Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт вычислительной математики им. Г.И. Марчука
Российской академии наук

На правах рукописи

Легкий Алексей Андреевич

Вычислительная биомеханика сердца: сократительная активность миокарда и диастолическое состояние аортального клапана

Специальность 1.2.2 —
«Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»

Диссертация на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
кандидат физико-математических наук
Данилов Александр Анатольевич

Научный консультант:
кандидат физико-математических наук
Саламатова Виктория Юрьевна

Москва — 2025

Оглавление

Введение

Актуальность темы. Сердечно-сосудистые заболевания (ССЗ) остаются одной из ведущих причин смертности в мире, а их распространённость продолжает неуклонно расти, что подтверждается данными глобальных эпидемиологических исследований [37; 99]. Это делает исследования в области физиологии и патофизиологии сердца критически важными для разработки новых методов диагностики и лечения. Особенность сердечных патологий заключается в их многоуровневом проявлении: нарушения затрагивают клеточные структуры, внеклеточный матрикс, тканевую архитектуру и анатомию всего органа [21]. Такие изменения часто возникают как компенсаторный механизм для поддержания кровоснабжения, но со временем могут усугублять заболевание, создавая порочный круг. Понимание взаимосвязи между структурными перестройками и функциональными нарушениями сердца становится ключевым для создания эффективных терапевтических стратегий.

Современные подходы к борьбе с ССЗ включают инновационные направления, такие как тканевая инженерия, разработка медицинских устройств, таргетных препаратов и персонализированных методов лечения. В этих областях вычислительные модели биомеханики сердца играют ведущую роль, позволяя тестировать новые методы лечения in silico, минимизируя риски и сокращая число экспериментов на животных [39]. Кроме того, применение численных моделей упрощает принятие клинических решений — от предоперационного планирования [54; 123] до коррекции терапии в реальном времени [84].

Сердце выполняет ключевую механическую функцию, обеспечивая циркуляцию крови по организму за счёт ритмичного сокращения и расслабления тканей миокарда. Однако эти сокращения не являются пассивным процессом — они инициируются электрической активностью кардиомиоцитов, что делает невозможным полное воспроизведение насосной функции сердца с помощью чисто механических моделей при нарушениях ритма или координации, вызванных патологиями. Для таких случаев требуется использование электромеханических моделей, объединяющих электрические и механические аспекты работы сердца. Подобные сопряжённые модели позволяют исследовать заболевания, одновременно затрагивающие обе функции, такие как желудочковая тахикардия, фибрилляция [52; 61] или блокада левой ножки пучка Гиса [82], а также разрабатывать методы их коррекции [161]. Также перспективным направлением является создание персонализированных цифровых двойников сердца, которые помогают анализировать последствия сердечной недостаточности, ишемической и гипертрофической кардиомиопатии [36; 67; 140; 147; 169]. Однако внедрение таких моделей в клиническую практику остаётся ограниченным из-за высоких вычислительных затрат и длительности симуляций.

Отдельной проблемой остаётся патология аортального клапана (АК), на которую приходится свыше 53% случаев смерти от приобретённого порока сердца [62]. Возрастная кальцификация створок АК часто приводит к потере их функциональности, что требует хирургического вмешательства. Одним из эффективных методов лечения является процедура Озаки, предполагающая замену патологических створок на аутотрансплантаты, вырезанные из перикарда пациента. Основная проблема методики состоит в необходимости выбора анатомически оптимального дизайна новых створок. Неверный размер может вызвать регургитацию или блокировку коронарных артерий [102], а у 12.5% пациентов после операции приводит к развитию тромбоза [57]. Численный расчёт диастолического состояния (конфигурации, закрытой в процессе диастолы) клапана, размещённого на геометрии корня аорты пациента, позволяет прогнозировать функциональность реконструкции, снижая риски осложнений.

Цель исследования. Интегрируя современные методы вычислительной механики и знания о физиологии сердца, разработать эффективную программную платформу для проведения численных экспериментов с сопряжённой моделью электромеханики сердца, а также предложить и реализовать персонализированную численную модель закрытия реконструированного аортального клапана, позволяющую оценить его пригодность на предоперационном этапе.

Задачи исследования. В процессе развития темы исследования для достижения поставленных целей были решены следующие задачи.

1. Выявить общую структуру моделей сопряжённой электромеханики тканей сердца, выделить типичные связи между их отдельными физическими подмоделями и на основе этого сформировать программную архитектуру для разработки соответствующей вычислительной платформы.
2. Предложить, реализовать и численно исследовать полностью разделённую численную схему для эффективной дискретизации сопряжённых моделей электромеханики миокарда.

3. Реализовать гибкую программную библиотеку для построения конечно-элементных дискретизаций уравнений в частных производных общего вида на тетраэдральных сетках.
4. Реализовать программный модуль, предназначенный для численного решения трёхмерных уравнений движения миокарда в рамках вычислительной платформы для моделирования сопряжённой электромеханики тканей сердца.
5. Реализовать программу-симулятор для расчёта движения оболочек и мембран с учётом их контактных взаимодействий.
6. Предложить и реализовать численную модель для оценки закрытого состояния реконструированного аортального клапана (АК), причём учесть в модели персонализированную геометрию корня аорты и особенности процедуры хирургического размещения створок.
7. Математически формализовать медицинские понятия, используемые для оценки состоятельности АК.
8. Провести расчёты закрытия клапанов Озаки на ряде геометрий корня аорты свиней для сравнения с результатами натурного эксперимента.

Научная новизна. В представленном исследовании получены следующие новые научные результаты.

1. Предложена и реализована новая численная схема расщепления по процессам для моделирования сопряжённой модели электромеханики сердца, где распространение электрической активации и деформация сплошной среды описываются на несогласованных тетраэдральных сетках и связаны друг с другом посредством систем ОДУ для клеточных уравнений, решаемых независимо в точках интегрирования.
2. Подготовлен и впервые осуществлён трёхмерный расчёт сопряжённой модели электромеханики сердца, использующей уравнения сопряжения, предложенные Ф. Сёминым, А. Цатуряном и А. Осепян [150].
3. Реализована новая численная схема для расчёта деформирования тонкостенных конструкций с учётом контактных взаимодействий, применимая для рассмотрения не только динамических, но и квазистатических задач, и позволяющая использовать неявные схемы с большими шагами по (квази-)времени.
4. Предложена автоматическая технология виртуального размещения плоских створок реконструированного аортального клапана внутри

полости аорты пациента вдоль заданных линий крепления с учётом особенностей процедуры хирургического размещения створок.

5. Разработана первая персонализированная модель отыскания закрытого состояния реконструированного аортального клапана для оценки его пригодности в операции Озаки на основе параметров коаптации.

Методология и методы исследования. Исследование выполнено на основе интеграции методов вычислительной механики, клинической кардиологии и математического моделирования. Теоретическая база включает классические уравнения механики деформируемого твёрдого тела и электрофизиологии, адаптированные для описания сопряжённых процессов в сердце. Корректность численных алгоритмов подтверждена верификацией на эталонных задачах и сравнением с опубликованными данными. Адекватность персонализированной модели закрытия аортального клапана подтверждена путём проведения вычислительных экспериментов и оценки отклонения рассчитанных значений и значений, измеренных в натурном эксперименте.

Практическая значимость. Сопряжённые модели служат мостом между теорией и практикой: не только улучшают диагностику, лечение и разработку терапии, но и обеспечивают данные для нейросетевых алгоритмов, создают основу для цифровых двойников и редуцированных моделей, делая кардиологию более прогностической, персонализированной и технологичной. Реализация специализированной платформы `CarNum` позволяет упростить и ускорить процесс разработки и внедрения таких моделей. Предложенная численная схема для дискретизации сопряжённых моделей позволяет достигнуть оптимального баланса между точностью расчётов и вычислительной эффективностью.

Реализованная автором конечно-элементная библиотека `AniFem++` расширяет множество типов дискретизаций, поддерживаемых вычислительным фреймворком `INMOST`, и может быть использована для решения разнообразных инженерных и исследовательских задач. Встроенная поддержка тензоров до 4-го ранга и автоматического дифференциирования позволяет также применять данный пакет для нелинейных задач и, в частности, для задач нелинейной механики сплошных сред.

Численное моделирование закрытия реконструированного аортального клапана позволяет прогнозировать его функциональность, снижая риски осложнений после хирургических операций. Автоматизация технологии расчётов с учётом данных о геометрии аорты конкретного пациента — первый шаг к построению системы поддержки принятия врачебных решений (СППВР), предлагающей оптимальный дизайн аутотрансплантанта в операции Озаки.

Разработанный программный пакет для моделирования деформаций тонкостенных оболочек является довольно общим и поддерживает моделирование произвольных гиперупругих материалов. Данный пакет может использоваться как для проведения биомеханических и медицинских исследований, например, связанных с клапанами, сосудами, роговицей, так и для различных прикладных и инженерных задач, рассматривающих полимеры и подобные материалы в рамках нелинейной теории упругости.

Основные положения, выносимые на защиту. Основным результатом работы является подготовка комплексов программ общего назначения для решения задач нелинейной теории упругости и их применение в формировании программной платформы для расчёта сопряжённых моделей миокарда, а также в разработке персонализированной технологии для расчёта диастолического состояния аортального клапана. На защиту выносятся следующие положения.

1. Комплекс программ для расчёта трёхмерных деформаций объёмных тел и тонкостенных конструкций.
2. Эффективная численная схема для дискретизации сопряжённой модели электромеханики миокарда.
3. Комплекс программ для проведения численных экспериментов с сопряжённой моделью электромеханики миокарда.
4. Автоматический алгоритм виртуального размещения тонких створок клапана в просвете корня аорты пациента.
5. Персонализированная модель для оценки коаптации реконструированного аортального клапана в диастолическом состоянии.

Степень достоверности работы. Для независимой верификации блоков трёхмерной кардиомеханики и электрофизиологии из представленной платформы для моделирования сопряжённой электромеханики сердца было проведено решение ряда тестовых задач [81; 106; 117]. Результаты тестирования совпадают с опубликованными данными других научных групп. Картины решений трёхмерной сопряжённой модели качественно выглядят физично и схожи с ранее полученными в работе [152] на двумерных расчётах.

Предсказания модели закрытия аортального клапана показали частичную согласованность с результатами выполненных П.А. Каравайкиным [181] натурных экспериментов по неокуспидизации 20 свиных корней аорты.

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались на 18 конференциях и симпозиумах. Среди них 5 международных мероприятий: NUMGRID, ФИЦ ИУ РАН, Москва, 2018, 2024; «The Eleventh Workshop on Numerical Methods and Mathematical Modelling in Biology and Medicine», ДВФУ, Владивосток, 2019; «The International Conference Smart Computational Methods in Continuum Mechanics», МФТИ, Москва, 2021; «International Forum on Intelligent Computing in Rehabilitation Medicine», SIAT, Шэньчжэнь, Китай, 2024. И 13 всероссийских: «Математические модели и численные методы в биологии и медицине», ИВМ РАН, Москва, 2018, 2021-2024; конференция МФТИ, Москва, 2021, 2023; симпозиум по биомеханике, НИИ Механики МГУ, Москва, 2023, 2025; конференция молодых учёных-механиков, «Буревестник» МГУ, Сочи, 2021; школа-конференция молодых учёных: «Проблемы механики: теория, эксперимент и новые технологии», ИТПМ, Новосибирск, 2022; онлайн семинар по биомеханике, Пермь, 2022; съезд по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики, СПбПУ, Санкт-Петербург, 2023.
Также результаты докладывались на семинаре ИВМ РАН «Вычислительная математика и её приложения», семинаре лаборатории биожидкостей ПНИПУ, семинаре МГУ по биомеханике и семинаре ИИФ УрО РАН.
По итогам конференций опубликованы тезисы докладов [183—185].

Публикации. Основные результаты по теме диссертации изложены в 11 публикациях [33; 76; 89—92; 136—138; 165; 166] в журналах, входящих в перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание учёной степени кандидата наук. Все эти публикации входят в систему цитирования Scopus и/или Web of Science.

Личный вклад. Вклад автора в работу [91] состоял в проработке программной архитектуры вычислительной платформы для моделирования сопряжённой электромеханики сердца. Также в рамках данной работы автором была реализована конечно-элементная библиотека `AniFem++`, в составе платформы проработан блок, отвечающий за моделирование трёхмерной кардиомеханики, и проведена верификация соответствующего блока на тестовых задачах с исследованием его параллельной эффективности.

В работе [92] автором предложена и реализована численная схема для расчёта сопряжённой модели электромеханики миокарда, а также проведено численное исследование поведения ошибок метода в зависимости от мелкости дискретизации, включающее ряд расчётов на вычислительном кластере.

В работах [33; 76; 136—138; 165; 166] вклад автора заключался в программной реализации описанных моделей упругости и модели закрытия аортального клапана (АК), запуске расчётов и сборе результатов счёта для дальнейшего анализа. Используемые постановки тестовых задач, геометрии пациентов и линии крепления подготавливались соавторами. В [137] автором также предложена формулировка идеализированной геометрии АК.

Работы [89; 90], выполненные автором самостоятельно, обобщают накопленный опыт моделирования АК и посвящены таким вопросам как разработка автоматического алгоритма виртуального размещения створок внутри полости корня аорты по заданным линиям крепления, выбор метода учёта контактного взаимодействия, формулировка критерия останова для расчётов и выработка математически однозначных формулировок для величин коаптации.

Объем и структура работы. Диссертация состоит из введения, 4 глав, заключения, списка сокращений и условных обозначений, списка литературы и 3 приложений. Полный объём диссертации составляет 145 страниц, включая 34 рисунка и 5 таблиц. Список литературы содержит 185 наименований.

Благодарности. Автор глубоко признателен Ю.В. Василевскому за активное участие в обсуждении ключевых задач, ценные рекомендации, а также организационную деятельность, которая подталкивала развитие исследований. Также благодарность направляется научному руководителю А.А. Данилову и научному консультанту В.Ю. Саламатовой за интересные постановки задач, полезные дискуссии и профессиональное наставничество Их опыт и критические замечания помогли сформировать концептуальную базу работы. Отдельная признательность — сердечно-сосудистому хирургу П.А. Каравайкину. Его экспертиза, активное участие в обсуждениях по моделированию аортального клапана и подготавливаемые клинические данные были незаменимы при проработке задачи. За значимый вклад в разработку вычислительной платформы `CarNum`, а также за детальные консультации по вопросам сопряжения электромеханических моделей, автор выражает благодарность Ф.А. Сёмину. Также автор благодарит свою жену за проявленное терпение и редакторскую помощь.

Работа поддержана грантами РНФ 21-71-30023, 22-71-10007 и Московским центром фундаментальной и прикладной математики (соглашение с Минобрнауки России № 075-15-2022-286).

Глава 1. Вычислительные методы нелинейной теории упругости

Нелинейная теория упругости исследует поведение материалов, для которых зависимость напряжений от деформаций существенно нелинейна и/или деформации столь значительны, что приводят к нелинейности геометрических соотношений. Эта область охватывает широкий спектр материалов: от резин и мягких биологических тканей до полимеров и металлов за пределом упругости. Поскольку аналитические решения возможны лишь для предельно простых случаев, вычислительные методы становятся основным инструментом анализа.

Благодаря своей универсальности в работе со сложными геометриями, граничными условиями и нелинейными материалами доминирующим подходом для пространственной дискретизации является метод конечных элементов (МКЭ) [172]. Технология естественно интегрирует большие деформации в лагранжевом описании, однако сталкивается с проблемой искажения сетки при экстремальных деформациях. Также активно исследуются альтернативные подходы: метод конечных объемов (МКО) [23] и метод виртуальных элементов (МВЭ) [174], чьи схемы для твердых тел требуют специфической адаптации, в частности, для учёта материальной нелинейности; методы частиц [31; 75], эффективные для задач с фрагментацией и сложным контактом благодаря лагранжеву описанию границ и периодическому перестроению сетки; и бессеточные методы [177], аппроксимирующие решение по облаку узлов и перспективные для экстремальных деформаций, но требующие значительных ресурсов и имеющие сложности с граничными условиями.

При моделировании динамики критичен выбор схемы интегрирования по времени. Явные схемы, такие как метод центральных разностей, эффективны для быстропротекающих процессов благодаря условной устойчивости и отсутствию необходимости решения систем уравнений на каждом шаге, а неявные схемы, например типа Ньюмарка, предпочтительны для квазистатики и медленной динамики из-за безусловной устойчивости, несмотря на необходимость решения нелинейных систем на каждом шаге [133].

Отдельную сложность представляет учет контактного взаимодействия между телами. Выбор подхода здесь зависит как от специфики задачи (известна ли зона контакта, степень деформации тел, характер трения), так и от используемого метода дискретизации [45]. Параллельно ведутся исследования в области решения возникающих нелинейных алгебраических систем, причём разрабатываются как общие ньютоновские и квази-ньютоновские схемы, так и специализированные подходы для конкретных случаев [172].

Целью данной главы является введение фундаментальных понятий и уравнений, определяющих движение сплошных сред в рамках механики деформируемого твердого тела, а также описание подходов к их численному решению, которые будут использованы в последующих главах для прикладных задач диссертации. Глава объединяет теоретическую основу, включая базовые уравнения для полноразмерных тел и тонких оболочек Кирхгофа-Лява, с описанием численных схем дискретизации. Следует отметить, что полный обзор всех упомянутых методов дискретизации и сопутствующих численных вызовов выходит за рамки настоящей работы, здесь будут рассмотрены только подходы, которые легли в основу разработанных программных комплексов общего назначения, представленных в главе 4.

1.1 Основы механики сплошных сред

Здесь будет изложено краткое описание необходимых понятий и обозначений из механики сплошной среды. За более подробным описанием и выводом уравнений рекомендуется обратиться к книгам и учебным пособиям, посвящённым механике сплошных сред, например, [28; 64; 110; 182].

Здесь и всюду далее в данной работе, если явно не указан знак суммы, будет использоваться правило суммирования Эйнштейна по повторяющимся верхним и нижним индексам.

Кинематика сплошной среды. Пусть имеется некоторая область $\Omega \in \mathbb{R}^3$, которая непрерывно деформируется во времени. Нижним индексом будем обозначать момент времени t, т.е. Ω_t — это результат деформирования области в момент времени t (Рисунок 1.1).

Пусть в начальной конфигурации Ω_0 и в актуальной Ω_t выбраны декартовы системы координат (ДСК) с базисами $\{\mathbf{E}_1, \mathbf{E}_2, \mathbf{E}_3\}$ и $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3\}$ соответственно. Обозначим положение точки в начальной конфигурации $\mathbf{X} = (X^1, X^2, X^3)$, а в актуальной — $\mathbf{x} = (x^1, x^2, x^3)$ относительно соответствующих

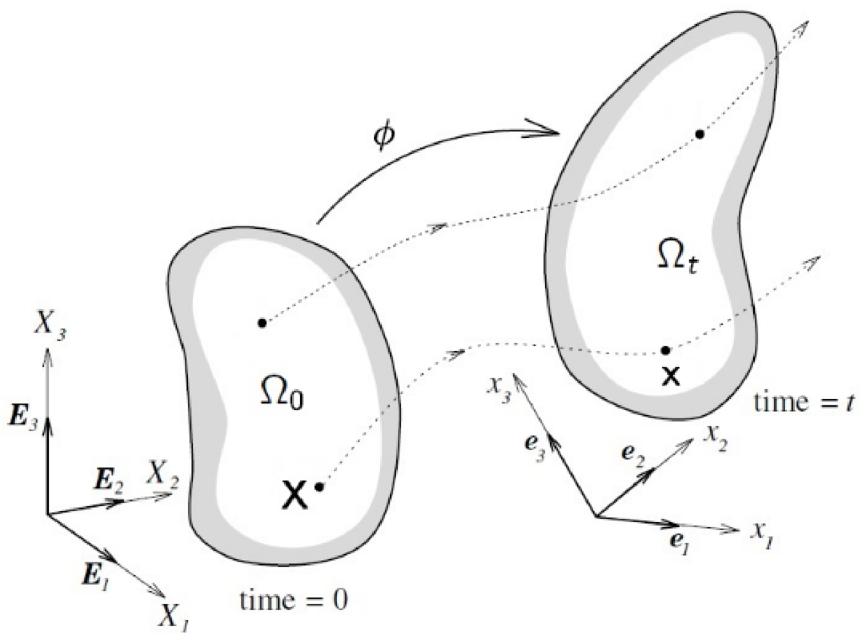


Рисунок 1.1 — Деформация области из начальной конфигурации Ω_0 в актуальную Ω_t

ДСК. Координаты $\mathbf{X} = (X^1, X^2, X^3)$ и $\mathbf{x} = (x^1, x^2, x^3)$ называются, соответственно, *лагранжевыми* и *эйлеровыми*.

Центральным понятием механики сплошной среды является *деформация* — достаточно гладкая функция

$$\mathbf{x} = \Phi(\mathbf{X}, t),$$

устанавливающая взаимно-однозначное соответствие между точками Ω_0 и Ω_t. Связанное с ней *перемещение* определяется как векторное поле $\mathbf{u} = \mathbf{x} - \mathbf{X}$.

Описание изменения формы и размеров среды в первую очередь связано с *тензором градиента деформации*

$$\mathbb{F} = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{X}} = \frac{\partial x^i}{\partial X^j} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{E}^j = \frac{\partial(\mathbf{X} + \mathbf{u})}{\partial \mathbf{X}} = \mathbb{I} + \nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{u},$$

где $\mathbb{I}$ — единичный тензор.

Правый тензор деформации Коши-Грина вводится как

$$\mathbb{C} = \mathbb{F}^T \mathbb{F}.$$

При описании материалов часто используют его изотропные инварианты:

$$I_1 = \operatorname{tr} \mathbb{C}, \quad I_2 = \frac{1}{2}[\operatorname{tr}^2(\mathbb{C}) - \operatorname{tr}(\mathbb{C}^2)], \quad I_3 = \det \mathbb{C}, \quad J = \sqrt{I_3} = \det \mathbb{F}.$$

Для анизотропных материалов с заданными направлениями $\mathbf{f}$ и $\mathbf{s}$ также возникают дополнительные инварианты:

$$I_{4f} = \mathbf{f} \cdot \mathbb{C} \cdot \mathbf{f}, \quad I_{4fs} = \mathbf{f} \cdot \mathbb{C} \cdot \mathbf{s}, \quad I_{5f} = \mathbf{f} \cdot \mathbb{C}^2 \cdot \mathbf{f}, \quad I_{5fs} = \mathbf{f} \cdot \mathbb{C}^2 \cdot \mathbf{s}.$$

Наряду с тензором $\mathbb{C}$ используют и другие тензоры деформации, например, *тензор деформации Грина-Лагранжа* $\mathbb{E} = \frac{1}{2}(\mathbb{C} - \mathbb{I})$.

Механическое напряжение. Реакция сплошной среды на деформации описывается посредством *тензора напряжений Коши*

$$\sigma = \sigma_{ij}\ \mathbf{e}^i\mathbf{e}^j.$$

По своей природе этот тензор характеризует именно физические свойства самой сплошной среды и при рассмотрении классических (неполярных/безмоментных) сред является симметричным.

Наряду с тензором σ используются *первый* $\mathbb{P}$ и *второй* $\mathbb{S}$ *тензоры напряжений Пиолы-Кирхгофа*, связанные простыми соотношениями

$$\mathbb{P} = J\sigma \cdot \mathbb{F}^{-T}, \quad \mathbb{P} = P_{ij}\ \mathbf{e}^i\mathbf{E}^j$$
$$\mathbb{S} = J\mathbb{F}^{-1} \cdot \sigma \cdot \mathbb{F}^{-T}, \quad \mathbb{S} = S_{ij}\ \mathbf{E}^i\mathbf{E}^j$$

причём тензор $\mathbb{S}$ наследуют симметричность тензора σ, а $\mathbb{P}$ — несимметричный.

Уравнение количества движения. Основным уравнением, описывающим динамику, является закон сохранения количества движения, записанный в эйлеровых координатах:

$$\rho\frac{d^2\mathbf{x}}{dt^2} = \rho\mathbf{b} + \operatorname{div}\ \sigma, \quad \mathbf{x} \in \Omega_t,$$

где $\frac{d^2(\cdot)}{dt^2}$ — полная вторая производная, ρ — актуальная плотность материала в точке $\mathbf{x}$, $\mathbf{b}$ — массовые силы в точке $\mathbf{x}$, $\operatorname{div}\ \sigma := \sum\limits_{j=1}^{3} \nabla_{\mathbf{x},j}\sigma^{ij}\ \mathbf{e}_i = \sum\limits_{j=1}^{3} \frac{\partial\sigma^{ij}}{\partial x^j}\ \mathbf{e}_i$.

На практике не редко более удобной оказывается форма этого уравнения, записанная в лагранжевых координатах, поскольку позволяет проводить численные расчёты относительно единственной начальной сетки:

$$\rho_0\frac{\partial^2\mathbf{u}}{\partial t^2} = \rho_0\mathbf{b} + \operatorname{Div}\ \mathbb{P}, \quad \mathbf{X} \in \Omega_0 \tag{1.1a}$$

где ρ_0 — начальная плотность материала в точке $\mathbf{X}$, $\mathbf{b}$ — массовые силы в точке $\mathbf{x}(\mathbf{X})$, $\mathrm{Div}\ \mathbb{P} := \sum\limits_{i=1}^{3} \frac{\partial \mathbb{P}}{\partial X^i} \cdot \mathbf{E}^i = \sum\limits_{i,k,n=1}^{3} \frac{\partial P^{kn}}{\partial X^i} (\mathbf{e}_k \otimes \mathbf{E}_n) \cdot \mathbf{E}^i = \sum\limits_{i,k=1}^{3} \frac{\partial P^{ki}}{\partial X^i} \mathbf{e}_k$ и его выражение зависит от базисного объекта тензора $\mathbb{P}$.

В частности, в случае статической постановки задачи при отсутствии массовых сил уравнение принимает вид:

$$-\mathrm{Div}\ \mathbb{P} = 0, \quad \mathbf{X} \in \Omega_0. \tag{1.1б}$$

Гиперупругость. Для того, чтобы замкнуть систему уравнений (1.1a), необходимо дополнительно задать так называемые *определяющие соотношения*, т.е. функциональные зависимости, связывающие напряжения и деформации тела. В данной диссертации мы будем рассматривать только *гиперупругие материалы* — материалы, для которых существует такая скалярная функция $\psi(\mathbb{F})$, называемая *упругим потенциалом*, что первый тензор напряжений Пиолы-Кирхгофа имеет вид:

$$\mathbb{P} = \frac{\partial \psi(\mathbb{F})}{\partial \mathbb{F}}.$$

С учётом налагаемых на $\psi(\mathbb{F})$ ограничений со стороны независимости от системы отсчёта (объективность), потенциал оказывается функцией только от правого тензора Коши-Грина $\psi(\mathbb{C})$. Даже более того, это функция только от изотропных и анизотропных инвариантов $\mathbb{C}$ [28; 171].

С точки зрения физического смысла экстремальные деформации должны вызывать неограниченный рост напряжений. Говорят, что потенциал ψ удовлетворяет *условию роста* [121], если $\psi(\mathbb{F}) \to \infty$ при $\det(\mathbb{F}) \to +0$ или $||\mathbb{F}||_F \to \infty$.

При анализе существования решений оказывается важна оценка скорости роста, а также знание о выпуклых свойствах упругого потенциала. Функцию ψ называют *коэрцитивной* [12], если существуют такие числа $A > 0$ и $b \in \mathbb{R}$, что

$$\psi(\mathbb{F}) \geqslant A(||\mathbb{F}||_F^2 + ||\mathrm{adj}\ \mathbb{F}||_F^{\frac{3}{2}}) - b.$$

Говорят, что ψ *поливыпуклый* [11], если его можно записать как выпуклую функцию миноров матрицы $\mathbb{F}$, т.е. существует выпуклая функция g такая, что

$$\psi(\mathbb{F}) = g(\mathbb{F}, \mathrm{adj}\ \mathbb{F}, \det \mathbb{F}).$$

Все вместе понятия поливыпуклости, коэрцитивности и условий роста задают основу для исследования задач нелинейной теории упругости и в ряде случаев позволяют доказать существование у них решений [12].

Учёт несжимаемости. Материал является *несжимаемым*, если при всех его движениях не меняется его плотность. Из данного определения вытекает кинематическое условие несжимаемости

$$J(\mathbf{X}, t) = 1, \quad \forall \mathbf{X} \in \Omega_0,\ t \in [0, T]. \tag{1.2}$$

Учёт несжимаемости приводит к модификации уравнений движения и введению дополнительной неизвестной — множителя Лагранжа p, имеющего в случае жидкостей смысл давления:

$$\rho_0 \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} = \rho_0 \mathbf{b} + \mathrm{Div}\, \mathbb{P}_p, \tag{1.3а}$$

$$J - 1 = 0, \tag{1.3б}$$

где $\mathbb{P}_p = \frac{\partial(\psi + \psi_p)}{\partial \mathbb{F}}$ и $\psi_p = -p \cdot (J - 1)$.

Численное решение системы уравнений с несжимаемостью является сложной задачей даже в рамках линейной упругости и требует использования специальных подходов при его дискретизации, в частности, необходимо соблюдать условия Ладыженской - Бабушки - Брецци [9].

На самом деле биологические ткани не являются строго несжимаемыми [168] и поэтому вместо наложения условия (1.2), можно лишь вводить в гиперупругий потенциал дополнительное слагаемое — *объёмный потенциал* $\psi_{vol}(J)$, штрафующий за изменение объёма:

$$\psi(\mathbb{C}) = \psi_e(\mathbb{C}) + \psi_{vol}(J), \tag{1.4}$$

где $\psi_e(\mathbb{C})$ — гиперупругий потенциал материала в отсутствие несжимаемости. Обычно в качестве объёмного потенциала выбирают выпуклую функцию $\psi_{vol}(J) : \mathbb{R}_+ \setminus \{0\} \to \mathbb{R}_+$ для которой

$$\psi_{vol}(1) = 0, \quad \lim_{J \to +0} \psi_{vol}(J) = \infty, \quad \lim_{J \to +\infty} \psi_{vol}(J) = \infty, \tag{1.5}$$

например, часто используют одну из следующих функций:

$$\psi_{vol}(J) = \frac{K}{4}((J-1)^2 + (J^{-1} - 1)^2), \tag{1.6а}$$

$$\psi_{vol}(J) = \frac{K}{4}(J^2 - 2\ln(J) - 1), \tag{1.6б}$$

$$\psi_{vol}(J) = \frac{K}{4}((J-1)^2 + \ln^2(J)), \tag{1.6в}$$

где K называется модулем объёмного сжатия и определяет величину штрафа.

Иногда наряду с введением объёмного потенциала модифицируют и сам гиперупругий потенциал материала. Подход [46] состоит в том, чтобы использовать изохорный потенциал $\hat{\psi}_e(\mathbb{C}) = \psi_e(\overline{\mathbb{C}})$, где $\overline{\mathbb{C}} = \overline{\mathbb{F}}^T\overline{\mathbb{F}}$, $\overline{\mathbb{F}} = J^{-\frac{1}{3}}\mathbb{F}$. Это соответствует мультипликативному разложению $\mathbb{F} = \mathbb{F}_{vol}\overline{\mathbb{F}}$ на чисто объёмную $\mathbb{F}_{vol} = J^{\frac{1}{3}}\mathbb{I}$ и изохорную $\overline{\mathbb{F}}$, $\det\overline{\mathbb{F}} = 1$ части. Для потенциала, задаваемого инвариантами, модификация записывается как

$$\psi = \hat{\psi}_e + \psi_{vol},$$
$$\hat{\psi}_e(I_1, I_2, J, I_{4,fs}, I_{5,fs}) := \psi_e(\overline{I}_1, \overline{I}_2, \overline{J}, \overline{I}_{4,fs}, \overline{I}_{5,fs}),$$
$$\overline{I}_1 = J^{-\frac{2}{3}}I_1, \quad \overline{I}_2 = J^{-\frac{4}{3}}I_2, \quad \overline{J} = 1, \quad \overline{I}_{4,fs} = J^{-\frac{2}{3}}I_{4,fs}, \quad \overline{I}_{5,fs} = J^{-\frac{4}{3}}I_{5,fs}.$$

Хотя такая замена потенциала может ускорить расчёты, физически изохорный потенциал описывает материал отличный от исходного. Изохорный потенциал может приводить к нефизичным решениям, как, например, происходит при раздутии анизотропной сферы [167]. Чтобы уменьшить влияние ошибки, вносимой при замене потенциала, рекомендуется использовать объёмно-изохорное разложение только полностью изотропной части потенциала [141], т.е. для

$$\psi_e(I_1, I_2, J, I_{4,fs}, I_{5,fs}) = \psi_{iso}(I_1, I_2, J) + \psi_{aniso}(I_{4,fs}, I_{5,fs})$$

предлагается использовать модификацию

$$\psi = \psi_{iso}(\overline{I}_1, \overline{I}_2, 1) + \psi_{aniso}(I_{4,fs}, I_{5,fs}) + \psi_{vol}(J).$$

Популярные формы гиперупругих материалов. Одним из естественных продолжений линейного материала из теории линейной упругости на случай больших деформаций является сжимаемый *материал Сен-Венана-Кирхгофа*, определяемый как

$$\psi = \frac{\lambda}{2}(\operatorname{tr}\mathbb{E})^2 + \mu\operatorname{tr}(\mathbb{E}^2),\ \mu > 0, 3\lambda + 2\mu > 0. \tag{1.7}$$

Данный материал не удовлетворяет условиям роста при чрезмерном сжатии и не является поливыпуклым [28, задача 2.6-2]. По этим причинам материал может демонстрировать некорректное поведение, например, иметь лишь умеренные напряжения при экстремальных деформациях.

Далее перечислим материалы в несжимаемой форме. Сжимаемые аналоги этих материалов получаются добавлением слагаемого $\psi_{vol}(J)$ — любой объёмный потенциал, удовлетворяющий свойствам (1.5).

Пусть $M, N \in \mathbb{N}$, $a_m > 0$, $\alpha_m \geqslant 1$ для $m \in \overline{1, M}$ и $b_n > 0$, $\beta_m \geqslant 1$ для $n \in \overline{1, N}$. Будем называть *материалом Огдена* [109] материал

$$\psi(\mathbb{C}) = \sum_{m=1}^{M} a_m I_1^{\frac{\alpha_m}{2}} + \sum_{n=1}^{N} b_n I_2^{\frac{\beta_n}{2}} + c, \tag{1.8}$$

где $c \in \mathbb{R}$ — нормировочное слагаемое, чтобы добиться $\psi(\mathbb{I}) = 0$.

Материал Огдена является изотропным и поливыпуклым [28, теорема 4.9-2]. К материалам Огдена относятся, в частности, *материал Нео-Гука*:

$$\psi = \mu(I_1 - 3),\ \mu > 0, \tag{1.9}$$

и *материал Муни-Ривлина*:

$$\psi = \mu[(I_1 - 3) + \alpha(I_2 - 3)],\ \mu,\alpha > 0. \tag{1.10}$$

Другой популярной моделью является *материал Гента* [51]:

$$\psi = -\frac{\mu J_m}{2} \ln\left(1 - \frac{I_1 - 3}{J_m}\right),\ \mu > 0, J_m > 0, \tag{1.11}$$

который так же является изотропным и поливыпуклым и сходится к материалу Нео-Гука при $J_m \to +\infty$. Этот материал сконструирован так, чтобы ограничить растяжимость полимерных цепочек материала за счёт введения особенности при достижении I_1 значения $I_m = 3 + J_m$.

На основе анализа экспериментальных наблюдений за сжатием пучков волокон сердечной мышцы сформулирован *материал Гуччионе* [55]:

$$\begin{aligned} \psi = &\frac{\mu}{2}(\exp Q(\mathbb{E}) - 1),\\ Q(\mathbb{E}) = &b_f(\mathbf{f}\cdot\mathbb{E}\cdot\mathbf{f})^2 + b_s(\mathbf{s}\cdot\mathbb{E}\cdot\mathbf{s})^2 + b_n(\mathbf{n}\cdot\mathbb{E}\cdot\mathbf{n})^2 +\\ &+ 2(b_{fs}(\mathbf{f}\cdot\mathbb{E}\cdot\mathbf{s})^2 + b_{fn}(\mathbf{f}\cdot\mathbb{E}\cdot\mathbf{n})^2 + b_{sn}(\mathbf{s}\cdot\mathbb{E}\cdot\mathbf{n})^2). \end{aligned} \tag{1.12}$$

Хотя данный материал активно используют при кардиомоделировании, он не является поливыпуклым даже в изотропном случае, когда $b_f = b_s = b_n = b_{fs} = b_{fn} = b_{sn} = b$.

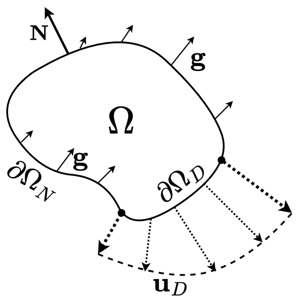
Наконец, для моделирования пассивных свойств миокарда успешно применяется *материал Хольцапфеля-Гассера-Огдена* [65]:

$$\begin{aligned} \psi = \frac{a}{2b}\exp\left[b(I_1 - 3)\right] + \frac{a_{fs}}{2b_{fs}}\left\{\exp\left[b_{fs}(I_{4,fs})^2\right] - 1\right\} +\\ + \sum_{i\in\{f,s\}} \frac{a_i}{2b_i}\left\{\exp\left[b_i((I_{4,i} - 1)_+)^2\right] - 1\right\}, \end{aligned} \tag{1.13}$$

где все параметры положительны и $(x)_+ = (|x| + x)/2$. Данный материал является анизотропным и поливыпуклым.

1.2 Уравнения движения деформируемого тела

Постановка задачи для сжимаемого тела. Для области Ω с достаточно гладкой границей $\partial\Omega$ и при достаточной гладкости функций и искомого решения $\mathbf{u}$ уравнения движения имеют вид:



$$\begin{aligned}
\rho_0\ddot{\mathbf{u}} - \mathrm{Div}\,\mathbb{P}(\nabla\mathbf{u}) &= \rho_0\mathbf{b}(t,\mathbf{u},\nabla\mathbf{u}), && t\in\Theta,\ \mathbf{X}\in\Omega,\\
\mathbb{P}(\nabla\mathbf{u})\cdot\mathbf{N} &= \mathbf{g}(t,\mathbf{u},\nabla\mathbf{u}), && t\in\Theta,\ \mathbf{X}\in\partial\Omega_N,\\
\mathbf{u} &= \mathbf{u}_D(\mathbf{X},t), && t\in\Theta,\ \mathbf{X}\in\partial\Omega_D,\\
\mathbf{u}|_{t=0} &= \mathbf{u}_0(\mathbf{X}), && \mathbf{X}\in\Omega,\\
\dot{\mathbf{u}}|_{t=0} &= \mathbf{v}_0(\mathbf{X}), && \mathbf{X}\in\Omega,
\end{aligned} \tag{1.14}$$

при $\det(\mathbb{I}+\nabla\mathbf{u}) > 0$, где $\Theta = (0,T]$, $\mathbf{b}(t,\mathbf{u},\nabla\mathbf{u})$ и $\mathbf{g}(t,\mathbf{u},\nabla\mathbf{u})$ — массовые и поверхностные силы, $\mathbb{P} = \mathbb{P}(\nabla\mathbf{u})$ — заданное определяющее соотношение, а также здесь и далее используется $(\mathrm{Div}\ \mathbb{P})^i := \sum_{j=1}^3 \nabla_j\mathbb{P}^{ij}$. Типичным примером массовых сил является гравитация ($\mathbf{b} = -g_{grav}\mathbf{E}^3$), а типичный пример поверхностных сил — внешнее давление ($\mathbf{g} = -p_{ext}(t)\,\mathrm{adj}(\mathbb{I}+\nabla\boldsymbol{u})^T\cdot\mathbf{N}$).

Слабая постановка для сжимаемого тела. Формально умножая данное уравнение на некоторую достаточно гладкую векторную тестовую функцию $\boldsymbol{\varphi}$ и интегрируя по объёму, имеем

$$\int_\Omega [\rho_0\ddot{\mathbf{u}}\cdot\boldsymbol{\varphi} - (\mathrm{Div}\ \mathbb{P})\cdot\boldsymbol{\varphi}\ ]d\Omega = \int_\Omega \rho_0\mathbf{b}\cdot\boldsymbol{\varphi}\ d\Omega.$$

Затем используем формулу Остроградского-Гаусса для преобразования

$$\int_\Omega -(\nabla_j\mathbb{P}^{ij})\ \boldsymbol{\varphi}_i d\Omega = \int_\Omega [\mathbb{P}^{ij}\nabla_j\boldsymbol{\varphi}_i - \nabla_j(\mathbb{P}^{ij}\boldsymbol{\varphi}_i)]d\Omega = \int_\Omega \mathbb{P} : (\nabla\boldsymbol{\varphi})^T d\Omega - \int_{\partial\Omega_N}\mathbf{g}\cdot\boldsymbol{\varphi}dS.$$

В итоге имеем

$$\int_\Omega \rho_0\ddot{\mathbf{u}}\cdot\boldsymbol{\varphi}\ d\Omega + \int_\Omega \mathbb{P} : (\nabla\boldsymbol{\varphi})^T d\Omega = \int_\Omega \rho_0\mathbf{b}\cdot\boldsymbol{\varphi}\ d\Omega + \int_{\partial\Omega_N}\mathbf{g}\cdot\boldsymbol{\varphi}\ dS.$$

Поскольку в уравнение входят только первые производные как от пробной функции $\mathbf{u}$, так и от тестовой φ, то решение можно искать на пространствах, где определены первые обобщённые производные, например, на $\mathcal{H}^1(\Omega)$. В зависимости от гладкости границы может потребоваться использование более общих пространств $\mathcal{W}^{1,p}$ [13], но здесь это не рассматривается.

Наконец, можно сформулировать слабую постановку. Пусть Ω область с кусочно-гладкой границей $\partial\Omega = \partial\Omega_D \cup \partial\Omega_N$, $\partial\Omega_D = \overline{\partial\Omega_D}$, $\partial\Omega_D \cap \partial\Omega_N = \varnothing$. Введём $\mathcal{H}_0^1 = \{\varphi \in \mathcal{H}^1(\Omega) : \varphi|_{\partial\Omega_D} = 0\}$. Пусть также заданы формы от двух аргументов вида $[\mathcal{H}^1(\Omega)]^3 \times [\mathcal{H}^1(\Omega)]^3 \to \mathbb{R}$:

$$\begin{aligned}
m(\mathbf{v}, \boldsymbol{\varphi}) &= \int_\Omega \rho_0 \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\varphi} \, d\Omega, \\
a(\mathbf{v}, \boldsymbol{\varphi}) &= \int_\Omega \mathbb{P}(\nabla\mathbf{v}) : (\nabla\boldsymbol{\varphi})^T \, d\Omega, \\
f(\mathbf{v}, \boldsymbol{\varphi}) &= \int_\Omega \rho_0 \mathbf{b}(\mathbf{v}, \nabla\mathbf{v}) \cdot \boldsymbol{\varphi} \, d\Omega + \int_{\Omega_N} \mathbf{g}(\mathbf{v}, \nabla\mathbf{v}) \cdot \boldsymbol{\varphi} \, dS.
\end{aligned} \tag{1.15}$$

Тогда $\mathbf{u} \in \mathcal{L}^2([0,T]; [\mathcal{H}^1(\Omega)]^3)$ с производной времени $\ddot{\mathbf{u}} \in \mathcal{L}^2([0,T]; [\mathcal{H}^1(\Omega)]^3)$ называется слабым решением уравнения (1.14), если $\mathbf{u}$ удовлетворяет начальным условиям, $\mathbf{u}|_{\partial\Omega_D} = \mathbf{u}_D$, $\det(\mathbb{I} + \nabla\mathbf{u}) > 0 \ \forall t \in [0,T]$ и выполнено [172]

$$m(\ddot{\mathbf{u}}, \boldsymbol{\varphi}) + a(\mathbf{u}, \boldsymbol{\varphi}) = f(\mathbf{u}, \boldsymbol{\varphi}), \ \forall \boldsymbol{\varphi} \in [\mathcal{H}_0^1]^3. \tag{1.16}$$

Пусть $\mathbf{b}$ и $\mathbf{g}$ не зависят от времени. Тогда функция $\mathbf{u} \in [\mathcal{H}^1(\Omega)]^3$ называется слабым решением задачи статического равновесия, если $\mathbf{u}|_{\partial\Omega_D} = \mathbf{u}_D$, $\det(\mathbb{I} + \nabla\mathbf{u}) > 0$ и выполнено

$$a(\mathbf{u}, \boldsymbol{\varphi}) = f(\mathbf{u}, \boldsymbol{\varphi}), \ \forall \boldsymbol{\varphi} \in [\mathcal{H}_0^1]^3. \tag{1.17}$$

В силу своей нелинейности данные уравнения тяжело поддаются анализу. Приведём лишь один из немногих известных результатов.

Теорема 1.2.1. *[13, теорема 6.1] Пусть $\mathbf{g} = 0$, $\mathbf{b}$ — является консервативной силой с плотностью потенциальной энергии $\mathcal{F}(\mathbf{X}, \mathbf{u})$, и пусть материал является гиперупругим с потенциалом ψ.*
Полная потенциальная энергия системы равна $\Pi = \int_\Omega [\psi(\nabla\mathbf{u}) + \mathcal{F}(\mathbf{X}, \mathbf{u})] d\Omega$.
Определим множество допустимых движений системы как

$$\mathcal{A} = \{\mathbf{u} \in [\mathcal{H}^1(\Omega)]^3 : \mathbf{u}|_{\partial\Omega_D} = \mathbf{u}_D, \ \det(\mathbb{I} + \nabla\mathbf{u}) > 0, \ \Pi(\mathbf{u}) < \infty\}.$$

Тогда если $\mathcal{A}$ не пусто, ψ является непрерывно-дифференцируемой, поливыпуклой, коэрцитивной и удовлетворяющей условиям роста, а $\mathcal{F}$ — непрерывна и ограничена снизу, то существует решение задачи (1.17).

Постановка задачи для несжимаемого тела. В случае полной несжимаемости уравнения движения имеют вид:

$$
\begin{aligned}
\rho_0 \ddot{\mathbf{u}} - \operatorname{Div} \mathbb{P}(\nabla \mathbf{u}) - \operatorname{Div}\left(\frac{\partial \psi_p}{\partial \mathbb{F}}\right) &= \rho_0 \mathbf{b}(t, \mathbf{u}, \nabla \mathbf{u}), && t \in \Theta,\ \mathbf{X} \in \Omega, \\
\frac{\partial \psi_p}{\partial p} &= 0, && t \in \Theta,\ \mathbf{X} \in \Omega, \\
\mathbb{P}(\nabla \mathbf{u}) \cdot \mathbf{N} &= \mathbf{g}(t, \mathbf{u}, \nabla \mathbf{u}), && t \in \Theta,\ \mathbf{X} \in \partial\Omega_N, \\
\mathbf{u} &= \mathbf{u}_D(\mathbf{X}, t), && t \in \Theta,\ \mathbf{X} \in \partial\Omega_D, \\
\mathbf{u}|_{t=0} &= \mathbf{u}_0(\mathbf{X}), && \mathbf{X} \in \Omega, \\
\dot{\mathbf{u}}|_{t=0} &= \mathbf{v}_0(\mathbf{X}), && \mathbf{X} \in \Omega,
\end{aligned}
\tag{1.18}
$$

где по сравнению с уравнениями (1.14) возникает $\psi_p = -p(J-1)$ и, соответственно, введена дополнительная переменная p и добавлено кинематическое условие несжимаемости $\frac{\partial \psi_p}{\partial p} = -(J-1)$, $\frac{\partial \psi_p}{\partial \mathbb{F}} = -p \operatorname{adj} \mathbb{F}^T$, $\operatorname{adj} \mathbb{F}^T = \det \mathbb{F} \cdot \mathbb{F}^{-T}$.

Слабая постановка для несжимаемого тела. В дополнение к формам (1.15) введём ещё 2 формы: $b_{\mathbf{u}} : \mathcal{H}^0(\Omega) \times [\mathcal{H}^1(\Omega)]^3 \times [\mathcal{H}^1(\Omega)]^3 \to \mathbb{R}$ и $b_p : [\mathcal{H}^1(\Omega)]^3 \times \mathcal{H}^0(\Omega) \to \mathbb{R}$ задаваемые равенствами:

$$
\begin{aligned}
b_{\mathbf{u}}(p, \mathbf{v}, \boldsymbol{\varphi}) &= \int_\Omega \frac{\partial \psi_p}{\partial \mathbb{F}}(\nabla \mathbf{v}, p) : (\nabla \boldsymbol{\varphi})^T d\Omega = -\int_\Omega p \operatorname{adj}(\mathbb{I} + \nabla \mathbf{v})^T : (\nabla \boldsymbol{\varphi})^T d\Omega, \\
b_p(\mathbf{v}, q) &= \int_\Omega \frac{\partial \psi_p}{\partial p}(\nabla \mathbf{v}) \cdot q \, d\Omega = -\int_\Omega (J(\nabla \mathbf{v}) - 1) \cdot q \, d\Omega
\end{aligned}
$$

Пара $\{\mathbf{u} \in \mathcal{L}^2([0,T]; [\mathcal{H}^1(\Omega)]^3),\ p \in \mathcal{L}^2([0,T]; \mathcal{H}^0(\Omega))\}$ с $\ddot{\mathbf{u}} \in \mathcal{L}^2([0,T]; [\mathcal{H}^1(\Omega)]^3)$ называется слабым решением уравнения (1.18), если $\mathbf{u}$ удовлетворяет начальным условиям, $\mathbf{u}|_{\partial\Omega_D} = \mathbf{u}_D$, $\det(\mathbb{I} + \nabla \mathbf{u}) > 0$ $\forall t \in [0,T]$ и выполнено

$$
\begin{aligned}
m(\ddot{\mathbf{u}}, \boldsymbol{\varphi}) + a(\mathbf{u}, \boldsymbol{\varphi}) + b_{\mathbf{u}}(p, \mathbf{u}, \boldsymbol{\varphi}) &= f(\mathbf{u}, \boldsymbol{\varphi}), && \forall \boldsymbol{\varphi} \in [\mathcal{H}^1_0]^3, \\
b_p(\mathbf{u}, q) &= 0, && \forall q \in \mathcal{H}^0(\Omega).
\end{aligned}
\tag{1.19}
$$

1.3 Дискретизация уравнений движения методом конечных элементов

Слабая постановка уравнений движения имеет вид (1.16) или (1.19). Будем предполагать, что материал является гиперупругим, т.е. будем считать, что $\mathbb{P} = \frac{\partial \psi}{\partial \mathbb{F}}$.

На области Ω построим тетраэдризацию $\mathcal{T}_h$. Будем использовать одинаковые аппроксимирующие пространства для пробных и тестовых функций, а именно будем использовать дискретизацию лагранжевыми элементами типа P_r, причём для уравнений движения можно использовать любое значение $r \geqslant 1$.

Пусть $\{\boldsymbol{\varphi}^r\}_{r=1}^N$ — базис аппроксимирующего пространства, тогда приближённое решение записывается как

$$\mathbf{u}^h = \mathbf{u}^{D,h} + \sum_{r=1}^{N} u_r \boldsymbol{\varphi}^r, \quad \mathbf{u}^{D,h} = \sum_{r=1}^{N_D} u_r^D \boldsymbol{\varphi}^{D,r},$$

где u_r — искомые коэффициенты (степени свободы дискретизации), а $\mathbf{u}^{D,h}$ — функция с известным коэффициентами u_r^D, удовлетворяющая условию Дирихле задачи. Объединим коэффициенты u_r и u_r^D в целостные вектора:

$$\tilde{U} = (u_1, \ldots, u_N)^T, \quad \tilde{U}^D = (u_1^D, \ldots, u_{N^D}^D)^T, \quad U = (u_1, \ldots, u_N, u_1^D, \ldots, u_{N^D}^D)^T.$$

В терминах вектора коэффициентов U можно записать, что

$$\mathbf{u}^h = \mathbf{u}^h(U) \ \text{ и } \ \mathbb{F}^h = \mathbb{F}^h(U) = \mathbb{I} + \nabla \mathbf{u}^h = \mathbb{I} + \sum_{r=1}^{N} u_r \nabla \boldsymbol{\varphi}^r + \sum_{r=1}^{N_D} u_r^D \nabla \boldsymbol{\varphi}^{D,r}.$$

Дискретизация для сжимаемого тела. Введём ряд векторов и матриц, составляющих компоненты полудискретной задачи:

$$\mathcal{P}_r(U) = \int_\Omega \frac{\partial \psi}{\partial \mathbb{F}_{kl}} (\mathbb{F}^h(U)) \nabla_l \boldsymbol{\varphi}_k^r \, d\Omega,$$

$$\mathcal{F}_r(U) = -\int_\Omega \rho_0 \mathbf{b}(\mathbf{u}^h(U), \mathbb{F}^h(U)) \cdot \boldsymbol{\varphi}^i d\Omega - \int_{\partial\Omega_N} \mathbf{g}(\mathbf{u}^h(U), \mathbb{F}^h(U)) \cdot \boldsymbol{\varphi}^r dS,$$

$$\mathcal{M}_{rs}^{\rho} = \int_\Omega \rho_0 \boldsymbol{\varphi}^r \cdot \boldsymbol{\varphi}^s d\Omega, \quad \mathcal{M}_{rs'}^{D,\rho} = \int_\Omega \rho_0 \boldsymbol{\varphi}^r \cdot \boldsymbol{\varphi}^{D,s'} d\Omega,$$

$$\mathcal{A}_{rs}(U) = \int_\Omega \nabla_l \boldsymbol{\varphi}_k^r \frac{\partial^2 \psi}{\partial \mathbb{F}_{kl} \partial \mathbb{F}_{mn}} (\mathbb{F}^h(U)) \nabla_n \boldsymbol{\varphi}_m^s \, d\Omega,$$

$$\mathcal{K}_{rs}(U) = -\int_\Omega \rho_0 \frac{\partial \mathbf{b}^k}{\partial \mathbf{u}_l} (\mathbf{u}^h(U), \mathbb{F}^h(U)) \boldsymbol{\varphi}_k^r \boldsymbol{\varphi}_l^s d\Omega - \int_{\partial\Omega_N} \frac{\partial \mathbf{g}^k}{\partial \mathbf{u}_l} (\mathbf{u}^h(U), \mathbb{F}^h(U)) \boldsymbol{\varphi}_k^r \boldsymbol{\varphi}_l^s dS,$$

$$\mathcal{N}_{rs}(U) = -\int_\Omega \rho_0 \frac{\partial \mathbf{b}^k}{\partial \mathbb{F}_{mn}} (\mathbf{u}^h(U), \mathbb{F}^h(U)) \boldsymbol{\varphi}_k^r \nabla_n \boldsymbol{\varphi}_m^s d\Omega - \\ - \int_{\partial\Omega_N} \frac{\partial \mathbf{g}^k}{\partial \mathbb{F}_{mn}} (\mathbf{u}^h(U), \mathbb{F}^h(U)) \boldsymbol{\varphi}_k^r \nabla_n \boldsymbol{\varphi}_m^s dS,$$

где $r,s \in \overline{1,N}$ и $s' \in \overline{1,N_D}$. Пусть также $\mathcal{M}^{*,\rho} = (\mathcal{M}^{\rho}, \mathcal{M}^{D,\rho})$.

Полудискретная система ОДУ принимает вид:

$$\mathcal{M}^{*,\rho} \cdot \ddot{U} + \mathcal{P}(U) + \mathcal{F}(U) = 0,\ t > 0.$$

Если использовать неявную схему с аппроксимацией второй производной центральными разностями, то получим нелинейную алгебраическую систему:

$$\mathcal{R}(\tilde{U}) := \mathcal{M}^{*,\rho} \frac{U^{n+1} - 2U^n + U^{n-1}}{(\Delta t)^2} + \mathcal{P}(U^{n+1}) + \mathcal{F}(U^{n+1}) = 0$$

с матрицей Якоби $\mathcal{J} := \frac{\partial \mathcal{R}}{\partial \tilde{U}} = \mathcal{M}^{\rho}/(\Delta t)^2 + \mathcal{A} + \mathcal{K} + \mathcal{N}$, где

- $\mathcal{M}^{\rho} = (\mathcal{M}^{\rho})^T > 0$;
- $\mathcal{A} = \mathcal{A}^T$ и для поливыпуклого потенциала $\mathcal{A} \geqslant 0$;
- $\mathcal{K}$ в общем случае несимметрична, но если $\exists G(\mathbf{u}), B(\mathbf{u}) : \mathbf{g} = -\frac{\partial G}{\partial \mathbf{u}}$ и $\mathbf{b} = -\frac{\partial B}{\partial \mathbf{u}}$, то $\mathcal{K} = \mathcal{K}^T$ и если G и B — выпуклые функции, то $\mathcal{K} \geqslant 0$;
- $\mathcal{N}$ - несимметрична, но $\mathcal{N} = 0$, если $\mathbf{b}$ и $\mathbf{g}$ не зависят от $\mathbb{F}$.

Дискретизация для несжимаемого тела. Пусть $\{q^v\}_{v=1}^{N_p}$ — базис аппроксимирующего пространства для переменной p. Тогда её дискретизация и вектор всех её коэффициентов записываются как

$$p^h = p^h(P) = \sum_{v=1}^{N_p} p_v q^v, \quad P = (p_1 \dots p_{N_p})^T.$$

Используя $r,s \in \overline{1,N}$ и $v \in \overline{1,N_p}$, введём несколько векторов и матриц:

$$\mathcal{P}_r^{\mathbf{u}}(P,U) = \int_\Omega \frac{\partial \psi_p}{\partial \mathbb{F}_{kl}}(p^h(P), \mathbb{F}^h(U)) \nabla_l \boldsymbol{\varphi}_k^r \, d\Omega, \quad \mathcal{P}_v^p(U) = \int_\Omega \frac{\partial \psi_p}{\partial p}(\mathbb{F}^h(U)) \cdot q^v \, d\Omega,$$

$$\mathcal{A}_{rs}^p(U) = \int_\Omega \nabla_l \boldsymbol{\varphi}_k^r \frac{\partial^2 \psi_p}{\partial \mathbb{F}_{kl} \partial \mathbb{F}_{mn}}(p^h(P), \mathbb{F}^h(U)) \nabla_n \boldsymbol{\varphi}_m^s \, d\Omega,$$

$$\mathcal{B}_{rv}(U) = \int_\Omega q^v \frac{\partial^2 \psi_p}{\partial p \, \partial \mathbb{F}_{kl}}(\mathbb{F}^h(U)) \nabla_l \boldsymbol{\varphi}_k^r \, d\Omega.$$

Полудискретная формулировка принимает вид системы из ряда ОДУ и алгебраических уравнений:

$$\begin{cases} \mathcal{M}^{*,\rho} \cdot \ddot{U} + \mathcal{P}(U) + \mathcal{P}^{\mathbf{u}}(P,U) + \mathcal{F}(U) = 0, \\ \hfill \mathcal{P}^p(U) = 0. \end{cases}, \quad t > 0.$$

Здесь при использовании неявной схемы с аппроксимацией производной центральными разностями матрица Якоби приобретает блочный вид:

$$\mathcal{J}(U,P) := \begin{pmatrix} \mathcal{M}^{\rho}/(\Delta t)^2 + \mathcal{A} + \mathcal{A}^p + \mathcal{K} + \mathcal{N} & \mathcal{B} \\ \mathcal{B}^T & 0 \end{pmatrix},$$

где $\mathcal{A}^p = (\mathcal{A}^p)^T$ и свойства матриц $\mathcal{M}^{\rho}$, $\mathcal{A}$, $\mathcal{K}$, $\mathcal{N}$ указаны выше.

1.4 Элементы обобщённой теории оболочек Кирхгофа-Лява

В данном разделе изложены основы теории Кирхгофа-Лява и кинематические соотношения, к которым они приводят в случае несжимаемых оболочек.

Кинематика тонкой оболочки. Положим, что рассматриваемое нами тело достаточно тонкое и для описания его поведения достаточно описать поведение его срединной поверхности. Более того, будем считать, что выполнено предположение Кирхгофа-Лява: прямые линии, нормальные к срединной поверхности в начальной конфигурации, остаются нормальными к срединной поверхности после деформации (т.е. в актуальной конфигурации) [154].

При сделанных предположениях тело можно параметризовать введя две обобщённые координаты для параметризации срединной поверхности и одну координату для параметризации вдоль нормали к срединной линии (Рисунок 1.2). В таком случае имеем параметризацию для начальной конфигурации:

$$\mathcal{S}_0 = \{\mathbf{X} \in \mathbb{R}^3 : \mathbf{X} = \mathbf{X}^m(\theta^1, \theta^2) + \theta^3\mathbf{N}(\theta^1, \theta^2)\},$$

а также для актуальной:

$$\mathcal{S}_t = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 : \mathbf{x} = \mathbf{x}^m(\theta^1, \theta^2) + \lambda(\theta^1, \theta^2)\theta^3\mathbf{n}(\theta^1, \theta^2)\},$$

где поверхностные координаты $(\theta^1, \theta^2) \in \mathcal{A}$, $\mathcal{A} \in \mathbb{R}^2$ — компактное множество, $\theta^3 \in [-H/2, H/2]$, $H = H(\theta^1, \theta^2)$ — толщина в начальной конфигурации, $\lambda = H_{def}/H$, $H_{def}(\theta^1, \theta^2)$ — толщина в актуальной конфигурации, $\mathbf{N}$ и $\mathbf{n}$ — единичные векторы нормали к поверхности начальной и актуальной конфигурации, $\mathbf{X}^m$ и $\mathbf{x}^m$ — координаты срединной поверхности в начальной и актуальной конфигурациях.

Здесь и далее греческими буквами $\alpha, \beta, \gamma, \ldots$ обозначены индексы пробегающие значения $\overline{1, 2}$, а латинскими i, j, k, l — $\overline{1, 3}$. Запятой в индексе обозначены производные по параметру: $f_{,\alpha} := \partial f/\partial\theta^\alpha$, $f_{,\alpha\beta} := \partial^2 f/\partial\theta^\alpha\partial\theta^\beta$.

Имея параметризацию области, можно ввести материальный базис:

$$\mathbf{G}_\alpha := \frac{\partial\mathbf{X}}{\partial\theta^\alpha} = \mathbf{X}^m_{,\alpha} + \theta^3\mathbf{N},\ \mathbf{G}_3 := \frac{\partial\mathbf{X}}{\partial\theta^3} = \mathbf{N},$$
$$\mathbf{g}_\alpha := \frac{\partial\mathbf{x}}{\partial\theta^\alpha} = \mathbf{x}^m_{,\alpha} + \theta^3(\lambda\mathbf{n})_{,\alpha},\ \mathbf{g}_3 = \frac{\partial\mathbf{x}}{\partial\theta^3} := \lambda\mathbf{n}.$$

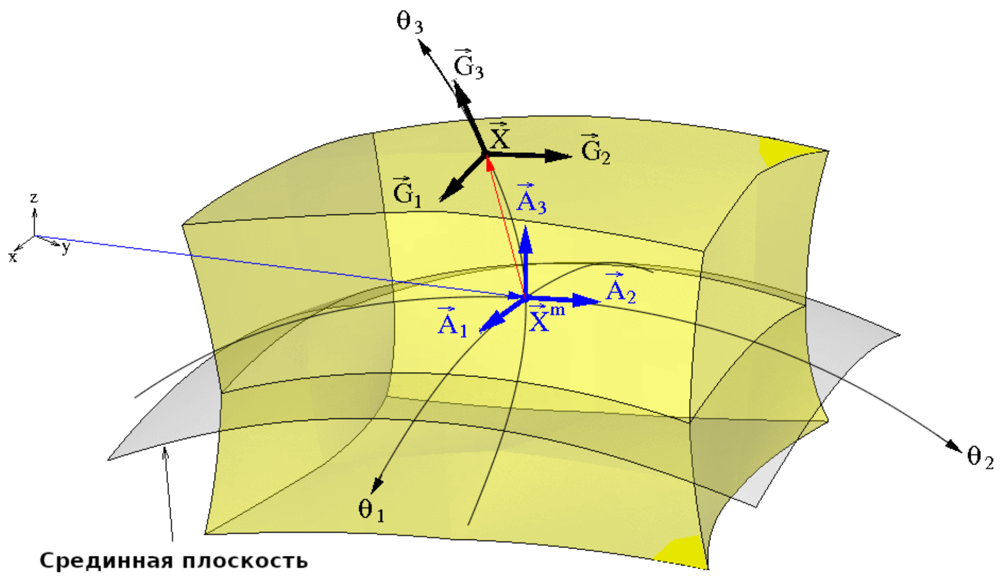


Рисунок 1.2 — Параметризация тонкой оболочки, локальные координаты θ^1, θ^2 описывают срединную поверхность, а θ^3 отсчитывается вдоль нормали

Геометрия срединной поверхности в актуальной конфигурации $\mathbf{x}^m(\mathcal{A})$ характеризуется двумя фундаметальными формами:

1. метрическим тензором: $a_{\alpha\beta} = \mathbf{x}^m_{,\alpha} \cdot \mathbf{x}^m_{,\beta} = (\mathbf{g}_\alpha \cdot \mathbf{g}_\beta)|_{\theta^3=0}$;
2. тензором кривизны: $\kappa_{\alpha\beta} = -\mathbf{x}^m_{,\alpha\beta} \cdot \mathbf{n} = \frac{1}{2}(\mathbf{x}^m_{,\alpha} \cdot \mathbf{n}_{,\beta} + \mathbf{x}^m_{,\beta} \cdot \mathbf{n}_{,\alpha})$.

Наконец, градиент деформации для оболочек равен

$$\mathbb{F} = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{X}} = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \theta^i} \Big/ \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \theta^i} = \mathbf{g}_i \otimes \mathbf{G}^i. \tag{1.20}$$

Правый тензор деформации Коши вычисляется как

$$\mathbb{C} = \mathbb{F}^T\mathbb{F} = (\mathbf{g}_i \cdot \mathbf{g}_j)\mathbf{G}^i \otimes \mathbf{G}^j,$$

$$\mathbb{C} = \underbrace{c_{\alpha\beta}\mathbf{G}^\alpha \otimes \mathbf{G}^\beta}_{\mathbb{C}^S} + \underbrace{b_\alpha[\mathbf{G}^\alpha \otimes \mathbf{N} + \mathbf{N} \otimes \mathbf{G}^\alpha]}_{\mathbb{C}^{SN}} + \underbrace{c_{nn}\mathbf{N} \otimes \mathbf{N}}_{\mathbb{C}^N}.$$

Прямые вычисления показывают:

– $c_{\alpha\beta} = (\mathbf{x}^m_{,\alpha} + \theta^3(\lambda\mathbf{n})_{,\alpha}) \cdot (\mathbf{x}^m_{,\beta} + \theta^3(\lambda\mathbf{n})_{,\beta}) = \mathbf{x}^m_{,\alpha} \cdot \mathbf{x}^m_{,\beta} + \theta^3\lambda(\mathbf{x}^m_{,\alpha} \cdot \mathbf{n}_{,\beta} + \mathbf{x}^m_{,\beta} \cdot \mathbf{n}_{,\alpha}) + (\theta^3)^2[\lambda_{,\alpha}\lambda_{,\beta} + \lambda^2\mathbf{n}_{,\alpha} \cdot \mathbf{n}_{,\beta}] = a_{\alpha\beta} + 2(\lambda\theta^3)\kappa_{\alpha\beta} + (\lambda\theta^3)^2 a^{\gamma\delta}\kappa_{\alpha\gamma}\kappa_{\beta\delta} + (\theta^3)^2\lambda_{,\alpha}\lambda_{,\beta}$;
– $b_\alpha = \theta^3(\lambda\mathbf{n}) \cdot (\lambda\mathbf{n})_{,\alpha} = (\lambda\theta^3)\lambda_{,\alpha}$;
– $c_{nn} = \lambda^2$.

Пренебрегая членами $O(\theta^3\lambda_{,\alpha})$ и $O((\theta^3)^2)$ и требуя, чтобы в полученных выражениях ненагруженное состояние имело нулевые деформации, правый тензор Коши раскладывается на поверхностную и нормальную составляющие следующим образом [44; 111; 154]:

$$\mathbb{C} = \sum_{\alpha,\beta=1}^{2} c_{\alpha\beta}\mathbf{G}^\alpha \otimes \mathbf{G}^\beta + c_{nn}\mathbf{N}\otimes\mathbf{N} = \mathbb{C}^S + \mathbb{C}^N, \tag{1.21}$$

$$c_{\alpha\beta} = a_{\alpha\beta} + 2\lambda\theta^3\chi_{\alpha\beta},\; c_{nn} = \lambda^2, \tag{1.22}$$

где $\chi = \kappa - \kappa^{(0)}$ и $\kappa^{(0)}$ — кривизна поверхности в ненагруженном состоянии.

Определяющие соотношения для тонкой несжимаемой оболочки. Несжимаемость материала означает выполнение равенства

$$1 = \det\mathbb{C} = \lambda^2 \det\nolimits_{2D} \mathbb{C}^S \to \lambda = \sqrt{\det\nolimits_{2D}\mathbb{C}^S}^{-1} \tag{1.23}$$

и позволяет полностью исключить параметр изменения толщины λ из уравнений. Здесь $\det_{2D}\mathbb{C}^S = ((\mathrm{tr}\ \mathbb{C}^S)^2 - \mathrm{tr}\ (\mathbb{C}^S)^2)/2 = \det\ [c^\beta_\alpha]$. Введём обозначение $(J^S)^2 = \det\ [c^\beta_\alpha]$.

При учёте несжимаемости потенциал упругости принимает вид:

$$\hat\psi(\mathbb{C}^S) = \psi(\mathbb{C}^S + (J^S)^{-2}\mathbf{N}\otimes\mathbf{N}), \tag{1.24}$$

а второй тензор Пиолы-Кирхгофа:

$$\mathbb{S} := \sum_{\alpha\beta}^{2} s^{\alpha\beta}\mathbf{G}_\alpha\otimes\mathbf{G}_\beta, \quad s^{\alpha\beta} = 2\frac{\partial\hat\psi(\mathbb{C}^S)}{\partial c_{\alpha\beta}},$$

$$s^{\alpha\beta} = 2\frac{\partial\hat\psi(\mathbb{C}^S)}{\partial c_{\alpha\beta}} = 2\left(\mathbf{G}^\alpha\cdot\frac{\partial\psi}{\partial\mathbb{C}}\cdot\mathbf{G}^\beta - \mathbf{N}\cdot\frac{\partial\psi}{\partial\mathbb{C}}\cdot\mathbf{N}(J^S)^{-2}c^{\alpha\beta}\right),$$

где $c^{\alpha\beta} = ([c_{\gamma\delta}]^{-1})_{\alpha\beta}$, $\mathbf{G}^i = \sum_j(\mathbb{G}^{-1})_{ij}\mathbf{G}_j$, $\mathbb{G}_{ij} = \mathbf{G}_i\cdot\mathbf{G}_j$.

В частности, потенциал $\psi(I_1, I_2, I_3, I_{4\mathbf{fs}}, I_{5\mathbf{fs}})$ будет преобразован заменами $I_1 \to I_1^S + \lambda^2$, $I_2 \to (J^S)^2 + I_1^S\lambda^2$, $I_3 \to 1$, $I_{4\mathbf{fs}} \to I^S_{4\mathbf{fs}} + \lambda^2 c^N_{\mathbf{fs}}$, $I_{5\mathbf{fs}} \to I^S_{5\mathbf{fs}} + \lambda^4 c^N_{\mathbf{fs}}$ как

$$\hat\psi(\mathbb{C}^S) = \psi(I_1^S + (J^S)^{-2}, (J^S)^2 + I_1^S(J^S)^{-2}, 1, I^S_{4\mathbf{fs}} + c^N_{\mathbf{fs}}(J^S)^{-2}, I^S_{5\mathbf{fs}} + c^N_{\mathbf{fs}}(J^S)^{-4}),$$

где $I_1^S = \mathrm{tr}\ \mathbb{C}^S$, $I_{4\mathbf{fs}} = \mathbf{f}\cdot\mathbb{C}^S\cdot\mathbf{s}$, $I_{5\mathbf{fs}} = (\mathbb{C}^S\cdot\mathbf{f})\cdot(\mathbb{C}^S\cdot\mathbf{s})$, $c^N_{\mathbf{fs}} = \mathbf{f}\cdot(\mathbf{N}\otimes\mathbf{N})\cdot\mathbf{s}$.

Замечание: В равенстве $\lambda^2 = 1/\det_{2D}\mathbb{C}^S$ нарушается независимость функции λ от θ^3. Усреднённая по толщине несжимаемость $1 = \frac{1}{H}\int_{-H/2}^{H/2}\det\mathbb{C}\,d\theta^3$, при которой $\lambda^2 = 1/\det[a_{\alpha\beta}] + O(H^2\det[\kappa_{\alpha\beta}])$, была бы корректнее, однако значительно усложнила бы выкладки и форму потенциала $\hat\psi$. Если на решении выполнено $||\partial\psi/\partial\mathbb{C}^N|| \ll ||\partial\psi/\partial\mathbb{C}^S||$, то подходы учёта несжимаемости совпадают.

1.5 Уравнения движения тонкой несжимаемой оболочки

Для вывода уравнений используем принцип Гамильтона с внешними силами: *истинная траектория механической системы такова, что вариация действия системы плюс работа внешних неконсервативных сил на виртуальных перемещениях равна нулю.* Математически принцип записывается как

$$\delta \int_0^T L\ dt + \int_0^T \delta A\ dt = 0,$$

где действие $S = \int_0^T Ldt$ выражается через лагранжиан $L = K - U$, который зависит от кинетической K и потенциальной энергии U системы, а A — работа внешних сил на виртуальных перемещениях.

Перепишем вариацию внутренней энергии для допустимых перемещений несжимаемой тонкой оболочки:

$$\begin{aligned}\delta U &= \int_{\Omega_0} \delta\left(\psi(\nabla \mathbf{x})\right) d\Omega = \int_{\Omega_0} \delta\left(\hat{\psi}(\nabla \mathbf{x})\right) d\Omega = \int_{\Omega_0} \delta\left(\mathbb{C}_S\right) : \frac{\partial \hat{\psi}}{\partial \mathbb{C}_S} d\Omega = \\ &= \int_{\Omega_0} \delta\left(c_{\alpha\beta}\right) \frac{1}{2} s^{\alpha\beta} d\Omega = \left[\ dA = |\mathbf{G}_1 \times \mathbf{G}_2| d\theta^1 d\theta^2\ \right] = \\ &= \underbrace{\int_{\mathcal{A}} \frac{1}{2}\delta\left(a_{\alpha\beta}\right) \left(\int\limits_{-H/2}^{H/2} s^{\alpha\beta} d\theta^3 \right) dA}_{\delta U^{memb}} + \underbrace{\int_{\mathcal{A}} \delta(\lambda \chi_{\alpha\beta}) \left(\int\limits_{-H/2}^{H/2} \theta^3 s^{\alpha\beta} d\theta^3 \right) dA.}_{\delta U^{bend}}\end{aligned}$$

Вариация внутренней энергии распалась на две составляющих: мембранную, которая отвечает за изменение линейных расстояний между точками оболочки, и изгибную, которая отражает сопротивление изгибным деформациям. Случай, когда изгибной составляющей пренебрегают, называется *мембранным приближением*, а когда не пренебрегают — *оболочечным приближением.*

Пусть в исходной трёхмерной постановке на тело с начальной конфигурацией Ω действует массовая сила $\mathbf{b}$. Также пусть в задаче имеют место границы двух типов: граница Дирихле $\Gamma_{0,D}$ и граница $\Gamma_{0,P}$, к которой прикладывается внешнее поверхностное воздействие $\mathbf{t}$ (записанное относительно координат актуальной конфигурации), тогда уравнения движения обретают следующий вид (опуская начальные условия):

$$\begin{cases} \rho_0 \ddot{\mathbf{x}} - \mathrm{Div}\ \mathbb{P}(\mathbb{C}) = \rho_0 \mathbf{b}, & \mathbf{X} \in \Omega, \\ \mathbf{x} = \mathbf{x}_0, & \mathbf{X} \in \Gamma_D, \\ \mathbb{P} \cdot \mathbf{N} = |\mathrm{adj}(\mathbb{F})^T \cdot \mathbf{N}|\ \mathbf{t}_0, & \mathbf{X} \in \Gamma_P. \end{cases}$$

Работа внешних сил на виртуальных перемещениях $\delta\mathbf{x}$ равна

$$\delta A = \underbrace{\int\limits_{\Gamma_{t,P}} \mathbf{t} \cdot \delta\mathbf{x}\ ds}_{\delta A^t} + \underbrace{\int\limits_{\Omega_t} \rho_t \mathbf{b} \cdot \delta\mathbf{x}\ d\mathbf{x}}_{\delta A^b} = \int\limits_{\Gamma_P} \mathbf{t}_0 \cdot \delta\mathbf{x}\ |\mathbf{N} \cdot \mathrm{adj}(\mathbb{F})| dS + \int\limits_{\Omega} \rho_0 \mathbf{b}_0 \cdot \delta\mathbf{x}\ d\mathbf{X},$$

где $\mathbf{b}_0(\mathbf{X}, t) = \mathbf{b}(\mathbf{x}(\mathbf{X}), t)$, $\mathbf{t}_0(\mathbf{X}, t) = \mathbf{t}(\mathbf{x}(\mathbf{X}), t)$.

Используя равенство $\delta\mathbf{x} = \delta(\mathbf{x}^m + \lambda\theta^3\mathbf{n}) = \delta\mathbf{x}^m + \theta^3\delta(\lambda\mathbf{n})$, преобразуем выражения для работы внешних сил и кинетической энергии:

$$\delta A^b = \int\limits_{\mathcal{A}_t} \delta\mathbf{x}^m \cdot \left(\int\limits_{-\lambda H/2}^{\lambda H/2} \rho_t \mathbf{b}(\mathbf{x}^m + \theta^3\mathbf{n})\ d\theta^3 \right) d\mathbf{x}^m +$$

$$+ \int\limits_{\mathcal{A}_t} \frac{\delta(\lambda\mathbf{n})}{\lambda} \cdot \left(\int\limits_{-\lambda H/2}^{\lambda H/2} \theta^3 \rho_t \mathbf{b}(\mathbf{x}^m + \theta^3\mathbf{n})\ d\theta^3 \right) d\mathbf{x}^m,$$

$$\delta A^t = \int_{\mathcal{A}_{t,P}} \mathbf{t}^\Sigma \cdot \delta\mathbf{x}^m\ d\mathbf{x}^m + \int_{\partial\mathcal{A}_{t,P}} \delta\mathbf{x}^m \cdot \left(\int\limits_{-\lambda H/2}^{\lambda H/2} \mathbf{t}(\mathbf{x}^m + \theta^3\mathbf{n}) d\theta^3 \right) dl +$$

$$+ \int_{\mathcal{A}_{t,P}} \frac{\lambda H}{2} \mathbf{t}^\Delta \cdot \frac{\delta(\lambda\mathbf{n})}{\lambda}\ d\mathbf{x}^m + \int_{\partial\mathcal{A}_{t,P}} \frac{\delta(\lambda\mathbf{n})}{\lambda} \cdot \left(\int\limits_{-\lambda H/2}^{\lambda H/2} \theta^3 \mathbf{t}(\mathbf{x}^m + \theta^3\mathbf{n}) d\theta^3 \right) dl.$$

$$\delta K = \delta \left(\int_{\Omega_t} \frac{\rho_t\ \dot{\mathbf{x}}^2}{2} d\mathbf{x} \right) = \int_{\Omega_t} \rho_t\ \dot{\mathbf{x}} \delta(\dot{\mathbf{x}})\ d\mathbf{x} = -\int_{\Omega_t} \rho_t\ \ddot{\mathbf{x}} \cdot \delta\mathbf{x}\ d\mathbf{x} =$$

$$= -\int_{\Omega_t} \rho_t\ (\ddot{\mathbf{x}}^m + \theta^3(\lambda\mathbf{n})'') \cdot (\delta\mathbf{x}^m + \theta^3\delta(\lambda\mathbf{n}))\ d\mathbf{x} =$$

$$= -\int_{\mathcal{A}_t} \ddot{\mathbf{x}}^m \cdot \delta\mathbf{x}^m \left(\int_{-\lambda H/2}^{-\lambda H/2} \rho_t(\mathbf{x}^m + \theta^3\mathbf{n}) d\theta^3 \right) d\mathbf{x}^m -$$

$$- \int_{\mathcal{A}_t} \left(\ddot{\mathbf{x}}^m \cdot \frac{\delta(\lambda\mathbf{n})}{\lambda} + \frac{(\lambda\mathbf{n})''}{\lambda} \cdot \delta\mathbf{x}^m\right) \left(\int_{-\lambda H/2}^{-\lambda H/2} \theta^3 \rho_t(\mathbf{x}^m + \theta^3\mathbf{n}) d\theta^3 \right) d\mathbf{x}^m -$$

$$- \int_{\mathcal{A}_t} \frac{(\lambda\mathbf{n})''}{\lambda} \frac{\delta(\lambda\mathbf{n})}{\lambda} \left(\int_{-\lambda H/2}^{-\lambda H/2} (\theta^3)^2 \rho_t(\mathbf{x}^m + \theta^3\mathbf{n}) d\theta^3 \right) d\mathbf{x}^m.$$

Здесь $\mathbf{t}^{\Sigma}(\mathbf{x}^m) = \mathbf{t}(\mathbf{x}^m + \frac{\lambda H}{2}\mathbf{n}) + \mathbf{t}(\mathbf{x}^m - \frac{\lambda H}{2}\mathbf{n})$ — разность давлений между нижней и верхней поверхностями оболочки, $\mathbf{t}^{\Delta}(\mathbf{x}^m) = \mathbf{t}(\mathbf{x}^m + \frac{\lambda H}{2}\mathbf{n}) - \mathbf{t}(\mathbf{x}^m - \frac{\lambda H}{2}\mathbf{n})$ — эффективная крутящая сила, $\delta\mathbf{x}^m$ — вариация положения (перемещения) срединной поверхности, $\mathcal{A}_t$ — поверхность оболочки в актуальной конфигурации, $\mathcal{A}_{t,P}$ — часть поверхности оболочки, к которой приложено давление, $\partial\mathcal{A}_{t,P}$ — часть границы поверхности оболочки, к которой приложено внешнее воздействие.

В *мембранном приближении* в записанных выше выражениях для вариаций пренебрегают слагаемыми содержащими $\delta(\lambda\mathbf{n})$ или $(\lambda\mathbf{n})''$.

Введём эффективные физические параметры для задачи упругости оболочек и мембран.

1. Эффективное давление на поверхность оболочки (далее будем называть просто давлением):
$$\mathbf{p} : \mathcal{A}_t \to \mathbb{R}^3;\ \mathbf{p}(\mathbf{x}^m) = \zeta_{\mathcal{A}_{t,P}} \cdot \mathbf{t}^{\Sigma} + \int\limits_{-\lambda H/2}^{\lambda H/2} \rho_t \mathbf{b}(\mathbf{x}^m + \theta^3\mathbf{n})\, d\theta^3,$$
где $\zeta_{\mathcal{A}_{t,P}} = \begin{cases} 1, \mathbf{x}^m \in \mathcal{A}_{t,P} \\ 0, \textit{иначе} \end{cases}$ — индикаторная функция множества.
2. Краевое натяжение:
$$\mathbf{q} : \partial\mathcal{A}_t \to \mathbb{R}^3;\ \mathbf{q}(\mathbf{x}^m) = \zeta_{\partial\mathcal{A}_{t,P}} \int\limits_{-\lambda H/2}^{\lambda H/2} \mathbf{t}(\mathbf{x}^m + \theta^3\mathbf{n}) d\theta^3.$$
3. Поверхностная плотность и коэффициенты инерции оболочки:
$$\tau_0^i : \mathcal{A}_0 \to \mathbb{R};\ \tau_0^i(\mathbf{X}^m) = \int_{-H/2}^{H/2} (\theta^3)^i \rho_0(\mathbf{X}^m + \theta^3\mathbf{N}) d\theta^3,\ i = 0{,}1{,}2$$
$$\tau_t^i : \mathcal{A}_t \to \mathbb{R};\ \tau_t^i(\mathbf{x}^m) = \frac{\lambda^{i+1}}{J} \tau_0^i(\mathbf{X}^m(\mathbf{x}^m)).$$
4. Эффективный момент сил, приложенных на поверхность оболочки:
$$\mathbf{m}^p : \mathcal{A}_t \to \mathbb{R}^3;\ \mathbf{m}^p(\mathbf{x}^m) = \zeta_{\mathcal{A}_{t,P}} \cdot \frac{\lambda H}{2} \mathbf{t}^{\Delta} + \int\limits_{-\lambda H/2}^{\lambda H/2} \theta^3 \rho_t \mathbf{b}(\mathbf{x}^m + \theta^3\mathbf{n})\, d\theta^3.$$
5. Краевой момент сил:
$$\mathbf{m}^q : \partial\mathcal{A}_t \to \mathbb{R}^3;\ \mathbf{m}^q(\mathbf{x}^m) = \zeta_{\partial\mathcal{A}_{t,P}} \int\limits_{-\lambda H/2}^{\lambda H/2} \theta^3 \mathbf{t}(\mathbf{x}^m + \theta^3\mathbf{n}) d\theta^3.$$

Слабая постановка задачи упругости для несжимаемой оболочки после пренебрежения членами $O(\theta^3\delta\lambda)$, $O(\theta^3\dot{\lambda})$ и $O(\theta^3\ddot{\lambda})$ принимает вид: найти функцию $\mathbf{x}^m \in \mathcal{L}^2([0,T];\mathcal{H}^2(\mathcal{A};\mathbb{R}^3))$, которая удовлетворяет начальным условиям $\mathbf{x}^m|_{t=0} = \mathbf{x}^m_0$, $\dot{\mathbf{x}}^m|_{t=0} = \mathbf{v}^m_0$ и граничным условиям Дирихле $\mathbf{x}^m|_{\partial\mathcal{A}_{t,D}} = \mathbf{x}^m_D$, такую, что $\forall t \in (0;T]$ и для любой функции $\delta\mathbf{x}^m \in \{\mathbf{x}^m \in \mathcal{H}^2(\mathcal{A};\mathbb{R}^3) : \mathbf{x}^m|_{\partial\mathcal{A}_D} = 0\}$ выполнено равенство:

$$\delta K - (\delta U - \delta A) = 0,$$

$$\begin{aligned}
&\delta K = \delta K^{memb} + \delta K^{bend,1} + \delta K^{bend,2},\\
&\delta U = \delta U^{memb} + \delta U^{bend},\ \delta A = \delta A^{memb} + \delta A^{bend},\\
&\delta K^{memb} := -\int\limits_{\mathcal{A}_0} \tau^0_0 \ddot{\mathbf{x}}^m \cdot \delta\mathbf{x}^m\, dA,\\
&\delta K^{bend,1} := -\int\limits_{\mathcal{A}_0} \lambda\tau^1_0(\ddot{\mathbf{x}}^m \cdot \delta\mathbf{n} + \ddot{\mathbf{n}} \cdot \delta\mathbf{x}^m)\, dA,\\
&\delta K^{bend,2} := -\int\limits_{\mathcal{A}_0} \lambda^2\tau^2_0\, \ddot{\mathbf{n}} \cdot \delta\mathbf{n}\, dA,\\
&\delta A^{memb} := \int\limits_{\mathcal{A}_t} \mathbf{p} \cdot \delta\mathbf{x}^m\, dA + \int\limits_{\partial\mathcal{A}_t} \mathbf{q} \cdot \delta\mathbf{x}^m\, dl,\\
&\delta A^{bend} := \int\limits_{\mathcal{A}_t} \mathbf{m}^p \cdot \delta\mathbf{n}\, dA + \int\limits_{\partial\mathcal{A}_t} \mathbf{m}^q \cdot \delta\mathbf{n}\, dl,\\
&\delta U^{memb} := \int_{\mathcal{A}_0} \left(\int\limits_{-H/2}^{H/2} s^{\alpha\beta} d\theta^3 \right) \frac{1}{2}\delta a_{\alpha\beta}\, dA,\\
&\delta U^{bend} := \int_{\mathcal{A}_0} \left(\int\limits_{-H/2}^{H/2} \theta^3 s^{\alpha\beta} d\theta^3 \right) \lambda\delta\kappa_{\alpha\beta}\, dA,
\end{aligned}$$

$$a_{\alpha\beta} := \mathbf{x}^m_{,\alpha} \cdot \mathbf{x}^m_{,\beta},\ \kappa_{\alpha\beta} := -\mathbf{x}^m_{,\alpha\beta} \cdot \mathbf{n} = (\mathbf{x}^m_{,\alpha} \cdot \mathbf{n}_{,\beta} + \mathbf{x}^m_{,\beta} \cdot \mathbf{n}_{,\alpha})/2,\ \chi = \kappa - \kappa^{(0)},$$

$$c_{\alpha\beta} := a_{\alpha\beta} + 2\lambda\theta^3\chi_{\alpha\beta},\ \lambda^2 = 1/\det[a_{\alpha\beta}],\ \mathbf{n} = \mathbf{x}^m_{,1} \times \mathbf{x}^m_{,2}/|\mathbf{x}^m_{,1} \times \mathbf{x}^m_{,2}|,$$

$$s^{\alpha\beta} := 2\frac{\partial\hat{\psi}(\mathbb{C}^S)}{\partial c_{\alpha\beta}},\ \hat{\psi}(\mathbb{C}^S) := \psi(\mathbb{C}^S + (J^S)^{-2}\mathbf{N} \otimes \mathbf{N}),\ (J^S)^2 := \det\nolimits_{2D} \mathbb{C}^S.$$

Для мембранной постановки члены с индексом ^{bend} принимаются нулевыми и $\mathcal{H}^2$ заменяется на $\mathcal{H}^1$. Стационарная задача совпадает с принципом равенства виртуальной работы и изменения внутренней энергии $\delta U = \delta A$ [28].

1.6 Численная дискретизация уравнений для оболочек и мембран

Будем описывать начальную конфигурацию поверхности оболочки с помощью конформной квазиравномерной треугольной сетки Ω_0^h с шагом h. Для дискретизации слабой постановки уравнений движения несжимаемой оболочки применим модифицированный метод конечных элементов, в котором искомое положение $\mathbf{x}^m$ будем описывать элементами типа P_1, т.е. будем считать функцию $\mathbf{x}^m$ непрерывной и кусочно-линейной на каждом треугольнике сетки. При применении стандартного метода конечных элементов типа P_1 не удаётся учесть вклад изгибной жесткости, ибо оказывается $\delta U^{bend} = 0$, поскольку входящая туда функция кривизны $\kappa_{\alpha\beta} = -\mathbf{x}^m_{,\alpha\beta} \cdot \mathbf{n}$ определяется через вторые производные от конечных координат, которые равняются нулю для кусочно-линейной функции $\mathbf{x}^m$. Модификация состоит в замене конечно-элементной аппроксимации для $\kappa_{\alpha\beta}$ на иную, основанную только на перемещениях узлов [50]. Будем следовать предложенному в работе Oñate и Flores [44] усовершенствованному методу простой треугольной оболочки (EBST), в котором аппроксимация $\kappa_{\alpha\beta}$ строится в духе метода конечных объёмов и использует положение не только центрального треугольника, но и его соседей.

Далее у $\mathbf{X}^m$ и $\mathbf{x}^m$ будем опускать верхний индекс m, который указывает на принадлежность величины к срединной поверхности. Тогда относительно декартовой системы координат (ДСК) $\{\mathbf{E}_1, \mathbf{E}_2, \mathbf{E}_3\}$ связанной с начальной конфигурацией и ДСК $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3\}$ в актуальной конфигурации имеем

$$\mathbf{X} = \sum_{i=1}^{3} X^i \mathbf{E}_i, \qquad \mathbf{x} = \sum_{i=1}^{3} x^i \mathbf{e}_i.$$

Здесь и далее будем предполагать, что в начальной и актуальной конфигурации используется общая ДСК, т.е. $\mathbf{E}_i = \mathbf{e}_i$, однако будем использовать оба эти обозначения, чтобы отличать принадлежность объектов к разным конфигурациям.

Деформация треугольного элемента и локальный базис. Пусть $\mathbf{P}_1$, $\mathbf{P}_2$, $\mathbf{P}_3$ — координаты вершин треугольника в начальной конфигурации T_P, а $\mathbf{Q}_1$, $\mathbf{Q}_2$, $\mathbf{Q}_3$ — координаты вершин того же треугольника после деформации T_Q (Рисунок 1.3). Будем также полагать, что координаты трёхмерные, если они двумерные, то в качестве третьей компоненты добавим 0. Будем считать, что вершины треугольника пронумерованы согласовано с направлением единичной нормали так, чтобы выполнялось $\mathbf{n}_p \upuparrows (\mathbf{P}_1 - \mathbf{P}_3) \times (\mathbf{P}_2 - \mathbf{P}_3)$.

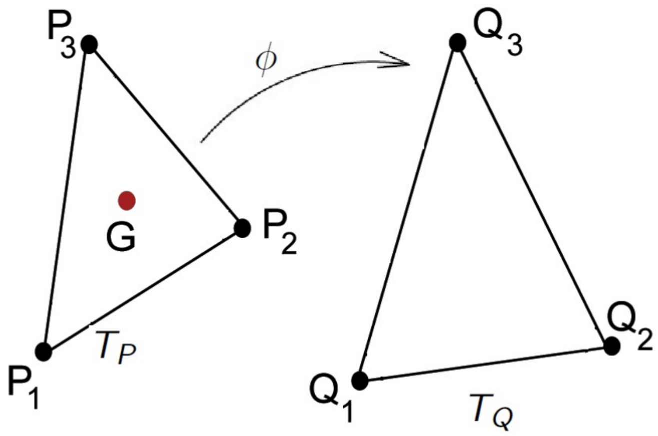


Рисунок 1.3 — Треугольник до и после деформации

Введём ряд обозначений:

– $\xi^i(\mathbf{X})$ для $i = 1{,}2{,}3$ — барицентрические координаты точки $\mathbf{X}$ на треугольнике T_P;
– $A_p = \frac{1}{2}|(\mathbf{P}_1 - \mathbf{P}_3) \times (\mathbf{P}_2 - \mathbf{P}_3)|$, $A_q = \frac{1}{2}|(\mathbf{Q}_1 - \mathbf{Q}_3) \times (\mathbf{Q}_2 - \mathbf{Q}_3)|$ — площади треугольников T_P и T_Q;
– $\mathbf{N}_p = \frac{(\mathbf{P}_1 - \mathbf{P}_3) \times (\mathbf{P}_2 - \mathbf{P}_3)}{2A_p}$, $\mathbf{n}_q = \frac{(\mathbf{Q}_1 - \mathbf{Q}_3) \times (\mathbf{Q}_2 - \mathbf{Q}_3)}{2A_q}$ - единичные нормали к плоскости треугольников T_P и T_Q;
– $p : \overline{1{,}5} \to \overline{1{,}3}$, $p(i) = 1 + (i-1)\%3$, где $x\%y$ обозначает операцию взятия остатка от целочисленного деления x на y;
– $\mathbf{D}_i = \nabla_{\mathbf{X}} \xi^i = \frac{1}{2A_p} \mathbf{N}_p \times (\mathbf{P}_{p(i+2)} - \mathbf{P}_{p(i+1)})$ для $i = 1{,}2{,}3$ — градиент барицентрических координат;
– локальные ортонормированные базисы $\{\hat{\mathbf{G}}_1, \hat{\mathbf{G}}_2, \mathbf{N}_p\}$ и $\{\hat{\mathbf{g}}_1, \hat{\mathbf{g}}_2, \mathbf{n}_q\}$, где $\hat{\mathbf{G}}_2 = \mathbf{N}_p \times \hat{\mathbf{G}}_1$, $\hat{\mathbf{g}}_2 = \mathbf{n}_q \times \hat{\mathbf{g}}_1$, а вектора $\hat{\mathbf{G}}_1$ и $\hat{\mathbf{g}}_1$ выбираются в плоскостях T_P и T_Q произвольным образом, например, можно взять $\hat{\mathbf{G}}_1 = (\mathbf{P}_1 - \mathbf{P}_3)/|\mathbf{P}_1 - \mathbf{P}_3|$ и $\hat{\mathbf{g}}_1 = (\mathbf{Q}_1 - \mathbf{Q}_3)/|\mathbf{Q}_1 - \mathbf{Q}_3|$;
– матрицы перехода в касательные плоскости T_P и T_Q: $[\hat{\mathbb{S}}_p]_{\alpha j} = \hat{\mathbf{G}}_\alpha \cdot \mathbf{E}_j$ и $[\hat{\mathbb{S}}_q]_{\alpha j} = \hat{\mathbf{g}}_\alpha \cdot \mathbf{e}_j$, т.е. матрицы перехода из глобальных ДСК в систему локальных координат;
– $\mathbb{Q} = (\mathbf{Q}_1, \mathbf{Q}_2, \mathbf{Q}_3)$ — матрица, столбцами которой являются координаты вершин треугольника в конечном состоянии, $\overline{\mathbb{Q}} = (\mathbf{Q}_1 - \mathbf{Q}_3, \mathbf{Q}_2 - \mathbf{Q}_3)$;
– $\mathbb{D} = (\mathbf{D}_1, \mathbf{D}_2, \mathbf{D}_3)$ — матрица, составленная из градиентов барицентрических координат и $\overline{\mathbb{D}} = (\mathbf{D}_1, \mathbf{D}_2)$;

– $\mathbb{D}^* = \mathbb{S}_p\mathbb{D}$ и $\overline{\mathbb{D}^*} = \mathbb{S}_p\overline{\mathbb{D}}$;
– $[\mathbb{I}^*]_{\alpha k} = \delta_{\alpha k} - (\delta_{1\alpha} + \delta_{2\alpha})\delta_{3k}$, где $\alpha = \overline{1,2}$, $k = \overline{1,3}$; справедливо $\overline{\mathbb{Q}} = \mathbb{Q}(\mathbb{I}^*)^T$ или $\overline{\mathbf{Q}}_\alpha = \mathbb{I}^*_{\alpha k}\mathbf{Q}_k$.

Применяя МКЭ с элементами типа P_1 имеем следующее выражение для вычисления положения любой точки треугольника до и после деформации:

$$\mathbf{X} = \sum_{i=1}^{3} \xi^i(\mathbf{X})\mathbf{P}_i, \qquad \mathbf{x} = \sum_{i=1}^{3} \xi^i(\mathbf{X})\mathbf{Q}_i. \tag{1.25}$$

Возникающие далее выражения для тензоров можно записывать как относительно глобальной ДСК, так и локального базиса. Во втором случае возникающие матрицы коэффициентов имеют меньшую размерность и соответственно влекут меньше вычислений, поэтому далее будем записывать выражения относительно локального базиса, если явно не будет указано иное.

Аппроксимация метрического тензора. Используя (1.25) имеем касательную компоненту градиента деформации:

$$\mathbb{F}^S = \mathbf{g}_\alpha \otimes \mathbf{G}^\alpha = \hat{F}^S_{ij}\mathbf{e}^i \otimes \mathbf{E}^j, \;\; \hat{F}^S_{ij} = \frac{\partial x_i}{\partial X^j} = \sum_{k=1}^{3} \frac{\partial \xi_k(\mathbf{X})}{\partial X^j}(\mathbf{Q}_k)_i = \sum_{k=1}^{3}(\mathbf{Q}_k)_i(\mathbf{D}_k)_j.$$

Последнее равенство можно переписать в матричной форме:

$$\begin{gathered}\mathbb{F}^S = \hat{F}^S_{ij}\mathbf{e}^i \otimes \mathbf{E}^j = F^S_{\alpha\beta}\hat{\mathbf{g}}^\alpha \otimes \hat{\mathbf{G}}^\beta, \\ \hat{F}^S_{ij} = (\overline{\mathbb{Q}}\;\overline{\mathbb{D}}^T)_{ij}, \quad F^S_{\alpha\beta} = (\mathbb{S}_q\overline{\mathbb{Q}}\;\overline{\mathbb{D}}^T\mathbb{S}_p^T)_{\alpha\beta}.\end{gathered} \tag{1.26}$$

Соответственно, можем записать выражение для касательного тензора $\mathbb{C}^S$:

$$\begin{gathered}\mathbb{C}^S = (\mathbb{F}^S)^T\mathbb{F}^S = \hat{a}_{ij}\mathbf{E}^i \otimes \mathbf{E}^j = a_{\alpha\beta}\hat{\mathbf{G}}^\alpha \otimes \hat{\mathbf{G}}^\beta, \\ \hat{a}_{ij} = (\overline{\mathbb{D}}\;\overline{\mathbb{Q}}^T\overline{\mathbb{Q}}\;\overline{\mathbb{D}}^T)_{ij},\; a_{\alpha\beta} = (\mathbb{S}_p\;\hat{a}\;\mathbb{S}_p^T)_{\alpha\beta} = (\overline{\mathbb{D}^*}\;\overline{\mathbb{Q}}^T\overline{\mathbb{Q}}\;\overline{\mathbb{D}^*}^T)_{\alpha\beta}.\end{gathered} \tag{1.27}$$

Вариация тензора $a_{\alpha\beta}$ вычисляется как

$$\delta a_{\alpha\beta} = \frac{\partial a_{\alpha\beta}}{\partial \overline{\mathbf{Q}}_\gamma} \cdot \delta\overline{\mathbf{Q}}_\gamma = 2\mathbb{A}_{\alpha\beta\gamma\lambda}\overline{\mathbf{Q}}_\lambda \cdot \delta\overline{\mathbf{Q}}_\gamma = 2\mathbb{A}_{\alpha\beta\gamma\lambda}\mathbb{I}^*_{\gamma k}\overline{\mathbf{Q}}_\lambda \cdot \delta\mathbf{Q}_k, \tag{1.28}$$

где использован $\mathbb{A}_{\alpha\beta\gamma\lambda} := \frac{1}{2}(\overline{\mathbb{D}^*}_{\alpha\gamma}\overline{\mathbb{D}^*}_{\beta\lambda} + \overline{\mathbb{D}^*}_{\beta\gamma}\overline{\mathbb{D}^*}_{\alpha\lambda})$ и ведётся суммирование по повторяющимся индексам.

Аппроксимация тензора кривизны. По определению тензора кривизны имеем

$$\kappa_{\alpha\beta} = -\mathbf{n} \cdot \mathbf{x}_{,\alpha\beta} = -(\mathbf{n}_q + O(h)) \cdot \left(\frac{1}{A_p}\int_{A_p} \mathbf{x}_{,\alpha\beta} d\mathbf{x} + O(h)\right).$$

Аппроксимируя κ с наименьшим порядком точности $O(h)$ будем далее считать κ кусочно-постоянной функцией аппроксимирующей выражение

$$\kappa_{\alpha\beta} := -\mathbf{n}_q \cdot \frac{1}{A_p} \int_{A_p} \mathbf{x}_{,\alpha\beta} d\mathbf{x}.$$

Интегрируя последнее выражение по частям и обозначая внешнюю нормаль к треугольнику на ребре e как $\mathbf{N}^e$, получаем

$$\kappa_{\alpha\beta} = -\mathbf{n}_q \cdot \frac{1}{A_p} \int_{A_p} \mathbf{x}_{,\alpha\beta} d\mathbf{x} = -\mathbf{n}_q \cdot \frac{1}{2A_p} \sum_{e\in\partial A_p} \left(\int_e \mathbf{x}_{,\alpha}\, dl\, \mathbf{N}^e_\beta + \int_e \mathbf{x}_{,\beta}\, dl\, \mathbf{N}^e_\alpha \right) =$$
$$= -\mathbf{n}_q \cdot \frac{1}{2A_p} \sum_{e\in\partial A_p} |e| \left(\mathbf{x}^e_{,\alpha} \mathbf{N}^e_\beta + \mathbf{x}^e_{,\beta} \mathbf{N}^e_\alpha \right) + O(h).$$

Наконец, пренебрегая слагаемым $O(h)$ и замечая, что $\mathbf{D}_i = -\frac{1}{2A_p}|e^i|\mathbf{N}^{e^i}$, имеем

$$\kappa_{\alpha\beta} = \sum_{I=1}^{3} [(\mathbf{n}_q \cdot \mathbf{x}^I_{,\alpha})\, \mathbb{D}^*_{\beta I} + (\mathbf{n}_q \cdot \mathbf{x}^I_{,\beta})\, \mathbb{D}^*_{\alpha I}], \tag{1.29}$$

$$\begin{aligned} \chi_{\alpha\beta} &= \sum_{I=1}^{3} \chi^I_{\alpha\beta}, \quad \chi^I_{\alpha\beta} := \mathbb{D}^*_{\alpha I} y^I_\beta + \mathbb{D}^*_{\beta I} y^I_\alpha,\ y^I_\alpha := (\mathbf{n}_q \cdot \mathbf{x}^I_{,\alpha}) - (\mathbf{N}_p \cdot \mathbf{X}^I_{,\alpha}), \\ \delta\chi_{\alpha\beta} &= \sum_{I=1}^{3} \delta\chi^I_{\alpha\beta}, \quad \delta\chi^I_{\alpha\beta} := \mathbb{D}^*_{\alpha I} \delta y^I_\beta + \mathbb{D}^*_{\beta I} \delta y^I_\alpha, \end{aligned} \tag{1.30}$$

где $\mathbf{x}^I_{,\alpha}$ — непрерывная аппроксимация величины $\mathbf{x}_{,\alpha}$ в центре ребра, лежащего напротив вершины $\mathbf{P}_I$.

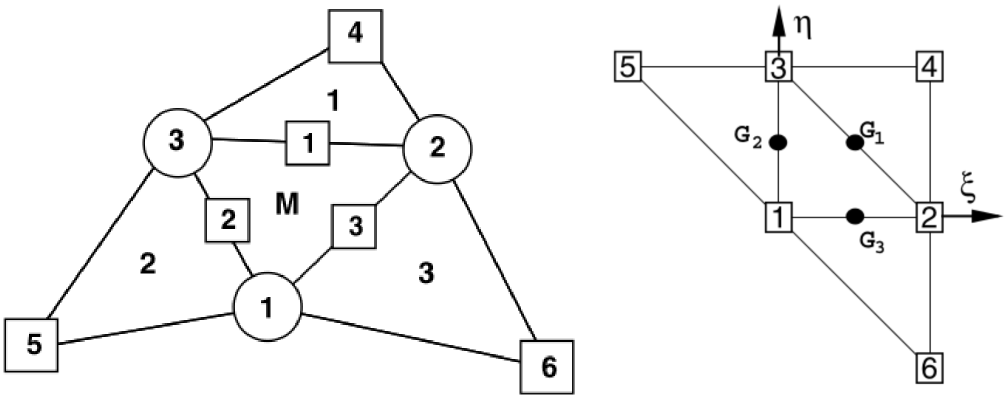


Рисунок 1.4 — Слева: патч из центрального треугольника (M) и его соседей (1,2,3); справа: представление патча в изогеометрическом пространстве [111]

Следуя работе [111], приведём вывод для аппроксимации $\mathbf{x}^I_{,\alpha}$ по узловым перемещениям четырёх-элементного патча (Рисунок 1.4). После того, как для центрального треугольника выбрана нумерация узлов, на патче пронумеруем соседние треугольники и дополнительные узлы как на Рисунке 1.4.

На патче будем использовать квадратичную интерполяцию координат:

$$\mathbf{x} = \sum_{i=1}^{6} N_i(\xi,\eta)\mathbf{Q}_i,\ \mathbf{X} = \sum_{i=1}^{6} N_i(\xi,\eta)\mathbf{P}_i, \tag{1.31}$$

где $\zeta = 1-\xi-\eta$ и выполнено

$$\begin{aligned} &N_1 = \zeta+\xi\eta, && N_2 = \xi+\eta\zeta, && N_3 = \eta+\zeta\xi,\\ &N_4 = \frac{\zeta}{2}(\zeta-1), && N_5 = \frac{\xi}{2}(\xi-1), && N_6 = \frac{\eta}{2}(\eta-1). \end{aligned} \tag{1.32}$$

Обозначим $\boldsymbol{\xi} = (\xi,\eta)$ и введём вектор-строку $\tilde{\mathbf{N}}^I = (N_1, N_2, N_3, N_{I+3})$. Изокоординаты центров рёбер равны $\boldsymbol{\xi}^{e,1} = (\frac{1}{2},\frac{1}{2})$, $\boldsymbol{\xi}^{e,2} = (0,\frac{1}{2})$ и $\boldsymbol{\xi}^{e,3} = (\frac{1}{2},0)$.

Пусть $\mathbb{N}_d^I = \nabla_{\boldsymbol{\xi}}\tilde{\mathbf{N}}^I(\boldsymbol{\xi}^{e,I})$. Простые вычисления приводят к матрицам:

$$\mathbb{N}_d^1 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -1 & 1 & -1 & 1\\ -1 & -1 & 1 & 1\end{pmatrix},\ \mathbb{N}_d^2 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -1 & 1 & 1 & -1\\ -2 & 0 & 2 & 0\end{pmatrix},\ \mathbb{N}_d^3 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -2 & 2 & 0 & 0\\ -1 & -1 & 1 & -1\end{pmatrix}.$$

На основе этих матриц также определим $(\mathbb{N}_M^I)_{\alpha j} = (\mathbb{N}_d^I)_{\alpha j}$ и $(\mathbb{N}_e^I)_\alpha = (\mathbb{N}_d^I)_{\alpha 3}$, где $j = 1{,}2{,}3$ и $\alpha = 1{,}2$.

Градиенты функций N относительно локального базиса записываются естественным образом:

$$\nabla N_i = \nabla_{\xi^\beta} N_i\ \mathbf{X}_{,\xi_\beta} = (\hat{\mathbf{G}}_\alpha\cdot\mathbf{X}_{,\xi_\beta})\nabla_{\xi^\beta} N_i \hat{\mathbf{G}}^\alpha.$$

Пусть $\mathbf{J}_{\alpha\beta} = \mathbf{X}_{,\xi^\alpha}\cdot\hat{\mathbf{G}}_\beta = \left(\sum_{i=1}^{6}\nabla_{\xi^\alpha}N_i\mathbf{P}_i\right)\cdot\hat{\mathbf{G}}_\beta$. Векторы $\mathbf{X}_{,\xi_\alpha}$ и $\hat{\mathbf{G}}_\beta$ формируют базисы касательной плоскости к искомой поверхности, поэтому

$$\nabla N_i = (\mathbf{J}^{-1}\cdot\nabla_{\boldsymbol{\xi}} N_i)_\beta \hat{\mathbf{G}}^\beta.$$

Наконец, выражение для аппроксимации величины $\mathbf{x}_{,\alpha}$ принимает вид:

$$\begin{pmatrix}\mathbf{x}_{,1}^I\\ \mathbf{x}_{,2}^I\end{pmatrix} = \left(\mathbb{N}_d^I\ (\mathbb{S}_p\mathbb{P}^I)^T\right)^{-1}\mathbb{N}_d^I\ (\mathbb{Q}^I)^T = \mathbb{K}_d^I\ (\overline{\mathbb{Q}}^I)^T = \mathbb{K}^{M,I}(\overline{\mathbb{Q}})^T + \mathbb{K}^{e,I}(\overline{\mathbf{Q}}_3^I)^T, \tag{1.33}$$

где $\mathbf{J}^I = \left(\overline{\mathbb{N}_d}^I\ (\mathbb{S}_p\overline{\mathbb{P}}^I)^T\right)$, $\mathbb{K}^I = (\mathbf{J}^I)^{-1}\overline{\mathbb{N}_d}^I$, $\mathbb{K}^{M,I} = (\mathbf{J}^I)^{-1}\overline{\mathbb{N}_M}^I$, $\mathbb{K}^{e,I} = (\mathbf{J}^I)^{-1}\overline{\mathbb{N}_e}^I$. Здесь использован ряд обозначений, где $p^I(n) = n + (n/3)I$:

$$\begin{aligned}\mathbb{P}^I &= \ (\mathbf{P}_1,\mathbf{P}_2,\mathbf{P}_3,\mathbf{P}_{I+3})\\ \mathbb{Q}^I &= \ (\mathbf{Q}_1,\mathbf{Q}_2,\mathbf{Q}_3,\mathbf{Q}_{I+3})\end{aligned},\ \mathbb{I}^I = \begin{pmatrix}1 & 0 & -1 & 0\\ 0 & 1 & -1 & 0\\ 0 & 0 & -1 & 1\end{pmatrix},\ \begin{aligned}&\overline{\mathbb{P}}^I = \mathbb{P}^I(\mathbb{I}^I)^T,\ \overline{\mathbf{Q}}_i^I = \mathbb{I}_{in}^I\mathbf{Q}_{p^I(n)},\\ &\overline{\mathbb{Q}}^I = \mathbb{Q}^I(\mathbb{I}^I)^T,\ \overline{\mathbf{Q}}_3^I = \mathbf{Q}_{I+3}-\mathbf{Q}_3,\\ &\overline{\mathbb{N}}_d^I = \mathbb{N}_d^I(\mathbb{I}^I)^T,\ \overline{\mathbf{P}}_3^I = \mathbf{P}_{I+3}-\mathbf{P}_3.\end{aligned}$$

Подставляя выражения (1.33) в определение y^I_α в (1.30), получаем

$$\begin{aligned}&(\mathbf{x}^I_{,\alpha}\cdot\mathbf{n}_q)=\sum_{\beta=1}^{2}\mathbb{K}^{M,I}_{\alpha\beta}(\overline{\mathbf{Q}}_\beta\cdot\mathbf{n}_q)+\mathbb{K}^{e,I}_{\alpha}(\overline{\mathbf{Q}}^I_3\cdot\mathbf{n}_q)=\mathbb{K}^{e,I}_{\alpha}(\overline{\mathbf{Q}}^I_3\cdot\mathbf{n}_q),\\&y^I_\alpha=\mathbb{K}^{e,I}_{\alpha}[(\overline{\mathbf{Q}}^I_3\cdot\mathbf{n}_q)-(\overline{\mathbf{P}}^I_3\cdot\mathbf{N}_p)].\end{aligned}\tag{1.34}$$

Вводя многомерные массивы $\mathbb{H}^{e,I}_{\alpha\beta}:=\mathbb{D}^*_{\alpha I}\mathbb{K}^{e,I}_{\beta}+\mathbb{D}^*_{\beta I}\mathbb{K}^{e,I}_{\alpha}$, имеем

$$\begin{aligned}&\chi^I_{\alpha\beta}=\mathbb{H}^{e,I}_{\alpha\beta}\,[(\overline{\mathbf{Q}}^I_3\cdot\mathbf{n}_q)-(\overline{\mathbf{P}}^I_3\cdot\mathbf{N}_p)],\\&\delta\chi^I_{\alpha\beta}=\mathbb{H}^{e,I}_{\alpha\beta}\,[\delta\mathbf{Q}_{I+3}\cdot\mathbf{n}_q-\delta\mathbf{Q}_3\cdot\mathbf{n}_q+\overline{\mathbf{Q}}^I_3\cdot\delta\mathbf{n}_q].\end{aligned}\tag{1.35}$$

Формула (1.35) и приведённые рассуждения о патче справедливы, если треугольный элемент не является граничным. Будем рассматривать 2 типа граничных условий:

1. Фиксировано направление нормального градиента решения.
На I ребре треугольника задан нормальный градиент $\varphi^I=\varphi^I_i\mathbf{E}_i$, $||\varphi^I||=1$, сохраняющий своё направление в глобальной ДСК в ходе деформаций:

$$\varphi^I=\mathbf{X}^I_{,n}:=\frac{\partial\mathbf{X}}{\partial\mathbf{N^I}}=(\mathbf{N}^I\cdot\nabla)\mathbf{X}=(\hat{N}^I_i\mathbf{E}^i\cdot\hat{\mathbf{G}}^\alpha\nabla_\alpha)\mathbf{X}=\mathbf{X}^I_{,\alpha}(\mathbb{S}_p)_{\alpha i}\hat{N}^I_i,\tag{1.36}$$

где $\mathbf{N}^I=\hat{N}^I_i\mathbf{E}^i=-\frac{\mathbf{D}_I}{|\mathbf{D}_I|}$ — внешняя единичная нормаль к ребру I (лежащая в плоскости треугольника). К ребру прилегают узлы с номерами $p(I+1)$ и $p(I+2)$ и можно вычислить

$$\mathbf{x}^I_{,s}=\frac{\mathbf{Q}_{p(I+2)}-\mathbf{Q}_{p(I+1)}}{l^I_p},\tag{1.37}$$

где $l^I_p=|\mathbf{P}_{p(I+2)}-\mathbf{P}_{p(I+1)}|$.
Из постоянства на элементе $\det_{2d}\mathbb{F}^S$ и ортогональности $\mathbf{x}^I_{,s}\perp\mathbf{x}^I_{,n}$ имеем

$$\det_{2d}\mathbb{F}^S=\det a=A_q/A_p=|\mathbf{x}^I_{,s}\times\mathbf{x}^I_{,n}|=|\mathbf{x}^I_{,n}||\mathbf{Q}_{p(I+2)}-\mathbf{Q}_{p(I+1)}|/l^I_p.$$

Используя l^I_p и l^I_q — длины I-го ребра до и после деформации, получаем

$$\mathbf{x}^I_{,n}=\frac{l^I_p}{A_p}\frac{A_q}{l^I_q}\varphi^I=\frac{1}{l^I_q}\frac{l^I_p\varphi^I}{\lambda}.\tag{1.38}$$

Пусть $N^I_\alpha=\sum_{i=1}^{3}(\mathbb{S}_p)_{\alpha i}\hat{N}^I_i$ - координаты внешней нормали к ребру в локальном базисе, тогда направление вдоль ребра $s^I=(-N^I_2,N^I_1)$. Тогда имеем:

$$\begin{pmatrix}\mathbf{x}^I_{,n}\\\mathbf{x}^I_{,s}\end{pmatrix}=\sum_{\alpha=1}^{2}\begin{pmatrix}\mathbf{x}^I_{,\alpha}N^I_\alpha\\\mathbf{x}^I_{,\alpha}s^I_\alpha\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}N^I_1&N^I_2\\-N^I_2&N^I_1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\mathbf{x}^I_{,1}\\\mathbf{x}^I_{,2}\end{pmatrix},$$

$$\mathbb{K}^{N,I} := \begin{pmatrix} N_1^I & -N_2^I \\ N_2^I & N_1^I \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \mathbf{x}_{,1}^I \\ \mathbf{x}_{,2}^I \end{pmatrix} = \mathbb{K}^{N,I} \begin{pmatrix} \mathbf{x}_{,n}^I \\ \mathbf{x}_{,s}^I \end{pmatrix}. \tag{1.39}$$

Наконец, подставляя (1.37) - (1.39) в (1.30) получаем:

$$(\mathbf{x}_{,\alpha}^I \cdot \mathbf{n}_q) = \mathbb{K}_{\alpha 1}^{N,I} \frac{l_p^I(\varphi^I \cdot \mathbf{n}_q)}{\lambda\, l_q^I} + \mathbb{K}_{\alpha 2}^{N,I} \frac{\left([\mathbf{Q}_{p(I+2)} - \mathbf{Q}_{p(I+1)}] \cdot \mathbf{n}_q\right)}{l_p^I} = \mathbb{K}_{\alpha 1}^{N,I} \frac{l_p^I(\varphi^I \cdot \mathbf{n}_q)}{\lambda\, l_q^I},$$

$$y_\alpha^I = \mathbb{K}_{\alpha 1}^{N,I} \frac{l_p^I(\varphi^I \cdot \mathbf{n}_q)}{\lambda\, l_q^I}. \tag{1.40}$$

Отсюда, вводя $\mathbb{H}_{\alpha\beta}^{N,I} := (\mathbb{D}_{\alpha I}^* \mathbb{K}_{\beta 1}^{N,I} + \mathbb{D}_{\beta I}^* \mathbb{K}_{\alpha 1}^{N,I}) = -2\frac{\mathbb{D}_{\alpha I}^* \mathbb{D}_{\beta I}^*}{|\mathbf{D}_I|}$, имеем:

$$\begin{aligned} \chi_{\alpha\beta}^I &= \kappa_{\alpha\beta}^I = \mathbb{H}_{\alpha\beta}^{N,I} \frac{l_p^I}{\lambda\, l_q^I}(\varphi^I \cdot \mathbf{n}_q), \\ \delta\chi_{\alpha\beta}^I &= \mathbb{H}_{\alpha\beta}^{N,I} \frac{l_p^I}{A_p} \delta\left(\frac{A_q}{l_q^I}\right)(\varphi^I \cdot \mathbf{n}_q) + \mathbb{H}_{\alpha\beta}^{N,I} \frac{l_p^I}{\lambda\, l_q^I}(\varphi^I \cdot \delta\mathbf{n}_q). \end{aligned} \tag{1.41}$$

2. Задан краевой момент.

Перепишем выражение для краевого момента:

$$\begin{aligned} \mathbf{m}^q &= \int_{-\lambda H/2}^{\lambda H/2} \theta^3 \mathbf{t}(\mathbf{x} + \theta^3 \mathbf{n}) d\theta^3 = \int_{-\lambda H/2}^{\lambda H/2} \theta^3 \sigma(\mathbf{x} + \theta^3 \mathbf{n}_q) \cdot \mathbf{n} d\theta^3 = \\ &= \int_{-\lambda H/2}^{\lambda H/2} \theta^3 \frac{1}{J} \mathbb{F} \cdot \mathbb{S} \cdot \mathbb{F}^T \cdot \mathbf{n} d\theta^3 = \int_{-\lambda H/2}^{\lambda H/2} \frac{\lambda\theta^3}{J} \mathbb{F} \cdot \mathbb{S}\left(\mathbf{X} + \frac{\theta^3}{\lambda}\mathbf{N}\right) \cdot \mathbf{N} d\theta^3 = \\ &= \int_{H/2}^{H/2} \frac{(\lambda)^3 \theta^3}{J} \mathbb{F} \cdot \mathbb{S}(\mathbf{X} + \theta^3 \mathbf{N}) \cdot \mathbf{N}\; d\theta^3. \end{aligned}$$

Из последнего выражения, учитывая, что в предложенной несжимаемой формулировке участвует только касательная компонента краевого момента, имеем уравнение:

$$M_\alpha = \lambda^3 F_{\alpha\beta}^S \left(\int_{-H/2}^{H/2} \theta^3 s^{\beta\gamma} d\theta^3 \right) N_\gamma^I, \tag{1.42}$$

где $N_\gamma^I = -\sum_{j=1}^3 (\mathbb{S}_p)_{\gamma j} \frac{(\mathbf{D}_I)_j}{|\mathbf{D}_I|}$ — внешняя единичная нормаль к граничному ребру I и $M_\alpha = \sum_{i=1}^3 (\mathbb{S}_q)_{\alpha i} \hat{M}_i$ для $\mathbf{m}^q = \hat{M}_i\ \mathbf{e}^i = M_\alpha\ \hat{\mathbf{g}}^\alpha$.

Раскладывая $s^{\beta\gamma}$ в ряд Маклорена по θ^3 и пренебрегая $O((\theta^3)^2)$, получаем:

$$M_\alpha = \frac{\lambda^4 H^3}{6} F_{\alpha\beta}^S \left.\frac{\partial s^{\beta\gamma}}{\partial c_{\delta\omega}}\right|_{\theta^3=0} N_\gamma^I\, \chi_{\delta\omega}. \tag{1.43}$$

Наконец, если подставить (1.30), то имеем:

$$M_\alpha = \frac{\lambda^4 H^3}{3} F^S_{\alpha\beta} \frac{\partial s^{\beta\gamma}}{\partial c_{\delta\omega}}\bigg|_{\theta^3=0} N^I_\gamma \, \mathbb{D}^*_{\delta i} y^i_\omega. \tag{1.44}$$

Выражение (1.44) представляет собой 2 линейных уравнения относительно 6 переменных y^i_α. Выражения (1.33) и (1.39) для рёбер, которые являются внутренними или лежат на границей с фиксированным нормальным градиентом, также представляют пары уравнений относительно y^i_α. Таким образом, на элементе имеем разрешимую СЛАУ 6×6, из которой определяются y^i_α.

Подставляя $\mathbb{B}_{\alpha\beta\gamma\lambda} := \overline{\mathbb{D}^*}_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\lambda} + \overline{\mathbb{D}^*}_{\beta\gamma}\delta_{\alpha\lambda}$ в (1.30), получаем:

$$\begin{aligned} \chi^I_{\alpha\beta} &= \mathbb{D}^*_{\alpha I} y^I_\beta + \mathbb{D}^*_{\beta I} y^I_\alpha = \sum_{\gamma,\lambda=1}^{2} \mathbb{B}_{\alpha\beta\gamma\lambda} I^*_{\lambda I} y^I_\gamma, \\ \delta\chi^I_{\alpha\beta} &= \sum_{\gamma,\lambda=1}^{2} \mathbb{B}_{\alpha\beta\gamma\lambda} I^*_{\lambda I} \left(\sum_{j=1}^{3} \frac{\partial y^I_\gamma}{\partial \mathbf{Q}_j} \cdot \delta\mathbf{Q}_j + \frac{\partial y^I_\gamma}{\partial \mathbf{Q}_{I+3}} \cdot \delta\mathbf{Q}_{I+3} \right). \end{aligned} \tag{1.45}$$

Применение теоремы о неявной функции (ТНФ) для уравнения (1.42) на близком решении из (1.44) позволяет не вычислять производные $\frac{\partial^2 s}{\partial c \partial c}$ при отыскании производных $\frac{\partial y^i_\alpha}{\partial \mathbf{Q}_j}$.

Например, пусть лишь одно ребро I треугольника имело заданный момент и $\mathbf{y}^* = (y^*_1, y^*_2)$ — решение уравнения (1.44). Обозначим:

$$\boldsymbol{\Omega}(\mathbb{Q}^\Pi, \mathbf{y}) = \lambda^3 \mathbb{F}^S(\mathbb{Q}^\Pi) \cdot \left(\int_{-H/2}^{H/2} \theta^3 \, \mathbb{S}^S(\mathbb{C}^S(\mathbb{Q}^\Pi, \mathbf{y})) \, d\theta^3 \right) \cdot \mathbf{N}^I - \mathbf{M},$$

где $\mathbb{Q}^\Pi$ — матрица координат вершин патча. По ТНФ имеем:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mathbb{Q}^\Pi} &= -\left(\frac{\partial \boldsymbol{\Omega}}{\partial \mathbf{y}}\right)^{-1} \cdot \frac{\partial \boldsymbol{\Omega}}{\partial \mathbb{Q}^\Pi}\bigg|_{\mathbf{y}=\mathbf{y}^*}, \\ \frac{\partial \boldsymbol{\Omega}_\alpha}{\partial \mathbf{y}_\beta} &= 2\lambda^4 F^S_{\alpha\zeta} \left(\int_{-H/2}^{H/2} (\theta^3)^2 \frac{\partial s^{\zeta\gamma}}{\partial c_{\delta\omega}} \frac{\partial \chi_{\delta\omega}}{\partial \mathbf{y}_\beta} d\theta^3 \right) N^I_\gamma, \\ \frac{\partial \boldsymbol{\Omega}_\alpha}{\partial \mathbb{Q}^\Pi} &= \frac{\partial(\lambda^3 F^S_{\alpha\beta})}{\partial \mathbb{Q}^\Pi} \int_{-H/2}^{H/2} \theta^3 s^{\beta\gamma} \, d\theta^3 \, N^I_\gamma + \\ &+ \lambda^3 F^S_{\alpha\beta} \left(\int_{-H/2}^{H/2} \theta^3 \frac{\partial s^{\beta\gamma}}{\partial c_{\delta\omega}} \left[\frac{\partial a_{\delta\omega}}{\partial \mathbb{Q}^\Pi} + 2\lambda\theta^3 \sum_{i \neq I} \frac{\partial \chi_{\delta\omega}}{\partial y^i_\zeta} \frac{\partial y^i_\zeta}{\partial \mathbb{Q}^\Pi} \right] d\theta^3 \right) N^I_\gamma, \end{aligned}$$

где интегралы вычисляются численно. Для вычисления производных $\frac{\partial^2 y^i_\alpha}{\partial \mathbf{Q}_j \partial \mathbf{Q}_k}$, возникающих при оценке якобиана для уравнений движения, также используется ТНФ, но производные $\frac{\partial^2 s}{\partial c \partial c}$ принимаются нулевыми.

Вычисление тензора напряжений. Поверхностные напряжения вычисляются естественным образом $s^{\alpha\beta} = 2\partial\hat{\psi}(\mathbb{C}^S)/\partial c_{\alpha\beta}$. Если потенциал задаётся в виде аналитической функции от своих инвариантов $\hat{\psi}(I_1^S, I_2^S, I_{\mathbf{4fs}}^S, I_{\mathbf{5fs}}^S)$, где $I_2^S = (J^S)^2$, то можно записать более удобные формулы для напряжений $s^{\alpha\beta}$:

$$s^{\alpha\beta} = 2\left(\frac{\partial\hat{\psi}}{\partial I_1^S}\frac{\partial I_1^S}{\partial c_{\alpha\beta}} + \frac{\partial\hat{\psi}}{\partial I_2^S}\frac{\partial I_2^S}{\partial c_{\alpha\beta}} + \frac{\partial\hat{\psi}}{\partial I_{\mathbf{4fs}}^S}\frac{\partial I_{\mathbf{4fs}}^S}{\partial c_{\alpha\beta}} + \frac{\partial\hat{\psi}}{\partial I_{\mathbf{5fs}}^S}\frac{\partial I_{\mathbf{5fs}}^S}{\partial c_{\alpha\beta}}\right),$$

$$\frac{\partial I_1^S}{\partial c_{\alpha\beta}} = \delta_{\alpha\beta}, \quad \frac{\partial I_2^S}{\partial c_{\alpha\beta}} = \delta_{\alpha\beta} I_1^S - c_{\alpha\beta}, \quad f_\alpha^S = \sum_{i=1}^{3} (\mathbb{S}_p)_{\alpha i}\hat{f}_i, \quad s_\alpha^S = \sum_{i=1}^{3} (\mathbb{S}_p)_{\alpha i}\hat{s}_i,$$

$$\frac{\partial I_{\mathbf{4fs}}^S}{\partial c_{\alpha\beta}} = \frac{1}{2}(f_\alpha^S s_\beta^S + s_\alpha^S f_\beta^S), \quad \frac{\partial I_{\mathbf{5fs}}^S}{\partial c_{\alpha\beta}} = \sum_{\gamma=1}^{2}\left(f_\alpha^S c_{\beta\gamma} s_\gamma^S + s_\alpha^S c_{\beta\gamma} f_\gamma^S\right),$$

где $\mathbf{f} = \hat{f}_i\ \mathbf{E}^i$, $\mathbf{s} = \hat{s}^i\ \mathbf{E}_i$.

Аналогично можно вычислить и вторые производные:

$$\frac{1}{2}\frac{\partial s^{\alpha\beta}}{\partial c_{\gamma\delta}} = \frac{\partial^2\hat{\psi}}{(\partial I_1^S)^2}\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} + \frac{\partial^2\hat{\psi}}{(\partial I_2^S)^2}\frac{\partial I_2^S}{\partial c_{\alpha\beta}}\frac{\partial I_2^S}{\partial c_{\gamma\delta}} + \frac{\partial\hat{\psi}}{\partial I_2^S}\frac{\partial^2 I_2^S}{\partial c_{\alpha\beta}\partial c_{\delta\gamma}} +$$
$$+ \frac{\partial^2\hat{\psi}}{(\partial I_{\mathbf{4fs}}^S)^2}\frac{\partial I_{\mathbf{4fs}}^S}{\partial c_{\alpha\beta}}\frac{\partial I_{\mathbf{4fs}}^S}{\partial c_{\gamma\delta}} + \frac{\partial^2\hat{\psi}}{(\partial I_{\mathbf{5fs}}^S)^2}\frac{\partial I_{\mathbf{5fs}}^S}{\partial c_{\alpha\beta}}\frac{\partial I_{\mathbf{5fs}}^S}{\partial c_{\gamma\delta}} + \frac{\partial\hat{\psi}}{\partial I_{\mathbf{5fs}}^S}\frac{\partial^2 I_{\mathbf{5fs}}^S}{\partial c_{\alpha\beta}\partial c_{\delta\gamma}},$$

$$\frac{\partial^2 I_2^S}{\partial c_{\alpha\beta}\partial c_{\delta\gamma}} = \delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} - \frac{1}{2}(\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma}),$$

$$\frac{\partial^2 I_{\mathbf{5fs}}^S}{\partial c_{\alpha\beta}\partial c_{\delta\gamma}} = \frac{1}{2}\left(f_\alpha^S\delta_{\beta\gamma}s_\delta^S + f_\alpha^S\delta_{\beta\delta}s_\gamma^S + s_\alpha^S\delta_{\beta\gamma}f_\delta^S + s_\alpha^S\delta_{\beta\delta}f_\gamma^S\right).$$

Аппроксимация слабой постановки. Выпишем некоторые выражения для вариаций, используя обозначения $\overline{\mathbf{Q}}^1 := \frac{1}{2A_q}\overline{\mathbf{Q}}_2 \times \mathbf{n}_q$ и $\overline{\mathbf{Q}}^2 := -\frac{1}{2A_q}\overline{\mathbf{Q}}_1 \times \mathbf{n}_q$:

$$\delta l_q^I = (\mathbf{Q}_{p(I+1)} - \mathbf{Q}_{p(I+2)}) \cdot (\delta\mathbf{Q}_{p(I+1)} - \delta\mathbf{Q}_{p(I+2)})\ /\ l_q^I,$$

$$\delta\mathbf{A}_q = \delta[(\mathbf{Q}_1 - \mathbf{Q}_3) \times (\mathbf{Q}_2 - \mathbf{Q}_3)]/2 = \sum_{i=1}^{3}(\mathbf{Q}_{p(i+2)} - \mathbf{Q}_{p(i+1)}) \times \delta\mathbf{Q}_i/2,$$

$$\delta A_q = \frac{1}{2}\delta\left[\sqrt{|\overline{\mathbf{Q}}_1 \times \overline{\mathbf{Q}}_2|}\right] = A_q\overline{\mathbf{Q}}^\alpha \cdot \delta\overline{\mathbf{Q}}_\alpha = A_q I_{\alpha k}^*\overline{\mathbf{Q}}^\alpha \cdot \delta\mathbf{Q}_k,$$

$$\delta\mathbf{n}_q = \overline{\mathbf{Q}}^\alpha(\delta\overline{\mathbf{Q}}_\alpha \cdot \mathbf{n}_q) = \sum_{k=1}^{3} I_{\alpha k}^*\overline{\mathbf{Q}}^\alpha(\delta\mathbf{Q}_k \cdot \mathbf{n}_q), \quad \ddot{\mathbf{n}}_q = \sum_{k=1}^{3} I_{\alpha k}^*\overline{\mathbf{Q}}^\alpha(\ddot{\mathbf{Q}}_k \cdot \mathbf{n}_q),$$

$$\delta\lambda = \delta\left(A_p/A_q\right) = -\lambda\ \delta A_q/A_q, \quad \lambda = A_p/A_q, \quad \delta\mathbf{x} = \xi^i(\mathbf{X})\delta\mathbf{Q}_i.$$

Теперь рассмотрим численную аппроксимацию членов слабой постановки из раздела 1.5 и выпишем выражения для вклада от каждой ячейки. Параметры

τ_0^0, τ_0^1, τ_0^2, $\mathbf{p}$, $\mathbf{m}^p$ положим кусочно-постоянными на треугольниках, а $\mathbf{q}$ и $\mathbf{m}^q$ — кусочно-постоянными на рёбрах границы. Принадлежность сеточному элементу будем отмечать нижним индексом T для треугольника и e для ребра.

$$
\begin{aligned}
\delta K_T^{memb} &= -M_{0,T}^{ij}\,\ddot{\mathbf{Q}}_j\cdot\delta\mathbf{Q}_i,\; M_{0,T}^{ij} = \int_{T_P}\tau_0^0\xi^i\xi^j\,dA = (1+\delta_{ij})\frac{A_p}{12}(\tau_0^0)_T,\\
\delta K_T^{bend,1} &= -\lambda(M_{1,T}^{\alpha}(\ddot{\overline{\mathbf{Q}}}_\beta\cdot\mathbf{n}_q)(\overline{\mathbf{Q}}^\beta\cdot\delta\overline{\mathbf{Q}}_\alpha) + M_{1,T}^{\beta}(\ddot{\overline{\mathbf{Q}}}_\beta\cdot\overline{\mathbf{Q}}^\alpha)(\mathbf{n}_q\cdot\delta\overline{\mathbf{Q}}_\alpha)),\\
&\quad M_{1,T}^{\alpha} = \int_{T_P}\tau_0^1\xi^\alpha\,dA = (\tau_0^1)_T\frac{A_p}{3},\\
\delta K_T^{bend,2} &= -\lambda^2A_p(\tau_0^2)_T(\ddot{\overline{\mathbf{Q}}}_\beta\cdot\mathbf{n}_q)(\overline{\mathbf{Q}}^\alpha\cdot\overline{\mathbf{Q}}^\beta)(\mathbf{n}_q\cdot\delta\overline{\mathbf{Q}}_\alpha),\\
\delta A_T^{memb} &= F_{p,T}^i\delta\mathbf{Q}_i + \sum_{e^I\in\mathcal{E}(T)\cap\partial\Omega_t^h} F_{q,T}^{I,\alpha}\delta\mathbf{Q}_{p(I+\alpha)},\;\; e^I = [\mathbf{Q}_{p(I+1)},\mathbf{Q}_{p(I+2)}],\\
&\quad F_{p,T}^i = \int_{T_Q}\mathbf{p}\xi^i\,dA = \frac{A_q}{3}\mathbf{p}_T,\; F_{q,T}^{I,\alpha} = \int_{e^I}\mathbf{q}\xi^{p(I+\alpha)}\,dl = \frac{l_q^I}{2}\mathbf{q}_{e^I},\\
\delta A_T^{bend} &= \left(\overline{\mathbf{Q}}^\alpha\cdot(A_q\mathbf{m}_T^p + \sum_{e^I\in\mathcal{E}(T)\cap\partial\Omega_t^h} l_q^I\mathbf{m}_{e^I}^q)\right)\,(\mathbf{n}_q\cdot\delta\overline{\mathbf{Q}}_\alpha),\\
\delta U_T^{memb} &= A_p\int_{-H/2}^{H/2}s^{\alpha\beta}d\theta^3\;\sum_{\gamma,\lambda=1}^{2}\mathbb{A}_{\alpha\beta\gamma\lambda}\overline{\mathbf{Q}}_\gamma\cdot\delta\overline{\mathbf{Q}}_\lambda =\\
&= A_pH\left(\sum_{q=1}^{N_q}w^qs^{\alpha\beta}(a+2\lambda\chi\xi^qH)\right)\sum_{\gamma,\lambda=1}^{2}\mathbb{A}_{\alpha\beta\gamma\lambda}(\overline{\mathbf{Q}}_\gamma\cdot\delta\overline{\mathbf{Q}}_\lambda),\\
\delta U_T^{bend} &= A_p\lambda\left(\int_{-H/2}^{H/2}\theta^3s^{\alpha\beta}\,d\theta^3\right)\delta\chi_{\alpha\beta} =\\
&= A_p\lambda H^2\left(\sum_{q=1}^{N_q}w^q\xi^qs^{\alpha\beta}(a+2\lambda\chi\xi^qH)\right)\sum_{\gamma,\lambda=1}^{2}\sum_{I=1}^{3}\mathbb{B}_{\alpha\beta\lambda\gamma}I_{\lambda I}^{*}[\frac{\partial y_\gamma^I}{\partial\mathbf{Q}_j}\cdot\delta\mathbf{Q}_j+\\
&\qquad + \frac{\partial y_\gamma^I}{\partial\mathbf{Q}_{I+3}}\cdot\delta\mathbf{Q}_{I+3}],
\end{aligned}
$$

где $\{w^q,\xi^q\}_{q=1}^{N_q}$ — квадратурная формула для отрезка $[-\frac{1}{2},\frac{1}{2}]$.
Пусть $T(v)$ — множество треугольников, содержащих вершину v, а $\Pi(v)$ — множество треугольников, входящих в какой-либо патч, содержащий вершину v. Выпишем вклады в общую узловую невязку со стороны узла v.

– Узловой инерционный член: $-\sum_l\mathcal{M}_{vl}(\mathbf{Q})\ddot{\mathbf{Q}}_l$, где обобщённая матрица масс равна $\mathcal{M}_{vl} = -\sum_{T\in T(v)}\dfrac{\partial^2(\delta K_T^{memb}+\delta K_T^{bend,1}+\delta K_T^{bend,2})}{\partial(\delta\mathbf{Q}_v)\partial\ddot{\mathbf{Q}}_l}$

– Узловые внешние поступательные силы: $\mathbf{F}_v^{e,p}(\mathbf{Q}) = \sum_{T\in T(v)} \frac{\partial(\delta A_T^{memb})}{\partial(\delta \mathbf{Q}_v)}$
– Узловые внешние изгибающие силы: $\mathbf{F}_v^{e,m}(\mathbf{Q}) = \sum_{T\in T(v)} \frac{\partial(\delta A_T^{bend})}{\partial(\delta \mathbf{Q}_v)}$
– Узловая упругая сила: $\mathbf{F}_v^{i,e}(\mathbf{Q}) = -\sum_{T\in T(v)} \frac{\partial(\delta U_T^{memb})}{\partial(\delta \mathbf{Q}_v)}$
– Узловая сила сопротивления изгибу: $\mathbf{F}_v^{i,b}(\mathbf{Q}) = -\sum_{T\in \Pi(v)} \frac{\partial(\delta U_T^{bend})}{\partial(\delta \mathbf{Q}_v)}$

Отсюда получается нелинейная система ОДУ:

$$\mathcal{M}_{vl} \cdot \ddot{\mathbf{Q}}_l - \mathbf{F}_v^{e,p} - \mathbf{F}_v^{e,m} - \mathbf{F}_v^{i,e} - \mathbf{F}_v^{i,b} = 0,\ v = 1, \ldots, N. \tag{1.46}$$

Для решения данной динамической системы в настоящей работе используется безусловно устойчивая схема β-Ньюмарка с параметрами $\gamma = 0.5$, $\beta = 0.25$ (схема с постоянным средним ускорением):

$$\begin{aligned}
&\mathcal{M}(\mathbf{Q}^{n+1}) \cdot \left[\frac{\mathbf{Q}^{n+1} - \mathbf{Q}^n - \tau\dot{\mathbf{Q}}^n}{(\tau/2)^2} - \ddot{\mathbf{Q}}^n\right] - \mathbf{F}(\mathbf{Q}^{n+1}) = 0,\\
&\dot{\mathbf{Q}}^{n+1} = \frac{\mathbf{Q}^{n+1} - \mathbf{Q}^n}{\tau/2} - \dot{\mathbf{Q}}^n,\\
&\ddot{\mathbf{Q}}^{n+1} = \frac{\mathbf{Q}^{n+1} - \mathbf{Q}^n - \tau\dot{\mathbf{Q}}^n}{(\tau/2)^2} - \ddot{\mathbf{Q}}^n,
\end{aligned} \tag{1.47}$$

где использовано $\mathbf{F} := \mathbf{F}^{e,p} + \mathbf{F}^{e,m} + \mathbf{F}^{i,e} + \mathbf{F}^{i,b}$.

Также в данной работе рассматриваются задачи статического равновесия:

$$\mathbf{F}(\mathbf{Q}) = 0. \tag{1.48}$$

Для их решения используются методы динамической релаксации [143], а именно явный метод простой итерации

$$\gamma^n \cdot \mathcal{C} \cdot (\mathbf{Q}^{n+1} - \mathbf{Q}^n) - \mathbf{F}(\mathbf{Q}^n) = 0$$

и неявный метод простой итерации

$$\gamma^n \cdot \mathcal{C} \cdot (\mathbf{Q}^{n+1} - \mathbf{Q}^n) - \mathbf{F}(\mathbf{Q}^{n+1}) = 0,$$

где n — номер итерации метода динамической релаксации, $\gamma^n \geqslant 0$ — параметр релаксации, $\mathcal{C}$ — некоторая положительно определённая матрица, которая в данной работе выбиралась диагональной с элементами $\mathcal{C}_{vv} = \frac{1}{3}\sum_{T\in T(v)} A_p$. Итерации совершаются до достижения заданной точности $||\mathbf{F}(\mathbf{Q}^n)|| \leqslant \varepsilon_{abs}$.

Возникающие нелинейные алгебраические системы решаются численно с помощью неточного метода Ньютона [42], и при составлении матрицы Якоби мы пренебрегаем слагаемыми со вторыми производными напряжения $\frac{\partial^2 s}{\partial c \partial c}$.

1.7 Моделирование контактного взаимодействия оболочек и мембран

При решении механических задач необходимо учитывать геометрические ограничения на допустимые взаимные конфигурации объектов: тела не должны пересекаться между собой. Особенно сложно учитывать контактные геометрические ограничения для деформируемых объектов, поскольку в этом случае контактная поверхность постоянно изменяется, а ещё приходится предотвращать не только взаимные пересечения, но и самопересечения. Существует огромное количество работ и подходов для моделирования контактных взаимодействий в деформируемых структурах [19; 20; 25; 56; 87; 173]. Однако большинство из существующих работ пригодны лишь для моделирования контактов в динамических задачах и не позволяют использовать неявные схемы с большим шагом по времени. Это, в частности, связано с неспособностью многих алгоритмов обеспечивать устойчивое состояние равновесия контактирующих тел, т.к. им не удаётся удовлетворить все ограничения сразу [18, discussion].

Для моделирования контактного взаимодействия в данной работе используется подход, предложенный Li et al. [88]. Отличительными чертами данного метода является:

– соблюдение точного отсутствия пересечений между телами на каждом шаге по времени и на линейных траекториях между ними
– сведение задачи об отыскании очередной конфигурации деформируемых тел с учётом контактов к задаче безусловной минимизации нелинейной функции $\mathcal{B}_t(\mathbf{x})$ класса гладкости C^2
– чёткое описание алгоритма, позволяющего эффективно найти решение сформулированной задачи минимизации,
– применимость неявных временных схем или пригодность для квазистатических задач.

К недостаткам подхода можно отнести то, что он иногда приводит к возникновению ложных сил отталкивания между близлежащими частями тела, рассматривая их как приближающиеся к самопересечению. Чтобы ослабить данную проблему при разрешении самопересечений тонкой оболочки в настоящей работе адаптированы некоторые идеи из статьи [68].

Пусть Ω — набор кусочно-гладких поверхностей, описывающих срединные поверхности деформируемых оболочек в стартовой расслабленной конфигурации (Ω может содержать одно или несколько тел), а $f : \Omega \to \mathbb{R}^3$ — деформация области, т.е. её непрерывное отображение на текущую пространственную конфигурацию. Будем называть деформацию *бесконтактной*, если она инъективна, т.е. не существует точек $x \neq y$ для которых $f(x) = f(y)$. Пусть также для каждой пары точек и допустимой деформации определена $\xi(x, y; f) \geqslant 0$ имеющая смысл минимального допустимого расстояния между этими точками. Бесконтактную деформацию для которой выполнено $|f(x) - f(y)| > \xi(x, y; f)$ для любых $x \neq y$ будем называть *допустимой*. Будем считать, что существует и задана некоторая начальная конфигурация, характеризуемая допустимой деформацией f_0. Здесь и далее в этом разделе будем обозначать точки на Ω обычными латинскими буквами вроде x, y и т.д.

Введём полную энергию контактного взаимодействия

$$\Psi_c(f) = \iint_{\Omega\times\Omega} \psi_c(x,y; f)\ dxdy, \tag{1.49}$$

где функция $\psi_c(x,y; f)$ называется контактным потенциалом, причем $\psi_c(x,y; f) > 0$ и интегрируема на $\Omega \times \Omega$ для любой допустимой f. На модель контактного взаимодействия накладываются следующие требования.

1. Локальность: существует параметр локальности $\hat{d}$, такой, что $\psi_c(x,y; f) = 0$ если $|f(x) - f(y)| > \hat{d}$.
2. Ненагруженная индиффирентность: для любых деформаций f отличных от f_0 перемещением композиции объектов как твёрдого тела контактные силы равны нулю, т.е. $\Psi_c(f) = 0$ и $\nabla\Psi_c(f) = 0$.
3. Барьерность: если допустимый f_t непрерывно зависит от параметра t и стремится к не допустимому f_{t_0} при $t \to t_0$, то $\Psi_c(f_t) \underset{t\to t_0}{\to} +\infty$.
4. Дифференциируемость: если f задаётся конечным числом степеней свободы, то $\Psi_c(f)$ — это гладкая (C^1) функция с кусочно-непрерывными вторыми производными (кусочно-C^2-гладкая функция) относительно этих степеней свободы.

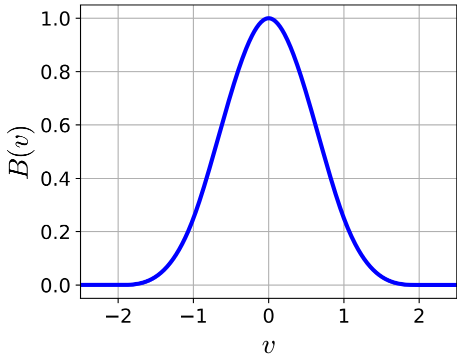
Требование 2 исключает наличие ложных контактных сил в ненагруженной конфигурации, 3 — гарантирует, что механическая конфигурация остаётся допустимой, а 4 необходимо для применимости модели в схемах, где требуется вычислять якобиан.

Будем использовать потенциал следующего вида:

$$\psi_c(x,y;f) = g\left(d(x,y;f), \hat{d}(x,y), \xi(x,y)\right) := K\frac{h(d,\hat{d})}{(d-\xi)^2}, \qquad (1.50)$$
$$d(x,y;f) = |f(x) - f(y)|,$$

где K — параметр жёсткости, который здесь и далее будет приниматься равным $K = 1$, а $h(d,\varepsilon) = B\left(\frac{2d}{\varepsilon}\right)$ задаётся посредством дважды непрерывно-дифференцируемой функции

$$B(v) = \begin{cases} 1 - \frac{3}{2}|v|^2 + \frac{3}{4}|v|^3, & |v| < 1, \\ \frac{1}{4}(2-|v|)^3, & 1 \leqslant |v| < 2, \\ 0, & 2 \leqslant |v|. \end{cases}$$



У оболочки существует параметр толщины H, на основе которого можно построить параметры локальности и минимального допустимого расстояния:

$$\hat{d}(x,y) = \min\left(\frac{H(x)+H(y)}{2}, \frac{|f_0(x)-f_0(y)|}{\alpha}\right),$$
$$\xi(x,y) = \beta\hat{d}(x,y),$$

где $H(x)$ — толщина оболочки в начальной конфигурации f_0 в точке $f_0(x)$ (пренебрегаем утолщением λ), $\alpha > 1$ отвечает за максимальную степень сжатия оболочки до возникновения ложных сил отталкивания и в данной работе было $\alpha = 3.2$ и $0 \leqslant \beta < 1$ — регулирует высоту расположения контактного барьера над срединной поверхностью и в данной работе был выбран как $\beta = 0.25$.

Аппроксимация энергии контактного взаимодействия. Пусть задана триангуляция Ω_0^h и определена нумерация узлов $I_n = \overline{1, N_1}$, рёбер $I_e = \overline{1+N_1, N_2}$ и треугольников $I_f = \overline{1+N_2, N_3}$. Через E_i, где $i = \overline{1, N_3}$, обозначим соответствующий элемент сетки (определённый узел, ребро или грань) и введём $\mathcal{T}(E_i) = \{T \in \mathcal{T}(\Omega_0^h) : \ E_i \in T\}$. Разобьём каждый треугольник в $\mathcal{T}(\Omega_0^h)$ $(i \in I_f)$ его тремя медианами на 6 треугольников и получим сетку $\Omega_0^{h,m}$. Через G_i обозначим 1) треугольник $T_i \in \mathcal{T}(\Omega_0^h)$ при $i \in I_f$, 2) многоугольник, образованный треугольниками из $\Omega_0^{h,m}$, лежащими одной из сторон на ребре $e_i \in \mathcal{E}(\Omega_0^h)$ при $i \in I_e$, 3) многоугольник, образованный треугольниками из $\Omega_0^{h,m}$ с общей вершиной $n_i \in \mathcal{N}(\Omega_0^h)$ при $i \in I_n$. Тогда если через L обозначить произвольный набор пар типов элементов $\{n, e, f\}$, то (1.49) преобразуется как

$$\Psi_c(f) = \frac{1}{|L|} \sum_{(b,g)\in L} \sum_{i\in I_b, j\in I_g} \int_{G_i} \int_{G_j} g\left(d(x,y), \hat{d}(x,y), \xi(x,y)\right)\, dxdy,$$

где $|L|$ — количество элементов в множестве пар L.

Отбросим слагаемые, включающие пересекающиеся многоугольники, и оценим подынтегральную функцию как постоянную на области $G_i \times G_j$, где d вычисляется в паре точек $x^*, y^* = \arg\min_{x\in E_i, y\in E_j} |f(x) - f(y)|$, а $\hat{d}$ и ξ вычисляются между ближайшими точками E_i и E_j относительно f_0, что приводит к $\hat{d} \approx \hat{d}_{ij} := \min(\frac{1}{2}(H_i + H_j), \frac{1}{\alpha} d^0_{ij})$ для $H_i = \max_{T\in\mathcal{T}(E_i)} H(T)$ и $d^0_{ij} = \min_{x\in E_i,\ y\in E_j} |f_0(x) - f_0(y)|$ (соответственно $\xi_{ij} := \beta \hat{d}_{ij}$).

$$\Psi_c(f) \approx \frac{1}{|L|} \sum_{(b,g)\in L} \sum_{\substack{i\in I_b, j\in I_g\\ G_i\cap G_j=\varnothing}} |G_i||G_j|\; g(d(x^*, y^*), \hat{d}_{ij}, \xi_{ij}).$$

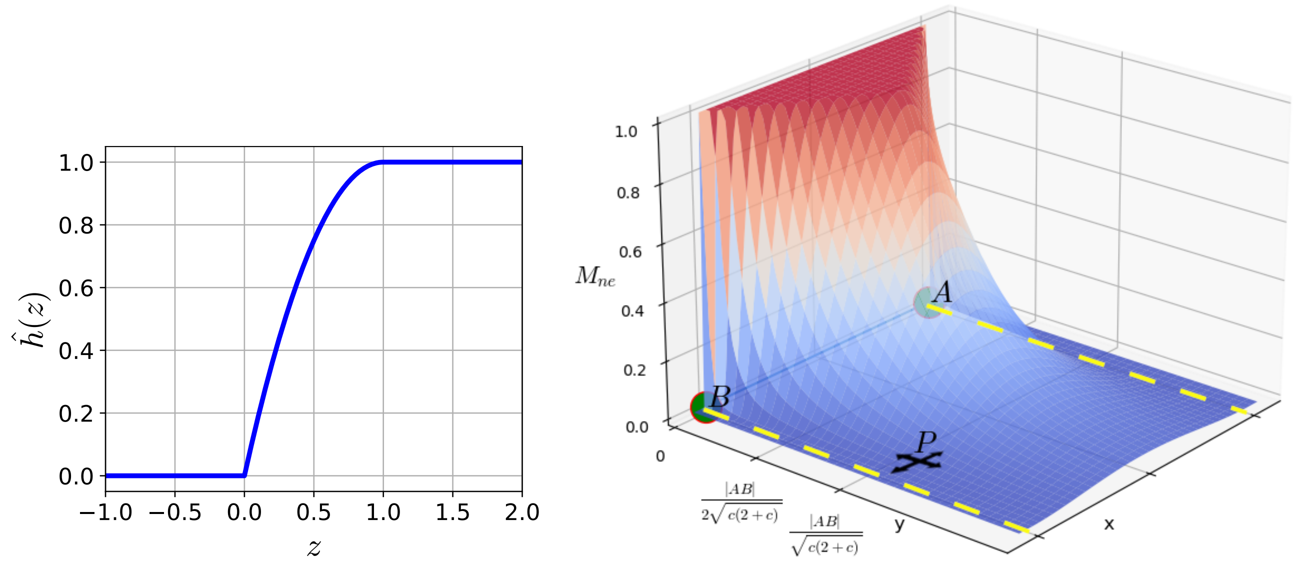
Если в последней формуле взять $L = \{(n, f), (e, e)\}$, то аппроксимация на дискретном уровне удовлетворяет требованиям 2 и 3. Однако, функции для вычисления ближайших точек примитивов x^*, y^* принадлежат лишь классу C^0 относительно степеней свободы f. Чтобы это преодолеть, используем подход из работы [68]: будем рассматривать набор $L = \{(n, n), (n, e), (n, f), (e, e)\}$ и для всех пар многоугольников в общей сумме, за исключением пар вершина-вершина, умножим их вклад в $\Psi_c(f)$ на специальную функцию $M(f)$ такую, что $x^*, y^* \in C^\infty$ на $\operatorname{supp} M$ и $M \to 0$ при измельчении сетки.

Приведём формулы для функции $M(f)$. Здесь через $d(\cdot,\cdot)$ будем обозначать расстояние между примитивами относительно f, например, $d(P, AB)$ — расстояние от вершины P до ребра AB. Пусть $\theta(x)$ — функция Хевисайда, $\hat{h}(z) := z(2 - z) \cdot \theta(z)\theta(1 - z) + 1 \cdot \theta(z - 1)$ (Рисунок 1.5(**a**)), введём вспомогательную функцию $h_c(s) := \hat{h}(\frac{s-1}{c})$, где в данной работе $c = 0.01$. Тогда в качестве M используем следующие выражения:

$$\begin{aligned}
&M_{nn}(f) = 1,\\
&M_{ne}(f) = h_c\left(\tfrac{d(P,A)}{d(P,AB)}\right) h_c\left(\tfrac{d(P,B)}{d(P,AB)}\right),\\
&M_{nf}(f) = h_c\left(\tfrac{d(P,AB)}{d(P,ABC)}\right) h_c\left(\tfrac{d(P,AC)}{d(P,ABC)}\right) h_c\left(\tfrac{d(P,BC)}{d(P,ABC)}\right),\\
&M_{ee}(f) = h_c\left(\tfrac{d(B,CD)}{d(AB,CD)}\right) h_c\left(\tfrac{d(A,CD)}{d(AB,CD)}\right) h_c\left(\tfrac{d(C,AB)}{d(AB,CD)}\right) h_c\left(\tfrac{d(D,AB)}{d(AB,CD)}\right).
\end{aligned}$$

Все приведённые функции являются гладкими относительно положения вершин примитивов при отсутствии пересечений, что, в частности, видно на

Рисунке 1.5(**b**) для функции M_{ne}. Кроме того, все представленные функции, за исключением M_{nn}, обладают характерным расстоянием порядка $\rho_c \approx h^{mesh}/\sqrt{c}$, где h^{mesh} — шаг сетки, и быстро убывают к нулю если расстояние между примитивами превышает ρ_c. Это приводит к постепенному выключению отталкивания всех пар примитивов за исключением пары узел-узел и достижению корректной аппроксимации исходной непрерывной формулировки контактной модели.



(**a**) (**b**)

Рисунок 1.5 — Графики функций (**a**) $\hat{h}$ и (**b**) M_{ne}. На (**b**) показана зависимость M_{ne} от положения точки P относительно ребра AB; если P находится вне зоны ограниченной жёлтой пунктирной линией, то $M_{ne} = 0$, иначе $M_{ne} > 0$; если $d(P, AB) > |AB|/(2\sqrt{c(2+c)})$, то $M_{ne} < 1$; характерное расстояние ограничения взаимодействия функцией M_{ne} составляет $|AB|/(\sqrt{c(2+c)})$

Окончательно $L = \{(n,n),(n,e),(n,f)(e,e)\}$, площадь многоугольника равна $|G_i| = \sum_{T\in\mathcal{T}(E_i)} |T|/(3 - 2\,\theta(i - N_2 - 0.5))$ и полная контактная энергия вычисляется как

$$\Psi_c^h(f) := \sum_{(b,g)\in L} \sum_{\substack{i\in I_b, j\in I_g \\ G_i\cap G_j=\varnothing}} M_{bg}(f; G_i, G_j)\; g(d(x^*, y^*), \hat{d}_{ij}, \xi_{ij})\; |G_i||G_j|. \qquad (1.51)$$

Данная формулировка обеспечивает выполнение требований 2-4. Для решения дискретизованных задач с учётом контактов используется метод Ньютона с отслеживанием барьеров [88, Алг. 1], а для подбора шага по времени используется аддитивный непрерывный поиск столкновений [87, Алг. 1].

Глава 2. Сопряжённая модель электромеханики миокарда

Взаимодействие электрической и механической активности сердца представляет собой ключевой физиологический процесс, обеспечивающий его насосную функцию. Эта связь, известная как *электромеханическое сопряжение*, лежит в основе ритмичных сокращений миокарда и изучается через комплексные математические модели, объединяющие уравнения электрофизиологии и механики деформируемого тела [126; 134]. Такие модели становятся незаменимыми инструментами в клинической практике: они позволяют прогнозировать развитие патологий, тестировать методы лечения in silico и персонализировать терапию, учитывая анатомические и функциональные особенности пациента.

В отличие от моделей, рассматривающих только электрическую проводимость или биомеханику, сопряжённые электромеханические подходы обеспечивают целостный анализ заболеваний и функции сердца. Так, они применяются для оптимизации лечения аритмий, таких как желудочковая тахикардия и фибрилляция, где нарушение электрической синхронности напрямую влияет на сократимость миокарда [160; 161]. Другой пример — механическая диссинхрония при блокаде левой ножки пучка Гиса, где сопряжённые модели помогают оценить влияние задержки электрического импульса на деформацию желудочков и подобрать параметры кардиостимуляции [82].

Кроме того, эти модели служат основой для создания цифровых двойников сердца воспроизводящих его поведение в норме и патологии. Двойники используются для изучения структурного ремоделирования при сердечной недостаточности, ишемической и гипертрофической кардиомиопатии, а также для анализа долгосрочных последствий заболеваний [36; 140; 147; 169]. Например, они позволяют смоделировать, как фиброз или кальцификация тканей влияют на электрическую проводимость и сократимость, что невозможно при использовании односторонних моделей.

Цель данной главы — рассмотреть новую численную схему для дискретизации сопряжённых моделей электромеханики. Здесь представлен краткий обзор некоторых механических характеристик миокарда и на их основе сформулирован общий класс сопряжённых моделей электромеханики. В результате анализа класса моделей предложена численная схема и представлены результаты её численного исследования для одной из сопряжённых моделей.

2.1 О некоторых свойствах и строении тканей сердца

Структура ткани сердца. Большую часть объема ткани сердца занимают поперечно-полосатые мышечные клетки называемые *кардиомиоцитами.* Они соединены друг с другом линейными рядами интеркалированных дисков. Как и все мышечные клетки, они являются возбудимыми клетками. Щелевые контакты между отдельными кардиомиоцитами позволяют электрическому потенциалу перемещаться по клеточным мембранам от клетки к клетке. Мышечные клетки встроены в волокнистый внеклеточный матрикс, состоящий в основном из белка коллагена, который постоянно синтезируется клетками сердечных фибробластов. Это самые многочисленные клетки сердечной ткани, и их задача — реконструировать внеклеточный матрикс в ответ на механическое напряжение и внешнее повреждение. Вместе они образуют армированную волокнами структуру, в которой кардиомиоциты расположены слоями ламинарных пластинок. Кроме того, сердечная ткань содержит клетки сосудистых гладких мышц во внутримиокардиальных коронарных артериолах и венулах, волокна Пуркинье, которые доставляют электрический сигнал от естественных желудочковых кардиостимуляторов к мышцам, и эндотелиальные клетки на внутренней поверхности сердца, называемой *эндокардом.* Тонкий слой соединительной ткани и жира, называемый *эпикардом*, покрывает внешнюю поверхность сердца. Срединная же и наиболее крупная часть стенки сердца называется *миокардом*, см. Рисунок 2.2. Кроме того, существует сеть кардиомиоцитов, соединенных интеркалированными дисками, называемая сердечным синцитием (и разделенная между предсердным и желудочковым синцитием), которая обеспечивает быстрое распространение электрических импульсов совместно с синхронным сокращением ткани и клеток [77]. Схематическое расположение клеток миокарда показано на Рисунке 2.1.

Продольная форма кардиомицитов, соседние клетки которых на миокарде имеют тенденцию ориентироваться примерно в одном направлении, позволяет определять локальную ориентацию клеток, которую принято называть *направлением волокон.* Так как клеточный уровень значительно меньше принятых при моделировании кардиомеханики пространственных масштабов, то в дальнейшем под направлением волокон будет пониматься средняя ориентация клеток в выбранном контрольном объёме.

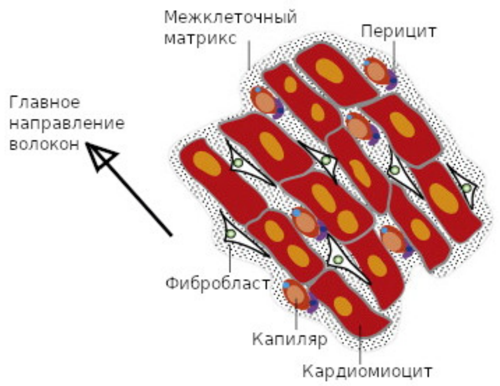


Рисунок 2.1 — Схематическое изображение расположения кардиомиоцитов в межклеточном матриксе

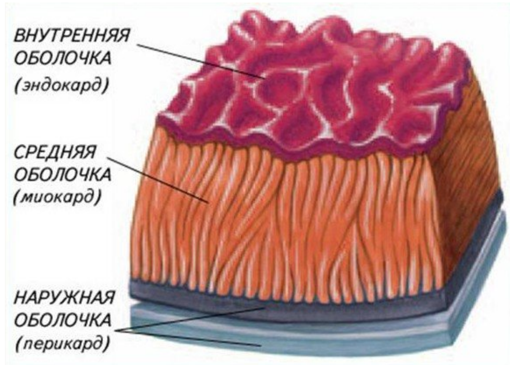


Рисунок 2.2 — Строение стенки сердца

https://gipertoniyanet.ru/wp-content/uploads/stroenie-stenki-serdca4.jpg

Макроскопическая конфигурация волокон в желудочках является довольно сложной. Измерения Стритера [146] показали трансмуральное изменение направления волокон в диапазоне от примерно -70° в плоскости короткой оси на внешней поверхности желудочка, эпикарде, до примерно $+80^\circ$ во внутренней части стенки, эндокарде. Наиболее популярным предположением дающим макроскопическое описание структуры сердечной мышцы является идея Торрента-Гуаспа [157; 158], которая заключается в том, что оба желудочка образованы одной лентой волокон, желудочковой миокардиальной лентой, скрученной в геликоидальную конфигурацию с двумя витками спирали. Существует математическая теория [124], основанная на этой идее, которая хорошо согласуется с измерениями Стритера [146]. Однако используются и другие варианты описания конфигурации волокон, например, аналитический для идеализированных геометрий [29; 43] или на основе разработанной Пескиным [119] математической теории, в которой ориентация волокон описывается приближенными геодезическими путями.

Помимо данных об ориентации волокон имеются доказательства [83] ламинарности структуры миокарда. Мышцу можно рассматривать как набор миоцитовых пластинок толщиной приблизительно четыре клетки каждая, сгруппированных вместе перимизиальным коллагеном. В каждой из этих пластинок миоциты связаны друг с другом и встроены в каркас эндомизиального коллагена, в то время как клетки в разных пластинках не связаны напрямую и, следовательно, связаны лишь слабо. Эти ламинарные структуры сильно влияют на механические и электрические свойства ткани.

Из-за конфигурации волокон в желудочках во время сокращения наблюдается продольное (от вершины к основанию) укорочение примерно на 15% от диастолической конфигурации желудочков, в то время как стенка ЛЖ утолщается более чем на 30%. Более того, их архитектура сильно влияет как на физиологические, так и на патологические электрические свойства сердца, поскольку она влияет на локальную электрическую проводимость и характер возбуждения.

Механизм активного мышечного сокращения. Мышечное сокращение — это субклеточный процесс, инициированный увеличением внутриклеточного кальция из-за открытия потенциалзависимых ионных каналов. Кардиомиоциты имеют регулярную структуру, состоящую из миофибрилл, стержневидных белковых структур, разделенных на основные сократительные единицы, называемые *саркомерами* (см. Рисунок 2.3). Саркомеры состоят из двух разных видов длинных белковых нитей: тонких и толстых, которые могут прикрепляться друг к другу в определенных местах связывания. Когда деполяризация внутриклеточного пространства увеличивает концентрацию внутриклеточного кальция, она запускает высвобождение цитозольного кальция, хранящегося в саркоплазматическом ретикулуме, что приводит к связыванию Ca_2^+ с тропонином-C и, наконец, связыванию миозиновых головок с актиновыми нитями. Это называется *механизмом поперечного мостика*, который заставляет волокна скользить друг относительно друга, что приводит к сокращению саркомеров (и всей клетки).

Более подробно сократительную структуру можно описать следующим образом [127]. Каждый кардиомиоцит состоит из миофибрилл, длинных трубчатых структур, окруженных саркоплазматической сетью. Каждая миофибрилла имеет правильную структуру, состоящую из светлых и темных полос. В полосе A толстый белок миозина и тонкий белок актина перекрываются, и полоса выглядит темнее, чем полоса I, где присутствует только актин. Полоса A расположена в центре саркомера, сократительной единицы клетки. Каждый саркомер ограничен Z-дисками, на которых закреплен актин. Между тонкими актиновыми филаментами мы находим толстые миозиновые филаменты.

Во время электрического возбуждения внутриклеточная концентрация кальция увеличивается, вызывая высвобождение большего количества кальция. Освободившиеся ионы кальция связываются с тропонином, вызывая изменение конфигурации тропомиозина, открывающего участки связывания. Затем миозиновые головки могут связываться с актином и создавать скользящее движение между двумя нитями. Это скольжение приближает Z-диски друг к другу, что приводит к сокращению клеток.

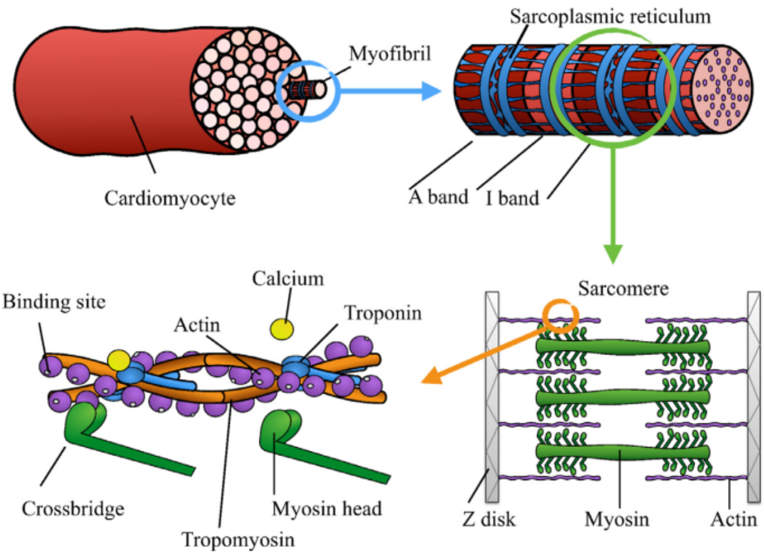


Рисунок 2.3 — Схематическое изображение сократительной структуры сердечной клетки. Источник: [127]

Описание математических моделей клеточных процессов активации-сокращения выходит за рамки данной работы и может быть найдено в [125].

2.2 Моделирование упругости в задачах электромеханики миокарда

Приступая к моделированию механики мягких тканей всегда в первую очередь сталкиваешься с проблемой: а каковы собственно механические свойства этой ткани, какой тип имеют определяющие соотношения, какие из свойств ткани существенны, а какими в рамках модели можно пренебречь. В дополнение к этим вопросам при моделировании электромеханики добавляется ещё один: а как собственно моделировать активное сокращение ткани в результате увеличения внутриклеточного кальция. Вообще говоря, обсуждение моделирования активного сокращения ткани не может быть полным без рассмотрения клеточных моделей сокращения-активации, однако это выходит за рамки данной работы и заинтересованных отсылаем к обзору [16].

В данном разделе будут кратко изложены отдельные известные предположения и результаты о свойствах миокарда, на которые будет опираться модель упругости в сопряжённой модели, сформулированная в следующем разделе.

Модельные предположения об упругих свойствах миокарда.

Из экспериментальных данных известно, что миокард демонстрирует вязкоупругие пассивные свойства и даже при небольших нагрузках может проявляться значительный упругий гистерезис. Исследователи связывают такое поведение с балансированием жидкости и вещества, составляющих миокард [98]. Однако, ввиду сложности получения данных о вязкоупругих свойствах миокарда и желания сократить и без того большое количество неизвестных параметров, материал миокарда обычно предполагают гиперупругим [127].

Ткань миокарда является анизотропной как на клеточном уровне (кардиомиоциты имеют вытянутую форму и локально параллельны друг другу), так и макрокопически (стенка сердца словно сформирована несколькими оборотами миокардиальной ленты, которая в каждом обороте немного поворачивается). Также именно анизотропия влияет на ряд важных механических свойств камер сердца, например, на их скручивание. Ввиду этого анизотропией обычно не пренебрегают и упругий потенциал $\psi(\mathbb{F})$ выбирается из числа анизотропных.

Миокард обычно моделируют как несжимаемый или малосжимаемый материал при физиологических нагрузках [30; 70; 107; 118], мотивируя это тем, что он в основном состоит из воды и поэтому наследует её свойства. Вообще говоря, это не верно и на практике объем сердечной ткани сильно зависит от перфузии крови из коронарных артерий и может изменяться до 7% во время систолического сокращения [8]. Однако преимущество этого предположения в том, что оно позволяет сократить число параметров в модели.

Механические процессы на органном уровне имеют значительно бо̀льшие характерные времена протекания, чем процессы электрофизиологии. В связи с этим при моделировании деформации сердца инерционным слагаемым в уравнениях движения часто пренебрегают и рассматривают квазистационарные уравнения упругости [118, разделы 3.2.3, 4.1].

Подходы к учёту активных напряжений на уровне сплошных деформаций. Ткань миокарда демонстрирует не только пассивные упругие свойства, но и активные (вызванные клеточным механизмом поперечного мостика, в котором участвуют клетки саркомеров). Пассивные свойства описываются стандартным набором определяющих соотношений, например, через гиперупругий потенциал. А вот для внедрения в модель упругости активного сокращения существует 2 основных подхода: *метод активных напряжений* и *метод активных деформаций*.

В методе активных напряжений предполагается, что активное сокращение имеет место на уровне напряжений, развиваемых материалом и приводит к её аддитивному изменению [118]:

$$\mathbb{P} = \mathbb{P}_e + \mathbb{P}_a,$$

где $\mathbb{P}_e = \frac{\partial \psi}{\partial \mathbb{F}}$ — пассивная часть напряжения, а $\mathbb{P}_a$ — активная.

Считается, что $\mathbb{P}_a$ является функцией от параметров моделей, описывающих клеточный процесс активации ткани, например, функцией от концентрации внутриклеточного кальция. В общем случае форма для тензора $\mathbb{P}_a$ должна устанавливаться экспериментально. Однако, обычно считают, что $\mathbb{P}_a$ возникает только вдоль направления волокон [69; 129; 145; 170], и тогда он представим как:

$$\mathbb{P}_a = \mathbb{F} g(\lambda_f, \mathbf{c}) \mathbf{f} \otimes \mathbf{f}, \; \lambda_f = \sqrt{I_{4f}},$$

где $g(\lambda_f, \mathbf{c})$ — некоторая скалярная функция, λ_f — кратность удлинения волокон, $\mathbf{c}$ — переменные состояния клеточной модели активации-сокращения, $\mathbf{f}$ — направление волокон в начальной конфигурации.

Метод активных деформаций, как следует из названия, предполагает, что активное сокращение имеет место на уровне деформации. А именно, предполагается, что деформация тела может быть представлена как приложение сначала активной деформации, а потом пассивной:

$$\mathbf{X} \underset{\mathbb{F}_a}{\rightarrow} \mathbf{x}_a \underset{\mathbb{F}_e}{\rightarrow} \mathbf{x},$$

что приводит к мультипликативному представлению градиента деформации:

$$\mathbb{F} = \mathbb{F}_e \mathbb{F}_a.$$

В работе [103] показано, что по крайней мере для слабого активного сокращения, т.е. приводящего лишь к небольшим деформациям, такое разложение действительно имеет место.

В этом случае оказывается справедлива цепочка равенств:

$$\int \psi d\mathbf{X} = \int \psi_e d\mathbf{x}_a = \int \psi_e \det\left(\frac{\partial \mathbf{x}_a}{\partial \mathbf{X}}\right) d\mathbf{X} = \int \psi_e \det \mathbb{F}_a d\mathbf{X} = \int \psi_e J_a d\mathbf{X},$$

т.е. $\psi = J_a \psi_e$, где $\psi_e = \psi_e(\mathbb{F}_e)$ — потенциал пассивной упругости.

Тогда, используя $\mathbb{F}_e = \mathbb{F}\mathbb{F}_a^{-1}$, получается выражение для напряжений [108]:

$$\mathbb{P} = J_a \frac{\partial \psi_e(\mathbb{F}_e)}{\partial \mathbb{F}_e}\bigg|_{\mathbb{F}_e = \mathbb{F}\mathbb{F}_a^{-1}} \cdot \mathbb{F}_a^{-T}.$$

Тензор активных деформаций $\mathbb{F}_a$ должен быть функцией от параметров клеточной модели активации-сокращения и обычно имеет форму [127]:

$$\mathbb{F}_a = \mathbb{I} + \gamma_f \mathbf{f} \otimes \mathbf{f} + \gamma_s \mathbf{s} \otimes \mathbf{s} + \gamma_n \mathbf{n} \otimes \mathbf{n},$$

где $\mathbf{f}$ и $\mathbf{s}, \mathbf{n}$ — продольное и поперечные направления волокон, γ_f, γ_s, γ_n — некоторые скалярные функции от параметров клеточной модели и текущей полной деформации.

2.3 Общая формулировка сопряжённой модели электромеханики

Воспроизведение работы сердца требует моделирования множества различных физиологических механизмов. Невозможно однозначно отделить одни протекающие процессы от других, поскольку сердце работает как единый скоординированный орган. Эффекты, возникающие в одних процессах, влияют на другие посредством механизмов прямой и обратной связи. Тем не менее, здесь будет предполагаться и использоваться разделение сопряжённой модели сердца на четыре связанных модельных блока (см. Рисунок 2.4): модель упругой деформации среды, модель распространения электрической активации на органном уровне, клеточная электрофизиология и клеточная модель кальциевого обмена и активного механического сокращения. В данной модели не учитываются дополнительные процессы, влияющие на работу сердца, такие как гемодинамика, работа сердечных клапанов и т.д. Отметим, что в данном разделе мы приводим формулировку не для одной отдельной модели, а для целого класса сопряжённых моделей электромеханики, поэтому в некоторых местах описание может оказаться не вполне точным.

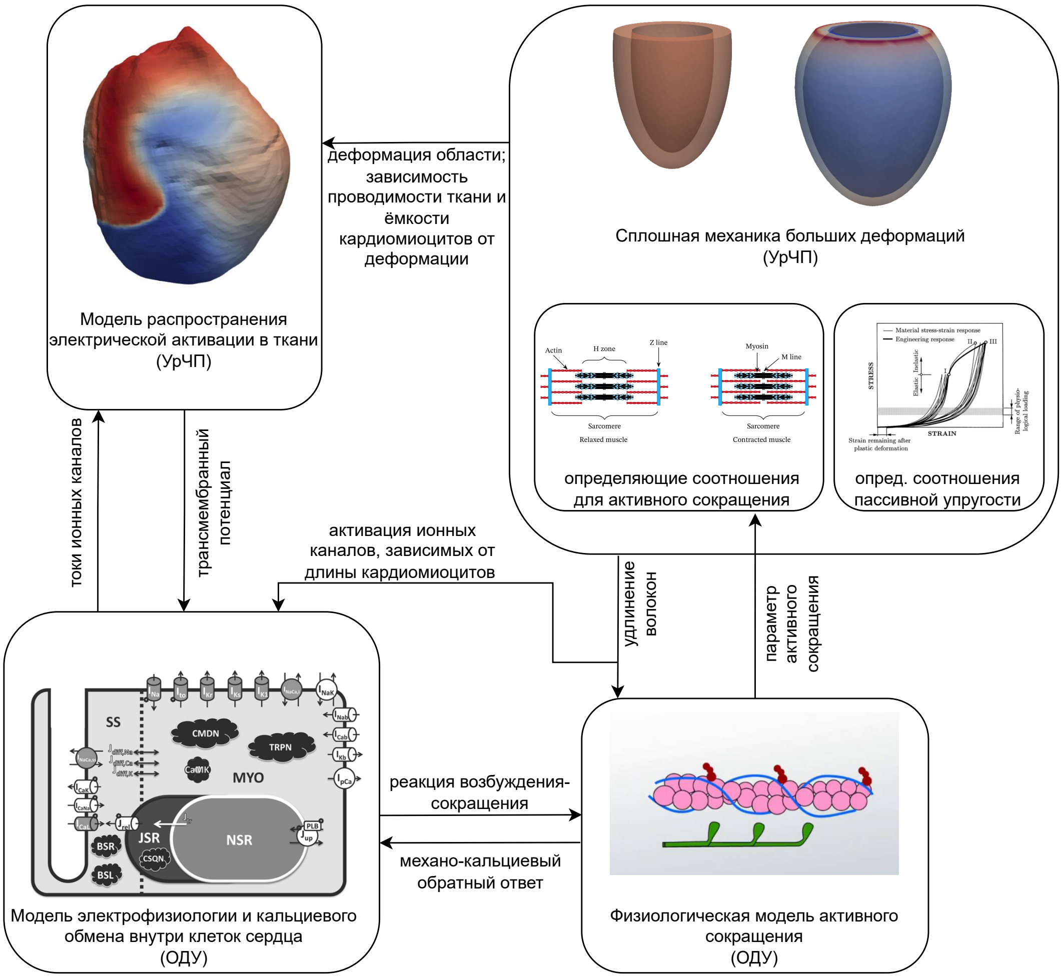


Рисунок 2.4 — Разделение сопряжённой модели электромеханики сердца на отдельные подмодели

Приведём математическую формулировку общей сопряжённой модели. Пусть моделируемое тело (сердце или его часть, например, участок миокарда) в ненагруженной исходной конфигурации занимает объём $\Omega \in \mathbb{R}^3$. Введём обозначения для неизвестных модели: $\mathbf{u} : \Omega \to \mathbb{R}^3$ — поле механических перемещений, $\upsilon : \Omega \to \mathbb{R}$ — трансмембранный электрический потенциал, $\mathbf{w} : \Omega \to \mathbb{R}^{n_w}$ — переменные состояния клеточной модели электрофизиологии и $\mathbf{a} : \Omega \to \mathbb{R}^{n_a}$ — переменные состояния для модели активации-сокращения кардиомиоцитов. В зависимости от формулировки подмодели могут добавляться дополнительные неизвестные, например, если абсолютно несжимаемая механика моделируется методом множителя Лагранжа, то к $\mathbf{u}$ может добавляться p, или же при использовании бидоменной модели для моделирования распространения электрической активации к υ будет добавляться неизвестный внеклеточный потенциал υ_e.

Механика конечных деформаций сплошной среды моделируется посредством стандартных уравнений движения (раздел 1.2):

$$\rho_0 \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} - \mathrm{Div}\ \mathbb{P}(\mathbb{F}, \mathbf{a}) = 0, \quad \mathbf{X} \in \Omega, \tag{2.1}$$

где ρ_0 — это плотность материала в ненагруженной конфигурации, а $\mathbb{P}$ — это первый тензор напряжений Пиолы-Кирхгофа, задаваемый посредством описания определяющих соотношений пассивной упругости (с помощью гиперупругого потенциала) и учитывающий активное сокращение через один из подходов описанных в разделе 2.2, $\mathbb{F} = \mathbb{I} + \nabla \mathbf{u}$. При этом первое инерционное слагаемое может опускаться. Также возможна формулировка несжимаемости через множитель Лагранжа, когда вводится дополнительная скалярная неизвестная p и дополнительное уравнение зависящее только от перемещений. В любом случае связь осуществляется только с клеточной моделью активации посредством функции $\mathbb{P} = \mathbb{P}(\mathbb{F}, \mathbf{a})$.

Уравнения движения дополняются начальными и граничными условиями в соответствии с экспериментом. В большинстве задач граничные условия принимают вид условий Дирихле:

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_D(\mathbf{X}), \quad \mathbf{X} \in \partial\Omega_D \tag{2.2}$$

или смешанных условий внешнего давления и пружинного закрепления:

$$\mathbb{P}\mathbf{N} + (k_\perp \mathbf{N} \otimes \mathbf{N} + k_\parallel (\mathbb{I} - \mathbf{N} \otimes \mathbf{N}))(\mathbf{u} - \mathbf{u}_{spr}) = -p_{ext} J \mathbb{F}^{-T} \mathbf{N}, \quad \mathbf{X} \in \partial\Omega_p, \tag{2.3}$$

где $k_\perp$, $k_\parallel$ — коэффициенты жёсткости пружинного закрепления поперёк и вдоль границы, $\mathbf{u}_{spr}$ — равновесное состояние закрепления, а p_{ext} — внешнее давление на границу. Начальные условия имеют простую форму:

$$\mathbf{u}|_{t=0} = \mathbf{u}_0(\mathbf{X}), \ \ \partial \mathbf{u}/\partial t|_{t=0} = \mathbf{v}_0(\mathbf{X}), \quad \mathbf{X} \in \overline{\Omega}. \tag{2.4}$$

Иногда требуются и более сложные граничные условия, например, граничное условие для изоволюметрического сокращения желудочков сердца.

Распространение электрической активации на уровне тканей обычно описывают бидоменной, монодоменной или эйкональной модель [47, глава 4]. Для определённости выпишем общий вид уравнения монодоменной модели:

$$\chi_m C_m(\mathbb{F}) \frac{\partial \upsilon}{\partial t} - \nabla \cdot (\sigma(\mathbb{F}) \nabla \upsilon) + \chi_m i_{ion}(\mathbf{w}, \upsilon, \mathbb{F}) = I_{stim}(t), \quad \mathbf{X} \in \Omega, \tag{2.5}$$

где χ_m — постоянная, выражающая отношение площади мембраны клетки к её объёму, C_m — электрическая ёмкость мембраны, I_{stim} — внешний ток стимуляции, i_{ion} — внутренние трансмембранные токи, определяемые конкретной моделью клеточной электрофизиологии, σ — это тензор проводимости. В бидоменную и эйкональную модель также входят аналогичные коэффициенты. В зависимости от модели, выбранной для описания проводимости σ, она может зависеть или не зависеть от деформации $\mathbb{F}$ [134, Appendix C]. Аналогично приведённая ёмкость $\hat{C}_m = \chi_m C_m$ также может моделироваться как зависящая от деформации $\mathbb{F}$ и даже учитывать запаздывание [152], хотя чаще её всё же считают постоянной. Наконец, в расширенных моделях клеточной электрофизиологии имеют место активируемые при растяжении-сжатии ионные каналы, что делает трансмембранный ток i_{ion} так же зависящим от $\mathbb{F}$.

Уравнения электрической активации дополняются простыми граничными условиями электрической изолированности ткани миокарда и начальным условием на величину потенциала, которые для монодоменной модели имеют вид:

$$\mathbf{N} \cdot (\sigma \nabla \upsilon) = 0, \quad \mathbf{X} \in \partial\Omega, \tag{2.6}$$

$$\upsilon|_{t=0} = \upsilon_0(\mathbf{X}), \quad \mathbf{X} \in \overline{\Omega}. \tag{2.7}$$

Наконец, клеточные модели электрофизиологии и механической активации, используемые на органном уровне, имеют вид систем ОДУ:

$$\frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} = \mathbf{r}_w(\upsilon, \mathbb{F}, \mathbf{w}), \quad \mathbf{X} \in \Omega, \qquad \mathbf{w}|_{t=0} = \mathbf{w}_0(\mathbf{X}), \quad \mathbf{X} \in \overline{\Omega}, \tag{2.8}$$

$$\frac{\partial \mathbf{a}}{\partial t} = \mathbf{r}_a\left(\mathbb{F}, \frac{\partial \mathbb{F}}{\partial t}, \mathbf{w}, \mathbf{a}\right), \quad \mathbf{X} \in \Omega, \qquad \mathbf{a}|_{t=0} = \mathbf{a}_0(\mathbf{X}), \quad \mathbf{X} \in \overline{\Omega}, \tag{2.9}$$

где $\mathbf{r}_w$ и $\mathbf{r}_a$ — правые части соответствующих уравнений, а $\mathbf{w}_0$ и $\mathbf{a}_0$ — функции начальных условий. В настоящее время существует огромное разнообразие клеточных моделей электрофизиологии, например, познакомиться с некоторыми можно в обзоре [47, раздел 2.9.4 и таблица 2.2]. Модели механической активации также могут в значительной степени варьироваться с точки зрения сложности и учитываемых эффектов [104; 150; 156]. Детальное описание соответствующих моделей выходит за рамки данной диссертации. Обращение к клеточным моделям будет производиться на основе приведённого здесь обобщённого представления, в виде некоторых систем ОДУ.

Итак, уравнения (2.1)-(2.9) формируют математическую модель сопряжённой электромеханики сердца, которая рассматривается в данной главе.

2.4 Численная дискретизация сопряжённой модели электромеханики миокарда

Сопряжённая электромеханическая модель сердца включает в себя следующие подмодели: клеточная модель электрофизиологии S_w, клеточная модель кальциевого обмена и активного механического сокращения S_a, механика деформаций сплошной среды S_u и модель электрической активации S_υ. Каждая подмодель имеет значительно отличающиеся характерные пространственные и временные масштабы. Поэтому перспективным подходом является использование схем полного расщепления по процессам, т.е. схем, которые позволяют использовать различные дробные временные шаги и даже различную пространственную дискретизацию для моделирования отдельных подпроцессов. Ранее было предложено несколько вариантов схем полного расщепления для решения электромеханических проблем сердца [27; 35; 49; 128; 139]. В предлагаемой здесь схеме электрическая и механическая части связываются через переменные состояния в точках интегрирования. Общая идея, лежащая в основе этого подхода, не нова [53; 104; 105; 135]. Однако большинство работ основаны на дискретизации пространства на общей сетке или использовании структурированных иерархических сеток, которые требуют специальных процедур интерполяции и/или имеют другие ограничения.

Представленная ниже численная схема для дискретизации сопряжённой электромеханической модели сердца отличается от ранее представленных в литературе тем, что снимает требование согласованности между сетками, используемыми для дискретизации механики и уравнений распространения электрической активации и применяется на неструктурированных тетраэдральных, а не шестигранных, сетках. Новая схема использует лишь простую поточечную интерполяцию с сетки на сетку между итерациями времени и не несёт заметных накладных расходов на фоне сложности решения возникающих линейных систем.

Для определённости далее будем считать, что для S_u на всей границе заданы условия вида (2.3), а S_υ описывается монодоменной моделью:

$$C_m(\mathbf{w})\frac{\partial\upsilon}{\partial t} - \nabla\cdot(\sigma\nabla\upsilon) + i_{ion}(\mathbf{w},\upsilon,\lambda_f) = I_{stim}(t),\ \mathbf{X}\in\Omega. \tag{2.10}$$

Для других граничных условий и моделей вида (2.1)-(2.9) схема аналогична.

Дискретизация по пространству. Моделируемый участок миокарда Ω дискретизуется с помощью квази-равномерных неструктурированных тетраэдральных сеток: $\mathcal{T}_{h_m}$ — для клеточной S_a и трёхмерной механики S_u и $\mathcal{T}_{h_e}$ — для уравнений распространения электрической активации $S_\mathfrak{v}$ и клеточных уравнений электрофизиологии S_w. Индексами h_m и h_e обозначим размер шага соответствующих сеток. Сетки $\mathcal{T}_{h_m}$ и $\mathcal{T}_{h_e}$ не являются топологически согласованными. Более того, границы областей, охватываемых этими сетками, не обязаны совпадать точно, хотя это несовпадение приводит к дополнительным численным ошибкам. Однако в численных экспериментах будет рассмотрен только случай, когда границы сеток в точности совпадают $\partial\mathcal{T}_{h_m} = \partial\mathcal{T}_{h_e}$ и $h_m \geqslant h_e$.

Пусть $\mathcal{V}_h^r$ — конечно-элементное пространство Лагранжа, состоящее из кусочно-полиномиальных функций $\mathcal{P}_r$ степени не выше r на тетраэдральной сетке $\mathcal{T}_h$ с множеством ячеек $\mathcal{C}_h$, т.е.

$$\mathcal{V}_h^r = \{v \in H^1(\Omega) \cap C^0(\overline{\Omega}) : v|_c \in \mathcal{P}_r(c) \ \forall c \in \mathcal{C}_h\}.$$

Введём $Q^s = \{w_q, \boldsymbol{\xi}_q\}_{q=1}^{n_q}$ — внутренняя положительная гауссова кубатурная формула порядка s такая, что для любого тетраэдра c с вершинами $\{\mathbf{p}^v\}_{v=1}^4$ выполнено $\int_c f(x)dx = |c| \sum\limits_{q=1}^{n_q} w_q f(\sum\limits_{v=1}^{4} \xi_q^v \mathbf{p}^v) \ \forall f \in \mathcal{P}_s(c)$. Обозначим q-ую точку квадратуры на ячейке $c \in \mathcal{C}_h$ как $\mathbf{x}_q^c = \sum\limits_{v=1}^{4} \xi_q^v \mathbf{p}^v$ и введём пространство $\mathcal{Q}_h^s(Q^s)$ дискретных сеточных функций, содержащих ровно одну степень свободы в каждой точке квадратуры $\mathbf{x}_q^c$ каждой ячейки. Для произвольной сеточной функции $p_h \in \mathcal{Q}_h^s(Q^s)$ обозначим её сужение на ячейку c как p_h^c и её значение в q-ой точке квадратуры ячейки c обозначим $(p_h)_q^c$. Также введём оператор проекции $I_h : C^0(\mathcal{T}_h) \to \mathcal{Q}_h^s(Q^s)$ как $(I_h p)_q^c = p(\mathbf{x}_q^c) \ \forall p \in C^0(\mathcal{T}_h)$. Наконец, численную аппроксимацию интеграла для непрерывной на каждой ячейке функции f, зависящей от векторной сеточной функции $\mathbf{p}_h \in [\mathcal{Q}_h^s(Q^s)]^d$ будем записывать как

$$⨍_{\mathcal{T}_h, Q^s} f(\mathbf{p}_h, \mathbf{x}) \, d\mathbf{x} := \sum_{c \in \mathcal{T}_h} |c| \sum_{q=1}^{n_q} w_q f\left((\mathbf{p}_h)_q^c, \mathbf{x}_q^c\right).$$

Для вычисления поточечной интерполяции функций введём отображение $c^*_{h_2,h_1} : \mathcal{C}_{h_2} \times \overline{1, n_{q,2}} \to \mathcal{C}_{h_1}$, возвращающее номер ближайшей ячейки сетки $\mathcal{T}_{h_1}$ к q-ой точке квадратуры формулы Q^{s_2}, применённой на ячейке c_2 сетки $\mathcal{T}_{h_2}$:

$$c^*_{h_2,h_1}(c_2, q) = \arg \min_{c_1 \in \mathcal{C}_{h_1}} \left(\min_{\mathbf{y} \in c_1} ||\mathbf{y} - \mathbf{x}_q^{c_2}|| \right),$$

где $\mathcal{C}_{h_1}$ и $\mathcal{C}_{h_2}$ — это множества ячеек сеток $\mathcal{T}_{h_1}$ и $\mathcal{T}_{h_2}$ и $n_{q,2}$ – это число точек в квадратурной формуле Q^{s_2}.

Для дискретизации S_u и S_υ будем использовать метод конечных элементов. В то же время, клеточные уравнения S_a и S_w будем решать в каждой точке квадратуры сеток $\mathcal{T}_{h_m}$ и $\mathcal{T}_{h_e}$ соответственно. Будем описывать поле перемещений $\mathbf{u}$ как непрерывную кусочно-квадратичную функцию $\mathbf{u}_{h_m} \in [\mathcal{V}^2_{h_m}]^3$ с базисом $\{\boldsymbol{\varphi}_i\}_{i=1}^{N_\mathbf{u}}$. Аналогично будем описывать трансмембранный потенциал v как непрерывную кусочно-линейную функцию $v_{h_e} \in \mathcal{V}^1_{h_e}$ из пространства $\mathcal{V}^1_{h_e}$ с базисом $\{\psi_i\}_{i=1}^{N_V}$.

Для численного вычисления интегралов, возникающих в слабых постановках для уравнений конечных деформаций и распространения электрической активации, будем использовать квадратурные формулы $Q^{s_m} = \{w_q, \boldsymbol{\xi}_q\}_{q=1}^{n_{q,m}}$ и $Q^{s_e} = \{w_q, \boldsymbol{\xi}_q\}_{q=1}^{n_{q,e}}$ соответственно. Для краткости пространства $\mathcal{Q}^{s_m}_{h_m}(Q^{s_m})$ и $\mathcal{Q}^{s_e}_{h_e}(Q^{s_e})$ будут обозначаться как $\mathcal{Q}^{s_m}_{h_m}$ и $\mathcal{Q}^{s_e}_{h_e}$. После дискретизации переменные состояния $\mathbf{w}$ описываются сеточной функцией $\mathbf{w}_{h_e} \in [\mathcal{Q}^{s_e}_{h_e}]^{n_w}$ на $\mathcal{T}_{h_e}$, а переменные состояния $\mathbf{a}$ — сеточной функцией $\mathbf{a}_{h_m} \in [\mathcal{Q}^{s_m}_{h_m}]^{n_a}$ на $\mathcal{T}_{h_m}$.

Наконец, полудискретная формулировка для сопряжённой модели миокарда принимает вид: найти $\mathbf{u}_{h_m} \in [\mathcal{V}^2_{h_m}]^3$, $v_{h_e} \in \mathcal{V}^1_{h_e}$, $\mathbf{w}_{h_e} \in [\mathcal{Q}^{s_e}_{h_e}]^{n_w}$ и $\mathbf{a}_{h_m} \in [\mathcal{Q}^{s_m}_{h_m}]^{n_a}$ для $t \in [0, T]$ такие, что выполняются следующие равенства:

$$
\begin{aligned}
&\int\limits_{\mathcal{T}_{h_m}} \rho\, \ddot{\mathbf{u}}_{h_m} \cdot \boldsymbol{\varphi}_i \, d\mathbf{x} + \int\limits_{\mathcal{T}_{h_m}, \mathcal{Q}^{s_m}_{h_m}} \mathbb{P}(\mathbb{F}_{h_m}, \dot{\mathbb{F}}_{h_m}, \mathbf{a}_{h_m}) : \nabla \boldsymbol{\varphi}_i \, d\mathbf{x} + \\
&\qquad + \int\limits_{\partial\mathcal{T}_{h_m}} [(k_\perp \mathbf{N}_{h_m} \otimes \mathbf{N}_{h_m} + k_\parallel(\mathbb{I} - \mathbf{N}_{h_m} \otimes \mathbf{N}_{h_m}))(\mathbf{u}_{h_m} - (\mathbf{u}_{spr})_{h_m})] \cdot \boldsymbol{\varphi}_i \, d\mathbf{s} + \\
&\qquad + \int\limits_{\partial\mathcal{T}_{h_m}} p_{ext} J_{h_m} \boldsymbol{\varphi}_i \cdot \mathbb{F}^{-T}_{h_m} \mathbf{N}_{h_m} d\mathbf{s} = 0, \ \ \forall i \in \overline{1,\, N_\mathbf{u}}, \\
&\int\limits_{\mathcal{T}_{h_e}, \mathcal{Q}^{se}_{h_e}} C_m(\mathbf{w}_{h_e})\, \dot{v}_{h_e} \psi_i \, d\mathbf{x} + \int\limits_{\mathcal{T}_{h_e}} \nabla \psi_i \cdot \sigma \nabla v_{h_e} \, d\mathbf{x} + \\
&\qquad\qquad + \int\limits_{\mathcal{T}_{h_e}, \mathcal{Q}^{se}_{h_e}} i_{ion}(v_{h_e}, \mathbf{w}_{h_e}) \psi_i \, d\mathbf{x} = \int\limits_{\mathcal{T}_{h_e}} i_{stim} \psi_i \, d\mathbf{x}, \ \ \forall i \in \overline{1,\, N_v},
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&(\dot{\mathbf{w}}_{h_e})^c_q = \mathbf{r}_\mathbf{w}(v_{h_e}(\mathbf{x}^c_q),\, (I_{h_e}\mathbb{F}_{h_m})^c_q,\, (\mathbf{w}_{h_e})^c_q), && \forall q \in \overline{1, n_{q,e}} \ \ \forall c \in \mathcal{C}_{h_e}, \\
&(\dot{\mathbf{a}}_{h_m})^c_q = \mathbf{r}_\mathbf{a}(\mathbb{F}_{h_m}(\mathbf{x}^c_q),\, \dot{\mathbb{F}}_{h_m}(\mathbf{x}^c_q),\, (I_{h_m} v_{h_e})^c_q,\, (\mathbf{a}_{h_m})^c_q), && \forall q \in \overline{1, n_{q,m}} \ \ \forall c \in \mathcal{C}_{h_m}.
\end{aligned}
$$

Здесь $\mathbb{F}_{h_m} = \mathbb{I} + \nabla \mathbf{u}_{h_m}$, $\dot{\mathbb{F}}_{h_m} = \nabla \dot{\mathbf{u}}_{h_m}$, $J_{h_m} = \det \mathbb{F}_{h_m}$, $\mathbf{N}_{h_m}$ — внешняя единичная нормаль к границе $\mathcal{T}_{h_m}$. Проекции с сетки на сетку определяются как $(I_{h_e}\mathbb{F}_{h_m})^c_q = \mathbb{I} + \sum\limits_{i:\ \boldsymbol{\varphi}_i|_{c_m}\neq 0} [\mathbf{u}_{h_m}]_i\ \nabla \boldsymbol{\varphi}_i(\mathbf{x}^c_q)$, где $c_m = c^*_{h_e,h_m}(c,q)$, и $(I_{h_m}\upsilon_{h_e})^c_q = \sum\limits_{i:\ \psi_i|_{c_e}\neq 0} [\upsilon_{h_e}]_i\ \psi_i(\mathbf{x}^c_q)$, где $c_e = c^*_{h_m,h_e}(c,q)$.

Дискретизация по времени. Для дискретизации по времени используется схема расщепления Годунова [180]. Аналогично работе [128] в подмоделях применяются дробные шаги по времени, причём шаг для механики $\tau_m = \Delta t$ выбран в качестве базового. Для монодоменного уравнения используется шаг $\tau_e = \Delta t/N_e$, а клеточные уравнения решаются с общим шагом $\tau_o = \Delta t/N_o$, $N_o = k_o N_e$, где N_e, N_o, $k_o \in \mathbb{N}$.

Обозначим векторы степеней свободы для неизвестных $\mathbf{u}$ и υ заглавными буквами U и V. Поскольку сеточные функции $\mathbf{w}_{h_e}$ и $\mathbf{a}_{h_m}$ уже заданы своим дискретным набором значений — значениями в точках квадратуры — как векторы степеней свобод, для них вводить специальных обозначений не требуется. Для простоты обозначений будем опускать нижние индексы h_m и h_e. Индекс ячейки c переместим вниз так, чтобы векторы значений в точках квадратур нумеровались мультииндексом q,c. Верхним индексом ${}^{n+\frac{k}{N_e}+\frac{l}{N_o}}$ будем обозначать значения величины в момент $t^{n+\frac{k}{N_e}+\frac{l}{N_o}} = n\tau_m + k\tau_e + l\tau_o$. Тогда, начиная с $n = k = l = 0$, последовательность решения уравнений описывается записанным ниже образом.

1. Производим k_o итераций времени, решая системы ОДУ клеточных моделей. Для решения может быть использован любой численный метод, пригодный для жёстких систем ОДУ. Здесь для демонстрации приведём вариант, основанный на формуле дифференциирования назад (BDF) первого порядка и неявной схеме Эйлера (используемая здесь величина $\dot{U}^n$ будет определена ниже):

$$\frac{\mathbf{w}_{q_e,c_e}^{n+\frac{k}{N_e}+\frac{l+1}{N_o}} - \mathbf{w}_{q_e,c_e}^{n+\frac{k}{N_e}+\frac{l}{N_o}}}{\tau_o} = \mathbf{r}_\mathbf{w}(V^{n+\frac{k}{N_e}}, U^n, \mathbf{w}_{q_e,c_e}^{n+\frac{k}{N_e}+\frac{l+1}{N_o}}), \quad \forall q_e \in \overline{1, n_{q,e}}\ \ \forall c_e \in \mathcal{C}_{h_e},$$
$$\frac{\mathbf{a}_{q_m,c_m}^{n+\frac{k}{N_e}+\frac{l+1}{N_o}} - \mathbf{a}_{q_m,c_m}^{n+\frac{k}{N_e}+\frac{l}{N_o}}}{\tau_o} = \mathbf{r}_\mathbf{a}(U^n, \dot{U}^n, V^{n+\frac{k}{N_e}}, \mathbf{a}_{q_m,c_m}^{n+\frac{k}{N_e}+\frac{l+1}{N_o}}), \forall q_m \in \overline{1, n_{q,m}}\ \ \forall c_m \in \mathcal{C}_{h_m}.$$

2. Производим одну итерацию по времени для решения монодоменного уравнения. Использование явно-неявной схемы приводит к линейной системе:

$$\mathcal{M}^{C_m}(\mathbf{w}^{n+\frac{k+1}{N_e}})\dot{V}^{n+\frac{k+1}{N_e}} + \mathcal{A}^{\sigma}V^{n+\frac{k+1}{N_e}} + \mathcal{I}_{ion}(V^{n+\frac{k}{N_e}}, \mathbf{w}^{n+\frac{k+1}{N_e}}) = \mathcal{I}_{stim}^{n+\frac{k+1}{N_e}},$$

где используются

$$\dot{V}^{n+\frac{k+1}{N_e}} := \frac{V^{n+\frac{k+1}{N_e}} - V^{n+\frac{k}{N_e}}}{\tau_e},$$

$$\mathcal{M}_{ij}^{C_m}(\mathbf{w}) := \int\limits_{\mathcal{T}_{h_e}, \mathcal{Q}_{h_e}^{se}} C_m(\mathbf{w})\ \psi_j\psi_i\ d\mathbf{x}, \quad \mathcal{A}_{ij}^{\sigma} := \int\limits_{\mathcal{T}_{h_e}} \nabla\psi_i \cdot \sigma\nabla\psi_j\ d\mathbf{x},$$

$$\mathcal{I}_{ion,i}(V, \mathbf{w}) := \int\limits_{\mathcal{T}_{h_e}, \mathcal{Q}_{h_e}^{se}} i_{ion}(v_{h_e}(V), \mathbf{w})\psi_i\ d\mathbf{x},$$

$$\mathcal{I}_{stim,i}^{n+\frac{k+1}{N_e}} := \int\limits_{\mathcal{T}_{h_e}} i_{stim}(t^{n+\frac{k+1}{N_e}})\ \psi_i\ d\mathbf{x}.$$

3. Повторяем первые два шага ещё $N_e - 1$ раз. Затем решаем нелинейную алгебраическую систему, возникающую из дискретизации уравнений движения, следующей неявной схемой:

$$\mathcal{M}^{\rho}\ddot{U}^{n+1} + \mathcal{P}(U^{n+1}, \dot{U}^{n+1}, \mathbf{a}^{n+1}) + \hat{p}(U^{n+1}) + \mathcal{G}(U^{n+1} - U_{spr}^{n+1}) = 0,$$

где используются

$$\ddot{U}^{n+1} := \frac{U^{n+1} - 2U^n + U^{n-1}}{\tau_m^2}, \qquad \dot{U}^{n+1} := \frac{U^{n+1} - U^n}{\tau_m},$$

$$\mathcal{M}_{ij}^{\rho} := \int\limits_{\mathcal{T}_{h_m}} \rho\ \boldsymbol{\varphi}_i \cdot \boldsymbol{\varphi}_j\ d\mathbf{x},$$

$$\mathcal{P}_i(U, \dot{U}, \mathbf{a}) := \int\limits_{\mathcal{T}_{h_m}, \mathcal{Q}_{h_m}^{sm}} \mathbb{P}(\mathbb{F}_{h_m}(U), \dot{\mathbb{F}}_{h_m}(\dot{U}), \mathbf{a}) : \nabla\boldsymbol{\varphi}_i\ d\mathbf{x},$$

$$\hat{p}_i(U) := \int\limits_{\partial\mathcal{T}_{h_m}} \boldsymbol{\varphi}_i \cdot [p_{ext}J_{h_m}(U)\mathbb{F}_{h_m}^{-T}(U)]\mathbf{N}_{h_m}d\mathbf{s},$$

$$\mathcal{G}_{ij} := \int\limits_{\partial\mathcal{T}_{h_m}} [k_{\parallel}(\boldsymbol{\varphi}_i \cdot \boldsymbol{\varphi}_j) + (k_{\perp} - k_{\parallel})(\mathbf{N}_{h_m} \cdot \boldsymbol{\varphi}_i)(\mathbf{N}_{h_m} \cdot \boldsymbol{\varphi}_j)]d\mathbf{s}.$$

4. Наконец, обновляем счётчик $n := n + 1$.
5. Повторяем шаги 1–4, пока $t^n < T$.

2.5 Результаты моделирования

Любое численное моделирование неизбежно сопровождается возникновением численных ошибок, и, если их величина достаточно велика, они могут привести к неправильной интерпретации получаемых решений. В практических расчетах мы всегда ограничены во времени и вычислительных ресурсах. В связи с этим приходится идти на компромисс между точностью получаемого решения и ресурсами, затраченными на получение этого решения. Поэтому на практике оказывается важно знание о порядке возникающих величин ошибок в зависимости от мелкости дискретизации задачи. В данной работе предложенная численная схема применена для задачи о возбуждении миокардиальной плиты из [152], описываемой сопряжённой моделью электромеханики. Проведён ряд численных экспериментов, в которых рассматриваются отклонения величин интереса более грубых аппроксимаций от результатов экспериментов, полученных для более подробных пространственных и временных дискретизаций. В результате получены оценки величины шагов пространственной и временной дискретизации для механических уравнений и электрофизиологических уравнений, необходимые для достижения разумной точности. Хотя рассматриваемая в данном исследовании математическая модель составлена из довольно простых отдельных подмоделей, таких как модель Алиева-Панфилова для ионных уравнений, изотропный материал Гуччионе для описания пассивных механических свойств, монодоменное уравнение для моделирования распространения активации и т.д., для более сложных моделей ограничения на мелкость дискретизации будут более строгими. Поэтому оценки, представленные в этом исследовании, все еще можно использовать как априорное знание о существующих ограничениях сверху на шаги дискретизации.

Во всех численных экспериментах рассматривается прямоугольная геометрия $\Omega = [0,\ k_x L] \times [0,\ k_y L] \times [0,\ k_z L]$, где L — базовая длина и $k_x, k_y, k_z \in \mathbb{N}$. Данная геометрия задаётся согласованной тетраэдральной сеткой $\mathcal{T}_h$, построенной в два этапа: 1) построение однородной кубической сетки с шагом $h = L/a$, где $a \in \mathbb{N}$ — мелкость разбиения, 2) разделение каждого элемента кубической сетки на 6 тетраэдров. Если не утверждалось иного, то в экспериментах использовались соответствующие миокарду значения параметров и начальных условий из Таблицы 4 (Приложение A). Моделирование выполнялось посредством фреймворка CarNum [91]. Нелинейные системы уравнений решались до относительного значения невязки 10^{-8}, а линейные — до 10^{-12}.

Математическая формулировка модели электромеханики миокарда. Общая формулировка сопряжённых моделей электромеханики уже изложена в разделе 2.3. Здесь же, используя обозначения из раздела 2.3, конкретизируем модель, использованную в численных экспериментах.

1. *Монодоменная модель* электрической активации ткани:

$$C_m(\mathbf{w})\frac{\partial \upsilon}{\partial t} - \nabla\cdot(\sigma\nabla\upsilon) + i_{ion}(\mathbf{w},\upsilon) = i_{stim}(t), \quad \mathbf{X}\in\Omega$$

с изолирующими граничными условиями (2.6). Здесь тензор проводимости задаётся коэффициентами σ_{iso} и σ_{aniso} как $\sigma = \sigma_{iso}\,\mathbb{I} + (\sigma_{aniso}-\sigma_{iso})\,\mathbf{f}\otimes\mathbf{f}$, где $\mathbf{f}$ — направление волокон.

2а. *Зависимость мембранной ёмкости* C_m от удлинения волокон (механо-электрический обратный ответ) [152]:

$$\frac{\partial w_{c_m}}{\partial t} = k_m(K_m(\lambda_f - 1)_+ - (w_{c_m} - 1)), \quad \mathbf{X}\in\Omega,$$

где $(x)_+ = (|x| + x)/2$, w_{c_m} — переменная состояния модели, $C_m(\mathbf{w}) = w_{c_m}$.

2б. Модифицированная ионная *модель Алиева-Панфилова* [5]:

$$\tau\frac{\partial w_\nu}{\partial t} = -\left(\varepsilon + \frac{\mu_1 w_\nu}{\mu_2 + u}\right)(w_\nu + ku(u-a-1)), \quad \mathbf{X}\in\Omega,$$

включающая безразмерный мембранный потенциал $u = (\upsilon - V_{min})/V_{norm}$ и переменную состояния w_ν, трансмембранный ток

$$i_{ion}(w_\nu, u) = \frac{uV_{norm}}{\tau}\left\{(1+k_{i1})w_\nu + k(u-(1+k_{i2})a)(u-1)\right\},$$

и параметры ε, μ_1, μ_2, k, a, τ, V_{min}, V_{norm}, k_{i1} и k_{i2}. Через последние 2 параметра в численных экспериментах моделировалась неоднородность ткани.

3. *Модель упругого деформирования* ткани миокарда:

$$\rho_0\frac{\partial^2\mathbf{u}}{\partial t^2} - \operatorname{Div}\mathbb{P}(\mathbb{F},\mathbf{a}) = 0, \quad \mathbf{X}\in\Omega,$$

где уравнения дополняются смешанными граничными условиями внешнего давления и пружинного закрепления (2.3).

Материал рассматривается как малосжимаемый, активные свойства вводятся через метод активных напряжений [118]: $\mathbb{P} = \mathbb{P}_{pas} + \mathbb{P}_{vol} + \mathbb{P}_{cell}$, где слагаемые соответствуют пассивному напряжению, штрафной добавке за изменение объёма и напряжениям клеточного уровня, включающим активные напряжения. Первые два слагаемых задаются посредством гиперупругих потенциалов как $\mathbb{P}_{type} = \frac{\partial W_{type}(\mathbb{F})}{\partial \mathbb{F}}$ для $type \in \{pas,\, vol\}$. Пассивные напряжения задаются изохорным потенциалом Гуччионе $W_{pas} = \frac{\mu}{2}(\exp(b\ \mathrm{tr}(\hat{\mathbb{E}}^2)) - 1)$, а штрафная добавка через $W_{vol} = \frac{K}{4}(J^2 - 1 - 2\ln J)$, где $\hat{\mathbb{E}} = \frac{1}{2}(J^{-\frac{2}{3}}\mathbb{F}^T\mathbb{F} - \mathbb{I})$. Клеточные напряжения действуют только вдоль волокон и имеют форму:

$$\mathbb{P}_{cell} = T_{cell}(\lambda_f,\, \partial_t\lambda_f,\, \mathbf{a})\, \frac{\mathbb{F}\mathbf{f}}{||\mathbb{F}\mathbf{f}||} \otimes \mathbf{f},$$

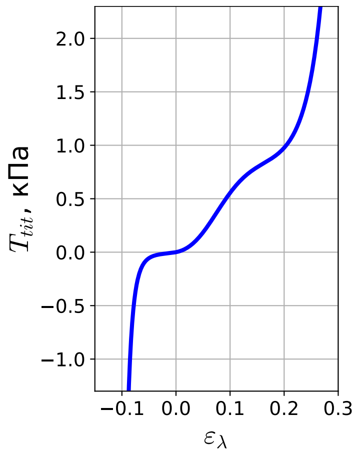
где $\lambda_f = ||\mathbb{F}\mathbf{f}||$ и $\partial_t\lambda_f = \partial\lambda_f/\partial t$ — это кратность и скорость удлинения волокна.

4. *Модель генерации клеточных напряжений* включала пассивную упругую реакцию саркомерного белка титина на растяжение $T_{tit} = T_{tit}(\lambda_f)$ и активные напряжения, развиваемые сократительными белками миозина и актина, $T_{act} = T_{act}(\lambda_f,\, \partial_t\lambda_f,\, \mathbf{a})$: $T_{cell} = T_{tit} + T_{act}$.

Модель реакции титина имела вид:

$$T_{tit} = t_{tit}\varepsilon_\lambda \cdot \begin{cases} \exp(q_1\varepsilon_\lambda + q_2\varepsilon_\lambda^2 + q_3\varepsilon_\lambda^3), & \varepsilon_\lambda > 0, \\ \exp(q_1\varepsilon_\lambda + q_2^*\varepsilon_\lambda^2), & \varepsilon_\lambda \leqslant 0, \end{cases}$$

где $\varepsilon_\lambda = \lambda_f - 1$, а коэффициенты t_{tit}, q_1, q_2, ... были выбраны для соответствия кривым напряжений растянутых саркомеров из работы [151].



В качестве модели генерации активных напряжений использовалась *модель Сёмина-Осепян-Цатуряна* [150]:

$$\begin{cases} T_{act} = T_{act}(\lambda_f,\, \partial_t\lambda_f,\, \mathbf{a}), \\ \dfrac{\partial \mathbf{a}}{\partial t} = \mathbf{r_a}(\lambda_f,\, \partial_t\lambda_f,\, v,\, \mathbf{a}), \quad \mathbf{X} \in \Omega, \end{cases}$$

явный вид уравнений для которой можно найти в оригинальной работе [150]. Для повышения устойчивости расчётов модель была несколько модифицирована согласно [92, раздел 2.4].

Электрическая активация недеформируемого миокарда. Для того, чтобы приступить к моделированию сопряжённой задачи, важно прояснить какие шаги дискретизации необходимы для корректного воспроизведения сугубо электрофизиологических процессов. С этой целью проведён расчёт несколько модифицированной тестовой задачи активации куска миокарда из [106], где материал считался недеформируемым и использовались однородные начальные условия $\mathbf{u}(\mathbf{X}, t) = 0 = \text{const}$.
Геометрия: плита с $L = 10$ мм, $k_x = 9$, $k_y = k_z = 1$.
Волокна: $\mathbf{f} = (1, 0, 0)^T$.

$$\textit{Стимуляция:}\ i_{stim}(\mathbf{X}, t) = \begin{cases} \hat{i}_{stim}, & \text{если } \mathbf{X} \in [0,\ 2.5]^3 \text{ мм},\ t \in [0,\ 20] \text{ мс}, \\ 0, & \text{иначе}, \end{cases}$$

где $\hat{i}_{stim} = 40$ мкА/мкФ.
Дискретизация: рассматривался набор сеток с мелкостью разбиения $a_e \in \overline{4{,}24}$, уравнения монодоменной модели дискретизовались с порядками квадратур $s_e \in \overline{1{,}5}$, $\tau_e = \tau_o = 0.01$ мс.

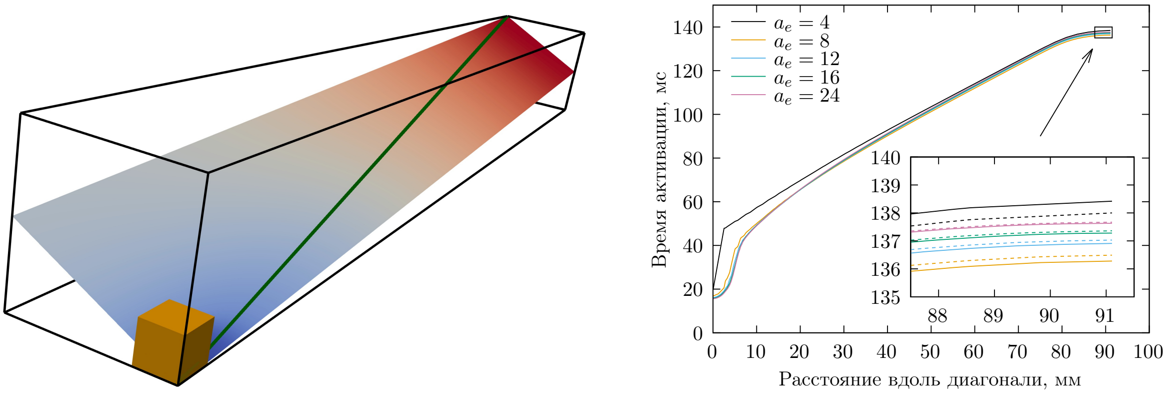


Рисунок 2.5 — Слева: схема задачи об активации недеформируемого миокарда, стимулируемый регион выделен оранжевым, чёрные рёбра обозначают границу расчётной области, а зелёной линией представлена диагональ, вдоль которой демонстрируются результаты на графике справа. Справа: графики времени активации вдоль диагонали области $90 \times 10 \times 10$ мм для сеток с шагом $h_e = L/a_e$, $L = 10$ мм. Представлены результаты для квадратур $s_e = 1$ (сплошная линия) и $s_e = 2$ (пунктирная линия). Главное окно содержит графики только для $s_e = 1$

Рисунок 2.5 демонстрирует, что времена активации вдоль диагонали области отличаются на не более чем 1 мс при $a_e \geqslant 12$, т.е. при $h_e = L/a_e \leqslant 0.8$ мм. Также видно, что времена активации зависят главным образом от h_e, а влияние порядка квадратуры s_e уже вторично. На Рисунке 2.5 не представлены результаты для $s_e > 2$, поскольку они визуально совпадают со случаем $s_e = 2$.

Более того, если интегралы, входящие в матрицу масс, вычислять точно, т.е. брать $\mathcal{M}_{ij}^{C_m} := \int_{\mathcal{T}_{h_e}} C_m \psi_i \psi_j d\mathbf{x}$, а для других членов использовать общую квадратурную формулу, то для $s_e = 1$ результаты также визуально неотличимы от случая $s_e = 2$ и фактически отличаются на не более чем 0.01 мс. Таким образом, чтобы упростить вычисления без существенных потерь в точности, можно использовать сеточный шаг $h_e \leqslant 0.8$ мм и метод среднего для аппроксимации интегралов, соответствующий $s_e = 1$.

Активация неоднородного миокарда. Для выяснения того, как мелкость дискретизации механических уравнений влияет на результаты симуляций, здесь рассмотрена задача об активации неоднородного куска миокарда (Рисунок 2.7 и 2.6).

Геометрия: плита с $L = 10$ мм, $k_x = k_y = 9$, $k_z = 1$.

Время: $t \in [0, T]$, $T = 1000$ мс.

Волокна: $\mathbf{f} = (1, 0, 0)^T$.

Стимуляция: $i_{stim}(\mathbf{x}, t) = \begin{cases} \hat{i}_{stim} \cdot f_{hat}(t), & \text{если } \mathbf{x} \in [0,\, 30] \times [0,\, 5] \times [0,\, 10] \text{ мм}, \\ 0, & \text{иначе}, \end{cases}$

где $\hat{i}_{stim} = 25$ μА/μФ, $f_{hat}(t) = f_w\left(\frac{t - T_{beg}}{t_{set}}\right) - f_w\left(\frac{t-(T_{end}-t_{set})}{t_{set}}\right)$, $f_w(x) = \frac{|x|-|x-1|}{2}$, и $T_{beg} = 100$ мс, $T_{end} = 103$ мс, $t_{set} = 1$ мс.

Неоднородность вводится за счёт модификации параметров модели Алиева-Панфилова как

$$\begin{array}{l} k_{i1}(\mathbf{x}) = \hat{k}_{i1} f_H(x,y) \\ k_{i2}(\mathbf{x}) = \hat{k}_{i2} f_H(x,y) \end{array}, \quad f_H(x,y) = \begin{cases} 1, \ (x,y) \in [x_1,\, x_2] \times [y_1,\, y_2], \\ 0, \ (x,y) \notin [x_1 - d_x,\, x_2 + d_x] \times [y_1 - d_y,\, y_2 + d_y], \\ 1 - \frac{\rho^2(x,[x_1,x_2]) + \rho^2(y,[y_1,y_2])}{I(x \notin [x_1,x_2]) d_x^2 + I(y \notin [y_1,y_2]) d_y^2}, \ \text{иначе}, \end{cases}$$

где $\rho(x, [x_1, x_2]) = \min\limits_{y \in [x_1,x_2]} |y - x|$, $I(\cdot)$ — индикаторная функция, $x_1 = 27$ мм, $x_2 = 36$ мм, $y_1 = 0$ мм, $y_2 = 36$ мм, $d_x = 1.35$ мм, $d_y = 3.6$ мм, $\hat{k}_{i1} = 5$ и $\hat{k}_{i2} = 2$. Физиологически это соответствует тому, что в образце ткани имеется область с повышенным порогом возбуждения и повышенными потоками положительных ионов, проходящими через клеточную мембрану, что предотвращает возбуждение ткани в этой области и ее дальнейшую проводимость.

Давление: $p_{ext} = \hat{p} \min(1, \frac{t}{T_p}) I(\mathbf{x} \in \Gamma_r)$, где $\Gamma_r = \{90\} \times [0, 90] \times [0, 10]$ мм, $\hat{p} = 1$ кПа, $T_p = 100$ мс.

На трёх границах применяется *пружинное закрепление*:

1. на $\Gamma_l = \{0\} \times [0, 90] \times [0, 10]$ — $k_\parallel = k_\perp = 20$ кПа, $\mathbf{u}_{spr} = 0$;
2. на $\Gamma_b = [0, 90] \times \{0\} \times [0, 10]$ — $k_\parallel = 20$ кПа, $k_\perp = 0$ кПа, $\mathbf{u}_{spr} = 0$;
3. на $\Gamma_r = \{90\} \times [0, 90] \times [0, 10]$, начиная с момента времени $t = T_p = 100$ мс (до этого граница свободна), накладывается условие пружинного закрепления, причём пружины в этот момент считаются ненагруженными, иначе говоря, используется $\mathbf{u}_{spr}(\mathbf{X}, t) = \mathbf{u}(\mathbf{X}, T_p) I(t \geqslant T_p)$ и $k_\parallel = k_\perp = 20 \cdot I(t \geqslant T_p)$ кПа.

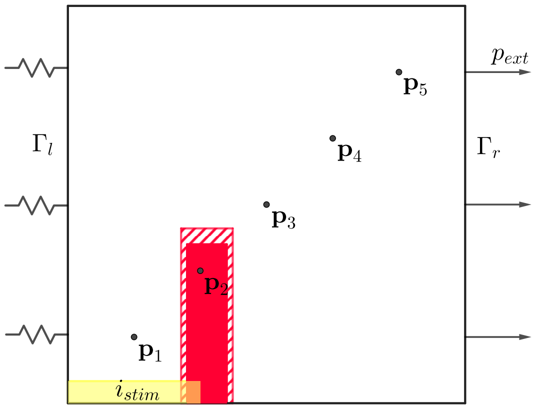


Рисунок 2.6 — Геометрия задачи об активации неоднородного куска миокарда: левая граница закреплена пружинами; правую границу тянут; жёлтым отмечена стимулируемая область, а красным — плохо проводящая ткань, штриховкой отмечена переходная область проводимости

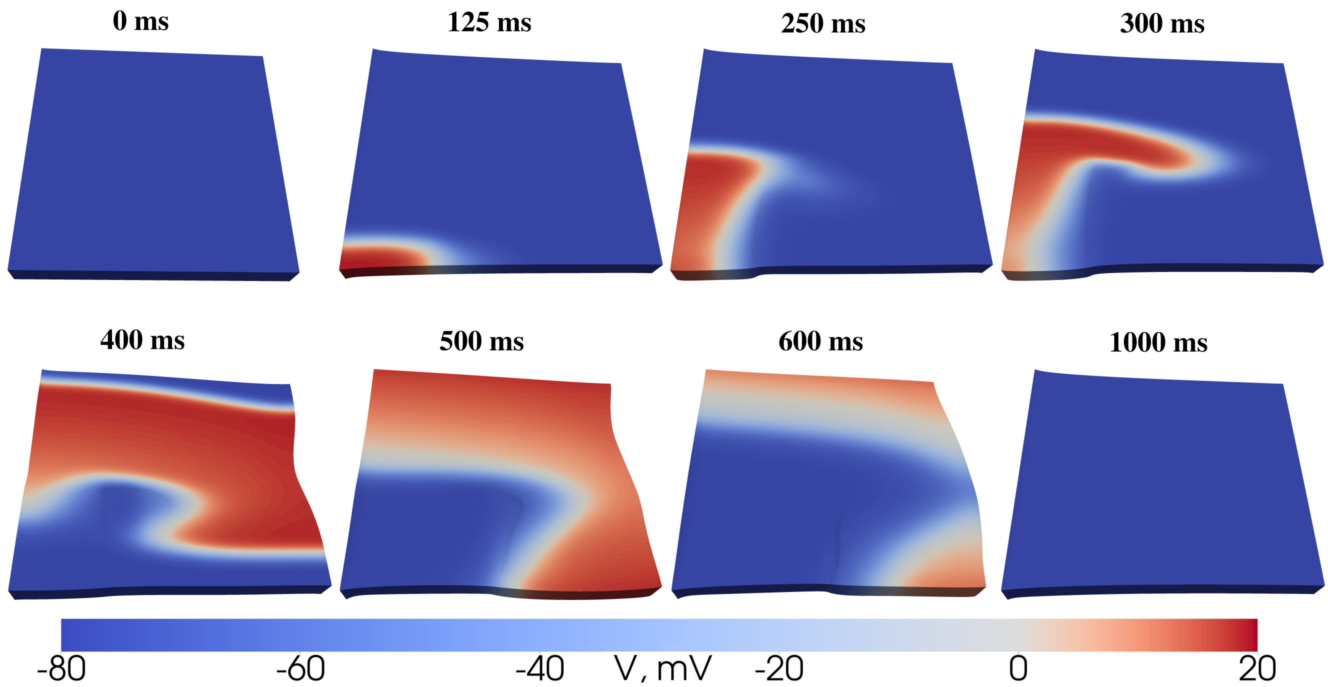


Рисунок 2.7 — Распространение трансмембранного потенциала υ в эксперименте с активацией неоднородного куска миокарда

Дискретизация: рассматривается ряд случаев с разной степенью разбиения $a_e \in \{10,\ 12\}$, $a_m \in \overline{2,\ 12}$ и разными шагами по времени τ_m от 0.1 до 1 мс и τ_e от 0.01 до 1 мс. Шаг по времени для клеточных моделей фиксирован и равен $\tau_o = 0.01$ мс. Для всех расчётов, за исключением референтного (будет определён далее), использовались порядки квадратур $s_m = 3$ и $s_e = 1$.
Методика сравнения: рассматриваются величины $\mathbf{u}$, υ и λ_f в пяти точках $\mathbf{p}_i = \{15i, 15i, 5i/3\}$, $i \in \overline{1,5}$, лежащих на главной диагонали плиты, причём точка $\mathbf{p}_2$ попадает в зону неоднородности материала. Численное решение, полученное на общей сетке $a_m = a_e = 12$ с параметрами дискретизации $s_m = s_e = 5$, $\tau_m = 0.1$ мс, $\tau_e = \tau_o = 0.01$ мс, взято в качестве референтного решения.

Чтобы оценить численную ошибку решений, рассматриваются абсолютные значения отклонений величин интереса как

$$\varepsilon_{var}(t) = \max_{i \in \overline{1,5}} ||var(\mathbf{p}_i, t) - var^{ref}(\mathbf{p}_i, t)||,\ var \in \{\mathbf{u},\ \upsilon,\ \lambda_f\},$$

где верхним индексом $(\cdot)^{ref}$ обозначена соответствующая величина на референтном решении. Также, чтобы показать величину фазовых ошибок, для всех рассмотренных случаев во всех пяти точках вычислялся момент активации

$$t_{act} = \min\{t > T_p :\ \upsilon(t) = 0\}$$

и момент сокращения

$$t_{contr} = \min\{t > T_p :\ \lambda_f(t) = \lambda_f^*\},$$

где $\lambda_f^* = \frac{1}{5}\sum\limits_{i=1}^{5} \frac{\lambda_f^{ref}(\mathbf{p}_i,T)+\lambda_f^{ref}(\mathbf{p}_i,0)}{2} \approx 1.06382$.

Прежде всего необходимо установить насколько большой может быть шаг сетки для механической части задачи. Для этого был проведён ряд расчётов с фиксированными $a_e = 12$, $\tau_m = 0.1$ мс, $\tau_e = 0.01$ мс и различными a_m, варьирующимися от 9 до 2. Результаты представлены во втором ряду на Рисунке 2.8. Хотя отклонение υ и достигает 13 мВ в моменты, когда υ изменяется наиболее быстро, на самом деле визуально графики для υ совпадают, что также видно в верхнем ряду рисунка. Это означает, что отклонение ε_υ имеет главным образом фазовый характер. Переход от $a_m = 4$ к $a_m = 3$ резко увеличивает отклонение величины удлинения волокон ε_{λ_f} от ≈ 0.005 до ≈ 0.04, что довольно существенно, поскольку $|\lambda_f - 1| < 0.3$. Как можно понять по графикам из верхнего ряда,

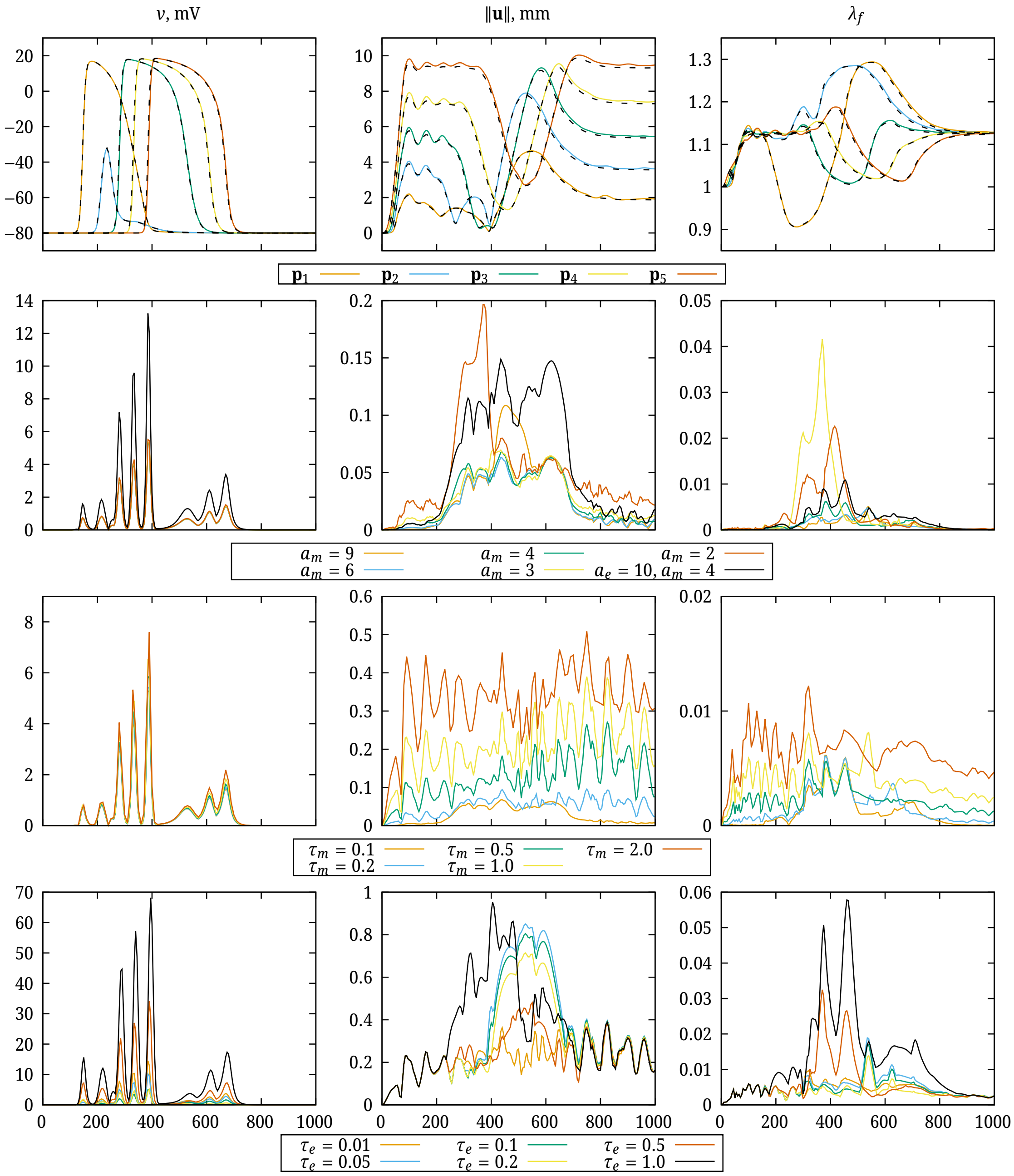


Рисунок 2.8 — Представлены величины и их отклонения от референтных значений для трасмембранного потенциала $\boldsymbol{\upsilon}$ (левый столбец), перемещений $\mathbf{u}$ (средний столбец) и удлинения волокон λ_f (правый столбец). На верхнем ряду представлена динамика рассматриваемых величин, вычисленная в пяти контрольных точках $\mathbf{p}_1, \ldots, \mathbf{p}_5$, причём сплошная линия соответствует референтному решению, а пунктирная — случаю с $a_e = 10$, $a_m = 4$, $\tau_m = 1$ мс, $\tau_e = 0.01$ мс. На втором ряду показаны отклонения ε_v, $\varepsilon_{\mathbf{u}}$, ε_{λ_f} для различных a_m при $a_e = 12$, $\tau_e = 0.01$ мс, $\tau_m = 0.1$ мс. Третий ряд показывает отклонения ε_v, $\varepsilon_{\mathbf{u}}$, ε_{λ_f} для различных τ_m при $a_e = 12$, $a_m = 4$, $\tau_e = 0.01$ мс. На четвёртом ряду представлены отклонения ε_v, $\varepsilon_{\mathbf{u}}$, ε_{λ_f} для различных τ_e при $a_e = 10$, $a_m = 4$, $\tau_m = 1$ мс. Графики используют общую горизонтальную ось t в мс.

это отклонение возникает в точке, принадлежащей области однородности. Вероятно, это связано с тем, что область неоднородности плохо разрешается на грубой сетке $\mathcal{T}_{h_m}$. В то же время абсолютные отклонения смещения $\varepsilon_{\mathbf{u}}$ остаются умеренными даже при $a_m = 3$. Можно сделать вывод, что для получения приемлемой точности достаточно использовать $a_m = 4$, т.е. $h_m \leqslant 2.5$ мм.

Затем исследовано влияние τ_m на качество решений. Проведена серия экспериментов с различными значениями τ_m и при $a_e = 12$, $a_m = 4$, $\tau_e = 0.01$ мс. Как показано в третьем ряду на Рисунке 2.8, увеличение τ_m от 0.1 до 1 мс приводит к около линейному увеличению отклонения для $\mathbf{u}$ с 0.05 до 0.4 мм. Влияние увеличения τ_m на υ и λ_f имело в основном фазовый характер и, как видно из Таблицы 5 (Приложение Б), приводило к небольшому уменьшению времени активации и сокращения. Предполагая, что относительные (по сравнению с референтным решением) отклонения скоростей распространения фронта активации и сокращения могут быть оценены как $\frac{t_{act}-t_{act}^{ref}}{t_{act}^{ref}-T_p}$, где $T_p = 100$ мс — время начала стимуляции, имеем, что при увеличении τ_m от 0.1 до 1 мс скорость активации и распространения фронта возбуждения увеличилась примерно на 0.7%. Фазовая ошибка при $\tau_m = 2$ мс отличается от остальных рассмотренных случаев и выражается в замедлении распространения фронта. Вероятно, это связано с тем, что при таком большом шаге по времени некоторые нелинейные эффекты воспроизводятся неправильно. Таким образом, можно заключить, что если ошибка в скорости распространения фронта порядка 1% приемлема, то для механических уравнений можно использовать временной шаг $\tau_m = 1$ мс.

Наконец, было исследовано влияние τ_e на решения при фиксированных $a_e = 10$, $a_m = 4$, $\tau_m = 1$ мс. Для всех рассматриваемых величин при изменении τ_e от 0.01 до 1 мс отклонение имело в основном фазовый вид. Как следует из данных Таблицы 5 (Приложение Б), увеличение τ_e приводит к замедлению распространения фронта аналогично тому, как это происходит в чисто электрофизиологических постановках. Однако как видно из четвертого ряда на Рисунке 2.8 и таблицы, по мере увеличения шага τ_e с 0.01 до 1 мс модуль отклонения сначала падает, а только затем увеличивается. Этот неожиданный результат обусловлен тем, что фазовые отклонения, вызванные временной дискретизацией для механики и электрофизиологии, имеют противоположные знаки и, таким образом, существует такое соотношение между τ_e и τ_m, при котором возникающие фазовые отклонения взаимно компенсируются. Например, это наблюдается при τ_e порядка $0.1 - 0.3$ мс и $\tau_m = 1$ мс.

Глава 3. Персонализированный расчёт диастолического состояния реконструированного аортального клапана

Аортальный клапан (АК) — это один из четырёх клапанов сердца, расположенный между левым желудочком и аортой. АК является важным элементом сердечно-сосудистой системы, обеспечивая эффективное распределение кислородосодержащей крови по всему организму.

Анатомически аортальный клапан состоит из трёх полулунных створок, которые образуют карманы (Рисунок 3.1). Эти створки, называемые правой (ПКС), левой (ЛКС) и некоронарной (НКС) створками, крепятся к фиброзному кольцу. Над каждой створкой находится синус Вальсальвы, который способствует правильному открытию и закрытию клапана. Морфологически АКС представляют собой соединительную ткань, богатую коллагеном и эластином, что обеспечивает их прочность, гибкость и износостойкость. Створки не имеют собственной сосудистой сети и получают питание непосредственно из крови, протекающей через клапан.

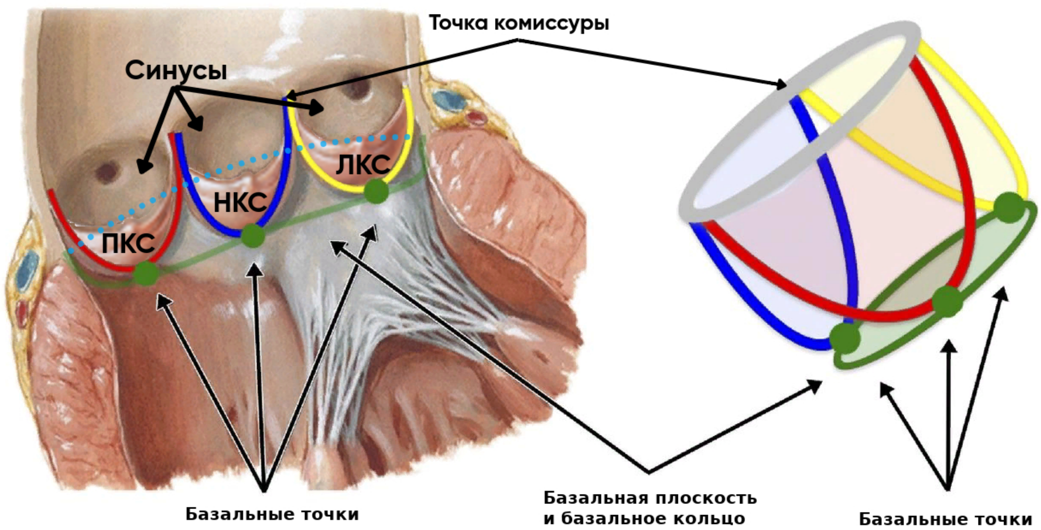


Рисунок 3.1 — Развёртка аорты (слева) и коронообразная линия крепления створок (справа) к поверхности аорты. Базальные точки или точки надира — наинизшие точки линии крепления створок. На левом рисунке пунктирная голубая линия и сплошная зелёная демонстрируют границы фиброзного кольца

Работа аортального клапана основана на разнице давлений в левом желудочке и аорте. Во время систолы левый желудочек сокращается и давление в нём превышает давление в аорте, что приводит к открытию створок аортального клапана. Далее во время диастолы желудочек расслабляется и давление в аорте становится выше, в результате чего створки закрываются и предотвращают регургитацию — обратный ток крови.

Заболевания аортального клапана являются одними из наиболее распространённых сердечно-сосудистых патологий, особенно среди пожилых пациентов. Согласно последним исследованиям [99], в мире насчитывается около 13.6 миллионов пожилых пациентов с аортальным стенозом и согласно прогнозам это число удвоится к 2050-ому году [162]. В работе [40] показано, что 5-летняя общая выживаемость даже для пациентов средней степени тяжести, не подвергающихся хирургическому лечению, составляет всего 52.3%. При этом лишь 28% пациентов с тяжёлым аортальным стенозом получают должное лечение и подвергаются операции по замене аортального клапана. Это соответствует 12 129 процедурам в США с 2008 по 2016 год [95]. В то же время предполагаемая годовая потребность в хирургическом лечении аортального клапана оценивается более чем в 200 000 случаев в Северной Америке и 300 000 в Европе. К 2018 году количество таких процедур в США увеличилось до 73 255 [6].

На сегодняшний день нет единой технологии лечения заболеваний аортального клапана. Хотя процедура транскатетерной имплантации протеза аортального клапана (transcatheter aortic valve implantation, TAVI) выполняется вдвое чаще, чем традиционная хирургическая замена аортального клапана (surgical aortic valve replacement, SAVR) [6], SAVR остаётся ключевой методикой для молодых пациентов и случаев, требующих проведения сопутствующих операций. Согласно текущим рекомендациям, пациентам младше 60 лет следует устанавливать механические протезы, тогда как пациентам старше 65–70 лет показаны биологические [60]. Впрочем современные метаанализы и наблюдательные исследования [38; 78; 79; 132] рассматривают биологические протезы как разумную альтернативу и для пациентов младше 60 лет, поскольку они позволяют избежать пожизненной антикоагулянтной терапии и снижают риск кровотечений. Главное препятствие в использовании биопротезов среди молодых пациентов — многократно более высокая частота реопераций по сравнению с механическими протезами.

В 1964 г. V.O. Björk и G. Hultquist представили первые результаты использования свежего аутологичного перикарда для замены створок аортального клапана [17], однако функция неостворок оказалась неудовлетворительной из-за их быстрой кальцификации. J.W. Love et al. предложили обрабатывать аутоперикард 0.6% раствором глутарового альдегида (раствор Carpentier) [94], что сделало его намного более пригодным для использования в качестве материала для неостворок. На основе этой методики S. Ozaki et al. разработали технику «неокуспидизации аортального клапана» (AVNeo) [113], которая вызвала широкий интерес и стала активно применяться. Авторы создали собственные шаблоны для измерения межкомиссуральных расстояний и подбора неостворок подходящего размера.

Поскольку при «неокуспидизации» применяется перикард самого пациента, данная процедура имеет очень низкий риск развития иммунного отторжения. Кроме того, метод обладает ещё рядом преимуществ: отсутствие необходимости в антикоагуляции, низкий трансклапанный градиент давления, увеличенная площадь эффективного отверстия, низкая регургитация, отсутствие неестественной деформации аортального кольца и корня аорты в течение сердечного цикла, низкая скорость деградации и кальцификации и низкая стоимость [14; 71; 144; 155].

Однако у метода AVNeo есть и недостатки. Ещё в 1960 г. было отмечено, что избыточный размер неостворок может привести к перекрытию устьев коронарных артерий [101]. Кроме того, после AVNeo у 12,5% пациентов возникает тромбоз неостворок [57], что так же, вероятно, вызвано их избыточной площадью. Для предотвращения осложнений рекомендуется вырезать неостворки минимально возможного размера, достаточного для нормальной работы клапана без регургитации. Из медицинской литературы известно, что для нормального функционирования нативный или реконструированный АК в закрытом состоянии должен обеспечивать определённые размеры областей коаптации (попарного соприкосновения) створок, а также иметь определённое «допустимое» положение относительно корня аорты. Говоря более конкретно, можно привести следующий набор критериев состоятельности АК [80; 100; 122; 130; 142]: высота центральной коаптации больше 4 мм, эффективная высота коаптации больше 9 мм, зона коаптации выше желудочково-аортального соединения, отсутствие провисания (billowing), пролапса и остаточной регургитации. Чем больше критериев соблюдено, тем лучше результат реконструкции.

Для оценки пригодности створок аортального клапана для конкретного пациента с учётом его анатомических особенностей могут быть использованы методы математического моделирования. Соответствующие модели разрабатываются как в контексте разработки биопротезов клапанов (например, [86; 93; 159]), так и конкретно для процедуры неокуспидизации на основе аутоперикарда (например, [59]). Подходы отличаются с точки зрения степени детализации (от просто геометрических замеров и оценок до тяжёлых многокомпонентных физических моделей), учёта тока крови (гемодинамическая или «сухая» модель), формулировки упругой структуры (мембраны, оболочки, сплошные тела), моделей материалов, используемых для описания механического поведения створки, методов учёта контактного взаимодействия и целевых оцениваемых значений по результатам математического моделирования (см. обзор [176]).

В рамках междисциплинарного взаимодействия между научной группой член-корреспондента РАН Ю.В. Василевского и кардиохирурга П.А. Каравайкина, а также его коллег-хирургов была поставлена глобальная цель: разработать систему поддержки принятия врачебных решений (СППВР), которая бы предлагала оптимальный дизайн неостворок для операции Озаки на основе данных о геометрии аорты конкретного пациента. Понятие оптимальности здесь возникает из необходимости отыскания баланса: с одной стороны, необходимо обеспечить надёжное закрытие неоклапана, что проверяется через соответствие АК критериям состоятельности, а с другой стороны, размер неостворок должен быть как можно меньше. Такая формулировка связана с тем, что избыточный размер створок приводит к ряду проблем, о которых упомянуто выше. Влияние дизайна клапана на его долговременную изнашиваемость при выборе понятия оптимальности не учитывалось. Таким образом, все выбранные целевые характеристики оказались связаны с геометрией клапана в закрытом (диастолическом) состоянии.

Применимость упомянутой СППВР в клинической практике накладывает значительные требования на скорость её работы: для возможности применения алгоритмов оптимизации оценка закрытого состояния должна быть вычислительно не дорогой и занимать не более нескольких минут. Кроме того, во время диастолы клапан успевает прийти к состоянию равновесия, а давление в диастоле уравняться, что означает, что динамическими эффектами можно пренебречь. Также в работе [149] показано, что оболочечная модель АК с хорошей точностью приближает результаты трёхмерной КЭ модели. Ввиду этих фактов, для оценки закрытого состояния клапана была выбрана вычислительно дешёвая «сухая» оболочечная модель.

Рисунок 3.2 — Макет технологии подбора оптимальных створок реконструированного АК на основе данных о геометрии корня аорты пациента. Процесс оптимизации производится посредством выполнения прямого моделирования закрытия выбранного клапана под действием заданного давления и оценки коаптационных и прочих целевых характеристик по результатам моделирования

Технологическая цепочка СППВР для персонализированного подбора оптимального дизайна створок реконструированного АК включает несколько частей: (Рисунок 3.2):

1. Сегментация КТ данных аорты пациента и генерация сетки для её внутренней поверхности;
2. Установка будущих линий крепления створок на поверхностной сетке аорты;
3. Виртуальное размещение заданных створок в полости аорты в соответствии с линиями крепления;
4. Моделирование закрытия реконструированного АК;
5. Обработка геометрии клапана в закрытом состоянии с целью оценки характеристик коаптации и других интересующих величин;
6. Процесс оптимизации геометрических параметров шаблонов створок.

В качестве входных данных для технологии выступают изображения корня аорты, полученные с помощью компьютерной томографической ангиографии с контрастным усилением, информация о механических свойствах ткани неостворок и трансклапанное давление во время диастолы.

В контексте данной технологии автор занимался только вопросами 3-5, поэтому задачи, связанные с сегментацией аорты, алгоритмами установки линии крепления и методами оптимизации, рассматриваться в настоящей работе не будут. Лишь кратко отметим, что сегментация изображений и построение триангуляции поверхности аорты производятся с помощью программного обеспечения ITK SNAP [175] и библиотеки CGAL [26; 131], о чём более подробно изложено в [138, sec. 2]; реализован специальный графический интерфейс, где хирург, ориентируясь на геометрию аорты, вручную проставляет точки, которые определяют линии крепления; вопросы о наиболее подходящих параметризациях геометрии створок активно исследуются.

Итак, далее автором будет решаться следующая задача: разработать численную модель для отыскания закрытой конфигурации клапана во время диастолы, а также формализовать понятия критериев состоятельности АК и предложить методы для их оценки в рамках модели.

3.1 Пришивание неостворок в операции Озаки

Для постановки корректных граничных условий в модели АК необходимо понять, как происходит пришивание и размещение неостворок в реальной хирургической практике.

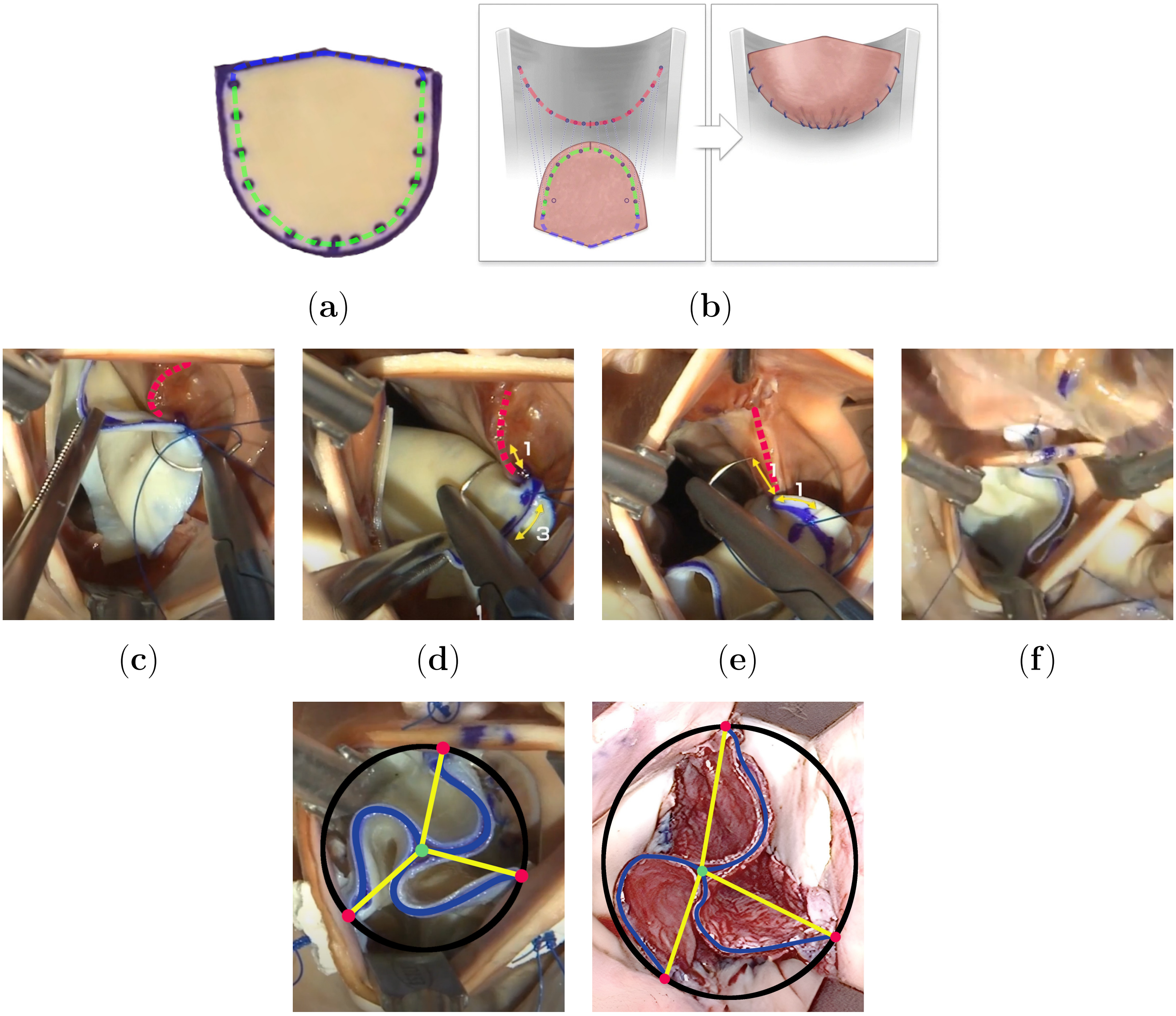
Перед тем как приступить к пришиванию створок в хирургической процедуре неокуспидизации, их согласно выбранному шаблону вырезают из обработанного перикарда пациента и на них отмечают точками будущие позиции для шовных стежков (Рисунок 3.3 **a**-**b**). Линия, проведенная через отмеченные точки, образует линию пришивания створки. Процесс наложения швов представлен следующим алгоритмом [4].

1. Опустите створку в полость аорты (Рисунок 3.3 **b**). Сделайте стежок (Рисунок 3.3 **c**), проходящий через центр линии пришивания створки (cusp suture line, CSL) и центр будущей линии шва на аорте (aortic suture line, ASL).

2. Пришейте половину створки:
   а) Производите стежки, скрепляющие отмеченные точки на шаблоне и ASL, так, чтобы соотношение расстояний между стежками на шаблоне и на поверхности аорты составляло 3:1 (Рисунок 3.3 **d**). Одновременно продвиньте шаблон вниз под остаток фиброзного кольца.
   б) Когда оставшаяся длина половины CSL станет равной или будет слегка превышать оставшуюся длину половины будущей ASL, начинайте накладывать швы между створкой и аортой эквидистантно (Рисунок 3.3 **e**).
   в) Последний стежок проведите через точку, расположенную на расстоянии 5 мм от свободного края створки и на 2 мм ниже наивысшей точки комиссуры на аорте.
   г) Скорректируйте положение створки, продвинув её вдоль аортальной стенки.
3. Повторите Шаг 2 для второй половины створки.
4. Повторите Шаги 1 и 2 для половины второй створки.
5. Сформируйте комиссуру между первой и второй створками. После этого этапа конец CSL будет совмещен с концом ASL (Рисунок 3.3 **f**).
6. Повторите Шаг 2 для второй половины второй створки.
7. Повторите Шаги 1, 2 и 5 для первой половины третьей створки, затем Шаги 2 и 5 для второй половины третьей створки.
8. Скорректируйте положение створок, чтобы обеспечить оптимальную конфигурацию и коаптацию трёхстворчатого клапана (Рисунок 3.3 **g-h**).

Из этой процедуры можно выделить следующие важные наблюдения:

– *Нелинейное по длине отображение CSL на ASL*. Функция искажения длины кривой при отображении описывается кусочно-постоянной функцией.
– *Фиксированная касательная полуплоскость вблизи CSL*. Порядок наложения швов (Рисунок 3.3 **b**) в процедуре приводит к тому, что CSL оказывается закреплена, и вблизи CSL створка выстилается по поверхности аорты в направлении к левому желудочку.
– *Сильно изогнутые поверхности попарных контактов створок*. Поверхности контакта далеки от плоских «идеальных» форм, которыми их часто изображают в анатомических работах (Рис. 3.3 **g-h**).



(a) (b)

(c) (d) (e) (f)

(g) (h)

Рисунок 3.3 — Пришивание створок в процедуре AVNeo. (**a**) плоский шаблон створки; (**b**) схема опускания лепестка относительно ASL и результат его пришивания; (**c**) процесс создания первого стежка; (**d**)-(**e**) процесс создания шва с соотношением расстояний между стежками на поверхности створки и аорты равным 3:1 и 1:1 соответственно; (**f**) формирование комиссуры между парой створок; (**g**)-(**h**) варианты конфигурации реконструированного АК после пришивания. Салатовый: линия шва на створке (CSL); синий: свободная подвижная граница створки; розовый: линия шва на поверхности аорты (ASL); жёлтый: отрезки, соединяющие зелёную точку тройного контакта с красной точкой комиссуры. Источники: (**a**) и (**h**) из [112], (**b**) из [10], (**c**)-(**g**) из [114]

3.2 Формулировка численной модели закрытия аортального клапана

Будем рассматривать створки аортального клапана как отдельные тонкостенные структуры и моделировать их с помощью оболочечной модели с контактным взаимодействием, уравнения и дискретизация для которых приведены в разделах 1.4, 1.6. Конкретизируем параметры этой модели.

– Граница створки состоит из двух частей: закреплённого с помощью шва (пришиваемого) Γ_{csl} и свободного края Γ_{free}.
– Створки имеют постоянную толщину $H \approx 0.4 - 0.5$ мм. На самом деле перикард пациента немного меняется по толщине и хирурги даже стараются вырезать шаблоны так, чтобы пришиваемый край был толще свободного, однако этим мы пренебрегаем.
– Плотность перикарда считаем постоянной и близкой к воде $\rho_0 \approx 1$ мг/мм^3. Отсюда $\tau_0^0 = H\rho_0$, $\tau_0^1 = 0$, и пренебрегаем $\tau_0^2 \sim O(H^3)$. Моделируя по существу стационарный процесс, параметры τ_0^i не обязательно задавать точно.
– Материал перикарда будем описывать моделью Гента
$$\hat{\psi} = -\frac{EJ_m}{6} \ln\left(1 - \frac{1}{J_m}(I_1^S + (J^S)^{-2} - 3)\right)$$
с параметром $J_m = 2.3$ и жёсткостью $E \sim 1000$ кПа (по порядку соотв. [1; 178]). Механические свойства обработанного перикарда недостаточно изучены (не ясно насколько существенна его анизотропность [3; 63; 137] и как меняется жёсткость при химической обработке (жёстче/мягче) [115; 178]), поэтому в данной работе выбрана такая простая форма потенциала.
– Сила давления описывается законом Паскаля: $\mathbf{p} = P_{dias}\,\mathbf{n}$, — где P_{dias} постоянна и соответствует разнице давлений в аорте и левом желудочке во время диастолы и в норме составляет 80-90 мм рт.ст. За время диастолы жидкость вблизи клапана успевает прийти в равновесие.
– Момент силы давления нулевой $\mathbf{m}^p \cdot \delta\mathbf{n} = 0$.
– На свободном крае $\mathbf{q}|_{\Gamma_{free}} = \mathbf{m}^q|_{\Gamma_{free}} = 0$.
– Пришиваемый край фиксирован: $\mathbf{x}|_{\Gamma_{csl}} = \mathbf{r}_{asl}$ и $\mathbf{x}'_n|_{\Gamma_{csl}} = \boldsymbol{\varphi}$ ($\mathbf{r}_{asl}$ и $\boldsymbol{\varphi}$ будут определены далее).
– Времени $T = 70$ мс достаточно для закрытия АК [85].

Для модели контактного взаимодействия требуется, чтобы в начальном расчётном приближении для положения АК выполнялись условия:

1. Створки АК расположены внутри корня аорты и не пересекаются с поверхностью аорты,
2. Створки АК не пересекаются между собой.

Из первого требования, в частности, следует, что кривая $\mathbf{r}_{asl}$ из гран. условий на пришиваемой границе должна быть отделена от поверхности аорты и лежать где-то внутри полости аорты. Таким образом, необходимы алгоритмы для определения $\mathbf{r}_{asl}$ и размещения створок в объёме корня аорты без пересечений.

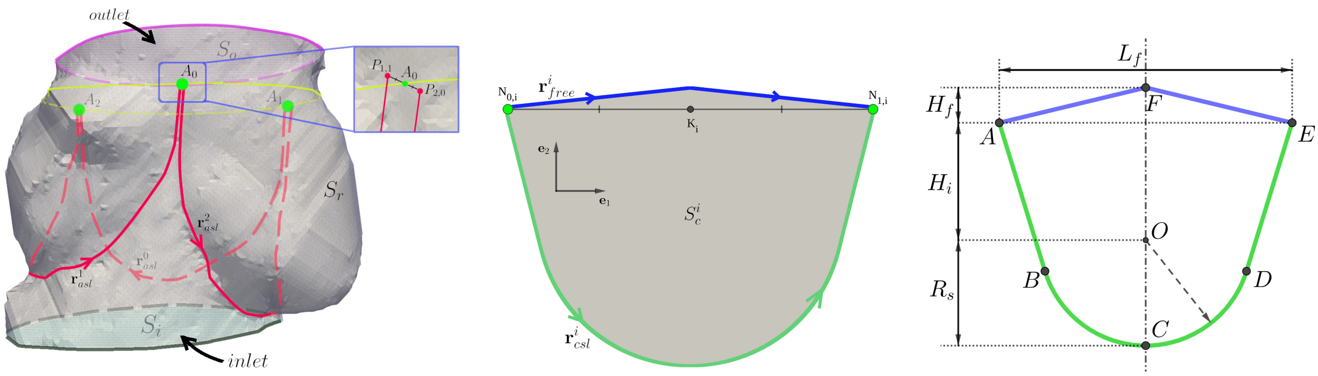
3.3 Входная геометрия и обозначения

После проведения сегментации и генерации сетки корень аорты задаётся как треугольная поверхностная сетка S_a с нормалями, направленными внутрь кольца аорты. Линия шва на аорте задаётся упорядоченным набором установленных хирургом точек, между каждой последовательной парой которых на аорте проводится кратчайшая геодезическая линия. В результате, для i-ой створки линия шва на аорте (ASL) представляет собой ломанную, задаваемую набором узлов $\{\mathbf{p}_v^i\}_{v=1}^{N^i}$. Далее верхним индексом $i = 0, 1, 2$ будем указывать на принадлежность используемых объектов или обозначений к i-ой створке там, где эта принадлежность не ясна из контекста. Нумерация створок и направление обхода узлов в ломанных ASL выбраны таким образом, чтобы эти объекты обходились против часовой стрелки при взгляде на них из восходящей аорты.

Будем рассматривать только плоские шаблоны неостворок (хотя описанные алгоритмы применимы и для не плоского случая). В этом случае 3D геометрия створки характеризуется её толщиной H и плоской срединной поверхностью S_c. Плоская поверхность S_c задаётся своими границами $\mathbf{r}_{csl}(t) : [0, 1] \to \mathbb{R}^2$ и $\mathbf{r}_{free}(t) : [0, 1] \to \mathbb{R}^2$ (Рисунок 3.4 **b**), соответствующими краям Γ_{csl} и Γ_{free}, причём кривые $\mathbf{r}_{csl}$ и $\mathbf{r}_{free}$ являются простыми, не пересекаются во внутренних точках и $\mathbf{r}_{csl}(0) = \mathbf{r}_{free}(0)$, $\mathbf{r}_{csl}(1) = \mathbf{r}_{free}(1)$. В данной работе построение сетки для поверхностей S_c производилось методом продвигаемого фронта из пакета Ani2D [7].

Введём ряд обозначений (Рисунок 3.4 **a**-**b**):

- $P_{i,0} = \mathbf{p}^i_1$, $P_{i,1} = \mathbf{p}^i_{N^i}$ — вершины крепления i-ой створки, $\mathbf{a}^i_P = \overrightarrow{P_{i,0}P_{i,1}}$,
- $A_i = (P_{(i+1)\%3,1} + P_{(i+2)\%3,0})/2$ — точка комиссуры (где '%' обозначает остаток от целочисленного деления),
- $\mathbf{a}_i = \overrightarrow{A_{(i+1)\%3}A_{(i+2)\%3}}$ — ориентированная i-ая сторона комиссурального треугольника $A_0A_1A_2$, $a_i = |\mathbf{a}_i|$,
- $M = \mathrm{aff}(A_0, A_1, A_2)$ — плоскость комиссур с нормалью $\mathbf{n} = \mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2 / |\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2|$, направленной вверх относительно геометрии на Рисунке 3.4 **a**,
- O — центр описанной вокруг треугольника $A_0A_1A_2$ окружности и $\mathbf{l}_O$ — ориентированная прямая, проходящая через точку O и сонаправленная с $\mathbf{n}$,
- $N_{i,0} = \mathbf{r}^i_{csl}(0)$, $N_{i,1} = \mathbf{r}^i_{csl}(1)$ — концы i-ой створки, $\mathbf{a}^i_N = \overrightarrow{N_{i,0}N_{i,1}}$,
- K^i и L^i — середины отрезков $N_{i,0}N_{i,1}$ и $P_{i,0}P_{i,1}$, соответственно.



(**a**) (**b**) (**c**)

Рисунок 3.4 — Входная геометрия: (**a**) участок корня аорты, (**b**) начальная геометрия плоского шаблона створки, (**c**) один из вариантов параметризации геометрии створок с параметрами L_f, H_f, H_i, R_s. Пунктиром обозначены невидимые части линий; ASL представлены красными линиями; жёлтым показано пересечение корня аорты и плоскости точек комиссуры; на увеличенном изображении на (**a**) показано положение точки комиссуры A_0 и концы прилежащих ASL; салатовым цветом обозначена CSL, а синим — свободный край створок

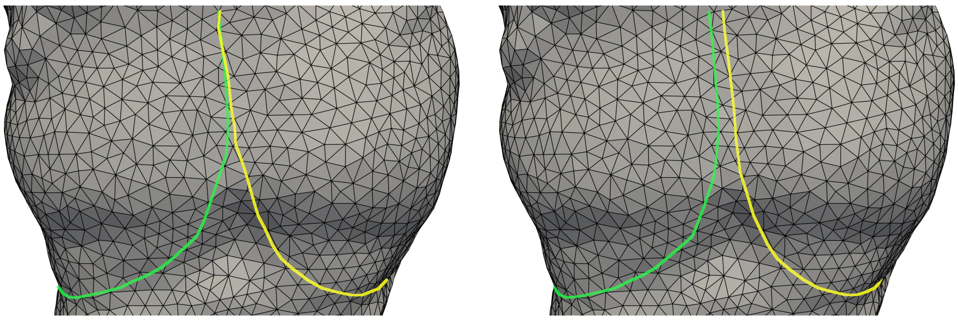
Также уточним понятие нормали для кусочно-линейной поверхности:

- *Углом* $\angle \mathbf{a}, \Pi(O)$ *между лучом/вектором* $\mathbf{a}$ *и многогранным углом* $\Pi(O)$ *с вершиной* O будем называть наименьший угол между $\mathbf{a}$ и лучом, проведённым из O по поверхности многогранного угла.
- *Обобщённую биссектрису многогранного угла* определим как любой луч, лежащий внутри области, ограниченной многогранным углом, и максимизирующий угол до этого многогранного угла.

- *Правильную нормаль* в точке P на кусочно-линейной поверхности S, составленной из плоских граней f, будем обозначать $\mathbf{N}_o(P, S)$ и понимать под ней нормированный вектор сонаправленный с:
  - нормалью грани f, если P лежит внутри грани f;
  - биссектрисой двугранного угла f_1 и f_2, если P лежит внутри ребра e, разделяющего грани f_1 и f_2;
  - обобщённой биссектрисой многогранного угла, образованного углами граней из S, разделяющими точку P, если P — узел поверхности S.

3.4 Установка линий крепления створок в модели

Следуя физическому смыслу i-ая и j-ая ASL должны быть отделены друг от друга на расстояние не менее $H^{ij} = (H^i + H^j)/2$, где H^i — толщина i-ой створки. Врачу сложно следить за выполнением этого требования при расстановке точек линии шва на аорте, поэтому необходима дополнительная коррекция положения линии шва на аорте. В данной работе предложен Алгоритм 1 (Приложение B), основанный на раздвигании слишком близких пар примитивов, принадлежащих разным ASL (Рисунок 3.5). Чтобы обеспечить правильное разрешение возможных пересечений алгоритм сначала раздвигает пересекающиеся примитивы, а уже потом близкие. Перемещение примитивов производится вращением вокруг оси $\mathbf{l}_O$, учитывая порядок расположения ASL на поверхности аорты.



(**a**) (**b**)

Рисунок 3.5 — Коррекция положения ASL: (**a**) линии ASL установленные хирургом; (**b**) линии ASL после применения коррекции Алгоритмом 1 (Приложение B)

Следующая техническая проблема состоит в построении кривых, отделённых от поверхности аорты на расстояние порядка $H/2$ и примерно параллельных кривым ASL. При достаточно малом H можно было бы сдвинуть узлы ASL вдоль аппроксимаций нормалей, однако в общем случае это не даёт гарантии того, что полученная таким образом кривая будет отделена от пов-ти аорты. Для решения данной проблемы предлагается использовать двухэтапный Алгоритм 2 (Приложение B). На первом этапе все узлы кривых ASL $\mathbf{r}_{asl}^{(0)}$ сдвигаются вдоль нормали пов-ти S_a на одинаковое достаточно малое расстояние h_0, приводя к кривой $\mathbf{r}_{asl}^{(1)}$ отделённой от пов-ти S_a. Затем, на втором этапе решается контактная задача равновесия, где кривая $\mathbf{r}_{asl}$ рассматривается как свободно изгибающаяся и не сопротивляющаяся кручению деформируемая нить, пружинно-прикреплённая к положению $\mathbf{r}_{asl}^{(0)}$ и наделённая по отношению к пов-ти S_a контактной толщиной $\hat{d} = k_2 H/2$ и минимально допустимым расстоянием ξ, возрастающим в ходе расчётов до $\xi = H/2$.

Наконец, после применения Алгоритмов 1 и 2 (Приложение B) построены ломаные $\mathbf{r}_{asl}^{(0)}(t)$ и $\mathbf{r}_{asl}^{(1)}(t)$ с общим параметром $t \in [0, 1]$. Пусть $\mathrm{norm}(\mathbf{x}) = \mathbf{x}/|\mathbf{x}|$. Введём почти всюду на $t \in [0, 1]$ векторное поле направлений «выстилания» створок

$$\mathbf{b}(t) = \mathrm{norm}\left(\frac{d\mathbf{r}_{asl}^{(0)}}{dt} \times \mathbf{N}_o\left(\mathbf{r}_{asl}^{(0)}(t), S_a\right)\right). \tag{3.1}$$

Теперь можно приступить к формулировке упомянутых в разделе 3.2 граничных условий пришиваемого края. Кривую $\mathbf{r}_{asl}^{(1)}$ далее будем обозначать как $\mathbf{r}_{asl}$.

Для работы с кривыми $\mathbf{r}(t) : [0, T] \to \mathbb{R}^3$ введём следующую нотацию:

- $len_{\mathbf{r}}(t) = \int_0^t ||\frac{d\mathbf{r}(t')}{dt'}||dt'$ — функция длины кривой $\mathbf{r}$,
- $(\varphi_{natural} \circ \mathbf{r})(s) = \mathbf{r}(len_{\mathbf{r}}^{-1}(s))$ — естественная параметризация кривой.

Граница Γ_{csl} представляет собой ранее введённую кривую $\mathbf{r}_{csl} : [0, 1] \to \mathbb{R}^3$. Таким образом, формулировка граничного условия закрепления сводится к построению отображения с кривой $\mathbf{r}_{csl}$ на кривую $\mathbf{r}_{asl}$. Для $\overline{\mathbf{r}}_{asl}(s) = (\varphi_{natural} \circ \mathbf{r}_{asl})$ и $\overline{\mathbf{r}}_{csl}(s) = (\varphi_{natural} \circ \mathbf{r}_{csl})$ отображение можно представить как

$$\varphi : \overline{\mathbf{r}}_{csl}(s) \to \overline{\mathbf{r}}_{asl}(\gamma(s)), \tag{3.2}$$

где $\gamma : [0, l_c] \to [0, l_a]$ — некоторая строго монотонно возрастающая от нуля функция, а l_c и l_a — длины кривых $\mathbf{r}_{csl}$ и $\mathbf{r}_{asl}$ соответственно.

Введём следующие обозначения:

– функция $\chi(s) : [0, l_c] \to \mathbb{R}_+$ искажения длины кривой при отображении

$$\chi(s) = \frac{|d\bar{\mathbf{r}}_{asl}(\gamma(s))|}{|d\bar{\mathbf{r}}_{csl}(s)|} = \frac{|\frac{d\bar{\mathbf{r}}_{asl}}{d\gamma}\frac{d\gamma}{ds}|}{|\frac{d\bar{\mathbf{r}}_{csl}}{ds}|} = \frac{d\gamma}{ds},$$

– нормализованная функция $\rho(\theta) : [0, 1] \to \mathbb{R}_+$ искажения длины

$$\rho(\theta) = \frac{l_c}{l_a}\chi(\theta l_c) = J_{sl}^{-1} \cdot \chi(\theta l_c),$$

$$\int_0^1 \rho(\theta) d\theta = \int_0^1 \frac{l_c}{l_a}\chi(\theta l_c) d\theta = \frac{1}{l_a}\int_0^{l_c} \chi(s) ds = \frac{\gamma(l_c) - \gamma(0)}{l_a} = \frac{l_a - 0}{l_a} = 1,$$

причём $\rho(\theta)$ связано с исходным отображением:

$$\gamma(s) = l_a \int\limits_0^{s/l_c} \rho(\theta)\ d\theta, \tag{3.3}$$

– касательное направление $\tau_a(s) : [0, l_a] \to \mathbb{R}^3$ к кривой ASL

$$\tau_a(s) = \mathrm{norm}\left(\frac{d\bar{\mathbf{r}}_{asl}}{ds}\right). \tag{3.4}$$

Согласно протоколу хирургической неокуспидизации (см. раздел 3.1) соотношение расстояний между стежками на аорте и створке составляет $\alpha_{sl}^m = 3$ вблизи центра линии закрепления и $\alpha_{sl}^e = 1 < \alpha_{sl}^m$ у концов этой линии и меняется так, что нормализованная функция искажения имеет вид

$$\rho(\theta) = \begin{cases} c_1,\ |\theta - 0.5| \geqslant c_3 \\ c_2,\ \text{иначе} \end{cases}$$

для некоторых c_1, c_2 и c_3. Будем предполагать, что для длин выполняется $\frac{1}{\alpha_{sl}^m} < J_{sl} = \frac{l_a}{l_c} < \frac{1}{\alpha_{sl}^e}$, иначе створку считаем непригодной для пациента, т.к. она слишком большая или малая для проведения операции.

Используя $\chi(0) = \chi(l_c) = 1/\alpha_{sl}^e$, $\chi(\frac{1}{2}l_c) = 1/\alpha_{sl}^m$ и $\int_0^1 \rho(\theta) d\theta = 1$ можно определить неизвестные коэффициенты

$$\rho(\theta) = \frac{1}{J_{sl}} \cdot \begin{cases} \frac{1}{\alpha_{sl}^e},\ |\theta - 0.5| \geqslant \frac{\alpha_{sl}^m(1 - J_{sl}\alpha_{sl}^e)}{2(\alpha_{sl}^m - \alpha_{sl}^e)}, \\ \frac{1}{\alpha_{sl}^m},\ \text{иначе}. \end{cases} \tag{3.5}$$

Теперь граничные условия в точке $\mathbf{X} \in \Gamma_{csl}$ можно выписать явно

$$\begin{aligned} &\mathbf{x}(\mathbf{X}) = \bar{\mathbf{r}}_{asl}(s_a(\mathbf{X})), \\ &\mathbf{x'}_n(\mathbf{X}) = \zeta(s_a) := \mathrm{orth}\left(\bar{\mathbf{b}}(s_a), \tau_a(s_a)\right), \end{aligned} \tag{3.6}$$

где $s_a(\mathbf{X}) = \gamma(s_c(\mathbf{X}))$, $s_c(\mathbf{X}) = len_{\mathbf{r}_{csl}}(\mathbf{X})$ $\overline{\mathbf{b}}(s) = \mathbf{b}(len^{-1}_{\mathbf{r}_{csl}}(s))$, γ и τ_a заданы уравнениями (3.3)-(3.5), $\mathbf{b}$ определено в (3.1), а оператор $\mathrm{orth}(\cdot,\cdot)$ здесь и далее $\mathrm{orth}(\mathbf{a},\mathbf{b}) := \mathrm{norm}\left(\mathbf{a} - \frac{(\mathbf{a}\cdot\mathbf{b})}{(\mathbf{b}\cdot\mathbf{b})}\mathbf{b}\right)$.

На дискретном уровне граничные условия приводятся к виду:

1. для любого узла n на $\overline{\mathbf{r}}_{csl}$ с естественным параметром s^n_c

$$\mathbf{x}^n = \overline{\mathbf{r}}_{asl}(s^n_a),\ s^n_a = \gamma(s^n_c), \tag{3.7}$$

2. для любого ребра e на $\overline{\mathbf{r}}_{csl}$ с узлами n_1 и n_2 на концах, которые задаются естественными параметрами $s^{n_1}_c$, $s^{n_2}_c$ определяется

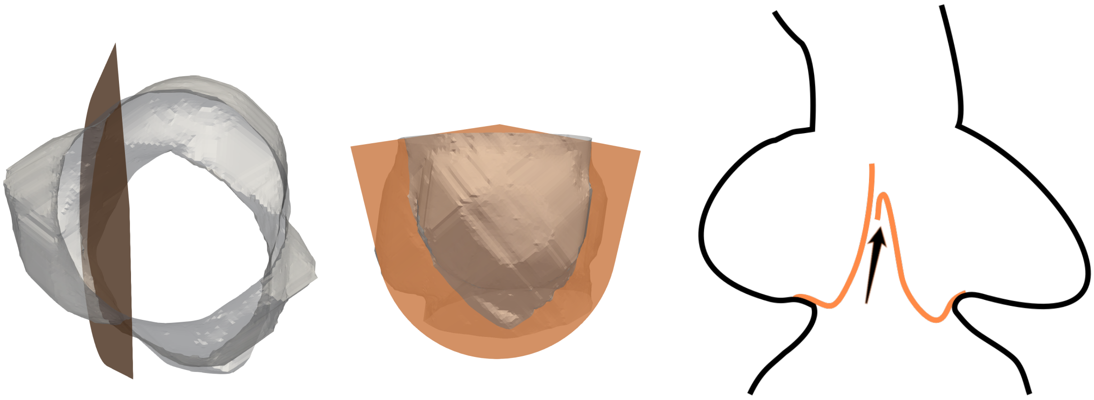
$$\varphi^e = \mathrm{orth}\left(\frac{\int_{s^{n_1}_a}^{s^{n_2}_a} \zeta(s_a)\, ds_a}{s^{n_2}_a - s^{n_1}_a}, \overline{\mathbf{r}}_{asl}(s^{n_2}_a) - \overline{\mathbf{r}}_{asl}(s^{n_1}_a)\right),\ s^{n_\alpha}_a = \gamma(s^{n_\alpha}_c). \tag{3.8}$$

3.5 Виртуальное размещение створок внутри корня аорты

Везде в этом разделе и далее будем считать, что геометрические объекты ($P_{i,0}$, $P_{i,1}$, A_i и т.д.), введённые относительно кривой ASL в разделе 3.3, вычисляются относительно сдвинутой кривой $\mathbf{r}_{asl}$, полученной с помощью алгоритмов предыдущего раздела.

Запуск расчётов возможен только с такого стартового положения, в котором створки находятся внутри аорты, не пересекаются между собой или с аортой и удовлетворяют граничным условиям закрепления. Главная сложность состоит в том, что линейные размеры реально вшиваемых створок нередко больше, чем диаметр корня аорты (Рисунок 3.6 **а**). Это означает, что даже одну створку нельзя разместить внутри корня без значительной деформации.

Линии крепления створок проводятся вблизи границ анатомических выпуклостей – синусов Вальсальвы, что позволяет разместить достаточно маленькие створки внутри аорты, просто расположив их вблизи центров L^i отрезков, соединяющих точки комиссуры, в плоскости проходящей через соответственные точки комиссур и параллельной нормали $\mathbf{n}$ к плоскости M. Кроме того, рассмотрение реальных геометрий корня аорты вместе с линиями ASL приводит к важному наблюдению: $\mathbf{r}^i_{asl}$ обычно «видна» из точки L^i или по крайней мере из центра O комиссурального треугольника. Говоря из точки «видна» кривая здесь имеется ввиду, что эту точку можно соединить с каждой точкой кривой отрезком, причём не возникнет отрезков, пересекающихся между собой или с аортой.



(**a**) (**b**)

Рисунок 3.6 — (**a**) сравнение размера аорты и неостворки; (**b**) пролапс АК

Из представленных наблюдений следует, что разместить достаточно маленькие створки внутри корня аорты не сложно:

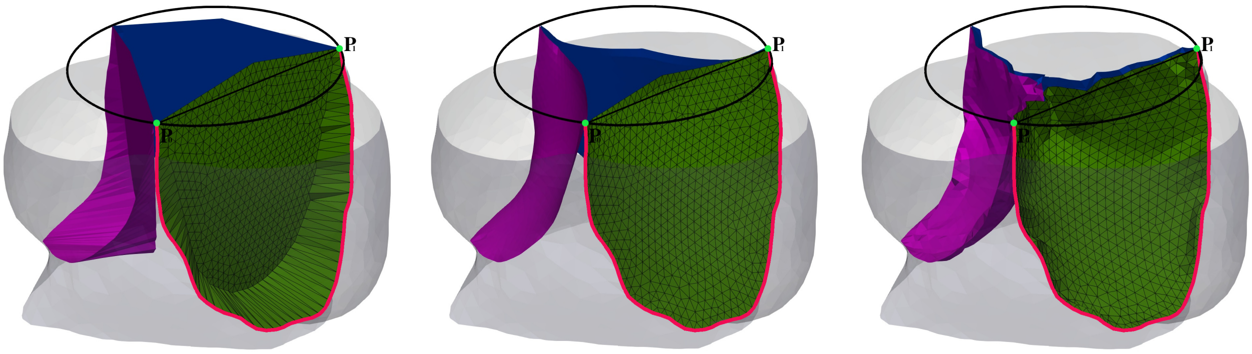
1) i-ую створку расположить в окрестности L^i,
2) перенести узлы границы Γ_{csl} створки на кривую $\mathbf{r}_{asl}$ согласно (3.7) и
3) релаксировать деформации.

Релаксация необходима, поскольку встречаются неподатливые материалы, для которых ψ быстро растёт для больших, но конечных деформаций, что не позволяет использовать их для расчётов (например, для материала Гента $\psi \to \infty$ при $I_1 \to J_m$). Релаксацию можно произвести с помощью ряда расчётов с изменяющимся от 1 до 0 параметром α со смешанным потенциалом

$$\psi_\alpha(\mathbb{C}^S) = \alpha\psi_{NH}(\mathbb{C}^S) + \psi(\mathbb{I}^S + (1-\alpha)[\mathbb{C}^S - \mathbb{I}^S]), \tag{3.9}$$

где $\psi_{NH} = \frac{E}{6}(I_1^S + (J^S)^{-2} - 3)$ с $E \sim 1000$ кПа — материал Нео-Гука, являющийся податливым, и ψ — целевая модель материала створки. Если перенос узлов границы в пункте 2 приводит к возникновению пересечений, можно, пока описанная проблема не исчезнет, решать задачи равновесия с податливым ψ_{NH}, используя всё более жёсткие пружины, притягивающие узлы границы Γ_{csl} к соответствующим узлам на кривой $\mathbf{r}_{asl}$.

Описанный подход удаётся расширить и на случай крупных створок (Рисунок 3.7) если уменьшить створку (Алгоритм 3, Приложение В) во столько раз s, чтобы она стала «достаточно» малой, и объявить данное состояние начальным ненагруженным (Алгоритм 4-5, Приложение В). Чтобы вернуть шаблонам истинный размер остаётся лишь после пунктов 1-2 размещения и релаксации с $\alpha = 1$ провести итерации «расправления» (Алгоритм 6, Приложение В), поочерёдно решая задачи равновесия с s-масштабированным ненагруженным состоянием, меняя s от текущего значения до 1.



(**a**) (**b**) (**c**)

Рисунок 3.7 — Виртуальное размещение створок внутри аорты: (**a**) размещение плоских створок и перенос границы Γ_{csl} на $\mathbf{r}_{asl}$ (Алгоритм 3-5, Приложение В), (**b**) начало и (**c**) конец «расправления» и релаксации шаблонов (Алгоритм 6, Приложение В)

Задача равновесия для крупных створок может иметь несколько решений. В частности, у створок может возникнуть нежелательная конфигурация с пролапсом (Рисунок 3.6 **b**) или они могут выгнуться не навстречу друг к другу. При реальном пришивании створок хирург корректирует их взаимное положение, устраняя данные конфигурации Чтобы избежать этих явлений при виртуальном размещении будем также прикладывать на створки диастолическое давление P_{dias} и введём искусственные силы $\mathbf{F}_v^{e,f-b}$, препятствующие проседанию свободной границы в направлении против тока крови.

Обозначим начальное плоское ненагруженное положение створки $\mathbf{Q}^*$ и введём на ней ДСК $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2\}$, где $\mathbf{e}_1 \uparrow\uparrow \overrightarrow{N_0 N_1}$ (Рисунок 3.4 **b**). Пусть $\mathbf{Q}_v^*$ и $\mathbf{Q}_v$ — начальное и актуальное положения узла v, лежащего на Γ_{free}. Введём S^0 и L_{free} — полная площадь створки и длина свободного края в конфигурации $\mathbf{Q}^*$, $\sum_{e \in \mathcal{E}(v) \cap \Gamma_{free}} l_{free}^e$ — сумма длин рёбер границы Γ_{free}, разделяющих узел v в конфигурации $\mathbf{Q}^*$.

Работа силы $\mathbf{F}_v^{e,f-b}$ на виртуальных перемещениях

$$\delta A^{f-b} = \sum_{v \in \mathcal{V}(\Omega^h) \cap \Gamma_{free}} \mathbf{F}_v^{e,f-b}(\mathbf{Q}) \cdot \delta \mathbf{Q}_v,$$

а сама сила вычисляется как

$$\mathbf{F}_v^{e,f-b} = \eta_1 S^0 \frac{\sum_{e\in\mathcal{E}(v)\cap\Gamma_{free}} l^e_{free}}{2L_{free}} f((\mathbf{Q}_v - P_0)\cdot \mathbf{n}^{f-b} - (\mathbf{Q}^*_v - N_0)\cdot \mathbf{e_2}),$$
$$f(d) = \left[\max\left(-\frac{2(d+\eta_3)}{\eta_2}, 0\right)\right]^2 \mathbf{n}^{f-b},\ \mathbf{n}^{f-b} = \mathrm{orth}(\mathbf{n}, \mathbf{a}_P), \tag{3.10}$$

где $\eta_1 \sim 10\ P_{dias}$, $\eta_2 \sim 0.02\ |\mathbf{a}_P|$, $\eta_3 \sim 0$ мм — подбираемые коэффициенты, влияющие на величину силы и глубину проседания свободного края створки.

3.6 Характеристики коаптации

После отыскания закрытого состояния АК необходимо оценить целевые характеристики, определяющие состоятельность клапана. Принятые в медицинской литературе [15; 34; 74] формулировки параметров коаптации допускают однозначную интерпретацию только для идеализированной геометрии АК. В данном разделе приводятся предложенные автором геометрические формулировки параметров коаптации, которые однозначно рассчитываются на основе реальной геометрии аортального клапана, неостворок и линий крепления.

Зона коаптации створки i со створкой j — это часть створки i, которая находится в непосредственном контакте со створкой j. Поскольку каждая створка представлена в модели своей срединной поверхностью и толщиной, *зоной коаптации* створки i со створкой j будем называть часть $\tilde{Z}^{ij}$ срединной пов-ти S^i_c, которая находится на удалении не более чем $H^{ij}_\delta = H^{ij} + \delta = (H^i + H^j)/2 + \delta$ от срединной пов-ти j-ой створки S^j_c, т.е.

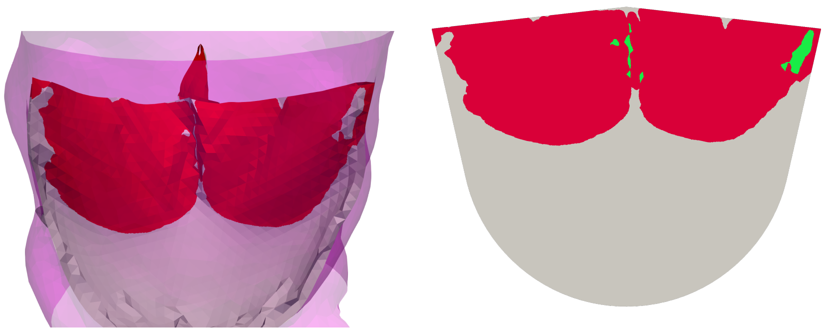
$$\tilde{Z}^{ij} = \{\mathbf{x} \in S^i_c : \mathrm{dist}(\mathbf{x}, S^j_c) \leqslant H^{ij}_\delta\}.$$

Здесь δ — это корректирующий параметр порядка шага сетки h_{mesh}, который вводится чтобы ослабить влияние кусочно-линейного представления срединных поверхностей в случае $h_{mesh} > H^{ij}$. Если створки соприкасаются не плотно, в зонах коаптации могут возникать «дыры» вроде таких, что показаны на Рисунке 3.8. Во врачебной практике, однако, обычно смотрят главным образом на нижний край зоны коаптации, игнорируя возможные «дыры». Чтобы это учесть, введём понятие *заполненной зоны коаптации*

$$Z^{ij} = \mathrm{Filled}(S^i_c, \tilde{Z}^{ij}),$$

где $\mathrm{Filled}(A, B) := B \cup \{\mathbf{x} \in A : \exists \text{односвязная}\, U \subset A, \mathbf{x} \in U \text{ и } \partial U \in B\}$. Теперь определим *полную зону коаптации створки* $Z^i := \mathrm{Filled}(S_c^i, \tilde{Z}^{i,(i+1)\%3} \cup \tilde{Z}^{i,(i+2)\%3})$, *площадь коаптации створки* $S_{coapt}^i = \mathrm{area}(Z^i)$ и *центральную зону коаптации створки* $Z_c^i := Z^{i,(i+1)\%3} \cap Z^{i,(i+2)\%3}$.

Характеристики коаптации определяются относительно направления «вверх» $\mathbf{l}_a$, вдоль тока крови от левого желудочка в аорту. В качестве такого вектора мы выбираем $\mathbf{l}_a = \mathbf{n}$ — нормаль к плоскости комиссур. *Точка надира* R^i для кривой $\mathbf{r}_{asl}^i$ — это самая нижняя точка этой линии относительно направления $\mathbf{n}_a$: $R^i = \arg\min\limits_{\mathbf{x} \in \mathrm{ASL}_i} (\mathbf{x}, \mathbf{l}_a)$. Точки надира (для трёхстворчатого клапана) образуют плоскость K с нормалью $\mathbf{n}_K$ такой, что $(\mathbf{n}_K, \mathbf{l}_a) > 0$.



(**a**) (**b**)

Рисунок 3.8 — Зона коаптации створки $\tilde{Z}^i = \tilde{Z}^{i,(i+1)\%3} \cup \tilde{Z}^{i,(i+2)\%3}$ (**a**) в актуальной конфигурации, (**b**) в отображении на плоскую конфигурацию створки, где зелёным обозначены «дыры» $Z^i \setminus \tilde{Z}^i$

Итак, выпишем модельные формулировки характеристик коаптации, где для тривиального случая пустых зон коаптации Z^{ij} или Z_c^i соответствующие характеристики положим нулевыми (также смотрите Рисунок 3.9):

– *Центральная длина коаптации* $L_{centr}^i = \max\limits_{\mathbf{x} \in Z_c^i} (\mathbf{x}, \mathbf{l}_a) - \min\limits_{\mathbf{x} \in Z_c^i} (\mathbf{x}, \mathbf{l}_a)$;

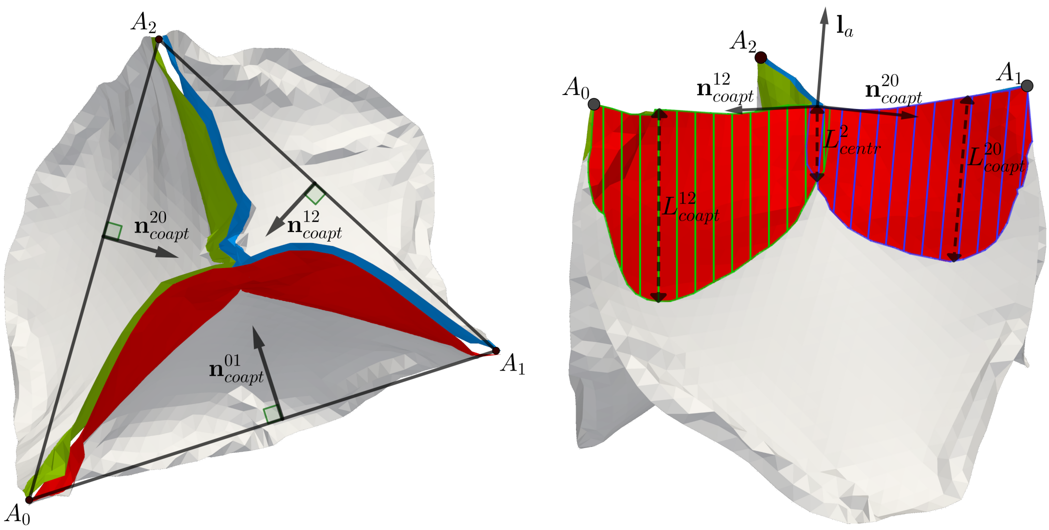
– *Эффективная высота* $H_{eff}^i = \max\limits_{\mathbf{x} \in Z_c^i} (\mathbf{x} - R^i, \mathbf{n}_K)$;

– *Боковая длина коаптации* $L_{coapt}^{ij} = \max\limits_{\substack{\mathbf{x},\mathbf{y} \in Z^{ij} \\ (\mathbf{x}-\mathbf{y}) \perp \mathbf{n}_{coapt}^{ij}}} (\mathbf{x} - \mathbf{y}, \mathbf{l}_a)$, $\mathbf{n}_{coapt}^{ij} = \mathbf{l}_a \times \overrightarrow{A_i A_j}$,

причём выделяют *правую* $L_{coapt,r}^i = L_{coapt}^{i,(i+1)\%3}$ и *левую* $L_{coapt,l}^i = L_{coapt}^{i,(i+2)\%3}$.

Также важным параметром является *биллоуинг* (провисание) створки — это расстояние от K до самой нижней относительно $\mathbf{n}_K$ точки створки:

$$H_{bill}^i = -\min_{\mathbf{x} \in S_c^i} (\mathbf{x} - R^i, \mathbf{n}_K).$$



(**a**) (**b**)

Рисунок 3.9 — Вычисление длин коаптации: (**a**) вспомогательные направления $\mathbf{n}^{ij}_{coapt}$, (**b**) боковая и центральная длины коаптации

Для общей характеристики закрытого состояния клапана как целого удобно использовать интегральные характеристики:

– *средняя площадь коаптации* $S_{coapt} = \frac{1}{3}\sum\limits_{i=0}^{i=2} S^i_{coapt}$,

– *средняя центральная коаптация* $L_{centr} = \frac{1}{3}\sum\limits_{i=0}^{i=2} L^i_{centr}$,

– *общая эффективная высота* $H_{eff} = \max\limits_i (H^i_{eff})$,

– *общая боковая длина коаптации* $L_{coapt} = \max\limits_i \left(\max(L^i_{coapt,r}, L^i_{coapt,l})\right)$,

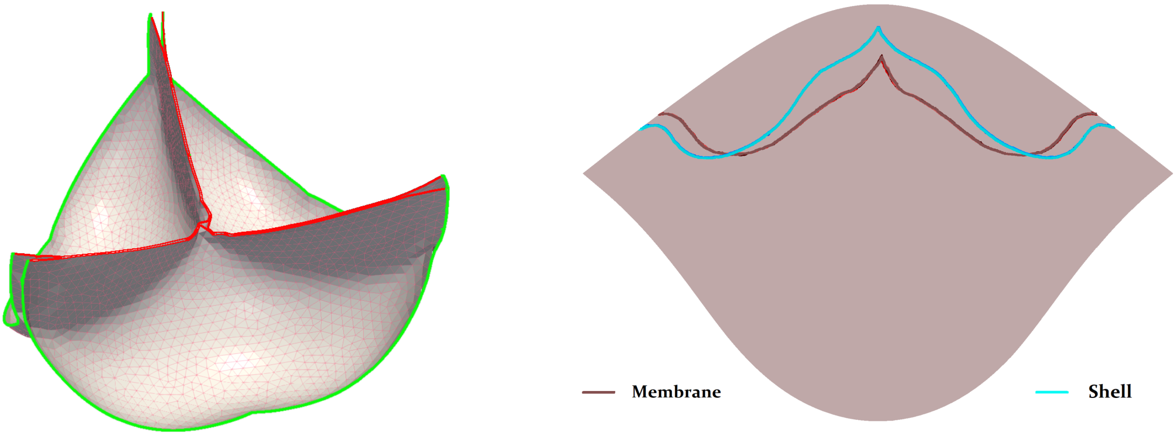
– *общий биллоуинг* $H_{bill} = \max\limits_i (H^i_{bill})$.

В проводимых расчётах мы вычисляем $\tilde{Z}^{ij}$ приближённо, используя тесселяцию сетки S^i_c. Алгоритмы вычисления характеристик коаптации были реализованы с помощью пакета CGAL [26].

3.7 О принятых технических решениях в процессе развития модели

В данном разделе пойдёт речь о том, как модель формулировалась и изменялась в процессе исследований. Обычно отрицательные результаты не принято указывать, однако здесь будет рассказано в том числе и о неудачных подходах, которые были опробованы.

Модель упругости. Изначально в модели не учитывалась изгибная жёсткость, т.е. использовалась мембранная модель упругости и даже модель масс и пружин (MSM) [138]. Сравнение (Таблица 1) численных результатов по закрытию идеализированного клапана (Рисунок 3.10 **a**) с такими моделями АК уже показывает неплохое соответствие с опубликованными данными FSI расчётов [97]. Хотя аналог боковой высоты коаптации h_{C-C} не совпал с референтными значениями, но такой же результат наблюдался для «сухой» модели и в [96]. Как отмечено в работе [148, раздел 4.1] это несоответствие вызвано разницей в учёте давления на створки.



(**a**) (**b**)

Рисунок 3.10 — (**a**) Идеализированный трёхстворчатый АК [97], (**b**) изменение профиля коаптации при учёте изгибной жёсткости в одном из сценариев из [137]

Модель	h_E, мм	h_{C-C}, мм	h_{avr}, мм	NCCA, %
FSI, лин. упруг. [97]	10.5	1.5	2.7	21
MSM [138, (2.3)]	10.8	3.8	3.3	25
SVK, мемб. (1.7)	10.8	3.1	2.9	24
NHK, мемб. (1.9)	10.4	3.0	2.5	21
GENT, мемб. (1.11)	10.8	3.4	3.1	24

Таблица 1 — Сравнение эффективной высоты h_E и аналога боковой длины h_{C-C} коаптации, отношения площади коаптации створки к длине её свободной границы h_{avr} и нормализованной площади коаптации NCCA для «сухих» моделей с данными FSI расчётов [97]

Дальнейшее исследование на идеализированных геометриях корней аорты показало [137; 165]: введение в рассматриваемую модель изгибной жёсткости и замена шарнирного крепления створки на полное закрепление может оказывать значительное влияние на общую конфигурацию створки, её выпуклость и параметры коаптации, особенно если материал жёсткий (так на Рисунок 3.10 **b** площадь коаптации изменялась на 16%). Это можно объяснить тем, что при приближении к соприкосновению створки испытывают значительный изгиб и потому сопротивление этому изгибу может повлиять на ширину зон коаптации.

Модель контактного взаимодействия. Было рассмотрено несколько моделей контактного взаимодействия.

Изначально использовался подход, предложенный в работе [116], состоящий в моделировании отталкивания с помощью эмпирических сил, отталкивающих близкие пары узел-грань. Данные силы зависели от результирующих сил, приложенных на примитивы и не имели барьерный характер (см. [138, (2.2)]). Близость пар оценивалась в конкретной конфигурации без учета деформаций между итерациями, т.е. имел место DCD (discrete collision detection). Метод не давал гарантий сохранения конфигурации без пересечений. Чтобы избежать пересечений требовалось проводить расчёты явными схемами с маленькими шагами по времени (или малыми перемещениями для статических постановок). Хотя модель на грубых сетках требовала мало ресурсов, с измельчением сеток её сложность быстро росла, как и вероятность возникновения пересечений. Это не позволяло автоматизировать процесс счёта, требуя постоянной ручной проверки корректности получаемых решений. Далее модель была дополнена введением импульсов, мгновенно раздвигающих близкие примитивы, словно они испытали абсолютно неупругое столкновение. Это избавило модель от некоторых колебаний в области контактов, но не избавило от пересечений.

Следующим шагом стал переход на робастную контактную модель, предложенную в работе [19]. Здесь также сочеталось использование контактных сил и раздвигающих неупругих импульсов, но в дополнение вводилась процедура коррекции решения, устраняющая все пересечения, возникающие между итерациями. Теперь столкновения отыскивались не только в конфигурациях каждой конкретной итерации, но и на линейных перемещениях между итерациями, т.е. использовался CCD (continous collision detection), основанный на рассмотрении корней кубического полинома. Вычислительная стоимость счёта многократно возросла и больше не позволяла использовать явные схемы, но зато пересечения теперь не должны были возникать. При использовании неявных схем возникла другая проблема: процедура коррекции решения для больших перемещений может значительно менять конфигурацию, в результате зависимость решения от начальной геометрии створок оказывается недостаточно гладкой. Дело в том, что после малого изменения геометрии створок при существовании нескольких состояний равновесия АК решение может сойтись к другому состоянию равновесия из-за больших деформаций в ходе коррекций. Это усложняет процесс оптимизации формы створок. Также коррекция может сдвигать решение от равновесного состояния, что не всегда допустимо для стационарных задач. Кроме того, на практике оказалось, что предложенный алгоритм CCD недостаточно надёжен и для некоторых конфигураций (например, при сближении параллельных рёбер) может упускать пересечение.

Наконец, была реализована модель контактного взаимодействия, предложенная в работах [68; 88] и описанная в разделе 1.7. Теперь контакты моделируются барьерными силами, действующими между парами узел-узел, узел-ребро, узел-грань, ребро-ребро. Новый подход использует ACCD (additive CCD) [87, Алгортим 1], который основан на простой оценке максимального возможного сближения примитивов при заданных скоростях движения их вершин, а также применяет метод Ньютона с барьерами [88, Алгоритм 1] и потому оказывается очень надёжным. Силы отталкивания в текущей модели являются непрерывно-дифференциируемыми и кусочно дважды непрерывно-дифференциируемыми функциями относительно актуальной конфигурации створок, что обеспечивает хорошую сходимость метода Ньютона. Сама модель не требует корректирующих процедур и задаётся как аппроксимация некоторой непрерывной модели контактных взаимодействий, а не только на дискретном уровне. Это позволяет организовать надёжные автоматические расчёты закрытия клапана, пригодные для использования совместно с процессом оптимизации.

Автоматическое виртуальное размещение створок. В процессе развития модели закрытия АК долгое время не удавалось построить надёжный автоматический алгоритм размещения створок внутри корня аорты. При первых попытках расчётов с реальной геометрией [33; 138] использовался ручной алгоритм размещения: створки уменьшались и размещались схожим с Алгоритмом 3 (Приложение В) образом, а затем запускался процесс «расправления» створок, где скорость этого расправления регулировалась в интерактивном режиме наблюдателем так, чтобы избежать пересечений (процесс деформации в ходе расчётов отрисовывался в оконном приложении). Ввиду изначального отсутствия надёжного метода учёта контактного взаимодействия, предпринимались попытки разработать алгоритм независимого размещения створок АК в заранее определённые непересекающиеся части полости аорты. Соответствующий алгоритм размещения удалось создать в предположении, что форма аорты близка к цилиндрической [89]. Данный подход можно пытаться расширять на случай реальной аорты, но это приводит к ряду технических сложностей. После реализации надёжного учёта контактов оказалось достаточно использовать алгоритмы, описанные в данной главе.

Чтобы продемонстрировать робастность Алгоритмов 5-6 (Приложение B), был проведён ряд экспериментов. Были рассмотрены геометрии корней аорты 21-ой здоровой свиньи, полученные в ходе исследования [76], а также 6-ти пациентов с патологиями АК. Для всех геометрий кардиохирургом была проведена линия шва ASL. Затем было произведено размещение створок. Размещались створки, параметризованные как на Рисунке 3.4 **c**, где $H_i = 11$ мм, $H_f = 2.2$ мм, $R_s = 0.525 \cdot L_f - 3.6$ мм, размер L_f^i выбирался в соответствии с геометрическим исследованием [89] как $L_f^i = 1.16 \cdot a_i$, а толщина створок была равна $H = 0.5$ мм. Во всех случаях алгоритмы размещения завершились успешно.

Геометрический анализ показал, что для всех свиных и 5 из 6 человеческих корней аорты было выполнено предположение о том, что ASL «видна» из точки L. Это подтверждает наблюдение, приведённое в разделе 3.5, и, более того, для этих корней аорты удалось при работе Алгоритма 5 (Приложение B) обойтись без решения задачи равновесия (строки алгоритма 13-22). Подробное рассмотрение выделяющегося корня аорты показало, что ASL правой коронарной створки (ПКС) не была «видна» даже из центра коммисурального треугольника O. Вероятно, причина такой геометрии корня состоит в том, что в процессе сегментации из просвета аорты не удалось полностью удалить кальций. При выборе $L_f^{j_{RCC}} < 0.8 \cdot a_{j_{RCC}}$, где j_{RCC} — номер ПКС, для выделяющегося корня аорты, строки 13-22 Алгоритма 5 (Приложение B) всё таки были исполнены, и, хотя это увеличило общее время работы, разместить створки удалось и в этом случае.

Это говорит о высокой робастности описанных алгоритмов размещения.

Критерий останова расчётов. Задача закрытия клапана по своей природе является задачей об отыскании равновесия и потому естественно было бы пытаться решать задачу как статическую или квази-статическую, проводя расчёты до достаточного падения нормы невязки $||\mathbf{R}^l|| < \varepsilon_{rel}||\mathbf{R}^0||$. Данный критерий хорошо работает на задачах с идеализированной геометрией [58; 86; 137] до тех пор, пока створки не слишком велики. Однако в случае реальных геометрий в присутствии сложных контактных взаимодействий нет гарантии, что устойчивое состояние равновесия действительно существует.

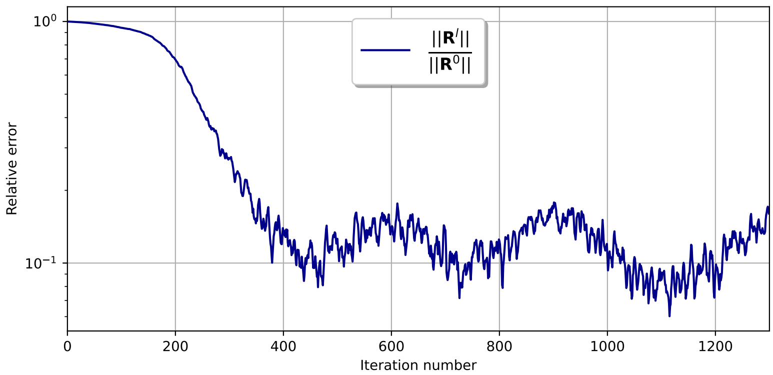


Рисунок 3.11 — Изменение относительной невязки $\mathbf{R}$ в процессе итераций метода Ньютона при решении статической задачи о закрытии неоклапана на одном из человеческих корней аорты

На практике при проведении расчётов на реальных корнях аорты редко удаётся достигнуть сходимости: клапан закрывается, но области соприкосновения створок продолжают некоторое периодическое движение, «отшатываясь» от центрального положения (как в динамической, так и в квазистатической постановке, в которой скорость на каждой итерации принимается нулевой). Невязка задачи при этом стагнирует как на Рисунке 3.11. Хотя зона коаптации при описанных «шатаниях» меняется слабо, сформулировать критерий останова на основе её установления также не удаётся, из-за проблем с закрытием, а следовательно и установлением закрытого состояния, в случае маленьких створок. В результате было принято решение, использовать динамическую постановку и в качестве критерия останова взять известное из клинических исследований время, достаточное для закрытия АК.

3.8 Первые шаги к валидации

Лучший способ валидировать модель — показать, что она правильно воспроизводит результаты натурного эксперимента. Как и с другими моделями биомеханики, для модели закрытия АК особая сложность состоит в том, чтобы найти или поставить натурные эксперименты, которые с одной стороны демонстрируют ключевые характеристики задачи, а с другой предоставляют исчерпывающее описание входных данных и физических параметров изучаемых объектов, чтобы эти эксперименты можно было воспроизвести в модели.

Большая работа в построении и проведении натурных экспериментов по закрытию АК была проведена П.А. Каравайкиным. Им была разработана методика натурного эксперимента с использованием свиного сердца для оценки замыкательной функции аортального неоклапана после неокуспидизации, а также произведены замеры ряда параметров замыкательной функции неоклапана в ходе исследований. Натурный эксперимент удалось успешно провести на 20 сердцах домашних свиней. В процессе экспериментов, следуя протоколу Озаки при выборе размеров неостворок и при их креплении, производилась неокуспидизация клапана, реконструированного из обработанного в глутаральдегиде свиного перикарда. С целью последующего построения 3D модели корня аорты выполнялась мультиспиральная компьютерная томография с контрастным усилением. Для имитиации диастолической фазы при томографировании корень аорты заполнялся контрастным веществом до давления 80-90 мм рт. ст. Для снятия замеров параметров коаптации АК в условиях имитирующих диастолу желудочков корень аорты герметизировался и заполнялся раствором желатина до давления в 80-90 мм рт. ст. После застудневания желатина маркером на неостворках отмечались границы зон коаптации, а также оценивалась эффективная высота неостворок и глубина их провисания (биллоуинг). Затем выполнялась фотосъёмка расправленных неостворок рядом с калиброванной измерительной лентой для дальнейшей цифровой оценки геометрических параметров зоны коаптации. Подробное описание методики экспериментов и таблицы с результатами замеров представлены в диссертации Каравайкина П.А. [181] и в оригинальной статье [76].

Также П.А. Каравайкиным было проведено сравнение полученных значений параметров состоятельности АК в натурном эксперименте с результатами численного моделирования, проведённого автором настоящей работы. При моделировании использовалась мембранная модель упругости (без изгибной жёсткости), материал описывался как неогуковский с модулем упругости $\mu = E/3 = 1000$ кПа, толщина створки полагалась равной $H = 0.2$ мм и прикладываемое на створки давление равнялось $P = 90$ мм рт. ст. Таблицы со значениями всех измеренных параметров во всех экспериментах приведены в диссертации Каравайкина П.А. [181]. Здесь приведём лишь Таблицу 2 с результатами статистической обработки этих данных. Отметим, что параметры коаптации створок в экспериментах сильно превышали физиологические значения, поскольку процедура выбора размера шаблонов створок АК в протоколе Озаки не подходит для свиной аорты и приводит к слишком крупным створкам.

	$L^*_{coapt,l}$	$L^*_{coapt,r}$	L^*_{centr}	H^{mean}_{eff}	H_{bill}	S^*_{coapt}
min	10.69	9.62	7.71	7.12	1.26	173.3
max	20.97	18.31	17.40	13.72	9.33	622.9
mean	14.77	14.37	11.52	9.98	4.25	400.7
MPE	+15.8%	+17.8%	+9.4%	+48.5%	-23.9%	+0.4%
MAPE	18.3%	19.9%	13.1%	48.5%	40.2%	5.5%

Таблица 2 — Агрегированные результаты натурных экспериментов и сравнение с численными расчётами из [181]. Верхний индекс * отмечает величины, измеренные по профилю коаптации на развёртке створки (отличается от определений в разделе 3.6), $H^{mean}_{eff} = \frac{1}{3}\sum_{i=0}^{2} H^i_{eff}$. Для H^{mean}_{eff} агрегирование делалось только по экспериментам, а для остальных величин — по экспериментам и номерам створок. Строки min, max и mean содержат минимальное, максимальное и среднее по всему множеству агрегирования значение величины, измеренной в натурном эксперименте. Строки MPE и MAPE демонстрируют средние по набору агрегирования проценты отличий численных результатов от натурных, где $MPE(A) = 100\% \ \frac{1}{N}\sum\limits_{i=1}^{N} \frac{A_i^{num} - A_i^{nat}}{A_i^{nat}}$ и $MAPE(A) = 100\% \ \frac{1}{N}\sum\limits_{i=1}^{N} \left|\frac{A_i^{num} - A_i^{nat}}{A_i^{nat}}\right|$

Проанализируем строки MPE и MAPE Таблицы 2. В численном эксперименте удалось хорошо предсказать лишь площадь коаптации (ошибка 5%). Боковая и центральная длины коаптации в численных расчётах систематически завышались на 17% и 10% соответственно. Аналогично, систематически сильно завышались (почти на 50%) предсказания эффективной высоты. В то же время, значение биллоуинга оказалось систематически меньше (в среднем на 24%), чем в натурном эксперименте (согласно полным данным [181] в ряде случаев $H^{num}_{bill} = 0$ при $H^{nat}_{bill} > 0$). Иными словами, в численных экспериментах створки смыкались сильнее, чем в натурном эксперименте, но провисали меньше.

Вероятно, главная причина представленного расхождения численных и натурных результатов связана с пренебрежением изгибной жёсткостью. Как показано в исследовании на идеализированной геометрии корня аорты [137; 165], учёт изгибной жёсткости и должная постановка условий на границе крепления створок может оказывать большое влияние на получаемые результаты и в первую очередь на биллоуинг и эффективную высоту. Условие крепления вдоль пов-ти аорты приводит к выстиланию створки по пов-ти аорты вблизи границы крепления, что обеспечивает ненулевой H_{bill}, а также приводит к более погружённой закрытой конфигурации в направлении к левому желудочку, т.е. приводит к уменьшению H_{eff}. Там же показано снижение L^*_{centr} на 1-2 мм при учёте изгибной жёсткости, что как раз соответствует ошибке в Таблице 2. Сравнение оболочечной и мембранной моделей показывают не очень большую разницу в замерах L^*_{coapt} (порядка 7%). Вероятно, одна из причин расхождения этого параметра кроется в неудачном выборе параметров жёсткости E и толщины створок H, которые при проведении натурных экспериментов не измерялись. Исследование чувствительности мембранной модели к форме и жёсткости изотропных потенциалов упругости на одной из реальных геометрий [138] показало, что зона коаптации мало зависит от формы потенциала (это объясняется тем, что расчётные линейные деформации АК при закрытии обычно не превышают 10%) и главным образом определяется модулем упругости E, причём изменение E от 10^2 до 10^4 кПа при $H = 0.4$ мм, может приводить к уменьшению боковой длины коаптации на 3-4 мм, что соответствует ошибкам из Таблицы 2. Чтобы проверить высказанные гипотезы требуется сравнить расчёты оболочечной модели с результатами натурных экспериментов, но это выходит за рамки данной диссертации и будет проделано в будущем.

В результате совместной работы с Каравайкиным П.А. подготовлена база для настройки и будущей валидации модели закрытия АК. Первые результаты для мембранной модели АК показывают не очень хорошее соответствие с данными натурного эксперимента, но анализ расхождений указывает направление для совершенствования модели. Вероятно, результаты для оболочечной модели АК, которые будут получены в будущих исследованиях, продемонстрируют лучшее соответствие экспериментальным данным.

Глава 4. Комплексы программ

Разработка специализированных программных комплексов и библиотек для математического моделирования является неотъемлемой частью исследований в области вычислительной биомедицины, обеспечивая точность, гибкость и воспроизводимость результатов. Такие инструменты позволяют интегрировать в единую вычислительную платформу разнородные математические методы — от решения уравнений электродинамики до анализа механических деформаций тканей — и медицинские знания о конкретных процессах и явлениях — от общих знаний о физиологии до протоколов конкретных медицинских вмешательств. Модульная организация программных комплексов позволяет использовать их для решения разнообразных задач, адаптируя вычислительные алгоритмы под уникальные анатомические особенности и физиологические сценарии и обеспечивая персонализацию моделей на основе клинических данных. В данной главе будут рассмотрены разработанные автором программные библиотеки, особенности их архитектуры и функциональные возможности, а также приведены некоторые примеры применения этих комплексов.

4.1 Конечно-элементная библиотека AniFem++

Существует огромное количество различных пакетов для построения конечно-элементных (КЭ) дискретизаций. В ИВМ РАН более 15 лет назад также был разработан собственный КЭ пакет `Ani3D/AniFem` [2; 179] на языке Fortran. С целью расширения гибкости и упрощения сопряжения с вычислительной платформой `INMOST` [72] данная библиотека была переписана автором на современном C++. Обновленная и усовершенствованная, она получила название `AniFem++`[1]. При разработке активно использовалось метапрограммирование C++, что позволило значительно расширить гибкость инструмента без ущерба для присущей предшественнику вычислительной эффективности. Кроме того, использование объектно-ориентированного подхода при проектировании конеч-

[1] https://github.com/INMOST-DEV/INMOST-FEM

ных элементов позволило создать более структурированный и интуитивный интерфейс для взаимодействия с библиотекой.

`AniFem++` — это универсальный инструмент для построения КЭ-дискретизаций на тетраэдральных сетках. Данная библиотека разработана именно для работы с локальными элементными выражениями и потому она не привязана к конкретному формату сетки. `AniFem++` оставляет сборку глобальной матрицы на пользователя, хотя предоставляет полный функционал для интеграции с платформой `INMOST`. Библиотекой предоставляется ряд возможностей.

- Вычисление элементных невязок и матриц Якоби для выражений

$$R_i(\mathbf{u}) = \int\limits_{\Omega} [B\psi_i] \cdot \mathbf{f}(\mathbf{v}^1, \dots, \mathbf{v}^K, \mathbf{X})\, d\Omega, \quad \mathbf{v}^l := A^l \mathbf{u},\, l \in \overline{1, K}$$

$$J_{ij}(\mathbf{u}) = \sum_{l=1}^{K} \int\limits_{\Omega} [B\psi_i] \cdot \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{v}^l} \cdot [A^l \varphi_j]\, d\Omega,$$

  где A^l, B — линейные дифференциальные операторы (например, тождественный оператор $\mathbb{I}$, div, grad, rot, $\partial^{|\boldsymbol{\alpha}|}(\cdot)/\partial^{\boldsymbol{\alpha}}\mathbf{X}$), $\mathbf{u}$ — неизвестная КЭ функция, φ_i и ψ_j — пробная и тестовая базисные функции, $\mathbf{f}$ — некоторая, возможно нелинейная, вектор-функция своих аргументов, Ω – область интегрирования.
- Наложение условий Дирихле, в том числе векторных

$$A \cdot \mathbf{u}\big|_g = \mathbf{d},$$

  где g — часть границы, $A \in \mathcal{M}^{m\times n}$ — матрица полного ранга размера $m \times n$ ($m \leqslant n$), $\mathbf{u}$ — векторная переменная задачи и $\mathbf{d}$ — гладкая вектор-функция, $\dim \mathbf{u} = n$ и $\dim \mathbf{d} = m$. Классы для конечных элементов хранят функционалы проекции на степени свободы и отображение между степенями свободы и элементами тетраэдральной сетки, что позволяет реализовать универсальный и естественный интерфейс для наложения условий Дирихле.
- Вычисление КЭ выражений в точке

$$\mathbf{u}(\mathbf{X}) = \sum_i u_i \boldsymbol{\varphi}_i(\mathbf{X}).$$

- Использование встроенных и создание собственных КЭ пространств. Реализован ряд КЭ-пространств низкого порядка:
  1) полиномиальные элементы Лагранжа P_k (до $k = 3$),
  2) элемент Крузея-Равьяра 1-го порядка CR_1,

3) $H(\Omega, \mathrm{div})$-согласованный вектор-элемент Равьяра-Тома 0-го порядка RT_0,
4) $H(\Omega, \mathrm{rot})$-согласованный вектор-элемент Неделека 0-го порядка ND_0.

Библиотека предоставляет интерфейсы для создания пользовательских пространств. Для формирования многокомпонентных КЭ-пространств реализованы стандартные операции:

1) декартово произведение пространств (оператор $\times$),
2) создание вектор-пространства из k идентичных компонент (оператор ^),
3) обогащение пространств базисными функциями (оператор $+$).

- Поддержка автодифференциирования выражений от небольшого числа переменных вплоть до вторых производных. Данная функциональность удобна при работе с нелинейными выражениями. Все производные хранятся в виде небольших плотных матриц или тензоров. Поддерживаются симметричные и несимметричные тензоры ранга 1 (вектор), 2 (матрица) и 4. В частности, поддерживаются тензоры 3×3 и $3 \times 3 \times 3 \times 3$, которые очень удобны для работы с задачами нелинейной механики.

Организация работы с памятью и структурами данных критически влияет на эффективность вычислений. `AniFem++` позволяет полностью отделить вычисления от выделений памяти, предоставляя информацию о требуемом объёме памяти и принимая память от пользователя. Там, где это возможно, используется статическое выделение памяти за счёт информации из шаблонов. Большинство функций, помимо стандартного интерфейса, поддерживают шаблонный, что исключает необходимость использования указателей на функции или динамического наследования и обеспечивает потенциальную совместимость с OpenCL. Для максимального использования аппаратной векторизации вычисления значений базисных функций и их производных допускается сразу для множества точек за один вызов функции.

Обширное покрытие тестами основных функций в `AniFem++`, а также успешное решение ряда модельных задач-примеров, верифицирует данную технологию и обеспечивает её надёжную работу.

Подробнее познакомиться с возможностями `AniFem++` можно в документации[2], где на простых геометриях представлены примеры решения уравнений диффузии, реакции-диффузии, конвекции-диффузии, задачи Стокса, уравнений равновесия изгибаемой балки из линейного и гиперупругого материала и других задач.

[2] https://github.com/INMOST-DEV/INMOST-FEM/blob/main/docs/rus/user_guide.md

4.2 Платформа для кардио-электромеханических симуляций CarNum

Современные модели электромеханики сердца обладают исключительной сложностью: они включают множество компонентов, охватывают различные пространственно-временные масштабы и требуют интеграции разнообразных физических процессов. Такая многогранность делает самостоятельную разработку и дискретизацию подобных моделей крайне трудоемкой, вынуждая исследователей обращаться к специализированным инструментам. Для оптимизации работы активно применяются численные пакеты для моделирования мультифизичных задач, а также разрабатываются предметно-ориентированные языки, которые позволяют компактно и эффективно описывать сложные математические модели, значительно ускоряя процесс их реализации. В настоящее время существует ряд пакетов для численного решения задач электромеханики сердца, включая `LifeX`[3], `OpenCARP`[4], `Cardioid`[5], `Chaste`[6], `MOOSE-EWE`[7], `CMISS/openCMISS`[8], `Simula-FEniCS`[9], `preCICE`[10] и др. Однако существующие пакеты не всегда обладают достаточной гибкостью для того, чтобы позволить использование отличающихся методов дискретизации в разных компонентах целостной мультифизической модели. Учитывая это, было принято решение разработать собственную платформу.

`CarNum` — новая платформа для построения и организации расчётов для задач электромеханики сердца. `CarNum` включает набор инструментов и предсобранных моделей для развертывания и запуска численных экспериментов и полностью реализован на языке C++. Платформа является `MPI` и `OpenMP` параллельной за счёт активного использования фреймворка `INMOST` [72] для организации массивно-параллельных вычислений. Благодаря активной работе с символьными выражениями, методами символьного и авто- дифференцирова-

[3] https://gitlab.com/lifex/lifex
[4] https://opencarp.org/
[5] https://github.com/LLNL/cardioid
[6] https://github.com/Chaste
[7] http://www.mooseframework.org/
[8] http://opencmiss.org
[9] https://fenicsproject.org/
[10] https://precice.org/

ния, а также за счёт использования JIT-компиляции платформа предоставляет гибкие возможности для конструирования и подготовки моделей.

Архитектура (Рисунок 4.1) CarNum была предложена автором в результате анализа существующих электромеханических моделей (см. секцию 2.3), методов их дискретизации и отражает стремление отделить описание отдельных подмоделей от их сопряжения между собой. Были выделены четыре основных блока: описание моделей, их связывание, дискретизация и ядро платформы.

- Описательный блок предоставляет общие структуры данных, помогающие пользователю задать физические уравнения подмоделей (без учета методов дискретизации), и включает методы для чтения и модификации параметров модели через конфигурационные файлы или аргументы командной строки.
- Блок связывания отвечает за организацию обмена данными между подмоделями, согласование методов дискретизации и методов численного решения, а также организует схему расщепления по времени для всей симуляции. Для простых сценариев настройка этого блока возможна через конфигурирование, но в общем случае требуется написание пользовательского кода.
- Для поддержки альтернативных методов дискретизации (например, МКО [23; 73]) вводится уровень дискретизации, задающий общий интерфейс для пространственно-временной аппроксимации уравнений нелинейной механики, диффузии, уравнений эйконала и обыкновенных дифференциальных уравнений. Учитывая значительные различия в пространственно-временных масштабах моделируемых процессов, предполагается, что разные подмодели будут использовать различные временные шаги и, возможно, осуществлять дискретизацию на различных вычислительных сетках (как в разделе 2.4). Поэтому в CarNum на уровне архитектуры устанавливается, что уравнения подмоделей решаются раздельно (сегрегированный подход). Такое решение позволяет отказаться от универсальных методов дискретизации в пользу специализированных подходов для каждого типа уравнений. В текущей версии для УрЧП доступны лишь стандартные инструменты МКЭ в виде AniFem++, а для работы с ОДУ используется библиотека Sundials/CVODE [32].
- Ядро платформы объединяет фреймворк INMOST, предоставляющий инструменты для работы с распределенными сетками, методы для сборки и решения больших разреженных систем, решатель нелинейных систем SUNDIALS/KinSol [163] и методы пакета CasADi [24] для обработки символьных выражений и JIT-компиляции.

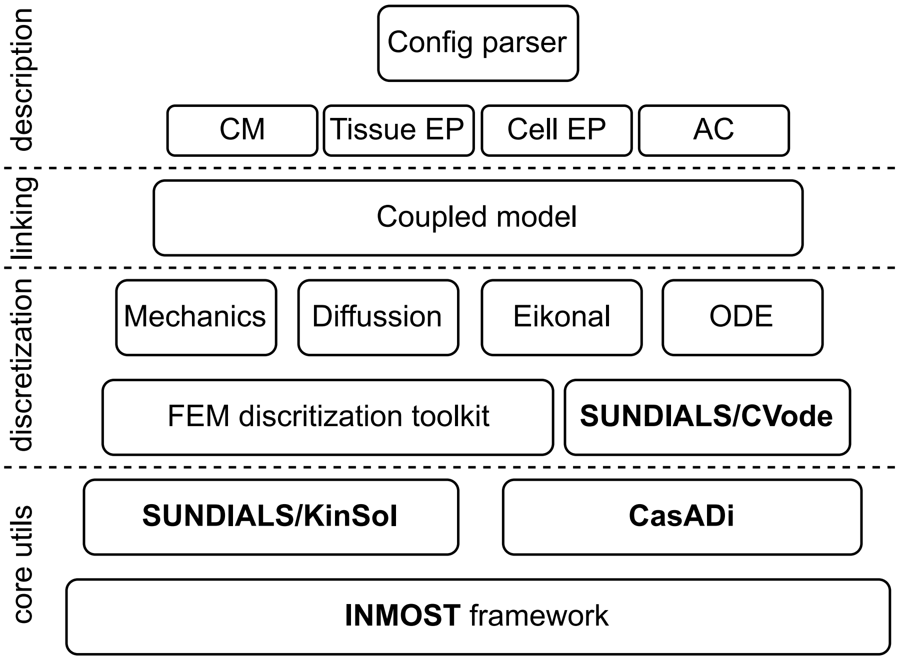


Рисунок 4.1 — Схема организации платформы `CarNum`: description — структуры с описанием параметров подмоделей (сплошная механика CM, модель распространения эл. активации Tissue EP, клеточная электрофизиология Cell EP, модель активного сокращения AC) и основной парсер; linking — обобщённый интерфейс для сопряжения подмоделей друг с другом, установки межмодельных итераций по времени и интерполяторов с сетки одной подмодели на сетку другой; discretization — пространственно-временные схемы дискретизации нескольких вариантов поддерживаемых уравнений; core utils — инструменты для работы с распределёнными данными, сетками, алгебраическими решателями и символьными выражениями

Верификация блока кардиомеханики. Разработка представленной платформы `CarNum` ведётся командой разработчиков. В рамках целостной модели автор ответствен за реализацию инструментов для работы с уравнениями механики, поэтому в рамках данной диссертации будут представлены только результаты верификации этого блока.

Проведён расчёт ряда задач, предложенных в работе [81]: деформация балки, пассивное и активное раздутие эллипсоидального желудочка сердца. Для моделирования несжимаемости использовался метод множителя Лагранжа. В задачах раздутия желудочков (при наличии и отсутствии активного сокращения) для повышения устойчивости использовался модифицированный изохорный механический потенциал $\hat{\psi}(\mathbb{F}) = \psi(J^{-\frac{1}{3}}\mathbb{F})$, что соответствует применениию мультипликативного разделения градиента деформации на изохорную и объёмную части [46]. Дискретизация уравнений проводилась методом конечных элементов с использованием элементов типа P_2 для перемещений $\mathbf{u}$ и элементов типа P_1 для множителя Лагранжа p. Для расчетов использовалась квазиравномерная тетраэдральная сетка с шагом 0.2 мм для задачи о деформации балки и с шагом 1.5 мм в остальных задачах. Возникающие нелинейные алгебраические системы решались методом Ньютона (до достижения $reltol = 10^{-8}$ или $abstol = 10^{-14}$), а для решения линейных систем использовался метод бисопряжённых градиентов (до достижения $reltol = 10^{-12}$ или $abstol = 10^{-14}$) с предобуславливателем ILUC [164], основанном на неполном LU разложении Краута.

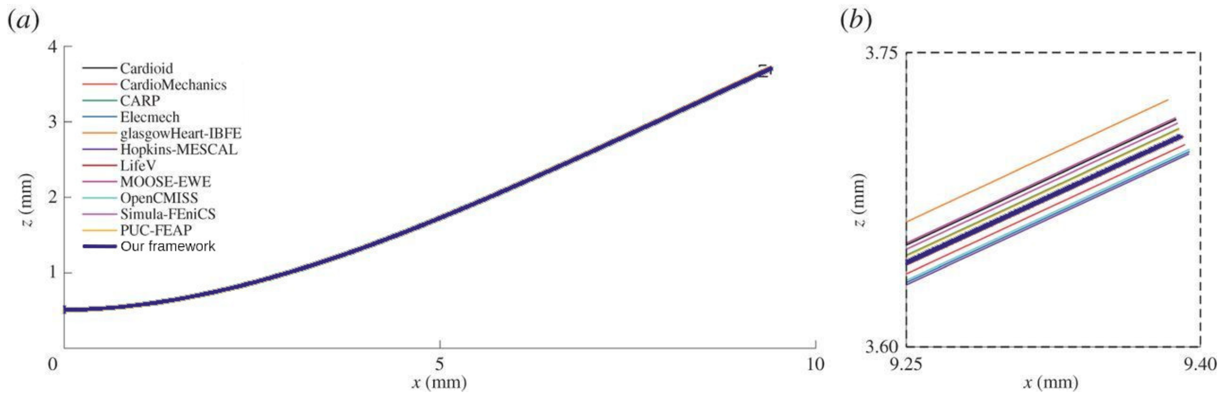


Рисунок 4.2 — Положение срединной линии деформированной балки.

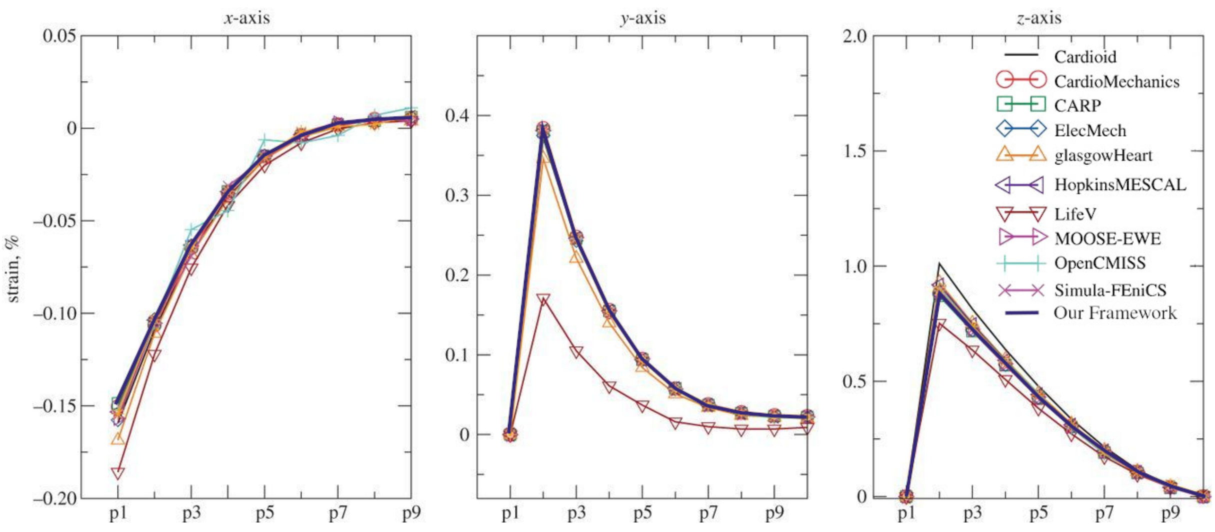


Рисунок 4.3 — Деформации между маркерными точками балки вдоль осей координат (детали см. в [81])

Расчёты демонстрируют хорошую согласованность с результатами других научных групп как с точки зрения величины перемещений, что выражается в совпадении срединных линий на Рисунке 4.2, 4.4 **a**,**b**, так и с позиции величин локальных растяжений материала, что отражено на Рисунке 4.3, 4.4 **c**,**d**.

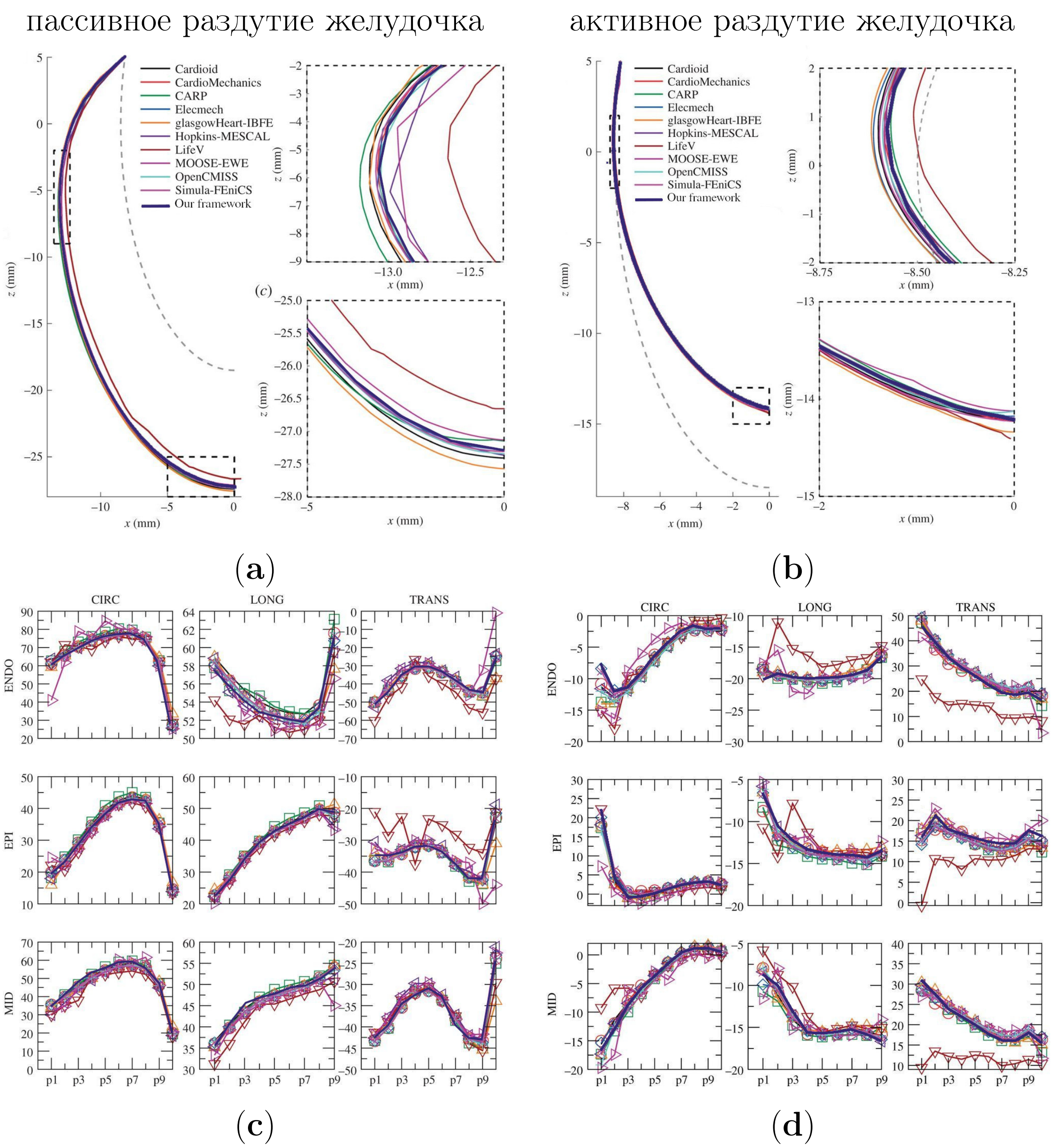


Рисунок 4.4 — Задача о раздутии желудочка при отсутствии (слева) и наличии (справа) активного сокращения (детали в [81]): (**a**)-(**b**) положение срединной линии стенки желудочка после деформирования, (**c**)-(**d**) продольная (LONG), круговая (CIRC) и трансмуральная (TRANS) деформации в маркерных точках эндокарда (ENDO), эпикарда (EPI) и центра стенки желудочка (MID)

Для задачи о пассивном раздутии желудочка на Рисунке 4.5 представлены результаты исследования параллельной масштабируемости. При решении задачи давление последовательно росло до $p = 10$ кПа с шагом $\Delta p = 0.1$ кПа. В эксперименте использовались две сетки: с шагом $h = 1.5$ мм (около 80 тыс. степеней свободы) и $h = 0.45$ мм (около 800 тыс. степеней свободы). Параллельное ускорение быстро выходит на насыщение из-за недостаточно большого числа элементов в сетках.

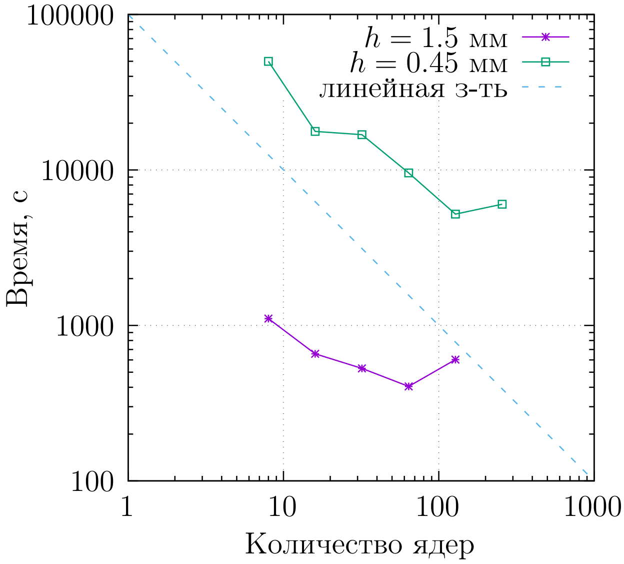


Рисунок 4.5 — Время параллельного решения задачи о пассивном раздутии желудочка с $h = 1.5$ мм и $h = 0.45$ мм в логарифмических осях. Расчёты производились на кластере ИКНММ Сеченовского университета с процессорами Intel(R) Xeon(R) Gold 6230R @ 2.10 ГГц

Расчёт сопряжённой задачи электромеханики. В разделе 2.5 была рассмотрена задача об активации неоднородного участка миокарда и продемонстрированы результаты применения численной схемы из раздела 2.4. Здесь приведём замеры времени счёта для данной задачи, демонстрирующие производительность представленного пакета.

Было измерено время вычислений для отдельных этапов решения сопряжённой задачи: сборка линейных систем для механики и монодоменного уравнения, решение этих линейных систем при работе с линейными и нелинейными алгебраическими задачами и решение клеточных ОДУ. На Рисунке 4.6 представлены результаты для референсного случая и случая с параметрами $a_e = 10$, $a_m = 4$, $\tau_m = 1$, $\tau_e = 0.05$, причём общее время вычислений составило приблизительно 165 часов на 512 ядрах и 3 часа на 156 ядрах, соответственно.

Отметим, что в данной работе не ставилось целью минимизировать время вычислений и не проводилась специальная настройка предобусловливателей или других параметров, поэтому приведенные данные о времени выполнения носят демонстрационный характер и могут быть улучшены.

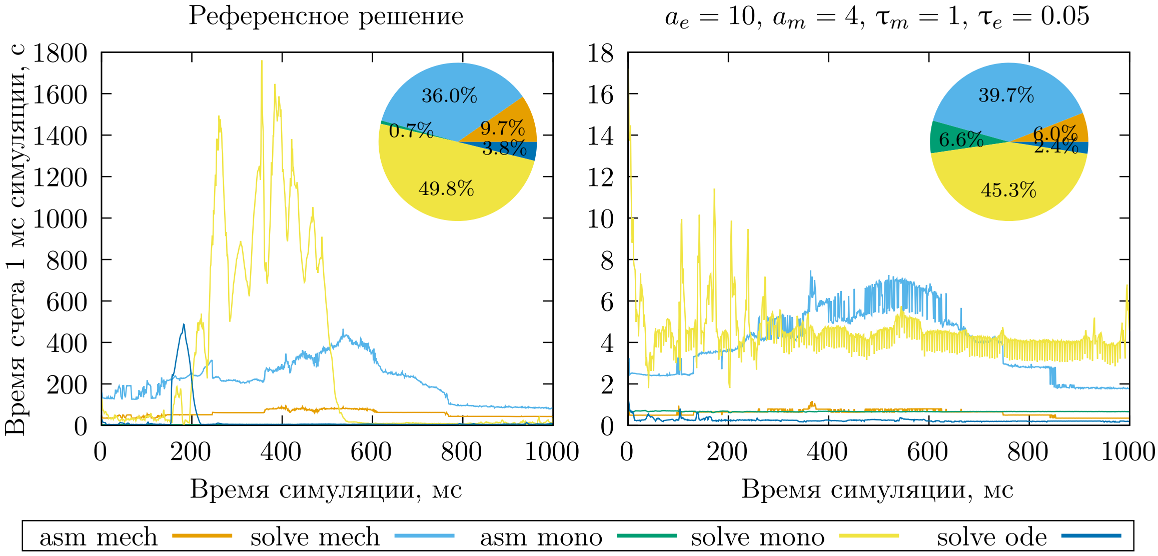


Рисунок 4.6 — Время вычислений на 1 мс симуляции в численном эксперименте с неоднородным миокардом для отдельных этапов: сборка якобианов и невязок для механики и монодоменного уравнения, решение линейных и нелинейных алгебраических систем, а также решение клеточных ОДУ. На вертикальной оси отложено время вычислений в секундах, на горизонтальной оси — время численного эксперимента в миллисекундах. Круговая диаграмма отражает вклад каждого этапа в общее время расчетов. На левой панели: результаты для референсного случая (165 часов на 512 ядрах). На правой панели: результаты для случая с параметрами $a_e = 10$, $a_m = 4$, $\tau_m = 1$ мс, $\tau_e = 0.05$ мс (3 часа на 156 ядрах). Вычисления проводились на кластере ИКНММ Сеченовского университета с процессорами Intel(R) Xeon(R) Gold 6230R @ 2.10 ГГц

4.3 Симулятор механики оболочек и мембран

На основе численных методов, изложенных в разделе 1.6, автором разработан программный пакет для моделирования деформаций тонкостенных структур. Симулятор реализован на C++ с использованием современных библиотек, что обеспечивает высокую производительность и гибкость.

Симулятор предоставляет гибкий контроль над сборкой матриц и невязок, предлагая два режима: ручной и автоматический. Ручной режим позволяет исследователям напрямую модифицировать элементные матрицы жёсткости и векторы невязок, обеспечивая полный контроль над процессом сборки якобиана. Это востребовано при разработке специальных стабилизаций для ускорения счёта, а также при рассмотрении неклассических сил, (например, сил, зависящих от других сил [138, (2.2)]). Автоматический режим упрощает настройку расчётов для типовых задач, делая её аналогичной взаимодействию с игровыми физическими симуляторами. Пользователь задаёт начальные условия, внешние воздействия и параметры материалов, а система самостоятельно организует сборку глобальных матриц и решение уравнений.

Тонкостенные деформируемые объекты характеризуются положением своей срединной поверхности, своими механическими свойствами и приложенными к ним силами. Для хранения и эффективной обработки треугольных поверхностных сеток используется класс `Surface_Mesh` из библиотеки `CGAL` [26]. Описание механических свойств возможно двумя способами: задание гиперупругого потенциала ψ через символьные выражения и непосредственное определение тензора $\mathbb{S}$ и его производных $\frac{\partial \mathbb{S}}{\partial \mathbb{E}}$. Выражение для ψ и его параметры могут быть импортированы из конфигурационных файлов или заданы через командную строку с использованием синтаксиса, разработанного в рамках проекта. Для наложения часто возникающих внешних сил и граничных условий реализован набор классов (давление, пружинные связи, условия Дирихле и др.), а для наложения специальных пользовательских воздействий предоставляется общий интерфейс.

Алгоритмы обнаружения контактов представляют важную часть программного пакета, поскольку в ряде задач могут оказаться «узким горлышком» всей симуляции. Эти алгоритмы разбиваются на две фазы. Для быстрого отбора потенциально пересекающихся объектов в «широкой» фазе используется иерархия ограничивающих объёмов (bounding volume hierarchy, BVH) из пакета `BulletPhysics` [22]. «Узкая» фаза задействует точные алгоритмы вычисления расстояний между примитивами из библиотеки `CGAL` [26].

Для оптимизации процесса расчётов в симуляторе реализованы интерфейсы к сторонним линейным решателям `Eigen` [41], `INMOST::Solver` [72] и нелинейным решателям `SUNDIALS/KinSol` [163], `PETSc/SNES` [120]. А для быстрой подготовки задач на простых геометриях настроена интеграция с пакетом для построения адаптивных треугольных сеток `Ani2D` [7].

Именно средствами представленного пакета производилось решение уравнений, описывающих модель закрытия аортального клапана в главе 3.

Симулятор был частично верифицирован на ряде задач с аналитическим решением для мембран (раздутие цилиндра, сферы, круглого плоского листа [136]) и оболочек (изгиб балки и лифтинг разреза кольцевого листа [165]).

Раздутие сферической и цилиндрической мембраны. Для проведения численных экспериментов рассматривается сферическая (круглая цилиндрическая) мембрана толщины H и радиуса R, раздуваемая под действием внутреннего давления p. Мембраны описываются несжимаемыми материалами Нео-Гука (1.9) и Гента с параметром μ и фиксированным $J_m = 2.3$ (1.11).

Вводя безразмерное давление $p^* = pR/\mu H$, можно выписать его аналитическую зависимость от изменений размеров:

для модели Нео-Гука

$$p^* = \begin{cases} 2\left(\dfrac{1}{\lambda} - \dfrac{1}{\lambda^7}\right), \text{ для сферы,} \\ \dfrac{1}{\lambda\lambda_L}\left(\lambda - \dfrac{1}{\lambda^3\lambda_L^2}\right), \text{ для цилиндра,} \end{cases}$$

для модели Гента

$$p^* = \begin{cases} \dfrac{2J_m}{\lambda^3(J_m - [2\lambda^2 + \lambda^{-4} - 3])}\left(\lambda^2 - \dfrac{1}{\lambda^4}\right), \text{ для сферы,} \\ \dfrac{J_m}{\lambda_3\lambda^2\left(J_m - [\lambda^2 + \lambda_L^2 + (\lambda\lambda_L)^{-2} - 3]\right)}\left(\lambda^2 - \dfrac{1}{(\lambda\lambda_L)^2}\right), \text{ для цилиндра.} \end{cases}$$

Здесь $\lambda_L = l/L$, где L и l — длины цилиндра до и после деформации.

В Таблице 3 приведен порядок сеточной сходимости для одного из значений безразмерного давления $p^* = 0.6$. Согласно приведенным результатам, порядок сеточной сходимости примерно второй. Подобный порядок сеточной сходимости наблюдается и при других значениях безразмерного давления.

Шаг сетки	Сфера		Цилиндр	
	Нео-Гук	Гент	Нео-Гук	Гент
h^*	$203 \cdot 10^{-7}$	$380 \cdot 10^{-7}$	$336 \cdot 10^{-7}$	$605 \cdot 10^{-7}$
$h^*/2$	$39 \cdot 10^{-7}$	$79 \cdot 10^{-7}$	$71 \cdot 10^{-7}$	$134 \cdot 10^{-7}$
$h^*/4$	$7 \cdot 10^{-7}$	$16 \cdot 10^{-7}$	$15 \cdot 10^{-7}$	$30 \cdot 10^{-7}$
порядок сходимости	2,45	2,27	2,22	2,17

Таблица 3 — Величина сеточной ошибки $|r_{calculated} - r_{analytic}|/R$ и порядок сеточной сходимости для задач о раздутии сферической и цилиндрической мембран в случае $p^* = 0.6$, где $h^* = h/R = 0.04$ — безразмерный шаг сетки

На Рисунке 4.7 приведено сравнение аналитических и расчетных зависимостей, причём для цилиндра все вычисления были сделаны в предположении

$\lambda_L = 1$. Расчетные и аналитические зависимости хорошо согласуются. Отметим, что вычисленный радиус сферы и цилиндра $r_{calculated}$ определялся как среднее арифметическое расстояний узлов сетки до центра сферы и оси цилиндра соответственно.

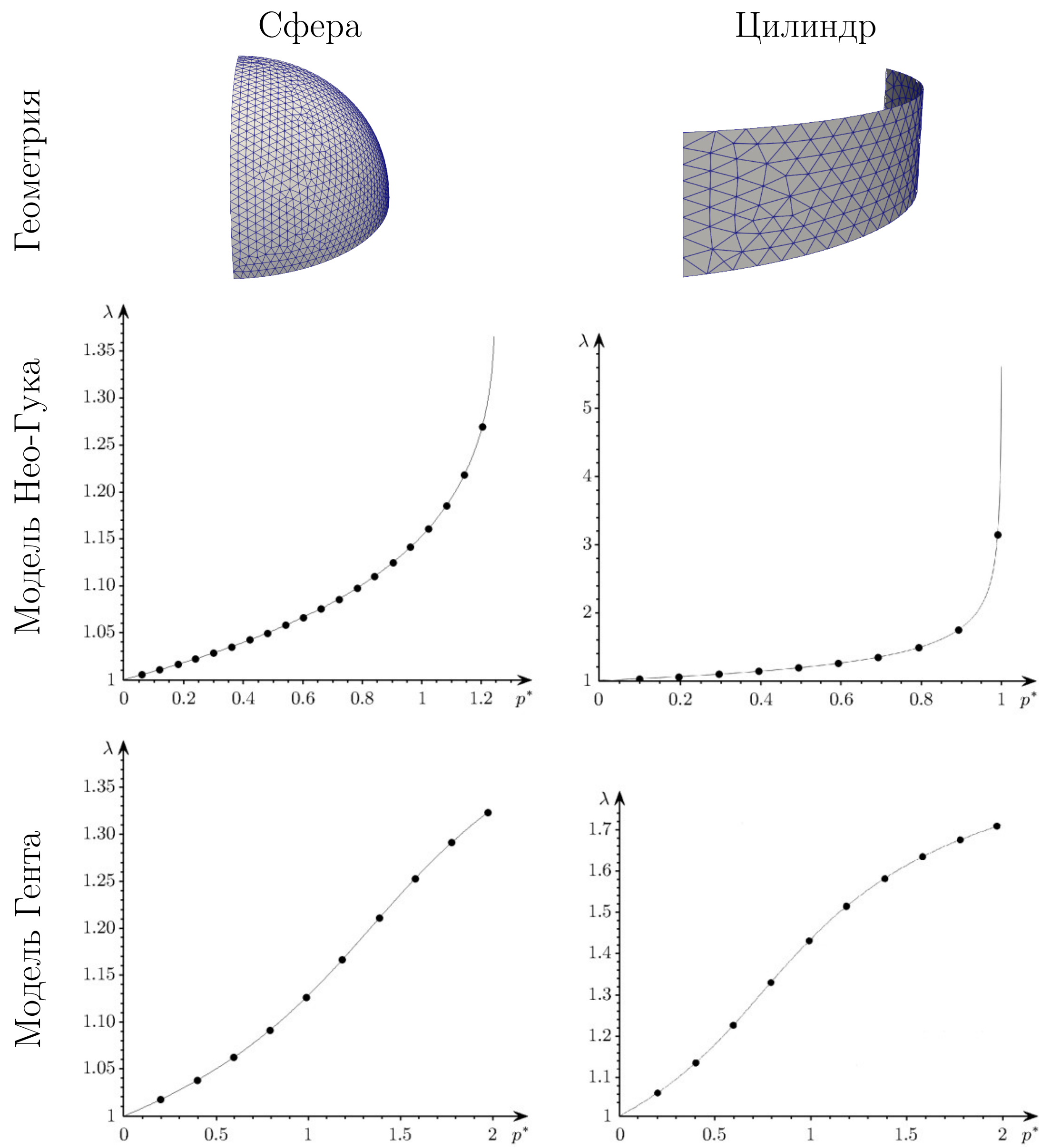


Рисунок 4.7 — Аналитическая (сплошная линия) и расчётная (точки) зависимости изменения радиуса $\lambda = r/R$ тонкой сферы и цилиндра из нелинейных материалов от безразмерного раздувающего давления p^*

Раздувание круглого плоского листа. Рассмотрим случай раздутия изотропной мембраны в виде изначально плоского круглого листа, закрепленного по своему периметру [48]. Мембрана радиуса R, толщины H и, описываемая материалом Муни-Ривлина (1.10), предварительно осесимметрично растягивается до нового радиуса $r = 1.1R$ и затем раздувается внутренним давлением p.

На Рисунке 4.8 приведено сравнение профилей мембраны и референтных результатов [48]. Линиями слева показаны результаты представленного симулятора, а справа — расчётные профили из [48]. На рисунке видно, что результаты совпадают.

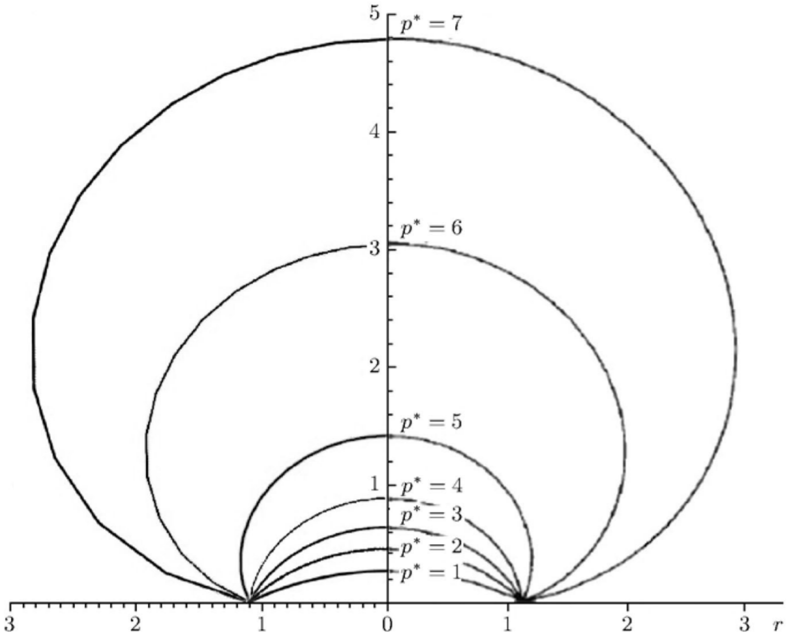


Рисунок 4.8 — Профиль раздуваемой круглой мембраны при различных значениях $p^* = pR/(\mu H)$: в левой половине приведены результаты расчётов, а справа — профили согласно [48]

Кантилевер под действием торцевой поперечной силы. Для тестирования учёта изгибной жёсткости рассмотрен кантилевер, описываемый материалом Сен-Венана-Кирхгофа (1.7) под действием силы $0 < P \leqslant P_{max}$. Геометрия и упругие коэффициенты представлены на вложенном изображении в левом верхнем углу Рисунка 4.9. Поскольку в этой тестовой задаче $\nu = 0$, т.е. материал не является несжимаемым, соотношения (1.23)-(1.24) из подраздела 1.4 оказываются не применимы. Использовалась форма потенциала, полученная из условия плоско напряжённого состояния ($s^{13} = s^{23} = s^{33} = 0$):

$$\hat{\psi}(\mathbb{C}^S) = \frac{\mu\lambda}{4(\lambda + 2\mu)}(I_1^S - 2)^2 + \frac{\mu}{4}\left((I_1^S - 1)^2 - 2(J^S)^2 + 1\right),$$
$$\lambda = \frac{E\nu}{1 - \nu^2}, \quad \mu = \frac{E}{2(1 + \nu)}.$$

Рассматривалось консервативное нагружение, сохраняющее своё направление, и неконсервативное, при котором направление силы менялось, совпадая с нормалью к срединной поверхности в актуальной конфигурации.

Расчёты проведены на трёх квазиравномерных треугольных сетках с шагами $h_1 = 0.1$, $h_2 = h_1/2$, $h_3 = h_1/4$. На Рисунке 4.9 представлены полученные кривые нагружения-сдвига для консервативной и неконсервативной формы нагрузки. Кривые приближаются к опубликованным кривым [66; 153] при измельчении сетки, и относительная ошибка не превосходит 2%.

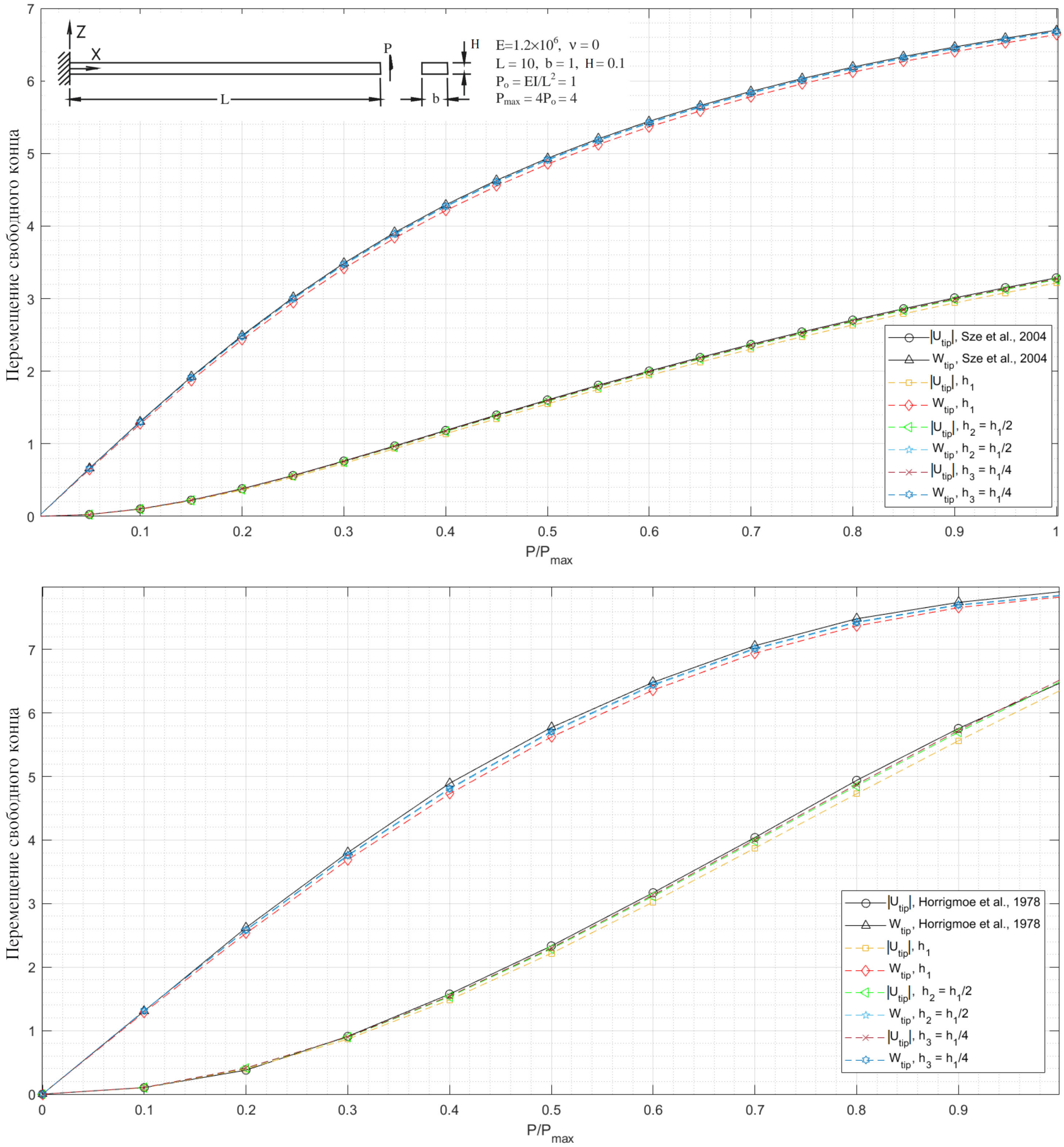


Рисунок 4.9 — Смещения свободного конца кантилевера (U_{tip} и W_{tip} — смещения по вертикали и горизонтали соответственно) в зависимости от прикладываемой нагрузки: расчёты симулятора и опубликованные результаты [66; 153] для консервативного (сверху) и неконсервативного (снизу) нагружения

Подъём разреза кольцевой пластины. В данном эксперименте рассматривалась кольцевая пластина с разрезом, исзготовленная из материала Сен-Венана-Кирхгофа (1.7). Граничная поднимающая сила P приложена к одной из сторон разреза, в то время как другая сторона закреплена. Детали геометрии и параметры упругости представлены снизу по центру на Рисунке 4.10.

Задача равновесия была численно решена на квазиравномерных неструктурированных треугольных сетках с шагом $h_1 = 0.2$, $h_2 = h_1/2$, $h_3 = h_1/4$. Полученные кривые нагружения-сдвига представлены на Рисунке 4.10. Относительное отличие результатов от опубликованных [153] не превосходит 2%.

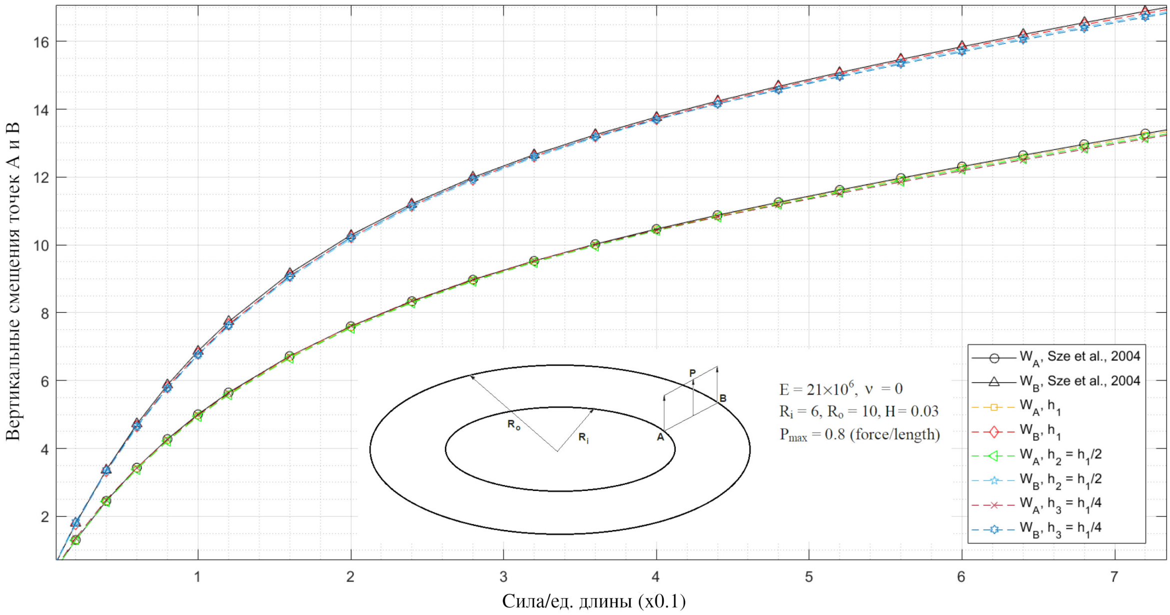


Рисунок 4.10 — Вертикальные смещения точек A и B разрезанного кольца, деформируемого вертикальной силой P

Заключение

В диссертационной работе рассматривается две ключевые задачи: разработка программной платформы для работы с сопряжёнными моделями электромеханики сердца и разработка персонализированной численной модели закрытия реконструированного аортального клапана (АК). Их актуальность обусловлена запросами современной кардиологии и доказательной медицины.

В работе представлена новая программная платформа для электромеханических симуляций `CarNum` и описаны концепции, которые обеспечивают её гибкость и применимость для работы с широким классом моделей. На основе анализа связей сопряжённых моделей электромеханики предложена и реализована новая полностью расщеплённая по процессам численная схема, использующая дискретизации электрических и механических процессов на несогласованных сетках. В рамках пакета `CarNum` это позволяет достичь оптимального баланса между точностью и вычислительной эффективностью.

Изучение протокола процедуры Озаки и физиологии АК позволило сформулировать и разработать технологию моделирования закрытого АК и оценки его состоятельности, с учётом персонализированной геометрии корня аорты. В ходе исследования удалось успешно решить проблему об отыскании начального приближения для запуска симуляций, что обеспечило полностью автоматизированную работу, без необходимости ручной настройки входной геометрии или граничных условий. Предсказания технологии демонстрируют частичную согласованность с данными натурных экспериментов.

Практическая ценность работы также включает реализации программы-симулятора для расчёта деформирования тонкостенных структур и MPI/OpenMP параллельного пакета программ `AniFem++` для конечно-элементного моделирования.

В дальнейшем планируется завершить валидацию модели закрытия аортального клапана и перейти к разработке целостной системы поддержки принятия врачебных решений, помогающей хирургу подобрать оптимальные створки клапана для конкретного пациента. Будущее развитие платформы `CarNum` будет направлено на расширение библиотеки встроенных моделей, внедрение методов машинного обучения для создания редуцированных моделей и переход к полномасштабному персонализированному моделированию.

Список сокращений и условных обозначений

$\mathbb{R}, \mathbb{Z}, \mathbb{N}, \mathbb{N}_0$	множества действительных, целых, натуральных чисел и натуральных чисел с нулём
$\overline{i,j}$	множество целых чисел из диапазона $\{k \in \mathbb{Z} : i \leqslant k \leqslant j\}$
$\mathbb{B} \otimes \mathbb{C}$	тензорное произведение, $(\mathbb{B} \otimes \mathbb{C})_{i^1 \ldots i^m j^1 \ldots j^n} = B_{i^1 \ldots i^m} C_{j^1 \ldots j^n}$
$\mathbb{B} \cdot \mathbb{C}$	скалярное произведение, $(\mathbb{B} \cdot \mathbb{C})_{i^1 \ldots i^{m-1}}{}^{j^2 \ldots j^n} = \sum_k B_{i^1 \ldots i^{m-1} k} C^{k j^2 \ldots j^n}$
$\mathbb{B} : \mathbb{C}$	двойное скалярное произведение, $(\mathbb{B} : \mathbb{C})_{i^1 \ldots i^{m-2}}{}^{j^3 \ldots j^n} = \sum_{kl} B_{i^1 \ldots i^{m-2} kl} C^{lk j^3 \ldots j^n}$
$\mathbb{B} \times \mathbb{C}$	векторное произведение тензоров, $(\mathbb{B} \times \mathbb{C})_{i^1 \ldots i^{m-1} l}{}^{j^2 \ldots j^n} = \sum_{i^m j_1} \varepsilon^{i^m}{}_{j_1 l} B_{i^1 \ldots i^m} C^{j^1 \ldots j^n}$
$\mathbb{A}_{,\, j^1 \ldots j^n}$	частная производная тензора по материальным координатам, $(\mathbb{A}_{,\, j^1 \ldots j^n})_{i^1 \ldots i^m} = A_{i^1 \ldots i^m,\, j^1 \ldots j^n} = \dfrac{\partial^n A_{i^1 \ldots i^m}}{\partial x^{j_1} \ldots \partial x^{j_n}}$
$\nabla \mathbb{A}$	градиент тензора по пространственным координатам (лагранжевым или эйлеровым в зависимости от контекста), $(\nabla \mathbb{A})_{i^1 \ldots i^m j} = \partial A_{i^1 \ldots i^m} / \partial x_j$
$\mathrm{Div}\ \mathbb{A}$	дивергенция тензора, $(\mathrm{Div}\ \mathbb{A})_{i^1 \ldots i^{m-1}} = \sum_k \partial A_{i^1 \ldots i^{m-1} k} / \partial x_k$
$\mathrm{tr}\ \mathbb{M}$	след квадратной матрицы / тензора ранга 2, $\mathrm{tr}\ \mathbb{M} = \sum_k M_k{}^k$
$\det \mathbb{M}$	детерминант квадратной матрицы / тензора ранга 2, $\det \mathbb{M} = \det[M_i{}^j]$
$\det_{2D} \mathbb{M}$	двумерный детерминант тензора ранга 2, $\det_{2D} \mathbb{M} = \frac{1}{2}((\mathrm{tr}\ \mathbb{M})^2 - \mathrm{tr}\ (\mathbb{M} \cdot \mathbb{M}))$
$\mathrm{adj}\ \mathbb{M}$	присоединённая матрица, $\mathrm{adj}\ \mathbb{M} = (\det \mathbb{M})\ \mathbb{M}^{-1}$
$\|\|\mathbb{M}\|\|_F$	Фробениусова норма тензора, $\|\|\mathbb{M}\|\|_F = \sqrt{\sum_{i^1 \ldots i^n} M_{i^1 \ldots i^n} M^{i^1 \ldots i^n}}$

Список литературы

1. *Abbasi, M.* A non-invasive material characterization framework for bioprosthetic heart valves / M. Abbasi [et al.] // Ann. Biomed. Eng. — 2019. — Vol. 47. — P. 97—112. — DOI: 10.1007/s10439-018-02129-5.
2. Advanced Numerical Instruments 3D [Электронный ресурс] / K. Lipnikov, Y. Vassilevski, [et al.]. — 2014. — URL: https://sourceforge.net/projects/ani3d/.
3. *Aguiari, P.* Mechanical testing of pericardium for manufacturing prosthetic heart valves / P. Aguiari [et al.] // Interact. Cardiovasc. Thorac. Surg. — 2015. — Oct. — Vol. 22, no. 1. — P. 72—84. — DOI: 10.1093/icvts/ivv282.
4. *Alhan, C.* Ozaki Procedure / C. Alhan // Turk. J. Thorac. Cardiovasc. Surg. — 2019. — Oct. — Vol. 27, no. 4. — P. 451—453. — DOI: 10.5606/tgkdc.dergisi.2019.01903.
5. *Aliev, R.* A simple two-variable model of cardiac excitation / R. Aliev, A. Panfilov // Chaos Soliton. Fract. — 1996. — Vol. 7, no. 3. — P. 293—301. — DOI: 10.1016/0960-0779(95)00089-5.
6. *Ando, T.* Transcatheter versus surgical aortic valve replacement in the United States (from the Nationwide Readmission Database) / T. Ando [et al.] // Am. J. Cardiol. — 2021. — Vol. 148. — P. 110—115. — DOI: 10.1016/j.amjcard.2021.02.031.
7. Ani2D: Advanced Numerical Instruments 2D [Электронный ресурс] / K. Lipnikov [и др.]. – 2014. – URL: https://sourceforge.net/projects/ani2d.
8. *Ashikaga, H.* Changes in regional myocardial volume during the cardiac cycle: implications for transmural blood flow and cardiac structure / H. Ashikaga [et al.] // Am. J. Physiol. Heart Circ. Physiol. — 2008. — Vol. 295, no. 2. — H610—H618. — DOI: 10.1152/ajpheart.00107.2008.
9. *Babuška, I.* Error-bounds for finite element method / I. Babuška // Numer. Math. — 1971. — Vol. 16, no. 4. — P. 322—333. — DOI: 10.1007/BF02165003.

10. *Baird, C.* Aortic valve neo-cuspidation using the Ozaki technique for acquired and congenital disease: where does this procedure currently stand? / C. Baird, S. Marathe, P. Del Nido // Indian J. Thorac. Cardiovasc. Surg. — 2020. — Vol. 36, no. 1. — P. 113—122. — DOI: 10.1007/s12055-019-00917-9.

11. *Ball, J.* Convexity conditions and existence theorems in nonlinear elasticity / J. Ball // Arch. Rational Mech. Anal. — 1976. — Vol. 63. — P. 337—403. — DOI: 10.1007/BF00279992.

12. *Ball, J.* Some open problems in elasticity / J. Ball // Geometry, mechanics, and dynamics. — New York : Springer, 2002. — P. 3—59. — DOI: 10.1007/0-387-21791-6_1.

13. *Ball, J.* W1, p-quasiconvexity and variational problems for multiple integrals / J. Ball, F. Murat // J. Funct. Anal. — 1984. — Vol. 58, no. 3. — P. 225—253. — DOI: 10.1016/0022-1236(84)90041-7.

14. *Benedetto, U.* Aortic valve neocuspidization with autologous pericardium in adult patients: UK experience and meta-analytic comparison with other aortic valve substitutes / U. Benedetto [et al.] // Eur. J. Cardiothorac. Surg. — 2021. — Vol. 60, no. 1. — P. 34—46. — DOI: 10.1093/ejcts/ezaa472.

15. *Berrebi, A.* Systematic echocardiographic assessment of aortic regurgitation — what should the surgeon know for aortic valve repair? / A. Berrebi, J. Monin, E. Lansac // Ann. Cardiothorac. Surg. — 2019. — Vol. 8, no. 3. — DOI: 10.21037/acs.2019.05.15.

16. *Bers, D.* Cardiac excitation – contraction coupling / D. Bers // Nature. — 2002. — Vol. 415. — P. 198—205. — DOI: 10.1038/415198a.

17. *Björk, V.* Teflon and pericardial aortic valve prostheses / V. Björk, G. Hultquist // J. Thorac. Cardiovasc. Surg. — 1964. — Vol. 47, no. 6. — P. 693—701. — DOI: 10.1016/S0022-5223(19)33497-X.

18. *Bouaziz, S.* Projective Dynamics: Fusing Constraint Projections for Fast Simulation / S. Bouaziz [et al.] // ACM Trans. Graph. — New York, NY, USA, 2014. — July. — Vol. 33, no. 4. — DOI: 10.1145/2601097.2601116.

19. *Bridson, R.* Robust treatment of collisions, contact and friction for cloth animation / R. Bridson, R. Fedkiw, J. Anderson // Proceedings of the 29th Annual Conference on Computer Graphics and Interactive Techniques. — New York, NY, USA : ACM, 2002. — P. 594—603. — (SIGGRAPH '02). — ISBN 1581135211. — DOI: 10.1145/566570.566623.

20. *Brunel, C.* A time-independent deformer for elastic contacts / C. Brunel, P. Bénard, G. Guennebaud // ACM Trans. Graph. — New York, NY, USA, 2021. — July. — Vol. 40, no. 4. — DOI: 10.1145/3450626.3459879.

21. *Buja, L. M.* Cardiovascular pathology / L. M. Buja, J. Butany. — Academic Press, 2022. — ISBN 978-0-12-822224-9.

22. Bullet Physics SDK [Электронный ресурс] / E. Coumans [et al.]. — URL: http://bulletphysics.org.

23. *Cardiff, P.* Thirty years of the finite volume method for solid mechanics / P. Cardiff, I. Demirdžić // Arch. Comput. Methods Eng. — 2021. — Vol. 28, no. 5. — P. 3721—3780. — DOI: 10.1007/s11831-020-09523-0.

24. CasADi – A software framework for nonlinear optimization and optimal control / J. Andersson [et al.] // Math. Program. Comput. — 2019. — Vol. 11, no. 1. — P. 1—36. — DOI: 10.1007/s12532-018-0139-4. — URL: https://web.casadi.org.

25. *Cerfontaine, B.* 3D zero-thickness coupled interface finite element: Formulation and application / B. Cerfontaine [et al.] // Comput. Geotech. — 2015. — Vol. 69. — P. 124—140. — DOI: 10.1016/j.compgeo.2015.04.016.

26. CGAL User and Reference Manual (v. 6.0.1) : tech. rep. — 2024. — URL: https://www.cgal.org.

27. *Chapelle, D.* Numerical simulation of the electromechanical activity of the heart / D. Chapelle [et al.] // Functional Imaging and Modeling of the Heart: 5th International Conference, FIMH 2009, Nice, France, June 3-5, 2009. Proceedings 5. — Springer. 2009. — P. 357—365. — DOI: 10.1007/978-3-642-01932-6_39.

28. *Ciarlet, P.* Mathematical Elasticity: Volume I: three-dimensional elasticity / P. Ciarlet. — Amsterdam : North-Holland, 1988. — P. 451. — ISBN 978-0-444-70259-3.

29. *Colli-Franzone*, *P.* Mathematical and numerical methods for reaction-diffusion models in electrocardiology / P. Colli-Franzone, L. Pavarino, S. Scacchi // Modeling of Physiological flows. — Milano : Springer, 2012. — P. 107—141. — DOI: 10.1007/978-88-470-1935-5_5.

30. *Costa*, *K.* Modelling cardiac mechanical properties in three dimensions / K. Costa, J. Holmes, A. McCulloch // Philos. Trans. A Math. Phys. Eng. Sci. — 2001. — Vol. 359, no. 1783. — P. 1233—1250. — DOI: 10.1098/rsta.2001.0828.

31. *Cremonesi*, *M.* A State of the Art Review of the Particle Finite Element Method (PFEM) / M. Cremonesi [et al.] // Arch. Computat. Methods Eng. — 2020. — Vol. 27. — P. 1709—1735. — DOI: 10.1007/s11831-020-09468-4.

32. CVODE, a stiff/nonstiff ODE solver in C / S. Cohen, A. Hindmarsh, P. Dubois // Comput. Phys. — 1996. — Mar. — Vol. 10, no. 2. — P. 138—143. — DOI: 10.1063/1.4822377.

33. *Danilov*, *A. A.* Patient-Specific Geometric Modeling of an Aortic Valve / A. A. Danilov, A. A. Liogky, R. A. Pryamonosov, V. Y. Salamatova // Lecture Notes in Computational Science and Engineering. — Springer International Publishing, 2019. — P. 217—227. — ISBN 978-3-030-23435-5. — DOI: 10.1007/978-3-030-23436-2_16.

34. *De Kerchove*, *L.* Free margin length and coaptation surface area in normal tricuspid aortic valve: an anatomical study / L. De Kerchove [et al.] // Eur. J. Cardiothorac. Surg. — 2017. — Dec. — Vol. 53, no. 5. — P. 1040—1048. — DOI: 10.1093/ejcts/ezx456.

35. *Dede'*, *L.* Segregated algorithms for the numerical simulation of cardiac electromechanics in the left human ventricle / L. Dede', A. Gerbi, A. Quarteroni // The Mathematics of Mechanobiology. — Cham : Springer, 2020. — P. 81—116. — (Lecture Notes in Mathematics). — ISBN 978-3-030-45196-7. — DOI: 10.1007/978-3-030-45197-4_3.

36. *Del Bianco*, *F.* Electromechanical effects of concentric hypertrophy on the left ventricle: a simulation study / F. Del Bianco [et al.] // Comput. Biol. Med. — 2018. — Vol. 99. — P. 236—256. — DOI: 10.1016/j.compbiomed.2018.06.004.

37. *Di Cesare*, *M.* The heart of the world / M. Di Cesare [et al.] // Glob. Heart. — 2024. — Jan. — Vol. 19, no. 1. — P. 11. — DOI: 10.5334/gh.1288.

38. *Diaz*, *R.* Long-term outcomes of mechanical versus biological aortic valve prosthesis: systematic review and meta-analysis / R. Diaz [et al.] // J. Thorac. Cardiovasc. Surg. — 2019. — Vol. 158, no. 3. — P. 706—714. — DOI: 10.1016/j.jtcvs.2018.10.146.

39. *Doorn*, *E. van.* Preclinical models of cardiac disease: a comprehensive overview for clinical scientists / E. van Doorn [et al.] // Cardiovasc. Eng. Tech. — 2024. — Vol. 15, no. 2. — P. 232—249. — DOI: 10.1007/s13239-023-00707-w.

40. *Du*, *Y.* Natural history observations in moderate aortic stenosis / Y. Du [et al.] // BMC Cardiovasc. Disord. — 2021. — Vol. 21. — P. 1—10. — DOI: 10.1186/s12872-021-01901-1.

41. Eigen v3 [Электронный ресурс] / G. Guennebaud, B. Jacob, [et al.]. — 2010. — URL: http://eigen.tuxfamily.org.

42. *Eisenstat*, *S. C.* Globally Convergent Inexact Newton Methods / S. C. Eisenstat, H. F. Walker // SIAM J. Optimzation. — 1994. — Vol. 4, no. 2. — P. 393—432. — DOI: 10.1137/0804022.

43. *Eriksson*, *T.* Influence of myocardial fiber/sheet orientations on left ventricular mechanical contraction / T. Eriksson [et al.] // Math. Mech. Solids. — 2013. — Vol. 18, no. 6. — P. 592—606. — DOI: 10.1177/1081286513485779.

44. *Flores*, *F.* Improvements in the membrane behaviour of the three node rotation-free BST shell triangle using an assumed strain approach / F. Flores, E. Onate // Comput. Method. Appl. M. — 2005. — Vol. 194, no. 6—8. — P. 907—932. — DOI: 10.1016/j.cma.2003.08.012.

45. *Flores*, *P.* Contact mechanics for dynamical systems: a comprehensive review / P. Flores // Multibody Syst. Dyn. — 2022. — Vol. 54, no. 2. — P. 127—177. — DOI: 10.1007/s11044-021-09803-y.

46. *Flory*, *P.* Thermodynamic relations for high elastic materials / P. Flory // Trans. Faraday Soc. — 1961. — Vol. 57. — P. 829—838.

47. *Franzone*, *P.* Mathematical cardiac electrophysiology. Vol. 13 / P. Franzone, L. Pavarino, S. Scacchi. — New York : Springer, 2014. — P. 397. — (MS & A). — ISBN 978-3-319-04801-7. — DOI: 10.1007/978-3-319-04801-7.

48. *Fried, I.* Finite element computation of large rubber membrane deformations / I. Fried // Int. J. Numer. Methods Eng. — 1982. — Vol. 18, no. 5. — P. 653—660. — DOI: 10.1002/nme.1620180503.

49. *Fröhlich, J.* Numerical evaluation of elasto-mechanical and visco-elastic electro-mechanical models of the human heart / J. Fröhlich [et al.] // GAMM-Mitteilungen. — 2024. — Vol. 46, no. 3/4. — e202370010. — DOI: 10.1002/gamm.202370010.

50. *Gärdsback, M.* A comparison of rotation-free triangular shell elements for unstructured meshes / M. Gärdsback, G. Tibert // Comput. Methods Appl. Mech. Eng. — 2007. — Vol. 196, no. 49. — P. 5001—5015. — DOI: 10.1016/j.cma.2007.06.017.

51. *Gent, A. N.* A New Constitutive Relation for Rubber / A. N. Gent // Rubber Chem. Technol. — 1996. — Mar. — Vol. 69, no. 1. — P. 59—61. — DOI: 10.5254/1.3538357.

52. *Gerach, T.* The impact of standard ablation strategies for atrial fibrillation on cardiovascular performance in a four-chamber heart model / T. Gerach [et al.] // Cardiovasc. Eng. Tech. — 2023. — Vol. 14, no. 2. — P. 296—314. — DOI: 10.1007/s13239-022-00651-1.

53. *Göktepe, S.* Computational modeling of cardiac electrophysiology: A novel finite element approach / S. Göktepe, E. Kuhl // Int. J. Numer. Methods Eng. — 2009. — Vol. 79, no. 2. — P. 156—178. — DOI: 10.1002/nme.2571.

54. *Gray, R.* Patient-specific cardiovascular computational modeling: diversity of personalization and challenges / R. Gray, P. Pathmanathan // J. of Cardiovasc. Trans. Res. — 2018. — Vol. 11. — P. 80—88. — DOI: 10.1007/s12265-018-9792-2.

55. *Guccione, J. M.* Passive Material Properties of Intact Ventricular Myocardium Determined From a Cylindrical Model / J. M. Guccione, A. D. McCulloch, L. K. Waldman // J. Biomech. Eng. — 1991. — Feb. — Vol. 113, no. 1. — P. 42—55. — DOI: 10.1115/1.2894084.

56. *Guo, Q.* A material point method for thin shells with frictional contact / Q. Guo [et al.] // ACM Trans. Graph. — New York, NY, USA, 2018. — Vol. 37, no. 4. — P. 1—15. — DOI: 10.1145/3197517.320134.

57. *H.*, *H.* Early detection of possible leaflet thrombosis after aortic valve neo-cuspidization surgery using autologous pericardium / H. H. [et al.] // American Society of Echocardiography 29-th Annual Scientific Sessions. 31(6). — J. Am. Soc. Echocardiogr., 06/2018. — B62.

58. *Haj-Ali*, *R.* Structural simulations of prosthetic tri-leaflet aortic heart valves / R. Haj-Ali [et al.] // J. Biomech. — 2008. — Vol. 41, no. 7. — P. 1510—1519. — DOI: 10.1016/j.jbiomech.2008.02.026.

59. *Hammer*, *P.* Computational model of aortic valve surgical repair using grafted pericardium / P. Hammer [et al.] // J. Biomech. — 2012. — Vol. 45, no. 7. — P. 1199—1204. — DOI: 10.1016/j.jbiomech.2012.01.031.

60. *Head*, *S.* Mechanical versus bioprosthetic aortic valve replacement / S. Head, M. Çelik, A. Kappetein // Eur. Heart J. — 2017. — Vol. 38, no. 28. — P. 2183—2191. — DOI: 10.1093/eurheartj/ehx141.

61. *Heijman*, *J.* Computational models of atrial fibrillation: Achievements, challenges, and perspectives for improving clinical care / J. Heijman [et al.] // Cardiovasc. Res. — 2021. — Vol. 117, no. 7. — P. 1682—1699. — DOI: 10.1093/cvr/cvab138.

62. *Hibino*, *M.* Valvular Heart Disease-Related Mortality Between Middle- and High-Income Countries During 2000 to 2019 / M. Hibino [et al.] // JACC Adv. — 2024. — Vol. 3, 12_Part_2. — P. 101133. — DOI: 10.1016/j.jacadv.2024.101133.

63. *Hofferberth*, *S.* Mechanical Properties of Autologous Pericardium Change With Fixation Time: Implications for Valve Reconstruction / S. Hofferberth [et al.] // Semin. Thorac. Cardiovasc. Surg. — 2019. — Vol. 31, no. 4. — P. 852—854. — DOI: 10.1053/j.semtcvs.2019.03.001.

64. *Holzapfel*, *A.* Nonlinear solid mechanics: A Continuum Approach for Engineering Science / A. Holzapfel. — New York : John Wiley & Sons, Inc., 2000. — P. 455. — ISBN 978-0-471-82304-9.

65. *Holzapfel*, *G.* Constitutive modelling of passive myocardium: a structurally based framework for material characterization / G. Holzapfel, R. Ogden // Philos. Trans. A Math. Phys. Eng. Sci. — 2009. — Vol. 367, no. 1902. — P. 3445—3475. — DOI: 10.1098/rsta.2009.0091.

66. *Horrigmoe, G.* Nonlinear analysis of free-form shells by flat finite elements / G. Horrigmoe, P. Bergan // Comput. Methods Appl. Mech. Eng. — 1978. — Vol. 16, no. 1. — P. 11—35. — DOI: 10.1016/0045-7825(78)90030-0.

67. *Huang, L.* Application and development prospect of digital twin in the forensic identification of cardiovascular diseases / L. Huang [et al.] // Digit. Med. — 2024. — Vol. 10, no. 4. — DOI: 10.1097/DM-2024-00013.

68. *Huang, Z.* Orientation-aware Incremental Potential Contact / Z. Huang [et al.]. — 2024. — DOI: 10.48550/arXiv.2402.00719. — arXiv: 2402.00719 [cs.GR].

69. *Hunter, P.* Computational mechanics of the heart / P. Hunter, M. Nash // J. Elast. — 2000. — Vol. 61, no. 1—3. — P. 113—141. — DOI: 10.1023/A:1011084330767.

70. *Hunter, P.* Modelling the mechanical properties of cardiac muscle / P. Hunter, A. McCulloch, H. Ter Keurs // Prog. Biophys. Mol. Biol. — 1998. — Vol. 69, no. 2/3. — P. 289—331. — DOI: 10.1016/S0079-6107(98)00013-3.

71. *Iida, Y.* Comparison of aortic annulus dimensions after aortic valve neocuspidization with those of normal aortic valve using transthoracic echocardiography / Y. Iida [et al.] // Eur. J. Cardiothorac. Surg. — 2018. — Vol. 54, no. 6. — P. 1081—1084. — DOI: 10.1093/ejcts/ezy190.

72. INMOST - a toolkit for distributed mathematical modeling [Электронный ресурс] / K. Terekhov [et al.]. — 2017. — URL: http://www.inmost.org.

73. *Jacquemet, V.* Finite volume stiffness matrix for solving anisotropic cardiac propagation in 2-D and 3-D unstructured meshes / V. Jacquemet, C. Henriquez // IEEE Trans. Biomed. Eng. — 2005. — Vol. 52, no. 8. — P. 1490—1492. — DOI: 10.1109/TBME.2005.851459.

74. *Jahanyar, J.* Functional and pathomorphological anatomy of the aortic valve and root for aortic valve sparing surgery in tricuspid and bicuspid aortic valves / J. Jahanyar [et al.] // Ann. Cardiothorac. Surg. — 2023. — Vol. 12, no. 3. — P. 179. — DOI: 10.21037/acs-2023-avs1-22.

75. *Jiang, C.* The affine particle-in-cell method / C. Jiang [et al.] // ACM Trans. Graph. — New York, NY, USA, 2015. — July. — Vol. 34, no. 4. — DOI: 10.1145/2766996.

76. *Karavaikin, P. A.* Numerical assessment of aortic valve coaptation after neocuspidation procedure / P. A. Karavaikin, A. A. Liogky, A. A. Danilov, [et al.] // Russian Journal of Cardiology and Cardiovascular Surgery. — 2022. — Vol. 15, no. 4. — P. 369—376. — DOI: 10.17116/kardio202215041369.

77. *Keener, J.* Mathematical physiology / J. Keener, J. Sneyd. — New York : Springer, 1998. — P. 767. — (Interdisciplinary Applied Mathematics). — ISBN 978-0-387-22706-1. — DOI: 10.1007/b98841.

78. *Kiyose, A.* Comparison of biological and mechanical prostheses for heart valve surgery: a systematic review of randomized controlled trials / A. Kiyose [et al.] // Arq. Bras. Cardiol. — Rio de Janeiro, Brazil, 2019. — Vol. 112, no. 3. — P. 292—301. — DOI: 10.5935/abc.20180272.

79. *Korteland, N.* Mechanical aortic valve replacement in non-elderly adults: meta-analysis and microsimulation / N. Korteland [et al.] // Eur. Heart J. — 2017. — Vol. 38, no. 45. — P. 3370—3377. — DOI: 10.1093/eurheartj/ehx199.

80. *Kunihara, T.* Preoperative aortic root geometry and postoperative cusp configuration primarily determine long-term outcome after valve-preserving aortic root repair / T. Kunihara [et al.] // J. Thorac. Cardiovasc. Surg. — 2012. — Vol. 143, no. 6. — P. 1389—1395. — DOI: 10.1016/j.jtcvs.2011.07.036.

81. *Land, S.* Verification of cardiac mechanics software: benchmark problems and solutions for testing active and passive material behaviour / S. Land [et al.] // Proc. R. Soc. A: Math. Phys. Eng. Sci. — 2015. — Vol. 471, no. 2184. — P. 20150641. — DOI: 10.1098/rspa.2015.0641.

82. *Lee, A.* Computational modeling for cardiac resynchronization therapy / A. Lee [et al.] // J. of Cardiovasc. Trans. Res. — 2018. — Vol. 11. — P. 92—108. — DOI: 10.1007/s12265-017-9779-4.

83. *LeGrice, I.* Laminar structure of the heart: ventricular myocyte arrangement and connective tissue architecture in the dog / I. LeGrice [et al.] // Am. J. Physiol. Heart Circ. Physiol. — 1995. — Vol. 269, no. 2. — H571—H582. — DOI: 10.1152/ajpheart.1995.269.2.H571.

84. *Lehrmann, H.* Novel Electrocardiographic Criteria for Real-Time Assessment of Anterior Mitral Line Block: "V1 Jump" and "V1 Delay" / H. Lehrmann [et al.] // JACC Clin. Electrophysiol. — Washington, DC, 2018. — Vol. 4, no. 7. — P. 920—932. — DOI: 10.1016/j.jacep.2018.03.007.

85. *Leyh, R.* Opening and Closing Characteristics of the Aortic Valve After Different Types of Valve-Preserving Surgery / R. Leyh [et al.] // Circulation. — 1999. — Vol. 100, no. 21. — P. 2153—2160. — DOI: 10.1161/01.CIR.100.21.2153.

86. *Li, K.* Simulated transcatheter aortic valve deformation: A parametric study on the impact of leaflet geometry on valve peak stress / K. Li, W. Sun // Int. J. Numer. Methods Biomed. Eng. — 2017. — Vol. 33, no. 3. — e02814. — DOI: 10.1002/cnm.2814.

87. *Li, M.* Codimensional incremental potential contact / M. Li, D. Kaufman, C. Jiang // ACM Trans. Graph. — New York, NY, USA, 2021. — July. — Vol. 40, no. 4. — DOI: 10.1145/3450626.3459767.

88. *Li, M.* Incremental potential contact: intersection-and inversion-free, large-deformation dynamics / M. Li [et al.] // ACM Trans. Graph. — New York, NY, USA, 2020. — Vol. 39, no. 4. — 49:1—49:20. — DOI: 10.1145/3386569.339242.

89. *Liogky, A. A.* Computational mimicking of surgical leaflet suturing for virtual aortic valve neocuspidization / A. A. Liogky // Russ. J. Numer. Anal. M. — 2022. — Nov. — Vol. 37, no. 5. — P. 263—277. — DOI: 10.1515/rnam-2022-0023.

90. *Liogky, A. A.* Numerical Issues of Patient-specific Assessment of Reconstructed Aortic Valve / A. A. Liogky // Lobachevskii J. Math. — 2025. — Mar. — Vol. 46, no. 2. — P. 736—749. — DOI: 10.1134/S1995080225604941.

91. *Liogky, A. A.* CarNum: parallel numerical framework for computational cardiac electromechanics / A. A. Liogky, A. Y. Chernyshenko, A. A. Danilov, F. A. Syomin // Russ. J. Numer. Anal. M. — 2023. — June. — Vol. 38, no. 3. — P. 127—144. — DOI: 10.1515/rnam-2023-0011.

92. *Liogky, A. A.* Temporally and spatially segregated discretization for a coupled electromechanical myocardium model / A. A. Liogky, A. A. Danilov, F. A. Syomin // Russ. J. Numer. Anal. M. — 2024. — Nov. — Vol. 39, no. 5. — P. 243—258. — DOI: 10.1515/rnam-2024-0022.

93. *Loerakker, S.* Effects of valve geometry and tissue anisotropy on the radial stretch and coaptation area of tissue-engineered heart valves / S. Loerakker [et al.] // J. Biomech. — 2013. — Vol. 46, no. 11. — P. 1792—1800. — DOI: 10.1016/j.jbiomech.2013.05.015.

94. *Love, J.* Rapid intraoperative fabrication of an autologous tissue heart valve: a new technique / J. Love [et al.] // Proceedings of the Third International Symposium on Cardiac Bioprostheses. — Yorke Medical, New York. 1986. — P. 691—698.

95. *Lowenstern, A.* Sex disparities in patients with symptomatic severe aortic stenosis / A. Lowenstern [et al.] // Am. Heart J. — 2021. — Vol. 237. — P. 116—126. — DOI: 10.1016/j.ahj.2021.01.021.

96. *Marom, G.* A fluid–structure interaction model of the aortic valve with coaptation and compliant aortic root / G. Marom [et al.] // Med. Biol. Eng. Comput. — 2012. — Vol. 50. — P. 173—182. — DOI: 10.1007/s11517-011-0849-5.

97. *Marom, G.* Aortic root numeric model: Annulus diameter prediction of effective height and coaptation in post – aortic valve repair / G. Marom [et al.] // J. Thorac. Cardiovasc. Surg. — 2013. — Vol. 145, no. 2. — P. 406—411. — DOI: 10.1016/j.jtcvs.2012.01.080.

98. *Mehlhorn, U.* Myocardial fluid balance / U. Mehlhorn [et al.] // Eur. J. Cardiothorac. Surg. — 2001. — Vol. 20, no. 6. — P. 1220—1230. — DOI: 10.1016/S1010-7940(01)01031-4.

99. *Mensah, G.* Global Burden of Cardiovascular Diseases and Risks, 1990-2022 / G. Mensah [et al.] // JACC. — 2023. — Dec. — Vol. 82, no. 25. — P. 2350—2473. — DOI: 10.1016/j.jacc.2023.11.007.

100. *Miyahara, S.* Impact of postoperative cusp configuration on midterm durability after aortic root reimplantation / S. Miyahara [et al.] // J. Heart Valve Dis. — 2013. — Vol. 22, no. 4. — P. 509—516.

101. *Muller Jr*, *W.* Surgical relief of aortic insufficiency by direct operation on the aortic valve / W. Muller Jr [et al.] // Circulation. — 1960. — Vol. 21, no. 4. — P. 587—597. — DOI: 10.1161/01.CIR.21.4.587.

102. *Mylonas*, *K. S.* Bioprosthetic Valves for Lifetime Management of Aortic Stenosis: Pearls and Pitfalls / K. S. Mylonas, D. C. Angouras // J. Clin. Med. — 2023. — Vol. 12, no. 22. — DOI: 10.3390/jcm12227063.

103. *Nardinocchi*, *P.* On the active response of soft living tissues / P. Nardinocchi, L. Teresi // J. Elast. — 2007. — Vol. 88, no. 1. — P. 27—39. — DOI: 10.1007/s10659-007-9111-7.

104. *Nash*, *M.* Electromechanical model of excitable tissue to study reentrant cardiac arrhythmias / M. Nash, A. Panfilov // Prog. Biophys. Mol. Biol. — 2004. — Vol. 85, no. 2/3. — P. 501—522. — DOI: 10.1016/j.pbiomolbio.2004.01.016.

105. *Nickerson*, *D.* New developments in a strongly coupled cardiac electromechanical model / D. Nickerson, N. Smith, P. Hunter // EP Europace. — 2005. — Vol. 7, s2. — S118—S127. — DOI: 10.1016/j.eupc.2005.04.009.

106. *Niederer*, *S. A.* Verification of cardiac tissue electrophysiology simulators using an *N*-version benchmark / S. A. Niederer [et al.] // Philos. Trans. A Math. Phys. Eng. Sci. — 2011. — Nov. — Vol. 369, no. 1954. — P. 4331—4351. — DOI: 10.1098/rsta.2011.0139.

107. *Niederer*, *S.* An improved numerical method for strong coupling of excitation and contraction models in the heart / S. Niederer, N. Smith // Prog. Biophys. Mol. Biol. — 2008. — Vol. 96, no. 1—3. — P. 90—111. — DOI: 10.1016/j.pbiomolbio.2007.08.001.

108. *Nobile*, *F.* An active strain electromechanical model for cardiac tissue / F. Nobile, A. Quarteroni, R. Ruiz-Baier // Int. J. Numer. Methods Biomed. Eng. — 2012. — Vol. 28, no. 1. — P. 52—71. — DOI: 10.1002/cnm.1468.

109. *Ogden*, *R.* Large deformation isotropic elasticity–on the correlation of theory and experiment for incompressible rubberlike solids / R. Ogden // Proc. R. Soc. Lond. A Math. Phys. Sci. — 1972. — Vol. 326, no. 1567. — P. 565—584. — DOI: 10.1098/rspa.1972.0026.

110. *Ogden*, *R.* Non-linear elastic deformations / R. Ogden. — New York : Dover Publications, 1997. — P. 532. — (Dover Civil and Mechanical Engineering). — ISBN 978-0-486-69648-5.

111. *Onate*, *E.* Advances in the formulation of the rotation-free basic shell triangle / E. Onate, F. Flores // Comput. Method. Appl. M. — 2005. — Vol. 194, no. 21—24. — P. 2406—2443. — DOI: 10.1016/j.cma.2004.07.039.

112. *Ozaki*, *S.* Aortic Valve Reconstruction Using Autologous Pericardium for Aortic Stenosis / S. Ozaki [et al.] // Circ. J. — 2015. — Vol. 79, no. 7. — P. 1504—1510. — DOI: 10.1253/circj.CJ-14-1092.

113. *Ozaki*, *S.* Aortic valve reconstruction using self-developed aortic valve plasty system in aortic valve disease / S. Ozaki [et al.] // Interact. Cardiovasc. Thorac. Surg. — 2011. — Vol. 12, no. 4. — P. 550—553. — DOI: 10.1510/icvts.2010.253682.

114. *Ozaki*, *S.* Ozaki's procedure training video [Электронный ресурс] / S. Ozaki. — Tokyo : Department of Cardiovascular Surgery, 2016. — URL: https://www.youtube.com/watch?v=Kww3ewKltfc (visited on 12/31/2024).

115. *Ozolins*, *V.* Biomechanical Properties of Glutaraldehyde Treated Human Pericadium / V. Ozolins [et al.] // 14th Nordic-Baltic Conference on Biomedical Engineering and Medical Physics. — Berlin, Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg, 2008. — P. 143—145. — ISBN 978-3-540-69367-3. — DOI: 10.1007/978-3-540-69367-3_39.

116. *Pappalardo*, *O.* Mass-spring models for the simulation of mitral valve function: Looking for a trade-off between reliability and time-efficiency / O. Pappalardo [et al.] // Med. Eng. Phys. — 2017. — Vol. 47. — P. 93—104. — DOI: 10.1016/j.medengphy.2017.07.001.

117. *Pathmanathan*, *P.* Verification of computational models of cardiac electrophysiology / P. Pathmanathan, R. Gray // Int. J. Numer. Methods Biomed. Eng. — 2013. — Nov. — Vol. 30, no. 5. — P. 525—544. — DOI: 10.1002/cnm.2615.

118. *Pathmanathan*, *P.* A numerical method for cardiac mechanoelectric simulations / P. Pathmanathan, J. Whiteley // Ann. Biomed. Eng. — 2009. — Vol. 37, no. 5. — P. 860—873. — DOI: 10.1007/s10439-009-9663-8.

119. *Peskin, C.* Fiber architecture of the left ventricular wall: An asymptotic analysis / C. Peskin // Commun. Pure Appl. Math. — 1989. — Vol. 42, no. 1. — P. 79—113. — DOI: 10.1002/cpa.3160420106.

120. PETSc/TAO Users Manual [Электронный ресурс] : tech. rep. / S. Balay [et al.] ; Argonne National Laboratory. — 2024. — ANL-21/39 —Revision 3.22. — DOI: 10.2172/2205494. — URL: https://petsc.org.

121. *Podio-Guidugli, P.* Extreme elastic deformations / P. Podio-Guidugli, G. Caffarelli // Arch. Rational Mech. Anal. — 1991. — Vol. 115. — P. 311—328. — DOI: 10.1007/BF00375278.

122. *Polain de Waroux, J.* Mechanisms of Recurrent Aortic Regurgitation After Aortic Valve Repair / J. Polain de Waroux [et al.] // JACC Cardiovasc. Imaging. — 2009. — Vol. 2, no. 8. — P. 931—939. — DOI: 10.1016/j.jcmg.2009.04.013.

123. *Prakosa, A.* Personalized virtual-heart technology for guiding the ablation of infarct-related ventricular tachycardia / A. Prakosa [et al.] // Nat. Biomed. Eng. — 2018. — Vol. 2, no. 10. — P. 732—740. — DOI: 10.1038/s41551-018-0282-2.

124. *Pravdin, S.* Mathematical model of the anatomy and fibre orientation field of the left ventricle of the heart / S. Pravdin [et al.] // BioMed. Eng. OnLine. — 2013. — Vol. 12, no. 1. — P. 1—21. — DOI: 10.1186/1475-925X-12-54.

125. *Qu, Z.* Nonlinear and stochastic dynamics in the heart / Z. Qu [et al.] // Phys. Rep. — 2014. — Vol. 543, no. 2. — P. 61—162. — DOI: 10.1016/j.physrep.2014.05.002.

126. *Quarteroni, A.* Mathematical modelling of the human cardiovascular system: data, numerical approximation, clinical applications / A. Quarteroni, A. Manzoni, C. Vergara, [et al.]. — New York : Cambridge University Press, 2019. — P. 290. — (Cambridge monographs on applied and computational mathematics series). — ISBN 978-1-108-48039-0. — DOI: 10.1017/9781108616096.

127. *Quarteroni, A.* Integrated Heart—Coupling multiscale and multiphysics models for the simulation of the cardiac function / A. Quarteroni [et al.] // Comput. Methods Appl. Mech. Eng. — 2017. — Vol. 314. — P. 345—407. — DOI: 10.1016/j.cma.2016.05.031.

128. *Regazzoni, F.* A cardiac electromechanical model coupled with a lumped-parameter model for closed-loop blood circulation / F. Regazzoni [et al.] // J. Comput. Phys. — 2022. — Vol. 457. — P. 111083. — DOI: 10.1016/j.jcp.2022.111083.

129. *Remme, E.* Distributions of myocyte stretch, stress and work in models of normal and infarcted ventricles / E. Remme, M. Nash, P. Hunter // Cardiac Mechano-electric Feedback and Arrhythmias: From Pipette to Patient. — Philadelphia : Elsevier Saunders, 01/2005. — P. 381—391. — ISBN 978-1-416-00034-1.

130. *Ridley, C.* Aortic leaflet billowing as a risk factor for repair failure after aortic valve repair / C. Ridley [et al.] // J. Cardiothorac. Vasc. Anesth. — 2017. — Vol. 31, no. 3. — P. 1001—1006. — DOI: 10.1053/j.jvca.2017.02.019.

131. *Rineau, L.* A generic software design for Delaunay refinement meshing / L. Rineau, M. Yvinec // Comput. Geom. — 2007. — Vol. 38, no. 1. — P. 100—110. — DOI: 10.1016/j.comgeo.2006.11.008. — Special Issue on CGAL.

132. *Rodríguez-Caulo, E.* Biological versus mechanical prostheses for aortic valve replacement / E. Rodríguez-Caulo [et al.] // J. Thorac. Cardiovasc. Surg. — 2023. — Vol. 165, no. 2. — P. 609—617. — DOI: 10.1016/j.jtcvs.2021.01.118.

133. *Rossi, D.* A review of automatic time-stepping strategies on numerical time integration for structural dynamics analysis / D. Rossi [et al.] // Eng. Struct. — 2014. — Vol. 80. — P. 118—136. — DOI: 10.1016/j.engstruct.2014.08.016.

134. *Sachse, F.* Computational cardiology: modeling of anatomy, electrophysiology, and mechanics. Vol. 2966 / F. Sachse. — Berlin : Springer Science & Business Media, 2004. — P. 326. — (Lecture Notes in Computer Science). — ISBN 978-3-540-21907-1. — DOI: 10.1007/b96841.

135. *Sainte-Marie, J.* Modeling and estimation of the cardiac electromechanical activity / J. Sainte-Marie [et al.] // Comput. Struct. — 2006. — Vol. 84, no. 28. — P. 1743—1759. — DOI: 10.1016/j.compstruc.2006.05.003.

136. *Salamatova, V. Y.* Method of Hyperelastic Nodal Forces for Deformation of Nonlinear Membranes / V. Y. Salamatova, A. A. Liogky // Differ. Equ. — 2020. — July. — Vol. 56, no. 7. — P. 950—958. — DOI: 10.1134/s0012266120070137.

137. *Salamatova, V. Y.* Impact of Material Stiffness and Anisotropy on Coaptation Characteristics for Aortic Valve Cusps Reconstructed from Pericardium / V. Y. Salamatova, A. A. Liogky, P. A. Karavaikin // Mathematics. — 2021. — Sept. — Vol. 9, no. 18. — P. 2193. — DOI: 10.3390/math9182193.

138. *Salamatova, V. Y.* Numerical assessment of coaptation for auto-pericardium based aortic valve cusps / V. Y. Salamatova, A. A. Liogky, P. A. Karavaikin, [et al.] // Russ. J. Numer. Anal. M. — 2019. — Oct. — Vol. 34, no. 5. — P. 277—287. — DOI: 10.1515/rnam-2019-0024.

139. *Salvador, M.* An intergrid transfer operator using radial basis functions with application to cardiac electromechanics / M. Salvador, L. Dedè, A. Quarteroni // Comput. Mech. — 2020. — Vol. 66, no. 2. — P. 491—511. — DOI: 10.1007/s00466-020-01861-x.

140. *Salvador, M.* Electromechanical modeling of human ventricles with ischemic cardiomyopathy: numerical simulations in sinus rhythm and under arrhythmia / M. Salvador [et al.] // Comput. Biol. Med. — 2021. — Vol. 136. — P. 104674. — DOI: 10.1016/j.compbiomed.2021.104674.

141. *Sansour, C.* On the physical assumptions underlying the volumetric-isochoric split and the case of anisotropy / C. Sansour // Eur. J. Mech. A/Solids. — 2008. — Vol. 27, no. 1. — P. 28—39. — DOI: 10.1016/j.euromechsol.2007.04.001.

142. *Schäfers, H.* A new approach to the assessment of aortic cusp geometry / H. Schäfers, B. Bierbach, D. Aicher // J. Thorac. Cardiovasc. Surg. — 2006. — Vol. 132, no. 2. — P. 436—438. — DOI: 10.1016/j.jtcvs.2006.04.032.

143. Implicit and Explicit Implementation of the Dynamic Relaxation Method for the Definition of Initial Equilibrium Configurations of Flexible Lines. Volume 1: Offshore Technology, Offshore Wind Energy, Ocean Research Technology, LNG Specialty Symposium. — 06/2006. — P. 131—140. — (International Conference on Offshore Mechanics and Arctic Engineering). — DOI: 10.1115/OMAE2006-92153.

144. *Siondalski, P.* Human aortic bioprosthesis / P. Siondalski [et al.] // Eur. J. Cardiothorac. Surg. — 2008. — Vol. 34, no. 6. — P. 1268—1268. — DOI: 10.1016/j.ejcts.2008.08.016.

145. *Smith, N.* Multiscale computational modelling of the heart / N. Smith [et al.] // Acta Numer. — 2004. — Vol. 13. — P. 371. — DOI: 10.1017/S0962492904000200.

146. *Streeter Jr, D.* Three-dimensional fiber orientation in the mammalian left ventricular wall / D. Streeter Jr [et al.] // Cardiovascular system dynamics, III ventricular dynamics. — Cambridge, Mass., 1978. — P. 73—84.

147. *Strocchi, M.* A publicly available virtual cohort of four-chamber heart meshes for cardiac electro-mechanics simulations / M. Strocchi [et al.] // PloS one. — 2020. — Vol. 15, no. 6. — e0235145. — DOI: 10.1371/journal.pone.0235145.

148. *Sturla, F.* Impact of modeling fluid – structure interaction in the computational analysis of aortic root biomechanics / F. Sturla [et al.] // Med. Eng. Phys. — 2013. — Vol. 35, no. 12. — P. 1721—1730. — DOI: 10.1016/j.medengphy.2013.07.015.

149. *Sun, W.* Simulated Bioprosthetic Heart Valve Deformation under Quasi-Static Loading / W. Sun, A. Abad, M. Sacks // J. Biomech. Eng. — 2005. — July. — Vol. 127, no. 6. — P. 905—914. — DOI: 10.1115/1.2049337.

150. *Syomin, F.* Computationally efficient model of myocardial electromechanics for multiscale simulations / F. Syomin, A. Osepyan, A. Tsaturyan // PloS One. — 2021. — Vol. 16, no. 7. — e0255027. — DOI: 10.1371/journal.pone.0255027.

151. *Syomin, F. A.* A simple model of cardiac muscle for multiscale simulation: Passive mechanics, crossbridge kinetics and calcium regulation / F. A. Syomin, A. K. Tsaturyan // J. Theor. Biol. — 2017. — Vol. 420. — P. 105—116. — DOI: 10.1016/j.jtbi.2017.02.021.

152. *Syomin, F.* Effect of strain-dependent conduction slowing on the re-entry formation and maintenance in cardiac muscle: 2D computer simulation / F. Syomin, V. Galushka, A. Tsaturyan // Int. J. Numer. Methods Biomed. Eng. — 2023. — Vol. 39, no. 11. — e3676. — DOI: 10.1002/cnm.3676.

153. *Sze, K.* Popular benchmark problems for geometric nonlinear analysis of shells / K. Sze, X. Liu, S. Lo // Finite Elem. Anal. Des. — 2004. — Vol. 40, no. 11. — P. 1551—1569. — DOI: 10.1016/j.finel.2003.11.001.

154. *Tepole, A.* Isogeometric Kirchhoff–Love shell formulations for biological membranes / A. Tepole [et al.] // Comput. Method. Appl. M. — 2015. — Vol. 293. — P. 328—347. — DOI: 10.1016/j.cma.2015.05.006.

155. *Thakeb, Y.* Short-term competency of aortic valve repair in Egyptian patients / Y. Thakeb [et al.] // J. Card. Surg. — 2020. — Vol. 35, no. 3. — P. 598—602. — DOI: 10.1111/jocs.14429.

156. *Timmermann, V.* An integrative appraisal of mechano-electric feedback mechanisms in the heart / V. Timmermann [et al.] // Prog. Biophys. Mol. Biol. — 2017. — Vol. 130. — P. 404—417. — DOI: 10.1016/j.pbiomolbio.2017.08.008.

157. *Torrent-Guasp, F.* Sobre morfologia y funcionalismo cardiacos. IV Communicacion / F. Torrent-Guasp // Rev. Esp. Cardiol. — 1967. — Vol. 20, no. 1. — P. 2—13.

158. *Torrent-Guasp, F.* Towards new understanding of the heart structure and function / F. Torrent-Guasp [et al.] // Eur. J. Cardiothorac. Surg. — 2005. — Vol. 27, no. 2. — P. 191—201. — DOI: 10.1016/j.ejcts.2004.11.026.

159. *Travaglino, S.* Computational optimization study of transcatheter aortic valve leaflet design using porcine and bovine leaflets / S. Travaglino [et al.] // J. Biomech. Eng. — 2020. — Jan. — Vol. 142, no. 1. — P. 011007. — DOI: 10.1115/1.4044244.

160. *Trayanova, N.* Whole-heart modeling: applications to cardiac electrophysiology and electromechanics / N. Trayanova // Circ. Res. — 2011. — Vol. 108, no. 1. — P. 113—128. — DOI: 10.1161/CIRCRESAHA.110.223610.

161. *Trayanova, N.* Computational cardiology: the heart of the matter / N. Trayanova // Int. Sch. Res. Notices. — 2012. — Vol. 2012, no. 1. — P. 269680. — DOI: 10.5402/2012/269680.

162. *Tsao, C.* Heart Disease and Stroke Statistics—2022 Update: A Report From the American Heart Association / C. Tsao [et al.] // Circulation. — 2022. — Vol. 145, no. 8. — e153—e639. — DOI: 10.1161/CIR.0000000000001052.

163. User documentation for kinsol v5.7.0 (sundials v5.7.0) [Электронный ресурс] : tech. rep. / A. Hindmarsh [et al.] ; Tech. Report. — 2021. — URL: https://computing.llnl.gov/projects/sundials/kinsol.

164. *Vassilevski, Y.* INMOST Platform Technologies for Numerical Model Development / Y. Vassilevski [et al.] // Parallel Finite Volume Computation on General Meshes. — Cham : Springer, 2020. — P. 127—177. — ISBN 978-3-030-47232-0. — DOI: 10.1007/978-3-030-47232-0_6.

165. *Vassilevski, Y. V.* Application of Hyperelastic Nodal Force Method to Evaluation of Aortic Valve Cusps Coaptation: Thin Shell vs. Membrane Formulations / Y. V. Vassilevski, A. A. Liogky, V. Y. Salamatova // Mathematics. — 2021. — June. — Vol. 9, no. 12. — P. 1450. — DOI: 10.3390/math9121450.

166. *Vassilevski, Y. V.* How material and geometrical nonlinearity influences diastolic function of an idealized aortic valve / Y. V. Vassilevski, V. Y. Salamatova, A. A. Liogky // Continuum Mech. Thermodyn. — 2022. — Dec. — Vol. 35, no. 4. — P. 1581—1594. — DOI: 10.1007/s00161-022-01176-7.

167. *Vergori, L.* On anisotropic elasticity and questions concerning its finite element implementation / L. Vergori [et al.] // Comput. Mech. — 2013. — Vol. 52. — P. 1185—1197. — DOI: 10.1007/s00466-013-0871-6.

168. *Wang, M.* Compressible hyperelastic models for soft biological tissue: a review / M. Wang, F. Liu // J. Biomater. Tissue Eng. — 2018. — Vol. 8, no. 10. — P. 1375—1389. — DOI: 10.1166/jbt.2018.1888.

169. *Wang, Z.* Human biventricular electromechanical simulations on the progression of electrocardiographic and mechanical abnormalities in post-myocardial infarction / Z. Wang [et al.] // EP Europace. — 2021. — Vol. 23, Supplement_1. — P. i143—i152. — DOI: 10.1093/europace/euaa405.

170. *Whiteley, J.* Soft tissue modelling of cardiac fibres for use in coupled mechano-electric simulations / J. Whiteley, M. Bishop, D. Gavaghan // Bull. Math. Biol. — 2007. — Vol. 69, no. 7. — P. 2199—2225. — DOI: 10.1007/s11538-007-9213-1.

171. *Wineman, A.* Material symmetry restrictions on constitutive equations / A. Wineman, A. Pipkin // Arch. Rational Mech. Anal. — 1964. — Vol. 17. — P. 184—214. — DOI: 10.1007/BF00282437.

172. *Wriggers, P.* Nonlinear finite element methods / P. Wriggers. — Berlin : Springer Science & Business Media, 2008. — P. 560. — ISBN 978-3-540-71000-4. — DOI: 10.1007/978-3-540-71001-1.

173. *Wu, L.* A Safe and Fast Repulsion Method for GPU-based Cloth Self Collisions / L. Wu [et al.] // ACM Trans. Graph. — New York, NY, USA, 2020. — Dec. — Vol. 40, no. 1. — DOI: 10.1145/3430025.

174. *Xu, B.-B.* High-order 3D virtual element method for linear and nonlinear elasticity / B.-B. Xu, W.-L. Fan, P. Wriggers // Comput. Methods Appl. Mech. Eng. — 2024. — Vol. 431. — P. 117258. — DOI: 10.1016/j.cma.2024.117258.

175. *Yushkevich, P.* User-guided 3D active contour segmentation of anatomical structures: Significantly improved efficiency and reliability / P. Yushkevich [et al.] // NeuroImage. — 2006. — Vol. 31, no. 3. — P. 1116—1128. — DOI: j.neuroimage.2006.01.015.

176. *Zakerzadeh, R.* Computational methods for the aortic heart valve and its replacements / R. Zakerzadeh, M. Hsu, M. Sacks // Expert Rev. Med. Devices. — 2017. — Vol. 14, no. 11. — P. 849—866. — DOI: 10.1080/17434440.2017.1389274.

177. *Zhang, L.* Meshfree and particle methods in biomechanics: Prospects and challenges / L. Zhang, A. Ademiloye, K. Liew // Arch. Computat. Methods Eng. — 2019. — Vol. 26, no. 5. — P. 1547—1576. — DOI: 10.1007/s11831-018-9283-2.

178. *Zigras, T.* Biomechanics of Human Pericardium: A Comparative Study of Fresh and Fixed Tissue : Master thesis / Zigras T.C. — Montreal, Quebec, Canada : McGill University, 2007. — URL: https://escholarship.mcgill.ca/downloads/p2676z58n (visited on 12/31/2024).

179. *Василевский, Ю.* Автоматизированные технологии построения неструктурированных расчетных сеток. Т. IV / Ю. Василевский [и др.]. — М. : Физматлит, 2016. — С. 216. — (Нелинейная вычислительная механика прочности). — ISBN 978-5-9221-1730-2.

180. *Годунов, С.* Разностный метод численного расчета разрывных решений уравнений гидродинамики / С. Годунов // Матем. сб. — 1959. — Т. 47(89), № 3. — С. 271—306. — URL: http://mi.mathnet.ru/sm4873.

181. *Каравайкин, П. А.* Математическое моделирование в прогнозировании замыкательной функции аортального клапана после неокуспидизации : Канд. дис. : 3.1.15 / Каравайкин П. А. — Москва : ФГБНУ «РНЦХ им. акад. Б.В. Петровского», 2023. — URL: https://old.med.ru/sites/default/files/docs/Karavaikin_Avtoref.pdf (дата обр. 31.12.2024).

182. *Келлер, И.* Механика сплошной среды. Законы сохранения / И. Келлер. — Пермь, 2022. — С. 260. — ISBN 978-5-398-00079-5.

183. *Легкий, А. А.* Влияние жёсткости и степени анизотропии материала на коаптационные характеристики реконструированного аортального клапана: мембрана и оболочка / А. А. Легкий, В. Ю. Саламатова // Труды 64-й Всероссийской научной конференции МФТИ. — Москва–Долгопрудный-Жуковский: МФТИ, 2021. — ISBN 978-5-7417-0788-3.

184. *Легкий, А. А.* Применение метода гиперупругих узловых сил для оценки коаптации створок модели аортального клапана: оболочечная формулировка против мембранной / А. А. Легкий, В. Ю. Саламатова // Всероссийская конференция молодых ученых-механиков YSM-2021. Тезисы докладов. — М.: Издательство Московского университета, 2021. — ISBN 978-5-19-011642-7.

185. *Легкий, А. А.* Влияние материальной и геометрической нелинейности, а также жёсткости и анизотропии материала на закрытое состояние модели аортального клапана / А. А. Легкий, В. Ю. Саламатова // XIII Всероссийский Съезд по теоретической и прикладной механике: сборник тезисов докладов. Т. 4. — СПб.: ПОЛИТЕХ-ПРЕСС, 2023. — С. 72—74. — ISBN 978-5-7422-8283-9. — DOI: 10.18720/SPBPU/2/id23-630.

Приложение A

Параметры сопряжённой модели электромеханики миокарда

Монодомен		
σ_{iso}	0.5	$\frac{mm^2}{ms}$
σ_{aniso}	5	$\frac{mm^2}{ms}$
Ёмкость мембраны		
k_m	10^{-3}	ms^{-1}
K_m	2.5	-
Модель А-П		
V_{min}	-80	mV
V_{norm}	100	mV
τ	12.9	ms
ε	0.01	-
μ_1	0.2	-
μ_2	0.3	-
k	8	-
a	0.1	-
k_{i1}	0	-
k_{i2}	0	-
Механика		
ρ_0	1	$\frac{mg}{mm^3}$
μ	0.55	kPa
b	2.85	-
K	50	kPa
Реакция титина		
t_{tit}	1.0297	kPa
q_1	37.0216	-
q_2	-257.471	-
q_2^*	772.412	-
q_3	556.322	-

Акт. напряжения		
l_{s0}	$1.90 \cdot 10^{-3}$	mm
l_0	$1.30 \cdot 10^{-3}$	mm
l_m	$1.63 \cdot 10^{-3}$	mm
l_z	$35 \cdot 10^{-6}$	mm
l_a	$1.12 \cdot 10^{-3}$	mm
l_b	$0.16 \cdot 10^{-3}$	mm
p_{f1}	0.5	-
E	$2.5 \cdot 10^{-3}$	$\frac{mN}{mm}$
N_m	$283 \cdot 10^6$	mm^{-2}
N_{xb}	150	-
h	10^{-5}	mm
k_{cb}	$75 \cdot 10^{-3}$	ms^{-1}
k_{21}	20	-
γ	4	-
δ^*	0.4	-
δ_2^*	0.37	-
a_{10}	1.5	-
b_{10}	8.5	-
B_{cyt}	130	μM
G_{xfer}	$3.8 \cdot 10^{-3}$	ms^{-1}
G_{leak}	$3 \cdot 10^{-5}$	ms^{-1}
k_{NCX}	0.8	-
k_4	$2.5 \cdot 10^{-4}$	ms^{-1}
K_2	125	-
K_R	200	μM

Нач. условия		
Монодомен		
υ	-80	mV
Ёмкость мембраны		
w_{c_m}	1	-
Модель А-П		
w_ν	0.02	-
Механика		
$\mathbf{u}$	$\mathbf{0}$	mm
$\partial_t \mathbf{u}$	$\mathbf{0}$	$\frac{mm}{ms}$
Акт. напряжения		
n	10^{-6}	-
A_1	0.018	-
A_2	0.018	-
c	0.078	μM
c_{SS}	0.080	μM
c_{SR}	616	μM
p	0.37	-
R	0.265	-
θ	0.5	-

Таблица 4 — Слева коэффициенты отдельных подмоделей (две колонки), а справа колонка с начальными условиями. Данные параметры использовались в численных экспериментах раздела 2.5, если не указывалось иного. Для модели активных напряжений (центральный ряд) указаны только параметры, чьи значения отличались от приведённых в таблице [150, Table 1].

Приложение Б

Моменты активации контрольных точек куска миокарда

case \ point				$\mathbf{p}_1$		$\mathbf{p}_3$		$\mathbf{p}_4$		$\mathbf{p}_5$	
a_e	a_m	τ_m	τ_e	t_{act}	t_{contr}	t_{act}	t_{contr}	t_{act}	t_{contr}	t_{act}	t_{contr}
12	12	0.1	0.01	154.473	185.206	289.248	363.155	340.603	451.565	394.210	535.809
a_e	a_m	τ_m	τ_e	Δt_{act}	Δt_{contr}	Δt_{act}	Δt_{contr}	Δt_{act}	Δt_{contr}	Δt_{act}	Δt_{contr}
12	9	0.1	0.01	-0.136	-0.098	-0.554	-0.734	-0.893	-1.475	-0.827	-0.964
12	6	0.1	0.01	-0.137	-0.119	-0.558	-0.725	-0.896	-0.939	-0.832	-1.347
12	4	0.1	0.01	-0.137	-0.174	-0.562	-1.011	-0.900	-1.416	-0.837	-0.206
12	3	0.1	0.01	-0.139	-0.159	-0.567	-1.253	-0.906	-1.030	-0.846	-1.754
12	2	0.1	0.01	-0.142	-0.375	-0.586	0.122	-0.926	-2.235	-0.872	-1.286
12	4	0.2	0.01	-0.139	-0.203	-0.573	-1.224	-0.915	-0.940	-0.861	-2.333
12	4	0.5	0.01	-0.144	-0.303	-0.605	-1.748	-0.958	-2.243	-0.932	-3.090
12	4	1.0	0.01	-0.152	-0.516	-0.659	-2.413	-1.028	-3.420	-1.047	-4.745
12	4	2.0	0.01	1.176	-1.179	-0.500	-4.041	-1.091	-5.540	-0.061	-7.188
10	4	0.1	0.01	-0.312	-0.251	-1.383	-2.074	-1.837	-2.374	-2.225	-3.319
10	4	1.0	0.01	-0.326	-0.605	-1.490	-3.623	-1.977	-4.718	-2.483	-5.653
10	4	1.0	0.05	-0.185	-0.445	-0.973	-3.069	-1.438	-2.690	-1.682	-4.951
10	4	1.0	0.10	-0.011	-0.243	-0.373	-2.205	-0.805	-1.871	-0.808	-3.831
10	4	1.0	0.20	0.327	0.072	0.728	-0.681	1.072	-0.089	0.689	-1.965
10	4	1.0	0.50	1.809	1.185	4.918	3.937	5.692	4.810	6.266	3.996
10	4	1.0	1.00	3.865	2.653	11.305	11.819	13.210	12.712	15.117	12.964

Таблица 5 — Времена активации и сокращения для различных степеней дискретизации в численном эксперименте об активации неоднородного куска миокарда. В верхней части таблицы показаны времена активации и сокращения полученные для референтного решения. Остальная часть таблицы демонстрирует отклонения времён от референтных как $\Delta t_{act} = t_{act} - t_{act}^{ref}$, $\Delta t_{contr} = t_{contr} - t_{contr}^{ref}$. Время в таблице в мс. Величины в $\mathbf{p}_2$ не представлены, поскольку в этой точке не были удовлетворены критерии активации и сокращения.

Приложение В

Автоматические алгоритмы размещения створок в полости аорты

Input: узлы ASL $\{\mathbf{p}_v^i\}_{v=1}^{N^i}$, толщины створок H^i, направленная вдоль $\mathbf{n}$ и проходящая точку O ось $\mathbf{l}_O$, поверхность аорты S_a, параметр $k_1 = 1.1$

Procedure `Shift`(*примитив* c, *точка* $\mathbf{q} \in c$, *точка* $\mathbf{r}$) :
    Найти w^c — барикоординаты $\mathbf{q}$ на c;
    Сдвинуть каждый узел $\mathbf{p}_v \in V(c)$ примитива c как
        $\mathbf{p}_v \leftarrow \mathbf{p}_v + \frac{w_v^c}{\sum_i (w_i^c)^2}(\mathbf{r} - \mathbf{q})$;
end procedure

Найти мн-во $\mathcal{A}$ пар узел-ребро $\{\mathbf{p}_{v_0}^i, e_{v_1}^{p(i+1)}\}$ и ребро-ребро $\{e_{v_0}^i, e_{v_1}^{p(i+1)}\}$, расстояние между которыми меньше $H^{i,p(i+1)} = (H^i + H^{p(i+1)})/2$ ($p(i) = i \ \% \ 3$; e_v — отрезок $[\mathbf{p}_v, \mathbf{p}_{v+1}]$);
Найти мн-во $\mathcal{B} \subset \mathcal{A}$ пересекающихся пар из $\mathcal{A}$;
while $\mathcal{A} \neq \varnothing$ **do**
    if $\mathcal{B} \neq \varnothing$ **then**
        Взять любую пару $\{c_0, c_1\} \in \mathcal{B}$;
        Задать $\texttt{LocDist}(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1) \leftarrow \operatorname{sgn}\left([(\mathbf{x}_0 - O) \times (\mathbf{x}_1 - O)] \cdot \mathbf{n}\right) \ |\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0|$;
    else
        Взять любую пару $\{c_0, c_1\} \in \mathcal{A}$;
        Задать $\texttt{LocDist}(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1) \leftarrow |\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0|$;
    end
    Найти $\{\mathbf{q}_0, \mathbf{q}_1\} \leftarrow \arg\min\limits_{\mathbf{x}_0 \in c_0, \mathbf{x}_1 \in c_1} \texttt{LocDist}(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1)$;
    Задать i — номер ASL, которой соответствует c_0, и $H \leftarrow H^{i,p(i+1)}$;
    Найти наименьший $\varphi > 0$ такой, что
        $\texttt{LocDist}(\texttt{Rot}_{\mathbf{l}_O}(-\varphi, \mathbf{q}_0), \texttt{Rot}_{\mathbf{l}_O}(\varphi, \mathbf{q}_1)) = k_1 \cdot H$;
    Сдвинуть узлы c_0: $\texttt{Shift}(c_0, \mathbf{q}_0, \texttt{Rot}_{\mathbf{l}_O}(-\varphi, \mathbf{q}_0))$;
    Сдвинуть узлы c_1: $\texttt{Shift}(c_1, \mathbf{q}_1, \texttt{Rot}_{\mathbf{l}_O}(+\varphi, \mathbf{q}_1))$;
    Спроецировать сдвинутые узлы на S_a;
    Обновить геодезические линии между узлами и обновить $\mathcal{A}$ и $\mathcal{B}$;
end

Алгоритм 1 — Коррекция линии шва ASL. Функция $\mathrm{Rot}_{\mathbf{l}_O}(\varphi, \mathbf{p})$ возвращает поворот точки $\mathbf{p}$ вокруг $\mathbf{l}_O$ на угол φ против часовой стрелки

Input: ломаная ASL $\mathbf{r}_{asl}^{(0)}$, состоящая из узлов $\{\mathbf{p}_v\}_{v=1}^{N}$, соединённых отрезками $e_v = [\mathbf{p}_v, \mathbf{p}_{v+1}]$; толщина H; пов-ть аорты S_a; $k_2 = 1.4$

$\mathbf{r}_{asl}^{(1)} \leftarrow \mathbf{r}_{asl}^{(0)}$, $h_0 \leftarrow H$;

$\alpha \leftarrow \min(\alpha_0, \pi/2)$, где $\alpha_0 = \min\limits_{v \in \overline{1,N}} \angle \mathbf{N}_o(\mathbf{p}_v^{(0)}, S_a), \Pi(\mathbf{p}_v^{(0)})$, где $\Pi(\mathbf{p}_v^{(0)})$ — многогранный угол, составленный из граней S_a, разделяющих $\mathbf{p}_v^{(0)}$;

repeat

    $h_0 \leftarrow h_0/2$;

    Сдвинуть все узлы $\mathbf{p}_v^{(1)} = \mathbf{p}_v^{(0)} + h_0 \cdot \mathbf{N}_o(\mathbf{p}_v^{(0)}, S_a)$;

until $\operatorname{dist}(\mathbf{r}_{asl}^{(1)}, S_a) > h_0 \sin(\alpha)/2$ **and** $\max\limits_{v \in \overline{1,N}} \left(\frac{|e_v^{(0)}|}{|e_v^{(1)}|}, \frac{|e_v^{(1)}|}{|e_v^{(0)}|} \right) < 2$;

$\hat{d} \leftarrow k_2 H/2$, $\xi \leftarrow 0$;

repeat

    $\xi \leftarrow \min \left(\xi + (\operatorname{dist}(\mathbf{r}_{asl}^{(1)}, S_a) - \xi)/2, H/2 \right)$;

    Решить задачу мех. равновесия $\mathbf{p}^{(1)} \leftarrow \arg \min\limits_{\mathbf{p}^{(1)} \in (\mathbb{R}^3)^N} [U + \Phi_s + \Psi_c]$:

        $a_v(\mathbf{p}^{(1)}) := |e_v^{(1)}|/|e_v^{(0)}|$, $\Delta p^v(\mathbf{p}^{(1)}) := \mathbf{p}_v^{(1)} - \mathbf{p}_v^{(0)}$,

        $U(\mathbf{p}^{(1)}) := \sum_{e_v} |e_v^{(0)}| \, (H/2)^2 \, (a_v^2 + 2/a_v - 3)$,

        $\Phi_s(\mathbf{p}^{(1)}) := \sum_{e_v} |e_v^{(0)}| \left[|\Delta p^v|^2 + |\Delta p^{v+1}|^2 + \Delta p^v \cdot \Delta p^{v+1} \right] /12$,

        $\Psi_c(\hat{d}, \xi, \mathbf{p}^{(1)})$ аналогичен (1.51): контактируют $\mathbf{r}_{asl}^{i,(1)}$ и S_a;

until $\xi \geqslant H/2$;

Алгоритм 2 — Отделение линии шва от поверхности аорты

Func `AlignInsert(`*сжатие* s, *геометрия створки* $S_c^{i,(0)}$`)` :

    Масштабировать створки $S_c^i \leftarrow s \cdot S^{i,(0)}$;

    Сдвинуть и повернуть створки S_c^i так, чтобы:

        1) S_c^i лежал плоскости векторов $\mathbf{a}_P^i$ и $\mathbf{n}$,

        2) K^i совпадало с L^i и $\mathbf{a}_N^i \uparrow\uparrow \mathbf{a}_P^i$,

        3) Γ_{csl}^i находилась ниже Γ_{free}^i относительно $\mathbf{n}$;

    return S_c^i;

Алгоритм 3 — Алгоритм виртуального размещения створок (часть 1): размещение масштабированных створок в окрестности L^i

Func `ApproxSolveProblem(`*недеформ. сост. створок* $S_c^{i,*}$*; текущее сост. створок* S_c^i*; релаксация материала* α*; жёсткость пружин* K*, притягивающих узлы* Γ_{csl}^i *к* $\mathbf{r}_{asl}^i$*; давление* P`)` :

  $\varepsilon_{strain} = 0.01$, $N_{maxits} = 10$;

  Совершать итерации по решению задачи равновесия, где

    1) ненагр. состояние $S_c^{i,*}$,

    2) материал створки ψ_α (3.9),

    3) включена сила $\mathbf{F}^{e,f-b}$ (3.10),

    4) если $K < \infty$, на Γ_{csl}^i налагаются пружины жёсткости K, притягивающие узлы Γ_{csl}^i к $\mathbf{r}_{asl}^i$, иначе гран. условия (3.7)-(3.8),

    5) приложено давление P,

    6) контактный потенциал $\Psi_c(\hat{d}, \xi)$ соотв. (1.51) для толщин H^i,

  до стабилизации деформации $\frac{|W^n - W^{n-1}|}{|W^1 - W^0|} \leqslant \varepsilon_{strain}$ или достижения макс. числа итераций $n = N_{maxits}$, где

    $W = \sum_{i=0}^{2} \sum_{T \in S_c^{i,*}} \int_T \left(||\mathbb{C}_S||_2 + ||\mathbb{C}_S^{-1}||_2 \right) d\mathbf{X}$;

  return приближённое решение задачи $(S_c^i)^n$;

Алгоритм 4 — Алгоритм виртуального размещения створок (часть 2): неточное решение задачи равновесия

Input: плоские недеформированные створки $S_c^{i,(0)}$ площадью $|S_c^{i,(0)}|$ с закрепляемой границей Γ^i_{csl}, начальные длины CSL $|\Gamma^{i,(0)}_{csl}|$, кривые ASL $\mathbf{r}^i_{asl}$, пов-ть аорты S_a, диастолическое давление P_{dias}, $k_{scale} = 0.8$, $k_{min} = 0.001$

$s_0 \leftarrow \min\left(\frac{||\mathbf{a}^0_P||}{||\mathbf{a}^0_N||}, \frac{||\mathbf{a}^1_P||}{||\mathbf{a}^1_N||}, \frac{||\mathbf{a}^2_P||}{||\mathbf{a}^2_N||}, 1\right)$; $s_{min} \leftarrow k_{min} s_0$, $s \leftarrow s_0/k_{scale}$;

repeat

    $s \leftarrow k_{scale} s$; $S^i_c \leftarrow \texttt{AlignInsert}(s, S_c^{i,(0)})$;

    Перенести узлы границы Γ^i_{csl} на кривую $\mathbf{r}^i_{asl}$ согласно (3.7);

    Определим $\mathcal{F}^i_{nocsl}$ — мн-во ячеек S^i_c, не содержащих вершин на Γ^i_{csl};

    if $\mathcal{F}^i_{nocsl} \cap S_a = \varnothing\ \forall i$ **and** $\exists i : (S^i_c \cap S_a) \setminus \mathbf{r}^i_{asl} \neq \varnothing$ **then**

        $\mathbf{u}^i \leftarrow \mathrm{norm}(\mathbf{n} \times \mathbf{a}^i_P)$;

        Найти наибольший $d \in \mathbb{R}$ для которого $\forall\ i,j :\ i \neq j$ $\mathrm{dist}(\mathcal{F}^i_{nocsl} + d\ \mathbf{u}^i, \mathcal{F}^j_{nocsl} + d\ \mathbf{u}^j) \geqslant (H^i + H^j)/2$;

        Сдвинуть вершины $\mathcal{V}(S^i_c) \setminus \mathcal{V}(\Gamma_{csl})$ на вектор $\max(d, 0)\mathbf{u}^i$;

    end

until *пов-ти* S^i_c *и* S_a *не имеют пересечений* **or** $s < s_{min}/k_{scale}$;

if *пов-ти* S^i_c *и* S_a *всё ещё имеют пересечения* **then**

    $s \leftarrow s_0/k_{scale}$;

    repeat

        $s \leftarrow k_{scale} s$; $S^i_c \leftarrow \texttt{AlignInsert}(s, S_c^{i,(0)})$;

    until *пов-ти* S^i_c *и* S_a *не имеют пересечений*;

    $K \leftarrow \min\limits_{i \in \overline{1,3}} \left(P_{dias}|S_c^{i,(0)}|/(20\ |\Gamma^{i,(0)}_{csl}|\ |\mathbf{a}^i_P|)\right)$;

    repeat

        $K \leftarrow 2K$;

        $S^i_c \leftarrow \texttt{ApproxSolveProblem}(S^{i,*}_c = s \cdot S_c^{i,(0)}, S^i_c, \alpha = 1, K, P = P_{dias})$;

    until *перенос узлов границы* Γ^i_{csl} *на* $\mathbf{r}^i_{asl}$ *не создаёт пересечений*;

    Перенести узлы границы Γ^i_{csl} на кривую $\mathbf{r}^i_{asl}$ согласно (3.7);

end

Алгоритм 5 — Алгоритм виртуального размещения створок (часть 3): перенос узлов границы Γ_{csl} на кривую $\mathbf{r}_{asl}$ без пересечений.

Input: недеформ. створки $S_c^{i,(0)}$, деформ. размещ. створки S_c^i, аорта S_a, сжатие s из Алгоритма 4, диастолическое давление P_{dias}, $k_{grow} = 100$, $k_{repair} = 2$

while $s \leqslant 1$ **do**
  $S_c^i \leftarrow$`ApproxSolveProblem` $(S_c^{i,*} = s \cdot S_c^{i,(0)},\ S_c^i,\ \alpha = 1,\ K = \infty,\ P = P_{dias})$;
  $s \leftarrow \mathrm{ifelse}(s < 1, \min(k_{repair} \cdot s, 1), 2)$;
end
$\alpha \leftarrow 1$;
repeat
  $S_c^i \leftarrow$`ApproxSolveProblem` $(S_c^{i,*} = S_c^{i,(0)},\ S_c^i,\ \alpha,\ K = \infty,\ P = P_{dias})$;
  if $\psi_{\alpha/2} < k_{grow}\psi_\alpha$ **then**
    $\alpha \leftarrow \alpha/2$;
  else
    Бинарным поиском на $[\alpha/2, \alpha]$ найти наименьший α^* для которого $\psi_{\alpha^*} < k_{grow}\psi_\alpha$;
    $\alpha \leftarrow \alpha^*$;
  end
until $\psi < \infty$;

Алгоритм 6 — Алгоритм виртуального размещения створок (часть 4): расправление и релаксация деформаций.