

Валидационные расчеты задач гемодинамики с использованием программного комплекса FlowVision в режиме параллелизации

М.Д. Калугина¹, В.С. Каширин¹, А.И. Лобанов^{1,2}

¹ООО «ТЕСИС», ²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

Проведены расчеты тестовой задачи, связанной с моделированием течения в идеализированном медицинском устройстве, в программном комплексе FlowVision. Расчеты проводились для ламинарного, турбулентного и переходного режимов течения. Исследована масштабируемость задачи. На основе решения тестовой задачи делается вывод, что программный комплекс FlowVision может быть использован для решения задач гемодинамики.

Ключевые слова: параллельные вычисления, программный комплекс FlowVision, гемодинамика, валидационные расчеты.

1. Введение

Задачи вычислительной гемодинамики приобрели значительный интерес в связи с возможностью перейти к созданию пациент-ориентированных (персонализированных) математических моделей кровообращения [1] и создания искусственных органов [2]. Современные математические модели гемодинамики представляют собой комбинацию математических моделей движения жидкости в сложном сосудистом дереве [1] и крупных сосудах сложной формы. Отметим, что оба класса задач требуют значительных вычислительных ресурсов и практически не могут быть реализованы без применения современных вычислительных технологий и использования мощных многопроцессорных вычислительных систем.

Возникают дополнительные требования к программному обеспечению для математического моделирования сложных задач гемодинамики. Так как системы уравнений существенно нелинейны (даже в случае использования системы Навье-Стокса для моделирования кровотока, учет реалистичной реологии крови приводит к появлению дополнительных нелинейностей), то получение точных решений для задач такого класса для областей сложной геометрии практически невозможно. Точные решения с учетом реологических уравнений могут быть получены только для упрощенных одномерных постановок [3].

Возросшее число работ по вычислительной гемодинамике выдвигает требования к возможностям программных комплексов. Эти требования существенны и для исследовательских проектов, и для задач проектирования новых устройств или препаратов. Для оценки точности и производительности программного обеспечения в настоящее время используются две задачи, предложенные американской Food and Drug Administration (FDA) [4, 5]. Это задачи о сопле (nozzle) и насосе для перекачки крови. Для решения практических задач гемодинамики, как правило, применяются те комплексы, которые показывают хорошие результаты на задачах FDA, что подтверждается соответствующими публикациями.

Задача о сопле широко используется для тестирования (бенчмаркинга) как коммерческого программного обеспечения, так и исследовательских программных комплексов. В литературе чаще встречаются результаты тестирования программных комплексов, основанных на методах конечных элементов. В [6] приведены результаты исследования задачи о сопле на основе использования комплекса мультифизического моделирования COMSOL.

Примерами программ для моделирования гидродинамики свободного доступа, основанными на методах конечных элементов, могут служить Feel++ [7], результаты расчетов задачи на его основе приведены в [8].

Некоторые системы математического моделирования задач гидродинамики, используемые для гемодинамических расчетов, специально разработаны для реализации на многопроцессорных вычислительных комплексах. Оценки решения задачи FDA с использованием солвера NEK 5000, основанного на методе спектральных элементов (вариант метода конечных элементов с базисом из кусочно-полиномиальных функций высокой степени), приведены в [9]. Выполнены оценки применимости параллельного комплекса LS-DYNA для данных задач [10]. Отметим, что программный комплекс LS-DYNA в настоящее время является частью популярной системы моделирования ANSYS. Использование программы ANSYS-FLUENT для решения задачи о сопле описано в [11].

В данной статье для решения тестовой задачи FDA использован программный комплекс FlowVision.

2. Характеристики программного комплекса FlowVision

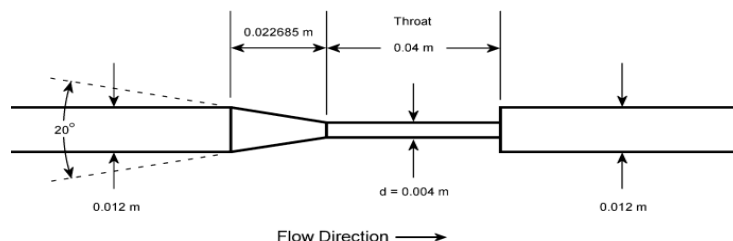
Программный комплекс вычислительной аэро- и гидродинамики FlowVision [12] предназначен для проведения математического моделирования различных физических процессов. Аппроксимация основных уравнений движения жидкости в форме Навье-Стокса в ПК основана на конечно-объемном подходе. Расчетная сетка во FlowVision является декартовой, ячейки сетки представляют собой гексаэдры. Во FlowVision имеется автоматический построитель неструктурированной сетки с возможностью ее локальной адаптации до указанного уровня на любой поверхности и в любом объеме расчетной области. Для моделирования характеристик пограничного слоя на стенке в функционал ПК заложены пристеночные функции, позволяющие пользователю без подробного разрешения пространства расчетной сеткой, получать достаточно точные результаты [13]. Для учета турбулентности течения во FlowVision реализовано 7 моделей турбулентности, которые можно использовать в низко- и высокорейнольдсовых расчетах [14]. Также в ПК реализован двухуровневый параллелизм, позволяющий эффективно проводить расчеты на компьютерах, имеющих распределенную и общую память одновременно.

3. Постановка задачи FDA

В тестовых задачах FDA рассматривается небольшое эталонное сопло, напоминающее упрощенные идеализированные медицинские устройства для переноса крови. Насадка обладает аналогичными характеристиками с наборами для гемодиализа, катетерами, иглами для подкожных инъекций, шприцами и т.д. Экспериментальные данные были получены в определенных сечениях сопла (рис. 1).

3.1 Модель сопла

Модель осесимметричного сопла имеет узкую горловину длиной 0,04 м с соединительным конусом на одном конце горловины и ступенчатым изменением диаметра на другом конце (рис. 1).



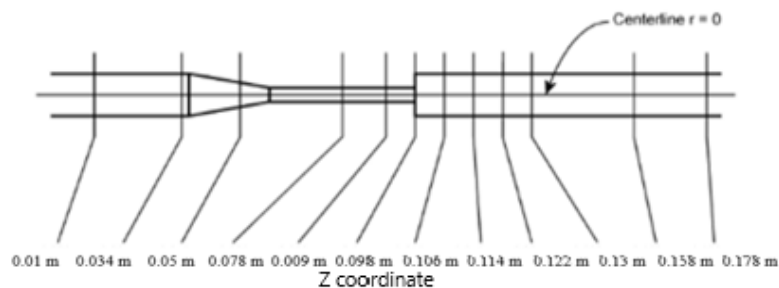


Рис. 1. Геометрические параметры сопла и сечения, в которых определялись параметры течения [5]

Предложенная FDA геометрия разработана с учетом ускоряющего и замедляющего потоков, изменения напряжения и скорости сдвига, а также рециркуляционного потока.

3.2 Численное моделирование

В программном комплексе (ПК) FlowVision в соответствии с начальными экспериментальными данными [5] были проведены трехмерные расчеты, соответствующие четырем числам Рейнольдса в горловине Re_t . Числа Рейнольдса выбирались таким образом, чтобы охватить ламинарный, переходный и турбулентный режимы. В таблице 1 представлены значения объемных расходов Q и соответствующих им чисел Рейнольдса.

Таблица 1. Объемные расходы и числа Рейнольдса

$Q, m^3/s$	Re_t
$5.21 \cdot 10^{-6}$	500
$2.08 \cdot 10^{-5}$	2000
$3.64 \cdot 10^{-5}$	3500
$6.77 \cdot 10^{-5}$	6500

Также при различных числах Рейнольдса использовались различные модели турбулентности и пристеночные функции (табл. 2).

Таблица 2. Числа Рейнольдса, модели турбулентности и пристеночные функции

Re_t	Модель турбулентности	Пристеночные функции
500	нет	равновесные
2000	SST	равновесные/без них
3500	SST	равновесные/без них
6500	SST, $k-\epsilon$	равновесные

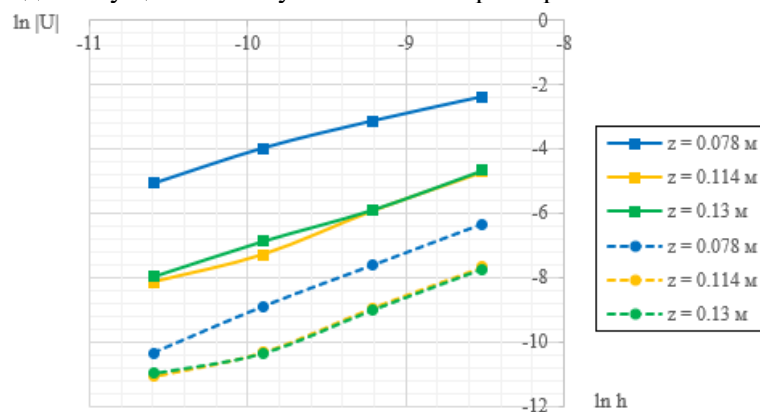
Поскольку при $Re_t = 500$ режим течения является полностью ламинарным, использование моделей турбулентности не потребовалось. Для остальных чисел Рейнольдса применялась SST-модель турбулентности, а при $Re_t = 6500$ использовалась также $k-\epsilon$ модель [13]. Стоит отметить, что для переходных режимов проводились расчеты как без использования пристеночных функций, т.е. пограничный слой полностью разрешался сеткой, так и с применением равновесных пристеночных функций.

Кровь упрощенно была определена как ньютоновская жидкость с плотностью и динамической вязкостью 1056 кг/м^3 и $0,0035 \text{ Н}\cdot\text{с/м}^2$ соответственно. На входной границе сопла задавался параболический профиль осевой скорости, представляющий полностью развитое стационарное течение в круглой трубе.

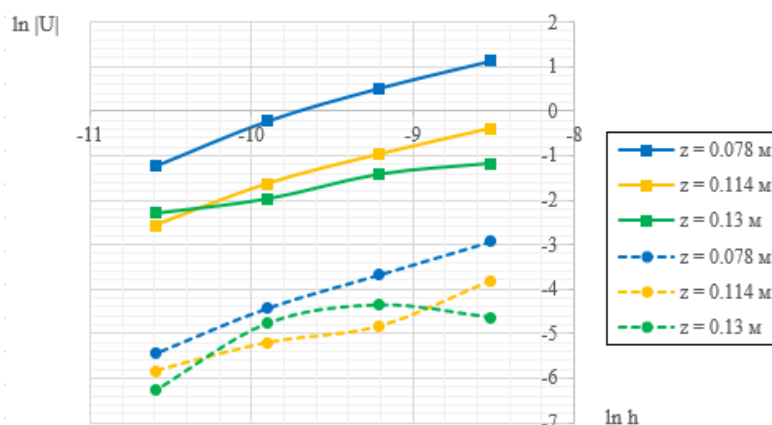
Для ламинарного течения и течения с развитой турбулентностью было проведено исследование сеточной сходимости. Были рассчитаны значения «сильной» (аналог нормы Чебышева) и «слабой» (аналог нормы L_2) нормы для отклонения значения осевой скорости от значений, полученных на самой подробной сетке, в сечениях с координатами $z = 0,078; 0,114$ и $0,13$ м в зависимости от размера ячейки h (м) вдоль оси z (рис. 2). На графиках «сильная» норма показана сплошной линией, «слабая» - пунктирной. Графики приведены в двойном логарифмическом масштабе, тангенс угла наклона примерно соответствует порядку сходимости для задачи. Отметим, что

численное значение тангенса оказалось практически не зависящим от конкретного выбора норм, что характерно для гладких решений.

Также для сравнения были использованы значения максимальной скорости в сопле U_{z_max} при различных уровнях адаптации сетки $N = 0, 1, 2$ и т.д, обеспечивающей измельчение ячеек расчетной сетки путем их разбиения пополам по всем направлениям (рис. 3). Наблюдается выход построенного графика на асимптоту при втором уровне адаптации сетки, т.е. дальнейшее измельчение сетки не приводит к существенному изменению характерной величины.

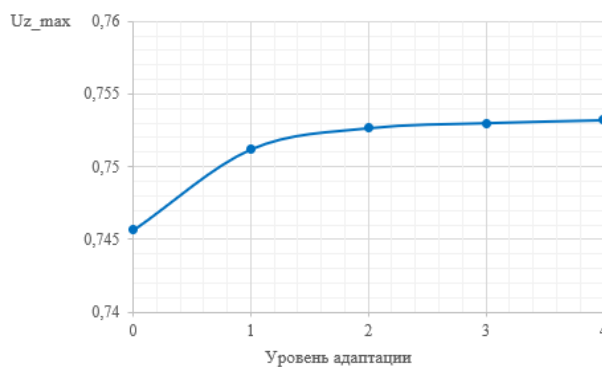


а)



б)

Рис. 2. Зависимость «сильной» и «слабой» нормы от размера ячейки в двойном логарифмическом масштабе при: а) $Re_t = 500$; б) $Re_t = 6500$



а)

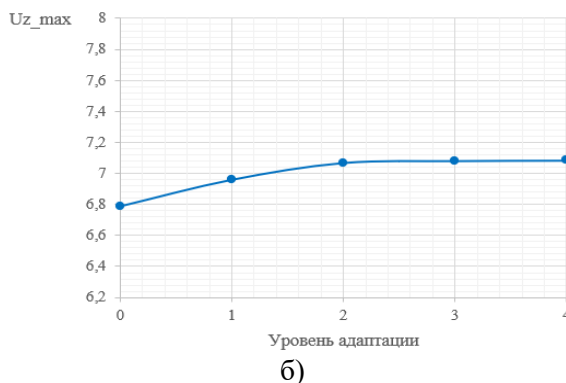


Рис. 3. Исследование сеточной сходимости: а) зависимость максимальной скорости в сопле от уровня адаптации сетки при $Re_t = 500$; б) зависимость максимальной скорости в сопле от уровня адаптации сетки при $Re_t = 6500$.

4. Результаты расчетов

В результате расчетов были получены значения осевой скорости U_z . При $Re_t = 2000$ и 3500 дополнительно проведены расчеты без пристеночных функций. Для этих расчетов сетка была построена так, чтобы безразмерный параметр Y^+ — первый пристеночный шаг по нормали к стенке в координатах закона стенки $\frac{Y \cdot V^*}{\nu}$, где $V^* = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}}$ — динамическая скорость, имел значение меньше 1 (рис. 4).

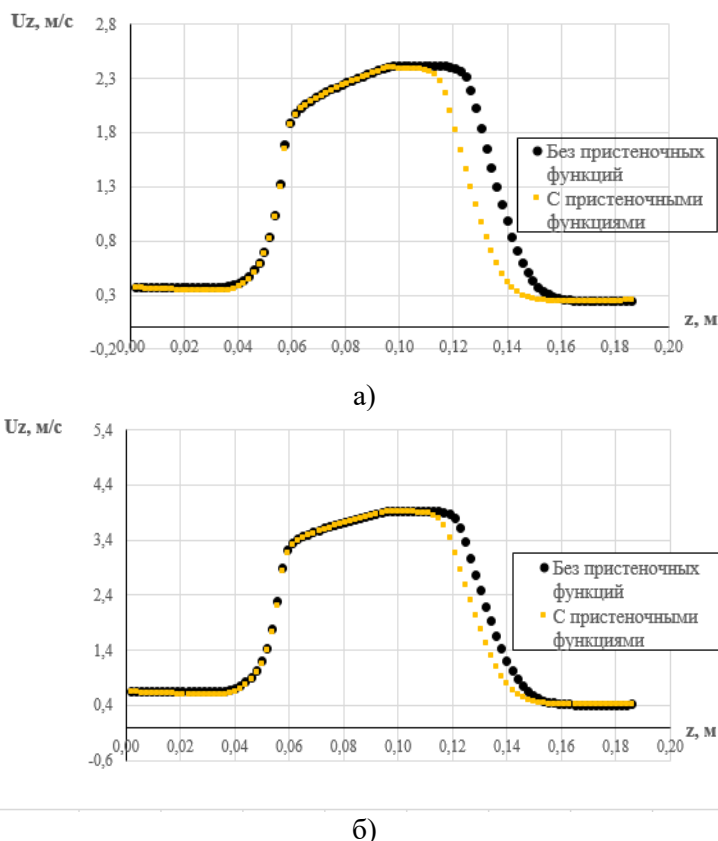
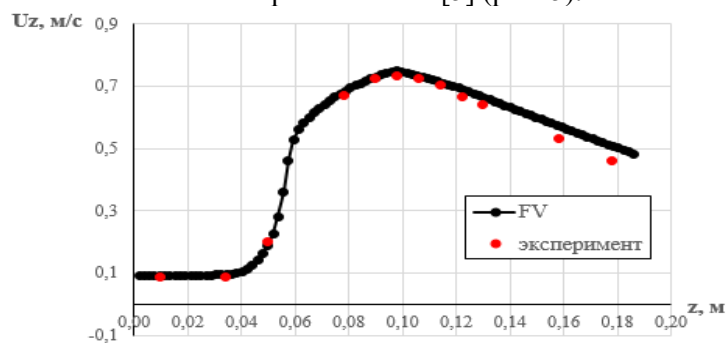


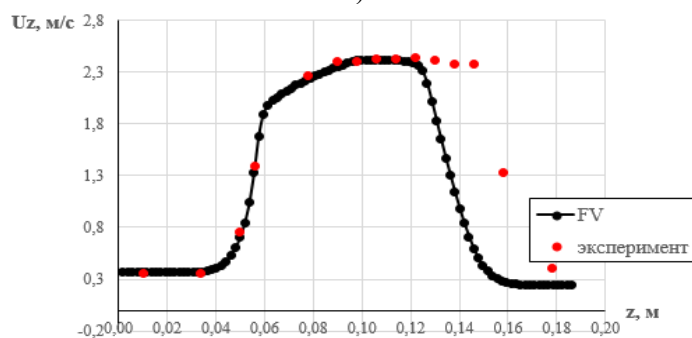
Рис. 4. Зависимость осевой скорости от координаты z при расчете с пристеночными функциями и без них: а) $Re_t = 2000$; б) $Re_t = 3500$.

Расчеты при $Re_t = 500$ и 6500 проводилось на сетке с количеством ячеек около 700000. Для расчета при $Re_t = 2000$ и 3500 были выбраны сетки, соответствующие $Y^+ < 1$ (пристеночные функции не использовались).

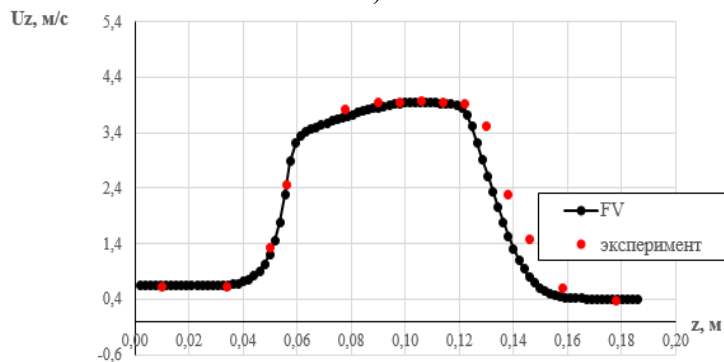
На рис. 5 показаны зависимости осевой скорости U_z от координаты z , полученные в программном комплексе FlowVision и экспериментально [5] (рис. 5).



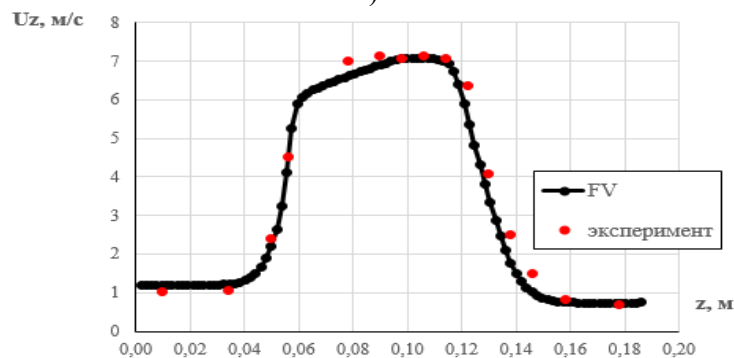
а)



б)



в)



г)

Рис. 5. Зависимость осевой скорости от координаты z : а) $Re_t = 500$; б) $Re_t = 2000$; в) $Re_t = 3500$;
г) $Re_t = 6000$.

Наилучшее соответствие с экспериментальными данными наблюдается при полностью ламинарном течении (рис. 5, а) и течении с развитой турбулентностью (рис. 5, в, г). При $Re_t = 6500$

после резкого расширения сопла возникает вихревое течение, образуются две зоны возвратного течения в области с минимальной скоростью (рис. 6).

Численное моделирование ламинарно-турбулентного перехода всегда представляет собой достаточно сложную задачу, поэтому для $Re_t = 2000$ в результатах появлялись некоторые расхождения с экспериментальными данными. Отличия были не больше полученных в других пакетах. Результаты численного моделирования, полученные в других программных комплексах [5], обозначены на рис. 7 как CFD_1 - CFD_4. При этом результаты расчета для $Re_t = 2000$ и 3500 без пристеночных функций лучше соответствуют экспериментальным данным. При ламинарном течении после выхода потока из горловины сопла скорость вдоль осевой линии сопла уменьшается постепенно, в остальных случаях происходит резкое снижение скорости.

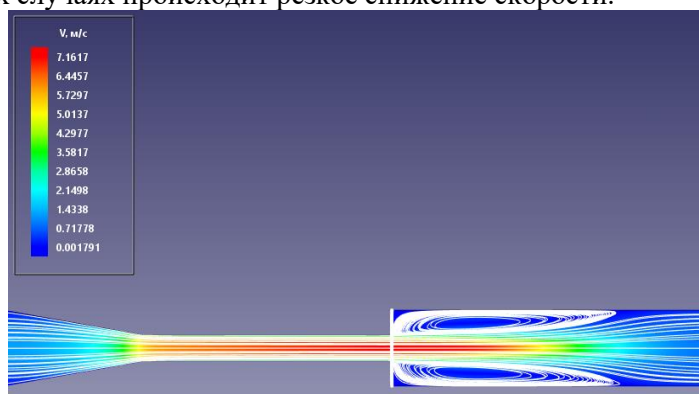


Рис. 6. Распределение скорости и линий тока в сопле

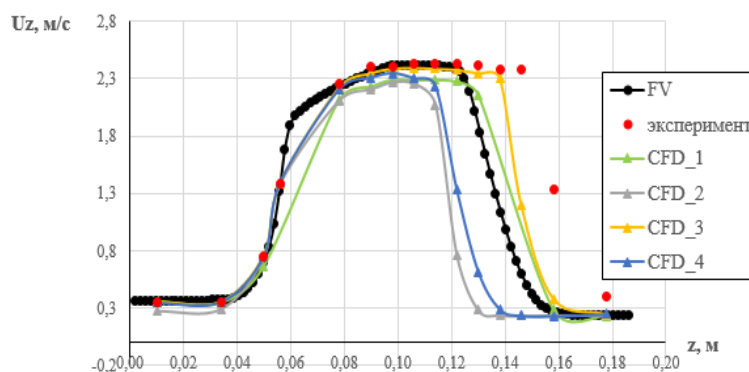
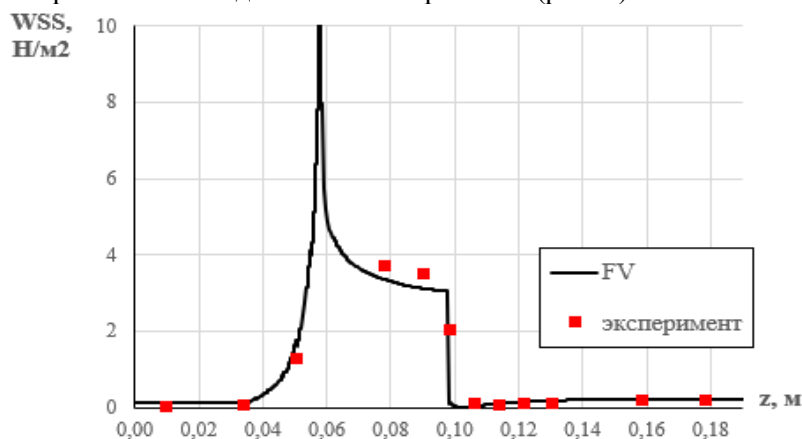


Рис. 7. Зависимость осевой скорости от координаты z при $Re_t = 2000$.

Помимо зависимости осевой скорости U_z от координаты z для чисел Рейнольдса $Re_t = 500$ и $Re_t = 6500$ было получено распределение сдвиговых напряжений на стенке (Wall shear stress - WSS) сопла, которое сравнивалось с данными эксперимента (рис. 8).



а)

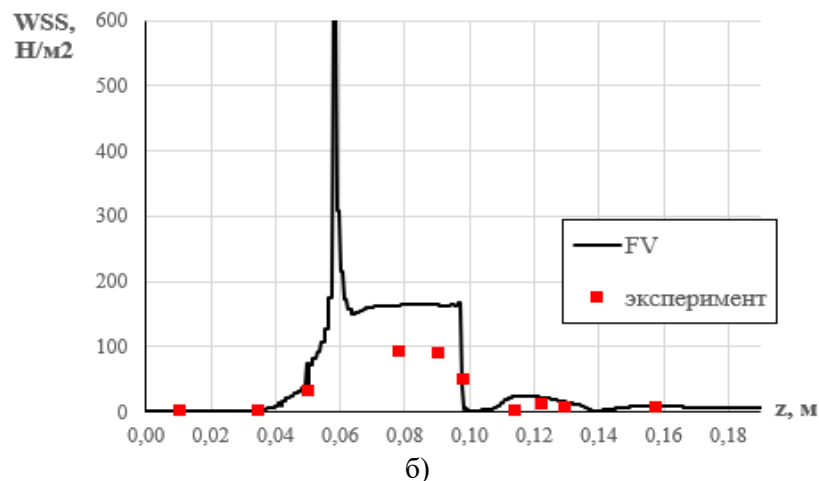


Рис. 8. Распределение сдвиговых напряжений на стенке при: а) $Re_t = 500$; б) $Re_t = 6500$.

Наилучшее соответствие расчетных данных и экспериментальных получено при ламинарном режиме течения жидкости. Наибольшее рассогласование соответствует горловине сопла.

Поскольку часть расчетов проводилась на вычислительном кластере НРС4, исследовалась масштабируемость задачи [15].

5. Характеристики параллельности

В многофункциональный вычислительный комплекс (МФК) НИЦ «Курчатовский институт» входит несколько высокопроизводительных кластеров. Часть представленных расчетов производилась на кластере НРС4, состоящем из 364 вычислительных узлов по 2 процессора Intel Xeon E5-2680 v3 и 23 вычислительных узлов по 2 процессора Intel Xeon E5-2680 v3 и по 3 ускорителя вычислений Supermicro NVIDIA Tesla K80 24GB GDDR5 PCIe 3.0 [16]. В качестве оценки эффективности распараллеливания расчетов использовалось отношение S (относительное ускорение) физического времени счета одного шага, измеряемого в секундах, полученного при расчете на 1 узле к времени счета одного шага, полученного при расчете на нескольких узлах n . Для всех исследуемых режимов расчет запускался на продолжение с определенного шага, до которого течение жидкости уже успело установиться. На рис. 9 представлена зависимость $S(n)$ для расчетов при числах Рейнольдса $Re_t > 500$.

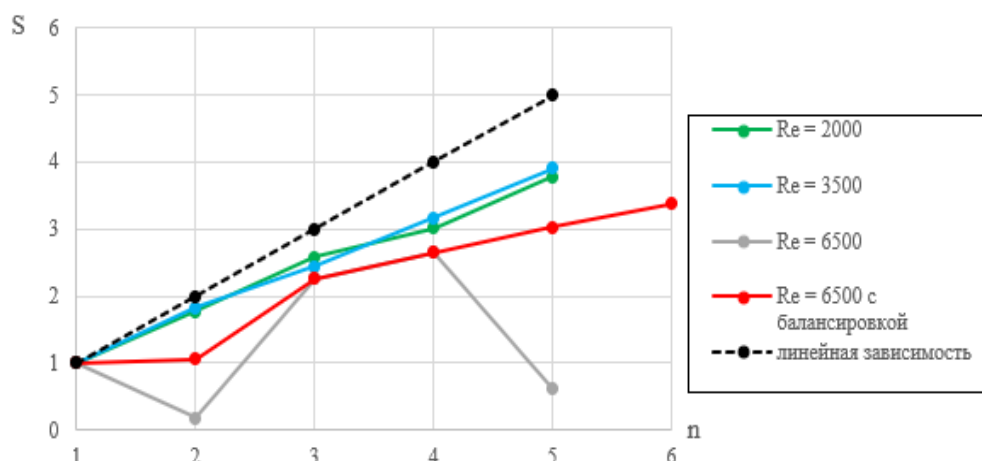


Рис. 9. Масштабируемость при различных числах Рейнольдса.

Зависимости $S(n)$ для расчетов при числах Рейнольдса 2000 и 3500 близки к линейной. При расчете на 2 узлах для $Re_t = 6500$ возникает значительный дисбаланс загрузки процессоров, т.е. такой режим запуска является неоптимальным. Использование 5 узлов также ведет к возникновению дисбаланса, который можно объяснить наличием слишком большого количества

исполнителей для используемой сетки. Однако дисбаланс, возникающий из-за большого времени обменных операций MPI, можно снизить за счет применения специальной технологии FlowVision «Динамическая балансировка». На рис. 9 показано, что использование динамической балансировки при расчете на двух и пяти узлах позволяет значительно снизить время вычисления шага и улучшить масштабируемость.

6. Выводы

В работе представлено решение тестовой задачи FDA в программном комплексе FlowVision. Получены значения осевой скорости в зависимости от координаты z при ламинарном, переходном и турбулентном режимах течения. Так же проведено исследование масштабируемости при расчете на вычислительном кластере НРС4. Существенному увеличению производительности вычислений в случаях, когда особенности постановки расчетной задачи приводят к дисбалансу загрузки процессоров, способствует специальная технология FlowVision «Динамическая балансировка».

Решение тестовой задачи показало, что программный комплекс FlowVision позволяет получать результаты, имеющие хорошее согласование с экспериментом для задачи FDA о сопле. Хорошее совпадение тестовых результатов расчетов с гемодинамическими экспериментами в искусственной системе открывает возможность решать более сложные задачи гемодинамики.

Литература

1. Yu. Vassilevski, M. Olshanskii, S.Symakov, A.Kolobov, A. Danilov Personalized computational hemodynamics // Models, methods and application for vascular surgery and antitumor therapy. Academic Press. 2020. 270 p.
2. Chen, Z., Fan, Y., Deng, X. and Xu, Z. A New Way to Reduce Flow Disturbance in Endovascular Stents: A Numerical Study. Artificial Organs. 2011. Vol. 35. P. 392-397. <https://doi.org/10.1111/j.1525-1594.2010.01106.x>.
3. Krivovichev G.V. Comparison of inviscid and viscid one-dimensional models of blood flow in arteries // Applied Mathematics and Computation. Elsevier, 2022. Vol. 418. P. 126856 <https://doi.org/10.1016/j.amc.2021.126856>.
4. Computational Fluid Dynamics Round Robin Study. URL: https://ncihub.org/wiki/FDA_CFD (дата обращения: 23.04.2022).
5. S.F.C Stewart et al. Assessment of CFD Performance in Simulations of an Idealized Medical Device: Results of FDA's First Computational Interlaboratory Study // Cardiovascular Engineering and Technology. 2012. Vol. 3(2) P. 139-160. DOI 10.1007/s13239-012-0087-5.
6. Blood Damage Modeling of FDA Benchmark Nozzle. URL: <https://www.comsol.ru/paper/blood-damage-modeling-of-fda-benchmark-nozzle-93171> (дата обращения: 21.04.2022).
7. C. Prud'homme, V. Chabannes, V. Doyeux, M. Ismail, A. Samake and G. Pena. Feel++: A Computational Framework for Galerkin Methods and Advanced Numerical Methods // ESAIM: Proceedings 2012. Vol. 38. P. 429–455. DOI:10.1051/proc/201238021.
8. V. Chabannes, C. Prud'Homme, M. Szopos, R. Tarabay. High order finite element simulations for fluid dynamics validated by experimental data from the FDA benchmark nozzle model // 5th International Conference on Computational and Mathematical Biomedical Engineering, CMBE 2017, April 10-12, 2017, Pittsburgh, PA, United States.
9. Abad, Nour & Vinuesa, Ricardo & Schlatter, Philipp & Andersson, Magnus & Karlsson, Matts. Simulation strategies for the FDA nozzle using Nek5000 Simulation strategies for the Food-and-Drug-Administration nozzle using Nek5000 // AIP Advances. 2020. Vol. 10 (2). P. 025033. DOI: 10.1063/1.5142703.

10. Huang, Chien-jung, Iñaki Çaldichoury, Facundo Del Pin and Rodrigo Paz. CFD Validations with FDA Benchmarks of Medical Devices Flows // 15th International LS-DYNA Users Conference. 2018.
11. Zmijanovic V., Mendez S., Moureau V., Nicoud F. About the Numerical Robustness of Biomedical Benchmark Cases: Interlaboratory FDA's Idealized Medical Device // International Journal for Numerical Methods in Biomedical Engineering. 2016. Vol. 33 (1). P. 1-19. DOI: 10.1002/cnm.2789.
12. А. А. Аксенов. FlowVision: индустриальная вычислительная гидродинамика // Компьютерные исследования и моделирование. 2017. Т. 9. №. 1. С. 5–20. DOI: 10.20537/2076-7633-2017-9-5-20.
13. С.В. Жлуктов, А.А. Аксенов. Пристеночные функции для высокорейнольдсовых расчетов в программном комплексе FlowVision // Компьютерные исследования и моделирование. 2015. Т. 7. № 6. С. 1221–1239.
14. С. В. Жлуктов, А. А. Аксенов, Д. В. Савицкий. Высокореинольдсовые расчеты турбулентного теплопереноса в программном комплексе FlowVision // Компьютерные исследования и моделирование. 2018. Т. 10. Вып. 4. С. 461–481. DOI: 10.20537/2076-7633-2018-10-4-461-481.
15. В.С. Акимов, Д.П. Силаев, А.С. Симонов, А.С. Семенов. Исследование масштабируемости FlowVision на кластере с интерконнектом Ангара // Вычислительные методы и программирование. 2017. Т. 18. Вып. 4. С. 406-414.
16. Объединенный вычислительный кластер. URL: <http://comp.nrcki.ru/pages/main/12530/12546/index.shtml> (дата обращения: 21.04.2022)