профиль интерполируется на новую сетку с использованием консервативной процедуры (см., например, [7]). Однако, в работе [8] было показанно, что данный подход вычислительно более затратный по сравнению с решением уравнения в сигма-координатах, что особенно проявляется в случае высокого пространственного разрешения. В связи с этим, мы используем сигма-преобразование  $\sigma = (z - z_b)/(z_{su} - z_b)$  для расчета диффузии тепла совместно с вариацией толщины. Используя правило производной сложной функции в левой части уравнения (4.1), получаем уравнение адвекции-диффузии, которое выражает закон сохранения энтальпии в сигма-области

$$\rho\left(\left.\frac{\partial E}{\partial t}\right|_{\sigma} + \dot{\sigma}\frac{\partial E}{\partial \sigma}\right) = \frac{\partial}{\partial z}\left(k\frac{\partial T}{\partial z} + R\right). \tag{4.2}$$

Временной масштаб процесса плавления/намерзания намного больше, чем масштаб диффузии тепла, поэтому уравнение (4.2) определяет задачу с преобладанием диффузии, которая не требует специальных методов численной стабилизации. Аналогично [8], закон сохранения энергии дополняется уравнением сохранения массы

$$\frac{\partial(\partial z/\partial\sigma)}{\partial t} + \frac{\partial(\partial z/\partial\sigma \cdot \dot{\sigma})}{\partial\sigma} = 0.$$
(4.3)

Вводя поток массы следующим образом  $\omega = \partial z / \partial \sigma \cdot \dot{\sigma}$  и отмечая, что  $\partial z / \partial \sigma = z_{su} - z_b = h$  не зависит от  $\sigma$ , получаем, что  $\omega$  является линейной функцией  $\sigma$ . Поэтому граничных значений  $\omega$  достаточно для определения этой велечины во всей области. Умножая уравнение (4.2) на  $\partial z / \partial \sigma$  и комбинируя результат с уравнением (4.3) получаем

$$\frac{\partial(\rho E \ \partial z/\partial\sigma)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho E \omega)}{\partial\sigma} = \frac{\partial}{\partial\sigma} \left(k\frac{\partial T}{\partial z} + R\right). \tag{4.4}$$

Это конечная форма уравнения адвекции-диффузии, которую мы будем использовать для формулировки дискретной задачи.

#### 2.4.3.2 Граничные условия

Граничное условие на интерфейсе "лед/снег-атмосфера" или "лед-океан" может быть записано в универсальном виде

$$\left[\rho L \frac{dz}{dt} = F - k \frac{\partial T}{\partial z}\right]_{z=z_b, z_{su}},\tag{4.5}$$

где L - удельная теплота плавления/замерзания для льда/снега, а F - внешний атмосферный/океанический поток. Это граничное условие означает, что количество энергии для изменения толщины льда/снега в единицу времени равно разнице внешнего и внутреннего проводящиго теплового потока. Интегрируя уравнение (4.3) по всей  $\sigma$ -области, получаем  $\frac{\partial h}{\partial t} = \omega_{\rm b} - \omega_{\rm su}$ , таким образом, лед образуется на нижней границе, если  $\omega_{\rm b}$  положительна и тает на поверхности, если  $\omega_{\rm su}$  положительна. Это означает, что знак  $\omega$  противоположен dz/dt, если ось z направлена наверх , и мы можем переписать уравнение (4.5) в терминах  $\omega$ 

$$\left[\rho L\omega = k \frac{\partial T}{\partial z} - F\right]_{z=z_{\rm b}, z_{\rm su}}.$$
(4.6)

Если рассматривается конфигурация льда со снегом, то на границе раздела "лед-снег" ставится условие непрерывности температуры и проводящего потока

$$T_{i}|_{\text{ice surface}} = T_{s}|_{\text{snow base}},$$

$$-k_{i}\frac{\partial T_{i}}{\partial z}\Big|_{\text{ice surface}} = -k_{s}\frac{\partial T_{s}}{\partial z}\Big|_{\text{snow base}}.$$
(4.7)

#### 2.4.3.3 Параметризация теплоемкости, теплопроводности и энтальпии

В настоящее время широко используются несколько параметризаций теплоемкости и теплопроводности морского льда. "Параметризация соляных карманов" основана на предположении, что морской лед состоит из продольных разрезов, наполненных рассолом, которые окружены свежим льдом. Теплоемкость и теплопроводность, впервые описанные в [9], могут быть введены как функции температуры *T* и солености *S* следующим образом

$$k(S,T) = k_{i0} + \frac{\beta S}{T},$$
(4.8)

$$c(S,T) = c_{p0} + \frac{\gamma S}{T^2},$$
(4.9)

где  $k_{i0}$  - теплопроводность пресного льда,  $c_{p0}$  - теплоемкость пресного льда или снега,  $\beta$  и  $\gamma$  - эмперические константы. В работе [10] впервые показано, что энтальпия морского льда может быть записана в форме

$$E(S,T) = c_{p0} \left(1 - \frac{-\mu S}{T}\right) - L_{f0} \left(1 - \frac{-\mu S}{T}\right) + c_{po} \frac{-\mu S}{T}T,$$
(4.10)

где  $L_{f0}$  скрытая теплота плавления пресного льда,  $c_{po}$  теплоемкость воды при солености 30 промилле. Это определение энтальпии согласуется с уравнением (4.9), поскольку  $c(S,T) = \partial E/\partial T$ . Используя параметризацию (4.8), мы обнаружили проблемы с неопределенностью k в случае приближения температуры льда к точке плавления, поэтому вместо нее мы реализовали параметризацию "bubbly-brine" [11]

$$k(S,T) = \frac{\rho_i}{\rho_0} \left( 2.11 - 0.011T + 0.09S/T \right).$$
(4.11)

#### 2.4.3.4 Краткое описание численной реализации

В программном коде реализованна временная схема BL99 [12], сохраняющая суммарную сеточную энтальпию. Адвективное слагаемое дискретизуется стандартным методом против потока первого порядка аппроксимации по пространству, диффузионное слагаемое аппроксимируется центральными разностями второго порядка. В результате дискретная задача сводится к решению системы линейных уравнений с трехдиагональной матрицей, которое производится методом прогонки за линейное время. Совместно с поиском профиля температур по толщине оценивается граничное значение температуры, удовлетворяющее граничному условию (4.6). Для этого решается одномерная нелинейная задача поиска нуля монотонной функции методом секущих. В связи с тем, что коэффициенты теплоемкости и теплопроводности зависят от низвестной температуры, см. (4.11), (4.9), мы реализовали метод релаксации нелинейных коэффициентов. В конечном итоге вычисления организованы таким образом, что в случае сходимости находится температурный профиль вместе с поверхностной температурой, согласованный с граничными условиями, а также новые значения толщин ячеек. Данный метод является неявным и абсолютно устойчивым, что позволяет использовать произвольно большой шаг по времени.

#### 2.4.3.5 Результаты численных экспериментов

В работе проведено качественное сравнение одномерной и нульмерной моделей термодинамики морского льда со снегом.

В первом численном эксперименте задается искусственный форсинг - температура атмосферы и скорость выпадения осадков. Сравниваются временные ряды температуры и толщины 1D и 0D моделей.

Во втором эксперименте проводится валидация моделей на реальных данных полевых измерений SHEBA [13].

#### 2.4.3.5.1 Искусственный форсинг

График изменения внещних параметров, определяющих термодинамику льда представлен на Рис.4.6.



РИС. 4.6: Эволюция температуры атмосферы и осадков в эксперименте с искусственным форсингом.

Результаты 0D и 1D моделирования представлены на Рис. 4.7 и Рис. 4.8. Видно, что профили температуры 1D модели более гладкие и инертные, с меньшими амплитудами температуры в период замерзания и таяния. Разница температур влияет на точность аппроксимации градиента, что выражается в значительной разнице в прогнозируемой толщине льда. 0D модель предсказывает гораздо меньшую толщину льда и процесс таяния значительно интенсивнее в "летний" период.

Однако температуры снега отличаются не так значительно, поскольку коэффициенты теплоемкости и теплопроводности снега постоянны во времени для 1D-модели, что отражается в близком к линейному профилю температур, который предсказывается и 0D-моделью. Это приводит к почти одинаковой толщине снега. Температура поверхности снега или льда (в случае растаявшего снега) также практически идентичны (см. Рис. 4.9). Таким образом, мы делаем вывод о том, что грубое приближение 0D модели дает неплохой результат, с точки зрения предсказания поверхностной температуры.



Рис. 4.7: Временной ряд температур льда и снега, полученный с помощью 0D модели.



Рис. 4.8: Временной ряд температур льда и снега, полученный с помощью 1D модели.



Рис. 4.9: Временной ряд поверхностной температуры для 1D и 0D моделей в задаче с искусственным форсингом.

#### 2.4.3.5.2 Валидация кода на реальных данных

Опишем процесс валидации представленных 0D и 1D моделей на данных полевого эксперимента SHEBA [13]. Группа ученых измеряла различные физические характеристики льда и прилегающих к нему пограничных слоев океана и атмосферы каждый час в течение 10 месяцев на ледоколе, дрейфующем вместе с льдиной в море Бофорта. Как и в более ранних работах [8, 14], мы ориентируемся на Питтсбургскую площадку, так как она располагалась на ровном многолетнем льду. В работе [15] предложен градиентный метод для более точной оценки положения границ раздела льда и снега с использованием измерений температуры с помощью нити термистров. Эти оценки были использованы в нашей работе. Измеренные профили температуры показаны на Рис. 4.10. Исходное состояние модели получается путем интерполяции измеренных температур в начальный момент времени на модельную сетку. Поток из океана в данных SHEBA был получен как разность мощности таяния/намерзания нижней границы, которая оценивается по измерениям толщины льда, и проводящим потоком тепла, полученным с помощью линейного приближения градиента измеренных температур на уровне 30 сантиметров [15]. Реализован линейный профиль солености со значением 4 промилле у основания до 1 промилле у



РИС. 4.10: Временной ряд измеренных температур эксперимента SHEBA.

поверхности льда. Толщина снега не является монотонной в период отсутствия таяния с декабря по май (рис. 4.10). Как отмечается в работе [14], это может быть связанно с горизонтальными процессами сдувания снега, которые не могут быть учтены в одномерной модели. При валидации мы использовали "эффективную" скорость осадков, которая обеспечивает наблюдаемую толщину снега в период отсутствия таяния.

Разница между предсказанным 1D моделью с 16 ячейками во льду и 10 ячейками в снегу и наблюдаемым временным рядом показана на Рис. 4.11. Видно хорошее соответствие между температурами, особенно в нижних слоях льда. Также можно заключить, что ошибка в толщине льда спустя 10 месяцев моделирования составляет примерно 10 см.



Рис. 4.11: Разница между предсказанным 1D моделью и наблюдаемым временным рядом.

На Рис. 4.12 представлен аналогичный результат для 0D модели. Видно существенное расхождение с данными наблюдений - амплитуда ошибки температур достигает 10 °C, а также значительное расхождение в предсказаной и наблюдаемой толщины льда, которое достигает полуметра в конечный момент. Таким образом, можно сделать вывод, что 0D модели очень плохо предсказывают мгновенный про-



Рис. 4.12: Разница между предсказанным 0D моделью и наблюдаемым временным рядом.

филь температур, что в свою очередь приводит к большим ошибкам в толщине льда, из-за неточности аппроксимации градиента температур на границе. Однако, как и в первом численном эксперименте, ошибка в поверхностной температуре не так велика, что продемонстрировано на Рис. 4.13 – амплитуда ошибки в поверхностной температуре всего в полтора раза больше для 0D модели.



Рис. 4.13: Ошибка в поверхностной температуре для 1D и 0D реализаций.

#### 2.4.3.6 Выводы по проделанной работе

В 2022 году была начата работа по разработке динамического блока модели морского льда на треугольной CD-сетке. В частности реализованы и протестированы схемы переноса скаляров на произвольной поверхности. Использование CD сеток является хорошей альтернативой стандартным А-сеткам с точки зрения разрешающей способности Линейных Кинематических Особенностей. В программном коде на языке C++ применяется нестандартный подход численного решения уравнений в локально-декартовом базисе, который делает код универсальным для любой геометрии (плоскость, сфера, геоид).

Таже в 2022 году была разработана, протестирована и валидирована на реальных данных измерений библиотека термодинамики морского льда со снегом. В подготовленной публикации дается подробное описание физических, вычислительных аспектов написанного кода, а также проводится сравнение 1D и 0D реализаций. Разработанная на языке C++ библиотека может быть оптимизированна под использование графических ускорителей (CUDA), а также может подключаться как внешний модуль к другим моделям океана, льда и климата.

Исследованы возможности улучшения стандартной параметризации прочности морского льда для случая окраинных морей и получены предварительные результаты для случая Белого моря (статья Q2). Изучается возможность обобщения использованных эмпирических соображения на общий случай распределения толщины льда по градациям толщины.

В 2023 году планируется завершить разработку динамического блока на CD-сетке и собрать начальную версию совместной модели динамики-термодинамики морского льда со снегом, которая может быть использована для прогноза состояния ледяного покрова.

### Литература

- TOPAZ4: an ocean-sea ice data assimilation system for the North Atlantic and Arctic / P. Sakov,
   F. Counillon, Laurent Bertino et al. // Ocean Science Discussions. 2012. 04. Vol. 9. Pp. 1519-1575.
- [2] Simulating Linear Kinematic Features in Viscous-Plastic Sea Ice Models on Quadrilateral and Triangular Grids With Different Variable Staggering / C. Mehlmann, S. Danilov, M. Losch et al. // Journal of Advances in Modeling Earth Systems. - 2021. - Vol. 13, no. 11. - P. e2021MS002523.
   - e2021MS002523 2021MS002523. URL: https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10. 1029/2021MS002523.
- [3] Tamamidis Panos. A new upwind scheme on triangular meshes using the finite volume method // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. - 1995. - Vol. 124, no. 1. - Pp. 15-31. -URL: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0045782594007518.
- [4] Bidadi Shreyas, Rani Sarma L. Quantification of numerical diffusivity due to TVD schemes in the advection equation // Journal of Computational Physics. - 2014. - Vol. 261. - Pp. 65-82. - URL: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999113008103.
- [5] Mehlmann Carolin, Korn Peter. Sea-ice dynamics on triangular grids // Journal of Computational Physics. - 2021. - Vol. 428. - P. 110086. - URL: https://www.sciencedirect.com/science/ article/pii/S0021999120308603.
- [6] Ridging, strength, and stability in high-resolution sea ice models / W. Lipscomb, Elizabeth Hunke, Wieslaw Maslowski, Jaromir Jakacki // Journal of Geophysical Research. - 2007. - 03. - Vol. 112.
- [7] CICE: The Los Alamos Sea Ice Model documentation and software user's manual version 4.1 / Elizabeth C Hunke, William H Lipscomb, Adrian K Turner et al. -2010. 5. -Vol. 675.
- [8] Comparison of different numerical approaches to the 1D sea-ice thermodynamics problem / Frederic Dupont, Martin Vancoppenolle, Louis-Bruno Tremblay, Hendrik Huwald // Ocean Modelling. — 2015. — Vol. 87. — Pp. 20-29. — URL: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/ S1463500314001930.
- [9] Untersteiner N. On the mass and heat budget of Arctic sea ice // Archiv für Meteorologie, Geophysik und Bioklimatologie Serie A. - 1961. - 01. - Vol. 12. - Pp. 151-182.

- [10] Ice-ocean boundary conditions for coupled models / G. A. Schmidt, C. M. Bitz, U. Mikolajewicz, L.-B. Tremblay // Ocean Model. 2004. Vol. 7. Pp. 59-74.
- [11] Thermal conductivity of landfast Antarctic and Arctic sea ice / Daniel Pringle, Hajo Eicken, H. Trodahl,
   L. Backstrom // J. Geophys. Res. 2007. 04. Vol. 112.
- [12] Bitz C. M., Lipscomb William H. An energy-conserving thermodynamic model of sea ice // Journal of Geophysical Research: Oceans. - 1999. - Vol. 104, no. C7. - Pp. 15669-15677. - URL: https: //agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/1999JC900100.
- [13] Measurements near the Atmospheric Surface Flux Group tower at SHEBA: Near-surface conditions and surface energy budget / Ola Persson, Chris Fairall, E. Andreas et al. // Journal of Geophysical Research.
   2002. - 10. - Vol. 107. - Pp. C10, 8045.
- [14] Huwald Hendrik, Tremblay Bruno, Blatter H. A multilayer sigma-coordinate thermodynamic sea ice model: Validation against Surface Heat Budget of the Arctic Ocean (SHEBA)/Sea Ice Model Intercomparison Project Part 2 (SIMIP2) data // J. Geophys. Res. - 2005. - 05. - Vol. 110.
- [15] Huwald Hendrik, Tremblay Bruno, Blatter H. Reconciling different observational data sets from Surface Heat Budget of the Arctic Ocean (SHEBA) for model validation purposes // J. Geophys. Res. - 2005. - 05. - Vol. 110.