

ОТЗЫВ

официального оппонента, доктора физико-математических наук Вершинина Анатолия Викторовича на диссертационную работу

Легкого Алексея Андреевича

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

представленную на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2 — Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Актуальность темы исследования. Диссертационная работа Легкого А.А. посвящена решению актуальных задач вычислительной биомеханики сердца, а именно: разработке программной платформы для проведения численных экспериментов с сопряжёнными моделями электромеханики миокарда и созданию численной модели для расчёта диастолического состояния реконструированного аортального клапана. Оба направления исследований имеют высокую значимость как для фундаментальной науки, так и для клинической практики. Разработанная модель аортального клапана, учитывающая непосредственные данные о геометрии корня аорты конкретного пациента, позволяет прогнозировать смыкание створок, созданных из перикарда пациента в ходе процедуры Озаки, в состоянии диастолы. Это открывает возможность для предоперационного определения оптимальной формы новых створок в рамках цифровой модели с учетом анатомических особенностей конкретного пациента, что способно снизить риски послеоперационных осложнений, облегчить работу хирурга и потенциально удешевить процедуру замены клапана. Фактически, автором диссертации предложена методика для создания цифрового персонифицированного двойника клапана и аорты и проведения виртуальных хирургических операций на нем с анализом результатов работы после установки.

Представленная программная платформа для расчёта сопряжённой электромеханики миокарда адресована фундаментальной проблеме моделирования сердечных патологий, которые носят многоуровневый и многомасштабный характер, затрагивая структуры от клеточного уровня до анатомии всего органа. Платформа существенно упрощает процесс подготовки и исследования новых сопряжённых электромеханических моделей, что позволяет проводить глубокие исследования механизмов развития заболеваний сердца (например, желудочковых аритмий) и методов их терапии. Кроме того, платформа может служить источником синтетических данных, необходимых для настройки и верификации

упрощённых моделей, например, на основе нейронных сетей, ориентированных на конкретные клинические приложения. Таким образом, решаемые в работе задачи напрямую отвечают на важные потребности современной кардиологии, предоставляя как общий вычислительный инструмент для исследования работы сердца, так и комплекс программ, который можно использовать для решения конкретной прикладной задачи - оптимизации операции Озаки.

Структура и содержание работы. Диссертация состоит из введения, 4 глав, заключения, списка сокращений и условных обозначений, списка литературы и 3 приложений.

Во введении отмечается актуальность и цели исследования, излагаются основные положения, выносимые на защиту, практическая значимость работы, научная новизна полученных результатов и личный вклад соискателя.

Первая глава посвящена общему рассмотрению уравнений движения объёмных и оболочечных гиперупругих тел, а также описанию численных методов решения краевых задач нелинейной теории упругости, которые будут использованы в дальнейших главах. Сначала вводятся базовые понятия нелинейной механики деформируемого твёрдого тела и формулируется общая система уравнений движения для случаев слабосжимаемого и несжимаемого деформируемого объёмного тела. Далее предлагается конечно-элементная дискретизация приведённых уравнений с помощью полиномиальных функций на тетраэдральной сетке и описываются свойства получающихся в результате матриц. После этого фокус смещается на рассмотрение тонкостенных тел и излагаются основы обобщённой теории несжимаемых оболочек Кирхгофа-Лява: приводится вывод основных кинематических соотношений и формулируется слабая постановка уравнений движения. Дискретизация уравнений движения оболочки производится на треугольной сетке, используя в качестве неизвестных только актуальные координаты срединной поверхности в узлах сетки. Предлагаемая дискретизация сочетает использование кусочно-линейного представления срединной поверхности оболочки для вычисления метрического тензора и актуального положения поверхности с описанием тензора кривизны по аналогии со смешанной формулировкой метода конечных элементов, где используются степени свободы целого патча из четырёх соседствующих треугольников. Для случая оболочек формулируется упругая барьерная модель контактного взаимодействия и выводится её гладкая численная аппроксимация с использованием только узловых координат срединной поверхности.

Во второй главе предлагается численная схема для дискретизации сопряжённых моделей электромеханики. Сначала представлен краткий обзор некоторых механических

характеристик миокарда и на их основе сформулирован общий класс сопряжённых моделей электромеханики. В результате анализа физических взаимодействий, учитываемых в рамках сформулированного класса моделей, предложена численная схема расщепления по физическим процессам для дискретизации сопряжённых моделей электромеханики сердца, в рамках которой распространение электрической активации и деформация сплошной среды описываются на несогласованных тетраэдральных сетках и связаны друг с другом посредством систем обыкновенных дифференциальных уравнений для клеточных уравнений, решаемых независимо в точках интегрирования. Затем продемонстрированы результаты численного исследования погрешностей предложенной схемы в задаче об активации предрастянутого вдоль волокон неоднородного участка миокарда. Приведены полученные численные оценки на допустимые шаги дискретизации по времени и по пространству для получения удовлетворительных решений.

Третья глава посвящена разработке персонализированной численной модели для отыскания закрытого диастолического состояния аортального клапана, реконструированного согласно процедуре Озаки. Приводится краткое описание анатомии аортального клапана, механизма его работы, методов лечения и затем подробнее рассматривается процедура Озаки, указывается ряд клинических критериев, определяемых геометрией клапана в закрытом диастолическом состоянии, которым должен удовлетворять "пригодный" артериальный клапан. Предлагается "сухая" оболочечная математическая формулировка модели для расчёта диастолического состояния аортального клапана. Граничные условия формулируются на основе анализа хирургического протокола пришивания неостворок. Предлагаются новые алгоритмы виртуального размещения плоских створок реконструированного аортального клапана внутри полости аорты пациента вдоль заданных линий крепления. Вводится математическая формализация ряда геометрических характеристик коаптации, вычисляемых в диастолической конфигурации клапана, для случая реальных геометрий аортального клапана и корня аорты. Представлены результаты валидации модели на данных натурных экспериментов: показана удовлетворительная согласованность для характеристик коаптации, полученных в численных расчётах диастолического состояния реконструированного аортального клапана на 20 свиных корнях аорты, с экспериментальными замерами.

В четвёртой главе перечисляются разработанные в процессе работы над диссертацией комплексы программ. Сначала описывается разработанная автором диссертации библиотека для построения конечно-элементных дискретизаций на тетраэдральных сетках AniFem++. Затем излагаются особенности архитектуры и функциональные возможности программной платформы для построения и организации расчётов задач электромеханики

сердца CarNum и подчёркиваются её гибкость и параллельность. Также описывается программный пакет для моделирования деформации тонкостенных гиперупругих оболочек/мембран, разработанный на основе методов дискретизации из первой главы. Кратко излагаются результаты верификации пакетов на задачах с известными аналитическими решениями, а также посредством сравнения с результатами других научных групп.

В заключении приводятся основные результаты диссертации.

В приложениях к диссертации представлены таблицы со значениями параметров и результатами расчёта времени активации в контрольных точках участка миокарда для сопряжённой модели из численных экспериментов, а также изложены алгоритмы для виртуального размещения створок аортального клапана в полости аорты.

Научная новизна. Все результаты диссертации, вынесенные на защиту, являются новыми. Предложена новая численная схема расщепления по процессам для моделирования сопряжённой модели электромеханики сердца, и с её помощью впервые осуществлён трёхмерный расчёт поведения участка миокарда, описываемого сопряжённой моделью электромеханики, предложенной Ф. Сёминым, А. Цатуряном и А. Осепян. Сформулирована и реализована новая схема дискретизации уравнений движения нелинейной оболочки с учётом контактных взаимодействий, обладающая достаточной гладкостью для применения ньютоновских методов решения возникающих нелинейных алгебраических систем уравнений. Разработана новая модель отыскания диастолического состояния реконструированного аортального клапана для оценки его пригодности в операции Озаки, причём, помимо самой модели, также представлены новые алгоритмы виртуального размещения створок реконструированного аортального клапана внутри геометрии просвета корня аорты пациента и осуществлена формализация клинических понятий коаптации.

Практическая и научная ценность работы. Научная ценность диссертации состоит в построении персонализированной модели расчёта диастолического состояния аортального клапана с использованием алгоритмов виртуального размещения створок в геометрии полости корня аорты для расчёта клинических показателей пригодности реконструированного аортального клапана, а также в разработке численной схемы дискретизации для расчёта сопряжённых моделей электромеханики миокарда. Практическая ценность диссертации состоит в разработке программ для расчёта напряженно-деформированного состояния объёмных и тонкостенных конструкций при конечных деформациях, а также в разработке специализированных программных

комплексов для работы с сопряжёнными моделями электромеханики миокарда и для расчёта диастолического состояния аортального клапана.

Обоснованность и достоверность научных положений и выводов. Разработанные программные комплексы были верифицированы с помощью решения ряда тестовых задач и сравнения полученных численных результатов с известными аналитическими решениями и опубликованными в литературе результатами решения данных задач другими авторами. Результаты трёхмерного расчёта поведения участка миокарда, описываемого сопряжённой моделью, качественно схожи с решением, полученным авторами сопряжённой модели в двумерном случае. Результаты расчётов диастолического состояния аортального клапана показали удовлетворительную согласованность с результатами выполненных в медицинских исследованиях натуральных экспериментов по замене створок аортального клапана в 20 свиных корнях аорты.

Замечания по работе:

1. Для замыкания математической постановки в лагранжевых координатах (1.14) на стр. 19 желательно добавить закон сохранения массы (связь плотностей в начальном и актуальном состояниях посредством третьего инварианта градиента деформаций).
2. На стр. 25 неясен смысл фразы: “Пренебрегая членами ... и требуя, чтобы в полученных выражениях ненагруженное состояние имело нулевые деформации”. В ненагруженном состоянии деформации нулевые, по определению. Насколько введенное упрощение обеспечивает нулевые деформации в актуальном состоянии при повороте оболочки на конечные углы, как жесткого тела?
3. Как учитывается гипотеза плоских напряжений в рассматриваемой модели оболочки? Как решается проблема с locking (Poisson, Shear) в оболочках?
4. Граничное условие Неймана вверху стр. 28 требует пояснения, т.к. оно не совпадает со стандартным вариантом (см. например, Лурье “Нелинейная теория упругости”) при задании следящей нагрузки – давления. Кроме того, уравнение движения записано для начального состояния, а дальнейшие выкладки проводятся для актуального. Необходимо конкретизировать, в координатном базисе какого состояния (начального или актуального)

формулируется задача. Например, на стр. 30 часть интегралов вычисляется по поверхности оболочки в актуальном состоянии, а часть – в начальном.

5. На стр. 31 фраза “Здесь и далее будем предполагать, что в начальной и актуальной конфигурации используется общая ДСК” требует пояснения, т.к., если в начальной конфигурации лагранжева (вмороженная) система координат является декартовой, то в актуальной (деформированной) конфигурации, вообще говоря, нет. Опять же возникает вопрос, в координатном базисе какого состояния выполняется дискретизация оболочечного тела?
6. На стр. 41 требуются пояснения по методам решения нелинейных систем. Как выбирался параметр релаксации в зависимости от номера итерации? Необходимо привести выражения для матрицы Якоби (по аналогии с разделом 1.3). Какая наблюдается сходимость по числу итераций?
7. Не описан алгоритм численного решения контактной задачи, а именно, как выполняется минимизация функционала контактной энергии, как при этом изменяются нелинейные уравнения, как они решаются методом Ньютона (какая матрица Якоби?), как решаются проблемы с неустойчивостью (например, мерцающий статус контакта, частичное отлипание и т.п.). Возможно ли решение задач контактного трения (и нужно ли его учитывать для контакта створок?) с использованием предложенного подхода? Проводилась ли верификация контактного алгоритма и его сравнение с аналитическими решениями (например, на задаче Герца)?
8. На стр. 59 сказано: “конечно-элементное пространство Лагранжа, состоящее из кусочно-полиномиальных функций P_r степени не выше r на тетраэдральной сетке”. Какие порядки полиномов использовались в численных расчетах? Проводился ли анализ сеточной сходимости для различных порядков? Как зависит шаг тетраэдральной сетки, обеспечивающий сеточную сходимость, от степени базисных полиномов?
9. Из описания численной дискретизации сопряженной модели в разделе 2.4 неясно, как именно осуществлялось сопряжение. Фактически, описан алгоритм независимого интегрирования четырех уравнений (два УРЧП и два ОДУ) с односторонней передачей результатов интегрирования между ними на

соответствующих (одинаковых) временах. Как проверялась совместность решения сопряженной системы в фиксированные моменты времени?

10. Как проводилась верификация полученного численного решения для сопряженной модели электромеханики? В разделе “Степень достоверности” сказано: “Картины решений трёхмерной сопряжённой модели качественно ... схожи с ранее полученными в работе [152] на двумерных расчётах.”, однако в тексте диссертации данное сравнение приводится недостаточно подробно.
11. Чем обусловлен выбор абсолютной погрешности на Рис. 2.8 стр. 70? Обычно при анализе сеточной сходимости анализируется относительная ошибка в процентах. Кроме того, при численном решении задач теории упругости желательно проверить сходимость по максимальным значениям инвариантов тензора напряжений Коши, т.к. они напрямую влияют на прочность материала.
12. Судя по геометрическим размерам, приведенным на стр. 95, отношение характерной длины створки к толщине – от 4 до 20. С учетом дискретизации створки несколькими треугольными элементами (например, на Рис. 3.7), данное отношение становится еще меньше (на стр. 71 указан рекомендуемый размер элемента около 2 мм), т.е. размер оболочечного элемента становится сопоставимым с толщиной оболочки, что нарушает гипотезы теории оболочек Кирхгофа-Лява, применимые для тонких оболочек. Проводился ли расчет створок на трехмерной МКЭ-сетке?
13. Проблема со сходимостью контактной задачи на Рис. 3.11 стр. 96 может быть обусловлена рядом причин: робастностью контактного алгоритма, его реализацией, МКЭ-сеткой и т.п. Как проводился анализ неустойчивости статически равновесного состояния? Проводился ли анализ линейной потери устойчивости? Можно было бы попробовать решить данную контактную задачу (методом множителей Лагранжа или методом штрафов) в коммерческих САЕ-пакетах (например, ANSYS, Abaqus), которые позволяют решать такие задачи (с физической и геометрической нелинейностями) для реальных моделей сложных конструкций с множественными контактами.

Общая оценка работы. Вышеуказанные замечания не снижают общей положительной оценки работы, которую можно охарактеризовать как законченное

исследование, выполненное на высоком научном уровне. Результаты работы являются новыми и имеют научную и практическую ценность.

Основные результаты диссертации докладывались на научных семинарах и многих международных и всероссийских конференциях.

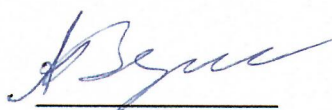
Результаты диссертации опубликованы в 11 работах в журналах, входящих в перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук. Все эти работы опубликованы в научных изданиях, индексируемых международными базами данных Web of Science или Scopus. Автореферат полностью и точно отражает содержание диссертации.

Считаю, что диссертация отвечает всем квалификационным требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, установленной «Положением о присуждении учёных степеней», а её автор **Легкий Алексей Андреевич** заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2 — «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Официальный оппонент,

доктор физ.-мат. наук,

профессор кафедры вычислительной
механики Федерального
государственного бюджетного
образовательного учреждения
высшего образования «Московский
государственный университет имени
М.В. Ломоносова»



Вершинин Анатолий
Викторович

«08» августа 2025 г.

Подпись профессора кафедры вычислительной механики МГУ, доктора физ.-мат. наук
Вершинина Анатолия Викторовича удостоверяю

Декан механико-математическ
факультета,

Член-корр. РАН, профессор



«08» августа 2025 г.

А.И. Шафаревич