

VILNIAUS GEDIMINO TECHNIKOS UNIVERSITETAS

Miglė STAŠKŪNIENĖ

MAŽAIS REINOLDSO SKAIČIAIS  
CHARAKTERIZUOJAMOS  
TURBULENTINĖS TĖKMĖS AORTOS  
VOŽTUVE MODELIAVIMAS

DAKTARO DISERTACIJA

TECHNOLOGIJOS MOKSLAI,  
MECHANIKOS INŽINERIJA (T 009)

Vilnius, 2021

Disertacija rengta 2014–2021 metais Vilniaus Gedimino technikos universitete.

### **Vadovas**

prof. dr. Arnas KACĖNIAUSKAS (Vilniaus Gedimino technikos universitetas, mechanikos inžinerija – T 009).

Vilniaus Gedimino technikos universiteto Mechanikos inžinerijos mokslo krypties disertacijos gynimo taryba:

### **Pirmininkas**

prof. dr. Dalius MAŽEIKA (Vilniaus Gedimino technikos universitetas, mechanikos inžinerija – T 009).

### **Nariai:**

doc. dr. Sergejus BORODINAS (Vilniaus Gedimino technikos universitetas, mechanikos inžinerija – T 009),

doc. dr. Rimvydas GAIDYS (Kauno technologijos universitetas, mechanikos inžinerija – T 009),

doc. dr. Julius GRĮŠKEVIČIUS (Vilniaus Gedimino technikos universitetas, mechanikos inžinerija – T 009),

habil. dr. Grigorij PANASENKO (Žano Monė universitetas, Prancūzija matematika – N 001).

Disertacija bus ginama viešame Mechanikos inžinerijos mokslo krypties disertacijos gynimo tarybos posėdyje **2021 m. kovo 18 d. 10 val.** Vilniaus Gedimino technikos universiteto senato posėdžių salėje.

Adresas: Saulėtekio al. 11, LT-10223 Vilnius, Lietuva.

Tel.: (8 5) 274 4956; faksas (8 5) 270 0112; el. paštas doktor@vilniustech.lt

Pranešimai apie numatomą ginti disertaciją išsiųsti 2021 m. vasario 17 d.

Disertaciją galima peržiūrėti Vilniaus Gedimino technikos universiteto talpykloje <http://dspace.vgtu.lt> ir Vilniaus Gedimino technikos universiteto bibliotekoje (Saulėtekio al. 14, LT-10223 Vilnius, Lietuva).

Vilniaus Gedimino technikos universiteto 2021-003-M mokslo literatūros knyga

doi:10.20334/2021-003-M

© Vilniaus Gedimino technikos universitetas, 2021

© Miglė Staškūnienė, 2021

*migle.staskuniene@vilniustech.lt*

VILNIUS GEDIMINAS TECHNICAL UNIVERSITY

Miglė STAŠKŪNIENĖ

MODELLING OF LOW REYNOLDS  
NUMBERS TURBULENT FLOW  
IN THE AORTIC VALVE

DOCTORAL DISSERTATION

TECHNOLOGICAL SCIENCES,  
MECHANICAL ENGINEERING (T 009)

Vilnius, 2021

Doctoral dissertation was prepared at Vilnius Gediminas Technical University in 2014–2021.

### **Supervisor**

Prof. Dr Arnas KAČENIAUSKAS (Vilnius Gediminas Technical University, Mechanical Engineering – T 009).

The Dissertation Defence Council of Scientific Field of Mechanical Engineering of Vilnius Gediminas Technical University:

### **Chairman**

Prof. Dr Dalius MAŽEIKA (Vilnius Gediminas Technical University, Mechanical Engineering – T 009).

### **Members:**

Assoc. Prof. Dr Sergejus BORODINAS (Vilnius Gediminas Technical University, Mechanical Engineering – T 009),

Assoc. Prof. Dr Rimvydas GAIDYS (Kaunas University of Technology, Mechanical Engineering – T 009),

Assoc. Prof. Dr Julius GRIŠKEVIČIUS (Vilnius Gediminas Technical University, Mechanical Engineering – T 009),

Habil. Dr Grigorij PANASENKO (Jean Monnet University, France, Mathematics – N 001).

The dissertation will be defended at the public meeting of the Dissertation Defence Council of Mechanical Engineering in the Senate Hall of Vilnius Gediminas Technical University at **10 a. m. on 18 March 2021**.

Address: Saulėtekio al. 11, LT-10223 Vilnius, Lithuania.

Tel.: +370 5 274 4956; fax +370 5 270 0112; e-mail: doktor@vilniustech.lt

A notification on the intend defending of the dissertation was send on 17 February 2021.

A copy of the doctoral dissertation is available for review at Vilnius Gediminas Technical University repository <http://dspace.vgtu.lt> and at the Library of Vilnius Gediminas Technical University (Saulėtekio al. 14, LT-10223 Vilnius, Lithuania).

# Reziუმė

Disertacijoje skaitiniais metodais tiriama kraujo tėkmė individualaus paciento aortos vožtuve. Tyrimo objektas – mažų Reinoldso skaičių turbulentinė kraujo tėkmė aortos vožtuve ir jos skaitiniai modeliai. Disertacijos tikslas – sudaryti ir ištirti skaitinį kraujo tėkmės aortos vožtuve modelį, įvertinantį mažų Reinoldso skaičių turbulencijos įtaką.

Disertaciją sudaro įvadas, trys skyriai, bendrosios išvados, naudotos literatūros ir autorės mokslinių publikacijų disertacijos tema sąrašai, santrauka anglų kalba bei trys priedai.

Įvadiniame skyriuje aptariama tiriamoji problema, darbo aktualumas, aprašomas tyrimų objektas, formuluojamas darbo tikslas ir uždaviniai, aprašoma tyrimų metodika, darbo mokslinis naujumas, darbo rezultatų praktinė reikšmė, ginamieji teiginiai. Įvado pabaigoje pristatomos disertacijos tema autorės paskelbtos mokslinės publikacijos ir pranešimai konferencijose bei disertacijos struktūra.

Pirmasis skyrius skirtas literatūros apžvalgai ir analizei. Pateikta skaitinių metodų, taikomų aortos vožtuvui modeliuoti, apžvalga. Akcentuojami tėkmei aortos vožtuve taikomi turbulencijos modeliai ir ištekėjimo kraštinės sąlygos atgalinėms tėkmėms modeliuoti.

Antrajame skyriuje aprašyti ir pritaikyti aortos vožtuvo geometriniai modeliai, kraujo tėkmės diferencialinės lygtys, kraštinės sąlygos ir baigtinių tūrių metodo skaitinės schemos. Pateiktos diferencialinės Navjė ir Stokso lygtys papildytos šlyties įtempių transportavimą įvertinančiu  $k-\omega$  turbulencijos modeliu su trūkiojo perėjimo lygtimi. Pasiūlyta ištekėjimo kraštinė sąlyga atgalinės tėkmės į uždavinio apibrėžimo sritį problemai spręsti. Aprašytas taikomas baigtinių tūrių metodas ir skaitinės schemos, disertacijoje naudoti skirtingo tankumo nestruktūriniai tinklai ir pasienio sluoksnio diskretizavimas.

Trečiame skyriuje aptariami atlikti skaitiniai eksperimentai. Aprašoma skaičiuojamoji infrastruktūra ir skaičiavimų efektyvumas. Aptarti pagrindinių skaitinių parametrų parinkimo atvejai, baigtinių tūrių tinklai ir laiko žingsnio dydis. Išnagrinėti skaitiniai sprendiniai, apskaičiuoti taikant pasiūlytą kraštinę sąlygą. Palyginti įvairių turbulencijos modelių rezultatai. Skaitinis sprendinys palygintas su medicininių matavimų rezultatais. Pateikiamos bendrosios skyriaus išvados.

Disertacijos tema išspausdinti aštuoni moksliniai straipsniai: penki *Clarivate Analytics Web of Science* žurnaluose, turinčiuose citavimo rodiklį, vienas – *Conference Proceedings* leidinyje, du – kitų tarptautinių duomenų bazių leidiniuose. Disertacinio darbo rezultatai aprobuoti penkiose mokslinėse konferencijose Lietuvoje ir užsienyje.

# Abstract

In the dissertation, patient-specific aortic valve flows are investigated by using numerical methods. The main object of research is aortic valve flow with low Reynolds numbers turbulence and its numerical models. The main goal of the dissertation is to develop and investigate a numerical model for aortic valve flows with low Reynolds numbers turbulence.

The dissertation consists of introduction, 3 chapters, general conclusions, references, a list of publications by the author on the topic of the dissertation, a summary in English and 3 annexes.

The introduction reveals the research problem, relevance of the work, describes the objective of research, formulates the aim and tasks of the work, and describes the research methodology, scientific novelty of the work, the practical significance of the results, defended statements. The introduction ends in presenting the author's publications on the topic of the dissertation, listing the made presentations in conferences and defining the structure of the dissertation.

Chapter 1 revises the literature. Numerical methods for aortic valve flows are overviewed. The attention is focused on turbulence models applied to aortic valve flows and outlet boundary conditions used in the case of backflows.

Chapter 2 presents the methodology of work: the applied geometric models of the aortic valve, the differential equations, boundary conditions and numerical schemes of the finite volume method. The differential Navier-Stokes equations are supplemented by the shear-stress transport  $k-\omega$  turbulence model with intermittency transition equation. The outlet boundary conditions are proposed to solve the backflow issues. The employed finite volume method and numerical schemes are described as well as the used unstructured meshes of various density and the discretization of the boundary layer.

Chapter 3 discusses the numerical results. The computing infrastructure and computational efficiency are described. Selection of the main numerical parameters, finite volume meshes and the size of time step is discussed. Results of various types of outlet boundary conditions are investigated to evaluate their influence on the resulting backflows. A comparative study of the numerical results obtained by using various turbulence models is also performed. The general conclusions of the chapter are presented.

8 scientific articles were published on the topic of the dissertation: 5 in *Clarivate Analytics Web of Science Journals* that have a citation index, 1 in *Conference Proceedings*, 2 in other international database publications. Results of the dissertation were presented in 5 international conferences held in Lithuania and abroad.

---

# Žymėjimai

## Simboliai

$a, b$  ir  $c$  – koeficientai, taikomi esant laisvo ištekėjimo kraštinės sąlygai;

$d_w$  – atstumas nuo sienelės;

$D_\omega$  – kryžminės difuzijos narys;

$E$  – sprendinių skirtumas  $L_2$  normoje;

$E_{p_s}$  – lygiagretusis efektyvumas, taikant  $p_s$  procesų skaičių;

$F$  – maišos / perėjimo funkcija;

$F_{onset}$  – funkcija, aktyvuojanti specialaus šaltinio narį trūkiojo perėjimo lygtyje;

$F_{turb}$  – turbulencijos funkcija trūkiojo perėjimo lygtyje;

$G_\omega$  – savitojo disipacijos greičio  $\omega$  generacijos narys;

$\tilde{G}_k$  – turbulencijos kinetinės energijos generacijos narys, susidarantis dėl vidutinių greičio gradientų;

$y$  – skaitinio sprendinio kintamasis, esant pasirinktam tinklui;

$\check{Y}_k$  – slopinimo narys, žymintis turbulencijos kinetinės energijos išsisklaidymą;

$Y_\omega$  – slopinimo narys, žymintis turbulencijos kinetinės energijos specifinio disipacijos greičio išsisklaidymą;

$y^V$  – etaloninio tinklo t-V skaitinio sprendinio kintamasis;

$y_i$  – pasirinkto tinklo skaitinio sprendinio kintamojo reikšmė mazge  $i$ ;

$y_i^V$  – skaitinio sprendinio kintamojo interpoliuota reikšmė mazge  $i$ , esant etaloniniam tinklui  $t$ - $V$ ;

$k$  – turbulencijos kinetinė energija;

$L_2$  – norma;

$m$  – mazgų skaičius pasirinktame tinkle;

$\vec{n}$  – normalinis vektorius;

$p$  – slėgis;

$p_{\text{DNS}}$  – DNS modeliu apskaičiuotas slėgis  $L_2$  normoje;

$p_s$  – procesų skaičius;

$p_{\text{turb}}$  – turbulentiiniu modeliu apskaičiuotas slėgis  $L_2$  normoje;

$P_W(t)$  – Windkessel modelio slėgio reikšmė, kintanti laike;

$Re$  – Reinoldso skaičius;

$S$  – deformacijos greičio modulis;

$S_k$  – vartotojo apibrėžtas narys turbulencijos kinetinės energijos lygtyje;

$S_{p_s}$  – lygiagrečiųjų skaičiavimų pagreitėjimas, taikant  $p_s$  procesų skaičių;

$S_\omega$  – vartotojo apibrėžtas narys turbulencijos kinetinės energijos specifinio disipacijos greičio lygtyje;

$T_1$  – didžiausiosios greičio reikšmės laiko momentas, parametrizuojant ir glodinant greičių kreives;

$T_2$  – nagrinėjamo laiko intervalo ilgis, parametrizuojant ir glodinant greičių kreives;

$T_{p_s}$  – uždavinio sprendimo  $p_s$  procesais laikas;

$v_{\text{max}}$  – didžiausioji greičio reikšmė;

$U(t)$  – normalinė greičio komponentė, kintanti laikui einant.

$\alpha$  – koeficientas, įvertinantis šlyties įtempio transportavimą, turbulentiui klampiui;

$\alpha^*$  – koeficientas, slopinantis turbulentių klampį;

$\varepsilon$  – kinetinės energijos disipacijos greitis;

$\epsilon_{ij}$  – deformacijų greičių tenzorius;

$\Gamma_{\text{IN}}$  – įtekėjimo paviršius (angl. *inlet*);

$\Gamma_{\text{OUT}}$  – ištekėjimo paviršius (angl. *outlet*);

$\Gamma_S$  – aortos vožtuvo sienelės;

$\gamma$  – trūkiojo perėjimo kintamasis;

$\mu$  – dinaminis skysčio klampis;

$\mu_t$  – turbulentiinis klampis;

$\rho$  – kraujo tankis;

$\sigma_k$  – turbulentiinis Prandtlio skaičius turbulencijos kinetinei energijai;



$\sigma_\omega$  – turbulentinis Prandtlio skaičius turbulencijos kinetinės energijos specifiniam disipacijos greičiui;

$\tau_{ij}$  – įtempių tenzorius nespūdiams niutoniniams skysčiams;

$\vec{\tau}$  – tangentinis vektorius;

$\omega$  – kinetinės energijos specifinis disipacijos greitis;

$\vec{u}$  – greičio vektorius;

$\Omega^a$  – absoliučiojo sukuringumo modulis;

$\Omega$  – uždavinio apibrėžimo sritis;

## Santrumpos

AIN – suminių iteracijų skaičiaus kaita, konkrečiu laiko intervalu (angl. *Average Iteration Number*);

ALE – Lagranžo ir Eulerio formuluotė (angl. *Arbitrary Lagrangian Eulerian*);

AMG – algebrinis daigiatinklis metodas (angl. *Algebraic MultiGrid*);

AVA – atsivėręs aortos vožtuvas;

AVU – užsivėręs aortos vožtuvas;

BOI – tinklo tankinamo aktualiuose regionuose metodika (angl. *Body Of Influence*);

CFD – skaičiuojamoji skysčių dinamika (angl. *Computational Fluid Dynamics*);

CPU – centrinis procesorius (angl. *Central Processing Unit*);

DNS – tiesioginė skaitinė simuliacija (angl. *Direct Numerical Simulation*);

DVU – dviburio širdies vožtuvo užsidarymas;

DVA – dviburio širdies vožtuvo atsidarymas;

EC2 – elastinis skaičiavimų debesis (angl. *Amazon Elastic Compute Cloud*);

FEM – baigtinių elementų metodas (angl. *Finite Element method*);

FSI – skysčio ir struktūros sąveika (angl. *Fluid-Structure Interaction*);

FVM – baigtinių tūrių metodas (angl. *Finite Volume method*);

GPU – grafinis vaizdo procesorius (angl. *Graphics Processing Unit*);

IaaS – infrastruktūros paslaugos debesų kompiuterijoje;

*in vivo* – medicininis procesas (bandymas, tyrimas), atliekamas arba stebimas gyvame organizme;

*in vitro* – medicininis procesas (bandymas, tyrimas), atliekamas ne gyvoje, bet dirbtinėje sistemoje;

IVK – izovoliuminės kontrakcijos periodas;

IVR – izovoliuminės relaksacijos periodas;

KP – kairysis prieširdis;

KS – kairysis skilvelis;

KT – daugiasluoksnė kompiuterinė tomografija;

LES – stambių sukurių modeliavimo metodas (angl. *Large Eddy Simulation*);  
LVOT – kairiojo skilvelio išstūmimo traktas (angl. *Left Ventricular Outflow Tract*);  
MHV – mitralinis širdies vožtuvas (angl. *Mitral Heart Valves*);  
MR – magnetinis rezonansas;  
MRT – magnetinio rezonanso tyrimas;  
NURBS – sudėtingos trimatės geometrijos apibrėžimas kreivės laipsniu, kontroliniais taškais ir *B-Spline* bazinėmis funkcijomis (angl. *Non Uniform Rational B-Splines*);  
PaaS – platformos paslaugos debesų kompiuterijoje;  
PCI – magistralės tipas;  
PHV – polimerinis širdies vožtuvas (angl. *Prosthetic Heart Valve*);  
PISO – skaitinė schema, pagrįsta Chorino projekcijos metodu (angl. *Pressure-Implicit with Splitting of Operators*);  
RANS – Reinoldso suvidurkintos Navjė ir Stokso lygtys (angl. *Reynolds-Averaged Navier-Stokes equations*);  
SaaS – programinės įrangos paslaugos debesų kompiuterijoje;  
SST – šlyties įtempių transportavimas  $k-\omega$  modelyje (angl. *Shear Stress Transport*);  
TAVI – transkateterinio aortos vožtuvo implantacija;  
TKE – turbulentinė kinetinė energija;  
UDF – vartotojo apibrėžta funkcija (angl. *User-Defined Function*);  
VM – virtualioji mašina.

---

# Turinys

|  |    |
|--|----|
| IVADAS .....   | 1  |
| Problemos formulavimas.....  | 1  |
| Darbo aktualumas.....  | 2  |
| Tyrimų objektas .....  | 2  |
| Darbo tikslas.....   | 3  |
| Darbo uždaviniai .....   | 3  |
| Tyrimų metodika .....  | 3  |
| Darbo mokslinis naujumas .....   | 3  |
| Darbo rezultatų praktinė reikšmė .....   | 4  |
| Ginamieji teiginiai.....   | 4  |
| Darbo rezultatų aprobavimas.....   | 5  |
| Disertacijos struktūra.....  | 5  |
| 1. KRAUJO TĖKMEI AORTOS VOŽTUVE TAIKOMŲ SKAITINIŲ METODŲ<br>LITERATŪROS APŽVALGA IR ANALIZĖ..... | 7  |
| 1.1. Aortos vožtuvo anatomijos ir biomechaninių parametrų analizė .....                          | 8  |
| 1.2. Aortos vožtuvo geometrijos nustatymas individualiam pacientui .....                         | 12 |
| 1.3. Skaitiniai metodai taikomi aortos vožtuvui .....  | 15 |
| 1.3.1. Aortos vožtuvo modeliavimo koncepcijos .....  | 15 |
| 1.3.2. Turbulencijos modelių apžvalga ir analizė .....   | 18 |
| 1.3.3. Kraštinės sąlygos .....   | 21 |
| 1.4. Pirmojo skyriaus išvados ir disertacijos uždavinių formulavimas.....                        | 23 |

|  |     |
|--|-----|
| 2. SKAITINIS KRAUJO TĒKMĒS AORTOS VOŽTUVE MODELIS.....   | 25  |
| 2.1. Aortos vožtuvo geometriniai modeliai.....   | 26  |
| 2.2. Kraujo tĕkmĕs diferencialinĕs lygtys.....   | 28  |
| 2.3. Aortos vožtuvo tĕkmĕs kraštiniĕs sĕlygos.....   | 31  |
| 2.4. Baigtinių tūrių metodas ir tinklai kraujo tĕkmei aortos vožtuve modeliuoti..              | 35  |
| 2.5. Antrojo skyriaus išvados.....   | 39  |
| 3. TĒKMĒS AORTOS VOŽTUVE MODELIAVIMO REZULTATAI.....   | 41  |
| 3.1. Skaičiuojamoji infrastruktūra ir skaičiavimų efektyvumas.....                             | 42  |
| 3.2. Skaitinių parametų parinkimas sudarytam tĕkmĕs aortos vožtuve modeliui                    | 46  |
| 3.2.1. Baigtinių tūrių tinklų parinkimo tyrimas.....   | 46  |
| 3.2.2. Baigtinių tūrių tinklų pasienio sluoksnyje parinkimo tyrimas.....                       | 49  |
| 3.2.3. Laiko žingsnių nustatymo tyrimas.....   | 53  |
| 3.3. Tĕkmĕs aortos vožtuve kraštinių sĕlygų tyrimas.....                                       | 55  |
| 3.4. Turbulencijos modelių tyrimas.....  | 62  |
| 3.5. Skaitinio sprendinio palyginimas su medicininį matavimų rezultatais.....                  | 69  |
| 3.6. Trečiojo skyriaus išvados.....  | 74  |
| BENDROSIOS IŠVADOS.....  | 77  |
| LITERATŪRA IR ŠALTINIAI.....   | 79  |
| AUTORĖS MOKSLINIŲ PUBLIKACIJŲ DISERTACIJOS TEMA SĄRAŠAS ....                                   | 91  |
| SUMMARY IN ENGLISH.....  | 93  |
| PRIEDAI <sup>1</sup> .....   | 109 |
| A priedas. Disertacijos autorĕs sĕžiningumo deklaracija.....                                   | 111 |
| B priedas. Bendraautorių sutikimai teikti publikacijose skelbtą medžiagą<br>disertacijoje..... | 112 |
| C priedas. Autorĕs mokslinių publikacijų disertacijos tema kopijos.....                        | 124 |

---

<sup>1</sup> Priedai pateikiami pridĕtoje kompaktinĕje plokštelĕje.

---

# Contents

|   |    |
|---|----|
| INTRODUCTION .....  | 1  |
| Problem formulation .....   | 1  |
| Relevance of the thesis .....   | 2  |
| The object of research .....  | 2  |
| The aim of the thesis .....   | 3  |
| The tasks of the thesis .....   | 3  |
| Research methodology .....  | 3  |
| Scientific novelty of the thesis .....  | 3  |
| Practical value of the reseach findings .....   | 4  |
| The defended statements .....   | 4  |
| Approval of the research findings .....   | 5  |
| Structure of the dissertation .....   | 5  |
| 1. REVIEW OF LITERATURE AND NUMERICAL METHODS FOR BLOOD FLOW<br>MODELLING IN AORTIC VALVE ..... | 7  |
| 1.1. Analysis of aortic anatomy and biomechanical parameters.....                               | 8  |
| 1.2. Patient-specific geometry of an aortic valve .....   | 12 |
| 1.3. Numerical methods applied for aortic valve.....  | 15 |
| 1.3.1. Aortic valve modeling concepts .....   | 15 |
| 1.3.2. Turbulence models .....  | 18 |
| 1.3.3. Boundary conditions.....   | 21 |

|  |     |
|--|-----|
| 1.4. Conclusions of chapter 1 and formulation of the thesis tasks.....                                   | 23  |
| 2. NUMERICAL MODEL OF AORTIC VALVE FLOW .....  | 25  |
| 2.1. Geometrical models of aortic valve.....   | 26  |
| 2.2. Differential equations of blood flow .....  | 28  |
| 2.3. Boundary conditions for aortic valve flow .....   | 31  |
| 2.4. The finite volume method and meshes for modelling aorticvalve flow .....                            | 35  |
| 2.5. Conclusions of chapter 2 .....  | 39  |
| 3. NUMERICAL RESULTS OF AORTIC VALVE FLOW .....  | 41  |
| 3.1. Computing infrastructure and computational efficiency .....   | 42  |
| 3.2. Selection of numerical parameters for the model of aortic valve flow.....                           | 46  |
| 3.2.1. Investigation of finite volume meshes.....  | 46  |
| 3.2.2. Investigation of finite volume meshes in the boundary layers .....                                | 49  |
| 3.2.3. Investigation of the selected time steps .....  | 53  |
| 3.3. Investigation of the developed boundary conditions of aortic valve flow.....                        | 55  |
| 3.4. Investigation of the turbulent models .....   | 62  |
| 3.5. Comparison of numerical solution with the results of medical measurements..                         | 69  |
| 3.6. Conclusions of chapter 3 .....  | 74  |
| GENERAL CONCLUSIONS .....  | 77  |
| REFERENCES .....   | 79  |
| LIST OF PUBLICATIONS BY THE AUTHOR ON THE TOPIC OF THE<br>DISSERTATION.....                              | 91  |
| SUMMARY IN ENGLISH.....  | 93  |
| ANNEXES <sup>1</sup> .....   | 109 |
| Annex A. Declaration of academic integrity .....   | 111 |
| Annex B. The co-authors agreements to present publications material<br>in the doctoral dissertation..... | 112 |
| Annex C. Copies of scientific publications by the author on the topic of the<br>dissertation.....        | 124 |

---

<sup>1</sup> The annexes are supplied in the enclosed compact disc.

---

# Įvadas

## Problemos formulavimas

Sveiko žmogaus triburių aortos vožtuvų lapeliai, sudarydami tris audinio kišenes, atsidaro ir užsidaro sistolės bei diastolės metu. Kai triburis aortos vožtuvas tampa nepakankamai sandarus arba nepakankamai pralaidus, vystosi širdies ydos. Dažniausiai diagnozuojami širdies vožtuvų pažeidimai, pasireiškiantys padidėjusiu aortos vožtuvų pralaidumu (nesandarumu) arba jų susiaurėjimu (stenoze). Tinkamai negydomos širdies ydos gali smarkiai patrumpinti gyvenimą ar sukelti mirtį. Tačiau aortos vožtuvui modeliuoti reikia daugybės žinių ir kompleksinio problemų sprendimo: pravartu įvertinti specifinę audinių reologiją, aortos geometriją, pradines kraštines sąlygas ir priimti sprendimą dėl tinkamiausio skaitinio metodo pasirinkimo.

Dauguma autorių modeliuoja kraujo tėkmę aortos vožtuve, neįvertindami turbulencijos įtakos, nes sveikose kraujagyslėse kraujo tėkmė dažniausiai būna laminarioji ir į turbulentinę nepereina. Su turbulentine tėkme aortos vožtuve susiduriama diagnozuojant širdies vožtuvų pažeidimus. Literatūroje turbulencijos modeliai dažniausiai buvo vertinami naudojant mechaninius aortos vožtuvų protezus ar ruošiantis aortos koarktacijos operacijoms. Vis dėlto pastebėta, jog tėkmė tampa turbulentine greičiui mažėjant po sistolės piko, kai tėkmė išsiplečia už aor-

tos vožtuvo lapelių. Taikant populiariausią  $k$ - $\epsilon$  turbulencijos modelį, didelės apskaičiuotos turbulentinio klampio reikšmės nugludina daugumą smulkesnių sūkurinių, ir gaunami netikslūs rezultatai. Dėl šios priežasties disertacijoje numatoma atlikti turbulencijos modelių tyrimą ir palyginimą mažų Reinoldso skaičių turbulentinės kraujo tėkmės aortos vožtuve atveju.

## Darbo aktualumas

Širdies ir kraujagyslių ligos – viena pagrindinių žmonių mirties priežasčių, dažnesnė nei visos vėžio formos kartu paėmus. Todėl, siekiant sumažinti jų skaičių, svarbu atlikti daugelį mokslinių tyrimų, analizuojant širdies ir kraujagyslių struktūrą, funkcijas ir biomechaninius parametrus. Širdis yra sudėtinga sistema, valdoma hemodinamikos, struktūrinės dinamikos ir elektromagnetinių dėsnių. Nepaisant daugybės hemodinamikos tyrimo būdų tobulinimo, šiuolaikiniai *in vivo* matavimo metodai gali užfiksuoti tik didelio mastelio reiškinius. Kraujotakos tyrimus būtų galima panaudoti atliekant širdies chirurgiją, kuriant dirbtines širdis ir protezinius širdies vožtuvus, užkertant kelią kylančiosios aortos dilatacijai (aneurizmai ir ektazijai). Jie taip pat galėtų būti naudingi ne tik medicinos ar biomedicinos srityse, bet ir kitose mokslo srityse. Šiuolaikiniai *in vivo* matavimo metodai gali išspręsti tik dalį problemų, susijusių su kraujotaka bei klinikiniu širdies funkcijos vertinimu, o chirurginiams vertinimams taip reikalingas slėgio skirtumų (gradientų) pasiskirstymas neišgaunamas atliekant medicininius tyrimus. Kraujo tėkmės modeliavimas aortos vožtuve gali padėti apsispręsti kai renkamas tarp chirurginės procedūros ir galimų neinvazinių metodų. Tokie tyrimai būtų naudingi siekiant sukurti naujas technologijas ir medicininius prietaisus, prognozuoti chirurginių operacijų, implantacijų pasekmes organizmui. Sudarius tinkamą kraujo tėkmės skaitinį modelį aortos vožtuve, galima įvertinti kraujospūdžio ir tėkmės greičio reikšmes visoje uždavinio apibrėžimo srityje, o tai leidžia tirti unikalius kraujo tėkmės procesus.

## Tyrimų objektas

Darbo tyrimų objektas – mažų Reinoldso skaičių turbulentinė kraujo tėkmė aortos vožtuve ir jos skaitiniai modeliai.



## Darbo tikslas

Darbo tikslas – sudaryti ir ištirti skaitinį kraujo tėkmės aortos vožtuve modelį, įvertinantį mažais Reinoldso skaičiais charakterizuojamos turbulencijos įtaką.

## Darbo uždaviniai

Darbo tikslui pasiekti iškelti uždaviniai:

1. Ištirti skaitinių metodų ir parametų įtaką tėkmės aortos vožtuve uždavinio sprendinio konvergavimui ir sprendimo laikui.
2. Ištirti kraštinių sąlygų įtaką atgalinės tėkmės susidarymui ir skaitinio sprendinio konvergavimui.
3. Parinkti tinkamą turbulencijos modelį mažais Reinoldso skaičiais charakterizuojamai tėkmei aortos vožtuve.
4. Validuoti sudarytą skaitinį modelį, remiantis individualaus paciento klinikinių matavimų rezultatais.

## Tyrimų metodika

Darbe literatūros ir lyginamosios analizės metodai taikomi tyrimų objektui ir turbulentinių tėkmių aortos vožtuve skaitinio modeliavimo metodams nagrinėti. Tėkmę aortos vožtuve aprašančios diferencialinės lygtys sprendžiamos skaitiniu baigtinių tūrių metodu, įdiegtu „ANSYS Fluent“ programų pakete. Individualaus paciento aortos vožtuvas aproksimuotas geometriniais modeliais, sudarytais iš parametrinių kreivių. Sudarytas skaitinis modelis validuotas „Philips IE 33“ echokardiografijos įranga atliktais tėkmės greičio matavimais, pagrįstais impulsinės bangos Doplerio efektu. Didelės apimties skaičiavimai atlikti „OpenStack“ debesų kompiuterijos infrastruktūroje.

## Darbo mokslinis naujumas

Rengiant disertaciją buvo gauti šie mechanikos mokslui nauji rezultatai:

1. Skaitinio sprendinio konvergavimui pagerinti ir atgalinei tėkmei modeliuoti pasiūlyta nauja ištekėjimo iš aortos vožtuvo kraštinė sąlyga, pagrįsta elipsinio paraboloido formos išgaubtu slėgio paviršiumi.

2. Aortos vožtuve vyraujančioms, mažais Reinoldso skaičiais charakterizuojamoms, turbulentinėms tėkmėms parinktas šlyties įtempių transportavimą įvertinantis  $k-\omega$  turbulencijos modelis su trūkiojo perėjimo lygtimi, kuris dar nebuvo taikytas aortos vožtuvui modeliuoti.

## Darbo rezultatų praktinė reikšmė

Tyrimų rezultatai gali būti naudingi medicinoje, atliekant skaitmeninius širdies vožtuvo struktūrinius tyrimus. Modeliavimo rezultatai gydytojams galėtų suteikti papildomos informacijos atliekant širdies chirurgines operacijas, užkertant kelią kylančiosios aortos dilatacijai (aneurizmai ir ektazijai). Kraujotakos modeliavimas gali būti naudingas, kai dvejojama renkantis chirurgines procedūras. Tokie tyrimai būtų naudingi ir tuomet, kai siekiama sukurti naujas technologijas ir medicininius prietaisus, prognozuoti chirurginių operacijų ar implantacijų pasekmes organizmui.

## Ginamieji teiginiai

1. Pasiūlyta ištekėjimo iš aortos vožtuvo kraštinė sąlyga, pagrįsta elipsinio paraboloido formos išgaubtu slėgio paviršiumi, prailgina skaitinio sprendinio konvergavimo laiko intervalą ir leidžia kontroliuoti atgalinės tėkmės dydį, keičiant pasiūlytos kraštinės sąlygos slėgio paviršiaus išgaubtumą.
2. Aortos vožtuve vyraujančioms, mažais Reinoldso skaičiais charakterizuojamoms, turbulentinėms tėkmėms parinktas šlyties įtempių transportavimą įvertinantis  $k-\omega$  turbulencijos modelis su trūkiojo perėjimo lygtimi sumažina Navjė ir Stokso lygčių skaitinio sprendinio oscilacijas, bet turbulentinio modelio rezultatai išlieka gana artimi laminariosios tėkmės, aproksimuotos DNS sprendiniu, rezultatams.
3. Sudarytas skaitinis modelis leidžia tiksliai apskaičiuoti didžiausiąją greičių lauko reikšmę sistolėje, kurią galima išmatuoti medicinine echokardiografijos įranga, pagrįsta impulsinės bangos Doplerio efektu.

## Darbo rezultatų apibavimas

Disertacijos tema išspausdinti 8 moksliniai straipsniai: penki – *Clarivate Analytics Web of Science* žurnaluose, turinčiuose citavimo rodiklį (Staškūnienė et al. 2018; Kačeniauskas et al. 2017; Starikovičius et al. 2017; Stupak et al. 2017; Kačeniauskas et al. 2015); vienas – *Conference proceedings* leidinyje (Kačeniauskas et al. 2016), du – kitų tarptautinių duomenų bazių leidiniuose (Staskuniene et al. 2017; Kačeniauskas et al. 2015).

Disertacinio darbo rezultatai apribuoti penkiose mokslinėse konferencijose Lietuvoje ir užsienyje:

1. 5-ojoje tarptautinėje konferencijoje „Lygiagretieji, paskirstytieji, tinkliniai, GPU ir debesų kompiuterijos skaičiavimai inžinerijoje „PARENG2017“, 2017 m. gegužės 30–31 d., Pešo universitete, Vengrijoje.
2. 14-ajame tarptautiniame Biomechanikos ir biomedicinos inžinerijos kompiuterinių metodų simpoziume (CMBBE), 2016 m. rugsėjo 20–22 d., Tel Avive, Izraelyje.
3. 40-ojoje tarptautinėje vientiso / deformuojamo kūno mechanikos konferencijoje „SOLMECH 2016“, 2016 m. rugpjūčio 29 – rugsėjo 2 d. Varšuvos mokslų akademijoje, Lenkijoje.
4. 21-ojoje tarptautinėje mokslininkų konferencijoje „Mechanika 2016“, 2016 m. gegužės 12–13 d., Kauno technologijos universitete, Kaune.
5. 4-ojoje tarptautinėje konferencijoje „Lygiagretieji, paskirstytieji, tinkliniai ir debesų kompiuterijos skaičiavimai inžinerijoje „PARENG 2015“, 2015 m. kovo 24–27 d., Dubrovniko, Kroatijoje.

## Disertacijos struktūra

Disertaciją sudaro įvadas, trys skyriai ir bendrosios išvados, literatūros ir autorės mokslinių publikacijų disertacijos tema sąrašai.

Darbo apimtis – 108 puslapiai, tekste panaudota 31 numeruota formulė, 39 paveikslai ir 1 lentelė. Rašant disertaciją buvo panaudoti 138 literatūros šaltiniai.



---

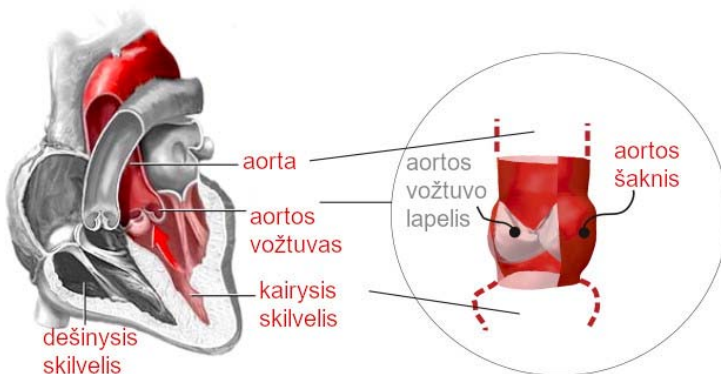
## **Kraujo tėkmei aortos vožtuve taikomų skaitinių metodų literatūros apžvalga ir analizė**

Šiame skyriuje aprašoma aortos anatomija ir pagrindiniai biomechaniniai parametrai. Apžvelgiami literatūroje randami individualaus paciento aortos vožtuvo geometrijos rekonstravimo būdai ir metodikos. Pateikiama literatūroje taikomų skaitinių metodų, skirtų įvairioms tėkmėms modeliuoti, apžvalga, daugiau dėmesio skiriant turbulencijos modeliams bei ištekėjimo kraštinėms sąlygoms, taikomoms aortos vožtuvui modeliuoti. Skyriaus pabaigoje pateikiamos išvados.

Šio skyriaus rezultatai paskelbti Kačeniauskas et al. 2015, Kačeniauskas et al. 2015 (2), Kačeniauskas et al. 2016, Stupak et al. 2017, Kačeniauskas et al. 2017, Starikovičius et al. 2017, Staškūnienė et al. 2017, Staškūnienė et al. 2018 mokslinėse publikacijose.

## 1.1. Aortos vožtuvo anatomijos ir biomechaninių parametrų analizė

Širdies ir kraujagyslių ligos – viena pagrindinių žmonių mirties priežasčių, dažnesnė nei visos vėžio formos kartu paėmus. Todėl, siekiant sumažinti jų skaičių, svarbu atlikti daugelį mokslinių tyrimų, analizuojant širdies ir kraujagyslių struktūrą, funkcionalumą ir biomechaninius parametrus. Širdis yra sudėtinga sistema, valdoma hemodinamikos (Moosavi et al. 2014), struktūrinės dinamikos ir elektromagnetinių dėsnių (Quarteroni et al. 2017). Nepaisant daugybės hemodinamikos tyrimo būdų tobulinimo, šiuolaikiniai *in vivo* matavimo metodai gali užfiksuoti tik didelio mastelio kraujotakos reiškinius, susijusius su klinikišku širdies funkcijos vertinimu. Kraujotakos tyrimus būtų galima panaudoti atliekant širdies chirurgines operacijas, kuriant dirbtines širdis ir protezinius širdies vožtuvus, užkertant kelią kylančiosios aortos dilatacijai (aneurizmai ir ektazijai), vertinant slėgio gradientų reikšmes ar siekiant suprasti natūralių (o kartu ir protezuotų) aortos vožtuvų hemodinamiką (Garcia et al. 2005). Jie taip pat galėtų būti naudingi ne tik medicinos ar biomedicinos srityse, bet ir kitoms mokslo sritims. Be to, kraujotakos modeliavimas gali būti naudingas, kai renkamas tarp chirurginės procedūros ir galimų neinvazinių metodų. Tokie tyrimai būtų naudingi ir tuomet, kai siekiama sukurti naujas technologijas ir medicininius prietaisus, prognozuoti chirurginių operacijų ar implantacijų pasekmes ir rizikos veiksnius organizmui (Anastasiou et al. 2010).

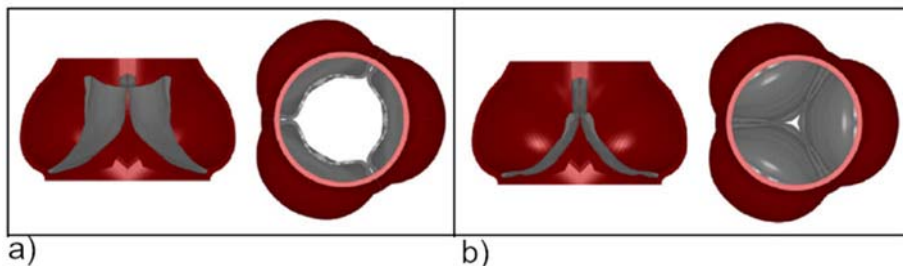


1.1 pav. Aortos vožtuvas: jo padėtis ir pagrindiniai struktūriniai komponentai (Morganti et al. 2015)

Fig. 1.1. Aortic valve, aortic valve position and main structural components (Morganti et al. 2015)

Aorta – stambiausia žmogaus arterija, prasidedanti kairiajame širdies skilvelyje. Ji skirstoma į tris dalis: kylančiąją aortą, aortos lanką ir nusileidžiančiąją aortą. Darbe nagrinėjama kylančiosios aortos dalis, kuri vidutiniškai yra iki 6 cm ilgio ir 2 cm skersmens. Širdies susitraukimo metu sveiko žmogaus aortoje vidutinis kraujo tėkmės greitis būna ne didesnis nei 0,3–0,4 m/s, ir iš kairiojo skilvelio atitekančio kraujo slėgis padidėja iki 10–16 kPa. Kylančioji aorta prasideda nuo aortos šaknies (1.1 pav.), ją formuoja aortos vožtuvo burės (pusmėnuliniai vožtuvai), subkomisuriniai trikampiai, Valsalvos sinusai, aortos vožtuvo žiedas, sinotubulinė jungtis. Pusmėnulinį aortos vožtuvą sudaro trys audinio kišenės, o kiekviena kišenė savo forma primena pusmėnulį, kurių vienas galas prisitvirtinęs prie aortos sienelės, o kitas laisvas (1.1 pav.).

Pagrindinė vožtuvų paskirtis – užtikrinti vienkryptį skysčio tekėjimą, palaikant reikiamą slėgį. Vožtuvų lapeliai, uždariantys vožtuvą, yra labai ploni ir lankstūs, tačiau atsparūs didelėms apkrovoms, todėl pusmėnulinio vožtuvo konstrukcija neleidžia kraujui tekėti atgaline kryptimi (Spühler et al. 2018). Sveiko žmogaus aorta yra triburė – aortos vožtuvų lapeliai sudaro tris audinio kišenes (Jatene et al. 1999). Triburio aortos vožtuvo padėtys sistolės ir diastolės metu pavaizduotos 1.2 paveiksle. Kai triburis aortos vožtuvas tampa nepakankamai sandarus arba nepakankamai pralaidus, vystosi širdies ydos. Dažniausiai diagnozuojami širdies vožtuvų pažeidimai, kurie pasireiškia padidėjusiu aortos vožtuvų pralaidumu (nesandarumu) arba jų susiaurėjimu (stenoze). Tinkamai negydomos širdies ydos gali smarkiai patrupinti gyvenimą ar sukelti mirtį.



**1.2 pav.** Triburio aortos vožtuvo padėtis:

a) sistolės metu b) diastolės metu (Weinberg et al. 2008)

**Fig. 1.2.** A tricuspid aortic valve position:

a) during systole b) during diastole (Weinberg et al. 2008)

Dažniausiai su aortos vožtuvo degeneracijomis susiduriama vyresniame amžiuje, progresuojant aortos stenozei, kai mažėja funkcinė aortos vožtuvo anga, o tarp kairiojo skilvelio ir aortos susidaro didelis slėgio gradientų skirtumas (Rajamannan et al. 2011; Bach 2010). Paprastai aortos stenozės metu susiaurėjus

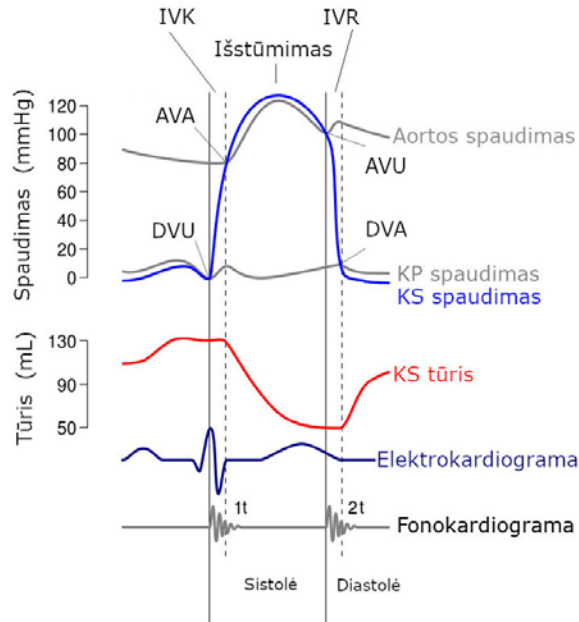
aortos vožtuvo angai, kairiojo skilvelio sistolinė funkcija taip pat išlieka sumažėjusi, kraujo tėkmės greitis ir vidutinis slėgio gradientų skirtumas aortoje padidėja daugiau nei 5,3 kPa (kairiojo skilvelio išstūmimo frakcija <50 %). Tačiau medicinoje žinomi ir kiti atvejai: kai kraujo tėkmės greitis išlieka normalus, o vidutinis slėgio gradientų skirtumas aortoje sumažėja (medicinoje toks atvejis vadinamas mažo gradiento aortos stenozė, angl. *low-gradient*) arba kai sumažėja ir kraujo tėkmės greitis, ir vidutinis slėgio gradientų skirtumas aortoje (medicinoje toks atvejis vadinamas mažos tėkmės, mažo gradiento aortos stenozė, angl. *low-flow low-gradient*). Tokiu atveju efektyvios angos plotas <0,8–1,0 cm<sup>2</sup>, kairiojo skilvelio išstūmimo frakcija ≥50 %, o vidutinis slėgio gradientų skirtumas <4,0–5,3 kPa (Baumgartner et al. 2009; Orwat et al. 2013; Bartel et al. 2013).

Aortos elastinės savybės leidžia jai išsitempti sistolėje ir susitraukti diastolėje. Sveiko žmogaus aortoje apytiksliai 50 % kairiojo skilvelio sistolinio tūrio pasiskirsto diastolės pabaigoje (daugiausia kylančiojoje aortoje) ir toliau kraujas išstumiamas į periferines kraujagysles. Aortos geba išsitempti svarbi kraujotakai ir arteriniam kraujospūdžiui viso širdies ciklo metu. Aortoje gausu elastinių skaidulų, tačiau jos elastingumas mažėja senstant, tai lemia elastinių ir kolageno skaidulų fragmentacija. Aortos sienelės prisitaikomasis judesys (angl. *compliance*) kairiojo skilvelio sistolės metu lemia didėjančią sistolinį arterinį kraujospūdį ir pulsinį spaudimą, o šie procesai – aortos išsiplėtimą ir prailgėjimą. Aortos prisitaikymo geba apibūdinama kaip aortos tūrio ir spaudimo pokytis tą pačią akimirką, o jis įvertinamas regioniniu aortos dydžio arba ploto pokyčiu, tenkančiu spaudimo pokyčiui, širdies ciklo metu (t. y. elastingumas) (Goldstein et al. 2015; Biesevičienė 2017).

Sveikos širdies ciklas trunka apie 0,8 s ir yra skirstomas į tris širdies ciklo etapus: prieširdžių sistolė, kuri trunka apie 0,1 s, skilvelių sistolė – apie 0,33 s, diastolė – apie 0,4 s (1.3 pav.). Darbe nagrinėjama tik skilvelių sistolė, kuri trunka iki 0,33 s. Tai širdies ciklo etapas, kurio metu iš širdies išstumiamas pritekėjęs kraujas skilveliams susitraukiant. Skilvelių sistolė turi dvi susitraukimo fazes. Per pirmąją fazę, kuri trunka 0,08 s įsitempia širdies raumuo (asinchroninė įtampa trunka iki 0,05 s ir izometrinis susitraukimas trunka iki 0,03 s), dviburiai širdies vožtuvai lieka uždari ir kraujo spaudimas skilveliuose ima didėti. Širdies įsitempimo periodas 1.3 paveiksle atitinka IVK trumpinį, t. y. izovoluminės kontrakcijos periodas, o uždari dviburiai širdies vožtuvai – DVU. Kai tik įtampa pasiekia piką, prasideda skilvelių susitraukimo laikotarpis, t. y. antroji fazė (fazė trunka 0,25 s). Jos metu atsidaro aortos vožtuvas (1.3 pav. atitinka AVA) ir plaučių arterijos kamieno pusmėnuliniai vožtuvai, tuomet kraujas iš kairiojo skilvelio (1.3 pav. atitinka KS) išstumiamas į aortą, o iš dešiniojo skilvelio – į plaučių arterijos kamieną, visa tai trunka apie 0,13 s (1.3 pav. atitinka „Išstūmimą“). Kai iš skilvelių išteka tiek kraujo, kad spaudimas juose tampa mažesnis už spaudimą aortoje ir plaučių arterijos kamiene, jų pusmėnuliniai vožtuvai užsidaro (1.3 pav.



atitinka IVR – izovoliuminės relaksacijos periodą), prasideda diastolė (Rudenko et al. 2011). Likę nepaminėti trumpiniai iš 1.3 paveikslė: AVU – aortos vožtuvo užsidarymas, DVA – dviburio vožtuvo atsідarymas, KP – kairysis prieširdis.



1.3 pav. Širdies ciklo fazės (Guyton et al. 2016)

Fig. 1.3. Phases of the cardiac cycle (Guyton et al. 2016)

Kraujas – cirkuliuojantis jungiamasis audinys, sudarytas iš skystosios tarp-ląstelinės medžiagos: kraujo plazmos (apie 55–60 %) ir kraujo ląstelių (apie 40–45 %). Kraujo tankis  $\rho = 1060 \text{ kg/m}^3$ . Kraujo klampis priklauso nuo plazmoje esančių baltymų kiekio ir nuo kraujo kūnelių koncentracijos. Paprastai sveiko žmogaus (iki 37 °C temperatūros) kraujo klampis svyruoja tarp 0,003–0,004 Pa·s. Reologinės kraujo savybės nustatomos pagal kraujo plazmos ir kraujo ląstelių tarpusavio santykius, taip pat sąveiką su aplinkinėmis struktūromis. Kraujo klampiui įtakos turi išorinės fizinės sąlygos, tokios kaip temperatūra, kurios net ir maži pokyčiai gyviesiems organizmams ir didžiajai daliai žinduolių gali daryti didžiulę įtaką (Sochi 2013).

Analizuojant kraujo reologines savybes, svarbu nepamiršti, jog kraujo sudėtis nuolat kinta. Tiriant jungiamojo audinio sudėtį pastebėta, kad kraujo plazma veikia kaip niutoninis skystis, kuris turi pastovų klampį, o kraujo ląstelės dėl jų sudėties – kaip neniutoninis skystis (Cho ir kt. 1991). Be to, pastebėta, jog sveiko žmogaus mažose kraujagyslėse skystis laikomas neniutoniniu dėl mažų šlyties

greičių. Didelėse sveikose arterijose, kurių skersmuo didesnis nei 1 mm (pvz., aortoje), šlyties dažnis yra didesnis kaip  $100 \text{ s}^{-1}$ , todėl skystis laikomas niutoniniu (Khanafar et al. 2006; Cho et al. 1991; Tian et al. 2013; Niazmand et al. 2008). Reikia nepamiršti ir to, jog, esant širdies vožtuvų pažeidimams, pavyzdžiui, aneurizmą ir stenozės atvejais, pakinta raudonųjų kraujo ląstelių ir trombocitų skaičius, o tai taip pat gali lemti kraujo klampio pokyčius (Khanafar et al. 2006). Vis dėlto bendru atveju kraujas laikomas neniutoniniu skysčiu, nes yra sudarytas iš sudėtingų stambiamolekulių junginių, jo klampis priklauso nuo tekėjimo greičio, bet neniutoninių kraujo savybių įtaka pastebima tik smulkiose kraujagyslėse ir kapiliaruose (Cho et al. 1991), todėl aortoje kraujas laikomas niutoniniu skysčiu.

## 1.2. Aortos vožtuvo geometrijos nustatymas individualiam pacientui

Individualaus paciento aortos vožtuvo geometrija gali būti tiesiogiai rekonstruota iš medicinine įranga nuskenuotų atvaizdų (Jabbour et al. 2011; Youssefi et al. 2017; Dowling et al. 2019; Basri et al. 2020). Medicinoje taikant įprastus rutininis širdies tyrimus (vertinant individualaus paciento aortos vožtuvo morfologiją, funkciją ir vožtuvų darbą) dažniausiai pasirenkamas neinvazinis diagnostikos metodas – echokardiografija. Dažnai taikoma realiojo laiko 3D echokardiografija, kurios metu tiesiogiai gaunami morfologiniai ir funkciniai aortos vožtuvų duomenys. Perkrūtininė ir perstemplinė echokardiografijos taip pat vertingos, atliekant įprastus rutininis širdies tyrimus (Goldstein et al. 2015). Kita vertus, įrodyta, jog, vertinant aortos vožtuvų geometrinius matmenis, daugiasluoksnė kompiuterinė tomografija (KT) ir kardialinis magnetinis rezonansas (MR) suteikia daugiau informacijos nei echokardiografija (Jabbour et al. 2011; Ionasec et al. 2010; Schenkel et al. 2009; Youssefi et al. 2017; Morganti et al. 2015). Vis dėlto bendro sutarimo, kaip ir kokia įranga matuoti būtų tikslinga, nėra, o taikomi skirtingi matavimo metodai bei kiekvieno žmogaus savitumas neretai lemia skirtingą aortos geometrijos vaizdavimo modelį, todėl idealiausiomis sąlygomis taikomi kompleksiniai matavimai su skirtinga technika (Goldstein et al. 2015).

Individualaus paciento aortos vožtuvo geometrijos rekonstrukcija prasideda nuo atvaizdų segmentacijos, kuri gali būti rankinė ir automatinė. Rankinės segmentacijos metu ekspertas rankomis segmentuoja aortos vožtuvo vaizdus, kiekviename iš jų apibrėždamas svarbiausius aortos vožtuvo geometrinius parametrus (Aggarwal et al. 2013; Ilina et al. 2017). Svarbiausia nustatyti pusmėnulinio aortos vožtuvo pusę bei kiekvieną subkomisurinį trikampį (Pouch et al. 2013). Be to, turi būti išmatuojami pagrindiniai geometriniai aortos vožtuvo ir aortos šaknies parametrai: didysis aortos vožtuvo angos spindulys, mažasis aortos vožtuvo angos spindulys ir didžiausias aortos vožtuvo lapelių aukštis (Morganti et al. 2015).

Automatinei segmentacijai gali būti taikomi įvairūs metodai: mašininio mokymosi metodai (angl. *machine learning*), statistiniai figūrų modeliavimo metodai (angl. *statistical shape models*) bei deformuojamų modelių metodai (angl. *deformable models*). Aortos sienelei atskirti nuo fono taikomos mašininio mokymosi metodais sukurtos sistemos, kurios mokosi iš turimų segmentuotų atvaizdų (atlieka duomenų analizę), o skaičiavimams naudoja įvairius algoritmus (Kwon et al. 2020; Yavuz et al. 2017). Automatinei segmentacijai dažnai taikomi eksperto sužymėti atlasai kartu su žymių sujungimo (angl. *multi-atlas label fusion*) algoritmais (Pouch et al. 2013; Basri et al. 2020).

Taikant statistinių figūrų modeliavimo metodą sukuriamas aortos geometrijos šablonas, kuris derinamas su galimų objekto formų rinkiniu. Tuomet nustatomas kiekvieno konkretaus aortos atvaizdų rinkinio tik aortai būdingas skaistis, o pašaliniai objektai pašalinami. Tokiai geometrijai gauti reikia atvaizdų iš kelių skirtingų objekto pusių. Kita vertus, turint kelis pagrindinius parametrus, gana lengvai generuojama nauja geometrijos forma (Ionasec et al. 2010; Book, Gregory A.; Wei Sun 2010). Deja, mašininio mokymosi metodai ir statistinių figūrų modeliavimo metodai nėra tinkami esant sunkioms aortos vožtuvo patologijoms ar vaizduose esant artefaktų (Voigt et al. 2011).

Naudojant deformuojamų modelių metodus, vaizdai segmentuojami interaktyviai, tačiau modelio inicializacija reikalauja labai daug pradinių elementų, kuriuos rankomis įvesti nepatogu. Dažniausiai taikoma srities didinimo metodika, apytiksliai aprašanti segmentuojamo objekto vietą, formą ir dydį. Turint apytikslį segmentuojamo objekto modelį, toliau jis tikslinamas taikant trimatį deformuojamąjį modelį. Pradiniams atvaizdo elementams parinkti (rankomis) pakanka vos kelių elementų, o šis reikalingas apytiksliam segmentuojamo objekto modeliui gauti ir įvertinti atitikimą tarp jų (Papademetris et al. 2001; Zhu et al. 2012). Kuriant aortos vožtuvo geometrinį modelį šia metodika, didžiausia kliūtimi tampa tiksliai aortos vožtuvo lapelių rekonstrukcija, nes lapelių tankis nedaug skiriasi nuo juos supančio kraujo tankio. Nepriklausomai nuo metodo, taikomo panašioms atvaizdo elementams sujungti į grupes, šis faktas labai apsunkina aortos vožtuvo lapelių srities segmentavimą. Neretai keli skirtingi segmentavimo metodai derinami tarpusavyje, kompensuojant atskirų metodų trūkumus.

Pasitelkus modernias technologijas galima sudaryti gan detalią individualaus paciento širdies vožtuvų geometriją, jei gaunamų atvaizdų rezoliucija yra gana didelė (Votta et al. 2013). Paprastai reikiamas rezultatas pasiekiamas kombinuojant keliomis technologijomis gautus rezultatus (Ionasec et al. 2010; Dowling et al. 2019) arba pritaikius inovatyvią įrangą (Veronesi et al. 2009; Youssefi et al. 2017). Morganti ir kt. (2015) palyginti lengvai išgauna aortos šaknies geometriją iš medicininių atvaizdų (daugiasluoksne KT), tačiau aortos lapelių su daugiasluoksne KT paprastai nematyti. Norint individualiam pacientui rekonstruoti lape-

lius, ultragarso matavimus tenka integruoti į daugiasluoksnės kompiuterinės tomografijos duomenis (Morganti et al. 2015). Pirola ir kt. (2017), magnetinio rezonanso tomografu išgautus aortos atvaizdus rekonstravę į individualaus paciento geometrinį modelį, jį panaudojo modeliuodami hemodinaminis procesus. Jų atkurtų fiziologinių slėgio bangų formų paklaida aortoje, palyginus su MR tomografu gautais rezultatais, siekė iki 8 % (Pirola et al. 2017). Daugiausia individualiam pacientui pritaikytų aortos geometrinių modelių literatūroje minima, nagrinėjant mechaninius aortos vožtuvo protezus ar atliekant hemodinaminę analizę TAVI procedūros metu (Basri et al. 2020; Youssefi et al. 2017; Grbic et al. 2012; Sirois et al. 2011; Dowling et al. 2019; Singh-Gryzbon et al. 2020).

Aortos vožtuvo geometrijos rekonstrukcija iš medicininių atvaizdų išlieka sudėtinga užduotimi dėl skaitiniams modeliams reikalingo tikslumo ne tik erdvėje, bet ir laike (Grbic et al. 2012; Basri et al. 2016). Plonų aortos vožtuvo lapelių tankis nedaug skiriasi nuo juos supančio kraujo tankio, todėl sudėtinga tiksliai nustatyti vožtuvo lapelių geometriją iš nepakankamai ryškių atvaizdų. Kita problema – žema nuskenuotų atvaizdų rezoliucija (Marom 2014; Morganti et al. 2015). Nepakankamos atvaizdų rezoliucijos pasekmės kompiuterinio modeliavimo procese verčia glodinti rekonstruotą geometriją. Dar didesnius iššūkius kelia 4D arba 3D atvaizdų, kintančių laike, skenavimas ir geometrijos rekonstrukcija. Kompiuterinės tomografijos įrangos greitis leidžia padaryti tik kelis 3D atvaizdus per širdies dūžį. Šiuolaikinių echokardiografų skenavimo greitis yra didesnis, bet, iki maksimumo padidinus skenavimo greitį, tenka mažinti atvaizdų rezoliuciją. Visais atvejais iš nuskenuotų vožtuvų atvaizdų rekonstruota geometrija nėra pakankamai tiksli sudėtingų patologijų skaitiniam modeliavimui, o vožtuvo lapelių judesio neįmanoma aproksimuoti be sudėtingų interpoliacijos metodų taikymo.

Modeliuojant sudėtingus procesus, laiko žingsnis gali būti labai mažas. Dažniausiai širdies dūžio ciklas dalijamas į kelis tūkstančius laiko žingsnių. Šiuolaikinė medicininė įranga nepajėgi skenuoti 3D geometrijos tokiu greičiu, todėl tenka naudoti geometrijos interpoliavimą laike. Dėl šios priežasties geometrijos rekonstrukcijos etape paranku taikyti geometrinį modelį, sudarytą iš analitiniu būdu apibrėžtų paviršių. Prireikus kontrolinius modelio taškus galima sujungti glodžiomis kreivėmis ir interpoliuoti jų padėtį laike. Pirmieji geometriniai aortos vožtuvo modeliai (Reul et al. 1990; Soncini et al. 2006) buvo dvimačiai, kad skaitiniam uždavinių sprendimui reikėtų mažiau išteklių. Pirmasis 3D geometrinį modelį, pagrįstą optimalų funkcionalumą aprašančiomis charakteristikomis, trilapiams aortos protezams pasiūlė M. Thubrikar (Thubrikar 1990). Vėliau šis modelis buvo pritaikytas ir natūraliems aortos vožtuvams modeliuoti (De Hart, Baaijens, et al. 2003; Labrosse et al. 2006). T. E. Claiborne ir kt. pasiūlė gaminti kintamojo storio aortos vožtuvo protezus iš polimerų, bet matematinių modelio išraiškų straipsnyje nepateikė (Claiborne et al. 2013). Geometrinį modelį, pagrįstą pussferėmis, pasiūlė J. S. Rankin ir kt. (Rankin et al. 2012). Dauguma ankstyvųjų

geometrinių modelių neturėjo tikslaus anatominių sinusų aprašymo. R. Haj-Ali straipsnyje aortos sinusai modeliuoti kosinuso kreivėmis, o vožtuvo lapeliai apromksimuoti analitinėmis išraiškėmis diastolėje (Haj-Ali et al. 2012). Dvi nepriklausomos parametrinės kreivės apibrėžė vožtuvo lapelius, o viena – aortos sinusus. Kelios papildomos kreivės buvo panaudotos šioms kreivėms sujungti. Toks pasiūlytas geometrinis modelis buvo pritaikytas tiek dvilapiams aortos vožtuvams modeliuoti (Marom et al. 2013), tiek trilapiams (Aggarwal et al. 2013).

### **1.3. Skaitiniai metodai taikomi aortos vožtuvui**

Kraujo tēkmę aortos vožtuve aprašo diferencialinės Navjė ir Stokso lygtys. Diferencialinių Navjė ir Stokso lygčių sistemai spręsti yra sukurta daug įvairių skaitinių schemų ir algoritmų, tačiau kiekvienu netipiniu atveju efektyviausios skaitinės schemos ir jos parametų parinkimas yra sudėtingas uždavinys. Toks pasirinkimas priklauso nuo pačios tēkmės struktūros ir greičių, sugeneruoto modeliuojamos srities diskrečiojo tinklo savybių, siekiamo tikslumo ir naudojamų skaičiuojamųjų išteklių. Sudarius kraujo tēkmės skaitinį modelį aortos vožtuve, galima įvertinti kraujospūdžio ir tēkmės greičio reikšmes visoje uždavinio apibrėžimo srityje, tai leidžia tirti unikalius kraujo tēkmės procesus (Marom 2014; Le et al. 2013). Darbe nagrinėjamos tēkmės struktūra yra labai sudėtinga, todėl būtinas tankus diskretizavimo tinklas ir patikima skaitinė schema. Skaitinės schemos, parametų reikšmių ir diskretizacijos tinklo parinkimas yra sudėtingas uždavinys, nes sprendinio tikslumui palankus pasirinkimas dažnai reikalauja labai didelio kompiuterinių išteklių kiekio, o maža skaičiavimų trukmė neleidžia gauti pakankamai tikslaus sprendinio. Literatūroje galima rasti daug skaitinių metodų, taikomų diferencialinėms Navjė ir Stokso lygtims spręsti, tačiau apžvelgsime tik pačius populiariausius.

#### **1.3.1. Aortos vožtuvo modeliavimo koncepcijos**

Individualaus paciento aortos vožtuvo geometrijos rekonstravimo galimybės, tobulėjantys skaičiuojamosios skysčių dinamikos metodai ir didėjantis skaičiuojamųjų išteklių našumas kompiuterinį modeliavimą medicinoje daro svarbiu įrankiu, siekiant sukurti naujas technologijas ir medicininius prietaisus, pagerinti širdies ligų gydymą ir prognozuoti chirurginių operacijų pasekmes organizmui. Nepaisant mokslinės pažangos, kraujo tēkmės modeliavimas aortos vožtuve vis vien išlieka sudėtinga sritimi (Spühler et al. 2018). Atlikus aortos vožtuvams taikomų skaitinių metodikų analizę, plačiausiu požiūriu jas galima suskirstyti į dvi

stambias taikymo grupes: metodus, pagrįstus skysčio ir struktūros sąveika (toliau – FSI, angl. *fluid-structure interaction*), bei metodus, pagrįstus nuskenuotu širdies judesiu ir kraujo tėkmės modeliavimu (Borazjani et al. 2008).

Didžiausioje mokslinių tyrimų grupėje nagrinėjama skysčių ir struktūrų sąveika esant natūraliems ir mišriems aortos vožtuvams (Peskin et al. 1980; DeHart et al. 2000; Marom et al. 2012; Ranga et al. 2006; Sturla et al. 2013; Weinberg et al. 2007) bei vien protezuotiems aortos vožtuvams (Borazjani 2013; Bavo et al. 2016; Wu et al. 2016). Taikant FSI metodą, sprendžiami erdvėje ir laike susieti skysčio tėkmės ir struktūros deformacijų uždaviniai, įvertinant skysčio ir struktūros tarpusavio sąveiką. FSI modeliavimą galima suskirstyti į dar dvi dideles sritis – fiksuoto (angl. *fixed mesh methods*) ir judančio (angl. *moving mesh methods*) tinklo metodus.

Taikant fiksuoto tinklo metodus, paviršius tarp skysčio ir struktūros nėra tiesiogiai apibrėžtas diskretizacijos tinklu. Kietojo kūno tinklo struktūra nėra sujungta su skysčio tinklo struktūra, todėl sąsaja tarp kietojo kūno ir skysčio nustatoma neišreikštiniu būdu. Tokia sąsaja gali būti diskretizuota naudojant papildomus parametrus ir sprendžiama Lagranžo metodu arba nusakoma skalariu funkcija. Fiksuoto tinklo metodo pradininku nagrinėjant širdies vožtuvus laikomas dr. Charles Peskin (Peskin 1972; Peskin et al. 1980) bei jo pasiūlytas panardinto krašto metodas (angl. *immersed boundary method*). Čia širdies vožtuvus modeliuojamas panardintas į nespūdujį skystį. Šiuo metodu didelės struktūrų deformacijos įvertinamos gan paprastai, tačiau sprendinys gali būti stipriai paveiktas skaitinės difuzijos ir labai netiksliai apibrėžti paviršių, esantį tarp kraujo ir vožtuvo lapelių. Šį trūkumą galima sumažinti sutankinant tinklą šalia panardinto kūno sienelės, kaip tai padarė Griffith (Griffith 2012), arba sąveikos paviršių traktuoti kaip trūkį (Borazjani et al. 2008; Vigmostad et al. 2010; Borazjani et al. 2010).

Alternatyvioje FSI taikomų fiksuoto tinklo metodų klasėje sąveika tarp skirtingų deformuojamų kūnų aprašoma Lagranžo daugikliais (van Loon et al. 2005; De Hart, Peters, et al. 2003; Astorino et al. 2009). Deja, De Hart ir kt. (DeHart et al. 2000) nagrinėdami 2D ir 3D aortos vožtuvus susidūrė su problemomis modeliuojant aortos vožtuvo lapelių struktūrą, nes aortos vožtuvo lapeliai susideda iš daugiau nei vienos rūšies medžiagų ir pasižymi viskoelastiniu, anizotropiniu ir netiesiniu mechaniniu elgesiu. Skaičiavimus apsunkina skirtingų komponentų tarpusavio sąveika (DeHart 2002). Be to, pastabėta, jog kontaktas tarp skirtingų deformuojamų kūnų prailgina ir pačius skaičiavimus (Astorino et al. 2009; Piatti et al. 2016). Nors gaunami tikslesni rezultatai, bet skaičiavimų išteklių reikia gana didelių (Piatti et al. 2016). Kontaktui tarp skirtingų deformuojamų kūnų sušvelninti, Astorino ir kt. (2009) pasiūlė skysčio viduje esančių plonų struktūrų savaiminių kontaktų radimo algoritmą. Algoritmas buvo naudojamas su aortos vožtuvo FSI protezu fiksuotoje standžiojoje aortos šaknyje. Deja, vietoje fiziologiniam skysčiui artimo slėgio (maždaug 10 kPa) buvo naudojamas labai žemas diastolinis

transvalvuliarinis slėgis 13 Pa), o tai visai neatitinka realybės (Astorino et al. 2009).

Judančio tinklo metoduose FSI modeliuoti paprastai taikoma Lagranžo ir Eulerio formuluotė ALE (angl. *Arbitrary Lagrangian-Eulerian*). Skysčio sritį diskretizuojančio tinklo krašto padėtį ir greitį apibrėžia kietojo kūno deformacija. Vidinių tinklo mazgų koordinatės, kurios tik iš dalies priklauso nuo kietojo kūno deformacijos, apskaičiuojamos įvairiais algoritmais. Dažniausiai, taikant spyruoklių sistemas, sprendžiamos nesudėtingos diferencialinės lygtys ar iteraciniai uždaviniai. Tinklo mazgų greičiai įtraukiami į konvekcinius Navjė ir Stokso lygčių narius. Deja, dėl didelių deformacijų smarkiai sumažėjus tinklo kokybei, turi būti generuojamas naujas tinklas, o tai gali pareikalauti didelių kompiuterio laiko sąnaudų (Annerel et al. 2014). Stiprioji metodo pusė – tiksliai apibrėžiamas sąveikos paviršius. Vieni pirmųjų skaičiavimų buvo atliekami 2D modeliams ir rezultatai lyginami su 3D modelių skaitiniais sprendiniais (Morsi et al. 2007). Pritaikius ALE metodą sumodeliuota širdies vožtuvų elgsena viso širdies ciklo metu (van Loon et al. 2005; Shadden et al. 2010). Vėliau šis metodas pritaikytas vertinant skilvelio sienelės sąveiką su lapelio judėjimu (Su et al. 2014). Reikia nepamiršti, kad tinklas ir jo judėjimas lemia nuo pasirinkto tinklo neturinčią priklausyti vožtuvo lapelių kinematiką (Annerel et al. 2014).

Antrai mokslinių tyrimų grupei priskiriami metodai pagrįsti nuskenuotu širdies judesiu ir tėkmės modeliavimu (Gunning et al. 2014; Morganti et al. 2014; Wang et al. 2015). Tokiu atveju lapelių padėtis nustatoma iš nuskenuotų atvaizdų, atliekami tik kraujo tėkmės skaičiavimai, o lapelių ir kraujo sąveika supaprastinama. Atskirais atvejais vožtuvo lapelių padėtis fiksuojama tam, kad iš turimų duomenų būtų galima išskirti sistolės piką. Taikydami metodiką, pagrįstą nuskenuotu širdies judesiu, Ge ir kt. (2003) pateikė įžvalgą apie sudėtingą mechaninio aortos vožtuvo lapelių hemodinamiką esant didžiausiajam Reinoldso skaičiui (Ge et al. 2003). Panašaus pobūdžio įžvalgos pateikiamos ir Grigioni ir kt. (2005), Nobili ir kt. (2008) darbuose, kai mechaninis aortos vožtuvas pritvirtintas prie idealizuotos ašiai simetrinės aortos geometrijos, o modeliavimas atliekamas sistolės fazėje, atsižvelgiant į didžiausiojo greičio ir sūkurių pokyčius (Grigioni et al. 2005; Nobili et al. 2008). Ir nors kraujo tėkmės analizei rekomenduojamas didesnio tankumo tinklas, skaičiavimų išteklių reikalingi mažesni, nes naudojamas palyginti nebrangus ir tikslus sudėtingų skaičiavimų algoritmas. Nors skaičiavimų tikslumą veikia aortos lapelių judėjimo trajektorijos ir kraujo kokybės pokyčių parametrai (DeTullio et al. 2009), naudojant šį modelį galima gauti didesnę kiekį informacijos ir prognozių įžvalgų, lyginant su magnetinio rezonanso tyrimu (MRT) (Lantz et al. 2013).

Dasi ir kt. (2007) iš eksperimentinių duomenų nustatė aortos lapelių judėjimą. Sirois ir kt. (2011), pasinaudoję baigtinių elementų modeliavimo rezultatais, išgavo vožtuvo lapelio deformatų geometrijų seriją nuo vožtuvo atsidarymo iki

vožtuvo užsidarymo. Šie duomenys buvo panaudoti hemodinaminių modelių serijai sukurti (Sirois et al. 2011), tačiau jie eliminavo lapelio judėjimą viso širdies ciklo metu, kontroliuodami tik kraujo tėkmės greitį aortoje. Darbe buvo daroma prielaida, jog aortos vožtuvo lapelių lankstumas yra nereikšmingas, o jų judėjimas atitinka kraujo tėkmę aortos vožtuve. Be to, aortos šaknies geometrija, medžiagų savybės ir kraujo tėkmės pradinės kraštinės sąlygos, naudojamos šiame tyrime, buvo paimtos iš skirtingų šaltinių.

Daugeliu atvejų literatūroje teigiama, jog FSI skaičiavimų rezultatai yra tikslesni, tačiau, juos atliekant, reikia išsamių žinių apie sudėtingą audinių reologiją. *In vivo* individualus paciento aortos vožtuvo mechaninių savybių nustatymas skaitiniam modeliui yra neišspręsta mokslinė problema. Tiksliai nustatyti kalcinozės lygį ir apibrėžti mechaninių širdies vožtuvo audinių savybes iš skenuotų širdies audinių vaizdų sunku, o literatūroje nagrinėjami tik atskiri pavieniai atvejai (Bianchi et al. 2019). van Loon (van Loon 2010) padidino vožtuvo žiedo arba vožtuvo lapelių standumą pagal sinuso kitimo dėsnį. Chandra ir kt. (Chandra et al. 2012) naudojo standžių elementų sluoksnius potencialiai kalcifikuotuose aortos vožtuvo regionuose. Weinberg ir kt. (Weinberg et al. 2009) kalcifikuotus vožtuvo regionus apibrėžė remdamasis eksperimentiniais tyrimais nustatytu šablonu ir diskretizavo standžiais kevalo elementais vožtuvo lapelių paviršiuje. Krishnamurthy ir kt. (2010), bei Stevanella ir kt. (2011) taikė atvirkštinio modeliavimo strategiją mechaninėms audinių savybėms nustatyti (Stevanella et al. 2011; Krishnamurthy et al. 2010).

Apibendrinant galim ateigti, kad FSI metodai dažniausiai taikomi aortos vožtuvams modeliuoti, nors ir neišsprendžia daugelio problemų. Diskretizuotų diferencialinių lygčių skaitiniai sprendiniai blogai konverguoja ir praktinių uždavinių sprendimas reikalauja labai didelio kompiuterinių išteklių kiekio. Deja, FSI reikia išsamių žinių apie sudėtingą vožtuvo lapelių audinių reologiją. *In vivo* individualus paciento aortos vožtuvo mechaninių savybių nustatymas skaitiniame modelyje yra neišspręsta mokslinė problema, o iš medicininių atvaizdų tiksliai nustatyti kalcinozės lygio ir apibrėžti audinių savybių neįmanoma. Dėl šių priežasčių disertaciniame darbe tinkamiausia skenuoti aortos vožtuvo geometriją ir modeliuoti tik kraujo tėkmę.

### 1.3.2. Turbulencijos modelių apžvalga ir analizė

Dauguma autorių modeliuoja tėkmę aortos vožtuve, neįvertindami turbulencijos įtakos dėl kompiuterinių išteklių stokos ir eksperimentinių matavimų sudėtingumo (Borazjani et al. 2010; Ge et al. 2005). Sveikose mažo skersmens kraujagyslėse kraujo tėkmė dažniausiai būna laminarioji, t. y.  $Re < 2320$  (Pasta et al. 2013, Bianchi et al. 2019), tačiau yra daugybė kraujotakos sutrikimo priežasčių, dėl kurių kraujo tėkmė tampa neapibrėžta ( $2320 < Re < 4000$ ), arba turbulentine



( $Re > 4000$ ). Tėkmės, kai  $4000 < Re < 10\,000$ , vadinamos mažais Reinoldso skaičiais charakterizuojamomis turbulentinėmis tėkmėmis. Tokios patologijos įvairiai keičia kraujagyslės spindį, sienelės storį, ilgį ir pralaidumą. Priklausomai nuo susidariusios patologijos formos ir dydžio kinta kraujo tėkmės slėgis ir greitis. Pulsuojanti tėkmė, pratekėjusi aortos vožtuvą tampa turbulentine, kai greitis pasiekia didžiausią reikšmę ir pradeda mažėti (Bluestein, Einav 2000). Paprastai moksliniuose straipsniuose turbulentinė tėkmė aortos vožtuve aprašoma nustatius aortos kalcifikaciją, aortos koarktaciją, aortos vožtuvo stenozę ir kitas panašaus pobūdžio ligas. Turbulencijos modeliai dažniausiai buvo taikomi didesnių greičių tėkmėms: mechaniniams aortos vožtuvo protezams (Sirois et al. 2011; Ge et al. 2003; Spühler et al. 2018) ir aortos koarktacijos operacijoms planuoti (Lantz et al. 2011; Brown et al. 2013; Basri et al. 2016; Basri et al. 2020).

Nagrinėjant metodus, taikomus turbulencijai vertinti, susiduriama su trimis pagrindiniais modeliavimo lygiais: tiesioginės skaitinės simuliacijos metodas DNS (angl. *Direct Numerical Simulation*), stambių sūkurių modeliavimas LES (angl. *Large Eddy Simulation*) ir Reinoldso suvidurkintų Navjė ir Stokso lygčių RANS sprendimas (angl. *Reynolds-averaged Navier-Stokes equations*) (Lantz 2013).

Modeliuojant turbulentinę tėkmę DNS metodu, taikomas labai tankus (Kolmogorovo skalės eilės, Shih et al. 1993) tinklas ir maži laiko žingsniai (Menter et al. 2015; Tuluszka-Sznitko et al. 2016). Tiesioginės skaitinės simuliacijos metodas ne kartą buvo naudotas mechaniniams aortos vožtuvams modeliuoti (Ge et al. 2003; DeTullio et al. 2009; Dasi et al. 2007). Ir nors šio metodo aprašymas nereikalauja jokios empirinės informacijos (Navjė ir Stokso lygtys sprendžiamos nesiremiant turbulencijos modeliais), tačiau sprendžiamų diferencialinių lygčių sistemai reikia daugybės kompiuterinių skaičiavimo resursų (Lantz 2013). Taikydami DNS, Dasi ir bendraautoriai (Dasi et al. 2007) nagrinėjo mechaninį vožtuvą, pritvirtintą prie idealizuotos ašiai simetrinės aortos geometrijos. Lapelių judėjimas buvo nustatytas iš eksperimentinių duomenų, eliminuojant lapelių ir kraujo sąveiką bei daugiausia dėmesio skiriant širdies ciklo piko ir artimiausios sistolės fazei. Taikant DNS metodą, naudojamas palyginti tikslus algoritmas, tačiau skaičiavimų tikslumą veikia tokie veiksniai, kaip aortos lapelių judėjimo trajektorijos ir kraujo kokybės pokyčių parametrai (DeTullio et al. 2009). Vis dėlto, naudojant DNS, galima gauti didesnę kiekį informacijos bei prognozių išvalgų, lyginant su magnetinio rezonanso tyrimu (MRT) (Lantz et al. 2013).

LES – vienas iš sudėtingiausių turbulencijos modeliavimo metodų, kuris reikalauja ir daugiausia kompiuterinių išteklių. Modeliuojant stambius sūkurius, suvidurkinimas atliekamas tik diskretizuotų tinklų celėse. Trimatė didesnių turbulencijos sūkurių struktūra tiksliai įvertinama tinklo celėse, o apytiksliai modeliuojami sūkuriai, kurie mažesni nei pasirinkto diskretizuoto tinklo celių dy-

dis (Ghasemiasl et al. 2018). Lantz ir kt. (Lantz et al. 2013), tirdami aortos koarktaciją, turbulentinę kinetinę energiją (TKE) apskaičiavo skaitmeniniame modelyje, naudodami stambių sūkurių modeliavimą, ir palygino ją su tiesioginiais *in vivo* MRT matavimais. Nepaisant dviejų visiškai skirtingų turbulentinės kinetinės energijos reikšmių gavimo būdų, tiek kiekybiniai, tiek kokybiniai rezultatai sutapo. Kadangi šie mažesni sūkuriai pasižymi izotropine struktūra (bent jau kai Reinoldso skaičiai yra dideli), tokius sūkurius yra lengviau modeliuoti (Poskas et al. 2010). Pritaikant šį metodą, gali būti naudojami retesni tinklai ir didesni laiko žingsniai nei DNS atveju.

Reinoldso laike suvidurkintų Navjė ir Stokso lygčių (RANS) koncepcija dažniau taikoma, kai siekiama sutaupyti kompiuterinių išteklių sąnaudas. Taikant DNS metodą, kompiuteriniai ištekliai reikalingi tiesiogiai vertinant kiekvieną greičio osciliaciją laike (Chorin 1968). RANS metodu diferencialinių lygčių sistema suvidurkintiems dydžiams gaunama greičiams ir slėgiui. Toks metodas literatūroje vadinamas trumpiniu RANS (Gorji et al. 2014; Aftab et al. 2016; Menter et al. 2015; Marom 2014). Suvidurkinta diferencialinių lygčių sistema skiriasi nuo pradinės Navjė ir Stokso lygčių sistemos tik vienu nariu – Reinoldso įtempiais, kuriems aproksimuoti sukurti įvairūs turbulentinio pernešimo metodai. Paprastai išskiriami trys lygiai tokiems Reinoldso įtempiams modeliuoti: algebriniai įtempimų modeliai, turbulentinio klampio modeliai ir Reinoldso įtempimų modeliai. Net ir sudėtingi RANS metodai reikalauja daug mažiau kompiuterio išteklių, negu LES ir DNS.

Kiris ir kt. (Kiris et al. 1997) kraujo tėkmę Björk ir Shiley mechaniniame vožtuve modeliavo taikydami baigtinių tūrių metodą su 3D patankintais tinklais pasienio zonoje ir RANS turbulencijos modeliu. Naudojant šį turbulencijos modelį, turbulentinis klampis nustatomas siauram pasienio sluoksniui ir atitinkamam jo storiui. Bluestein ir kt. turbulentiniam klampiui vertinti naudojo Wilcox pasiūlytą  $k-\omega$  turbulencijos modelį, nes šis modelis tinkamesnis mažais Reinoldso skaičiais charakterizuojamai tėkmei ( $Re < 10\,000$ ) (Wilcox 1993; Bluestein et al. 2002; Bluestein, Einav 2000). Jie pastebėjo, jog dėl susidarančių sūkurių modeliuoti pereinamąjį ir turbulentinį režimus be galo sudėtinga, tačiau rezultatus validavo remdamiesi greičio pasiskirstymo kreivėmis, išgautomis iš matavimų atvaizdų. Panašaus ilgio ir laiko skalėje  $k-\omega$  turbulencijos modelis taip pat buvo taikomas vertinant dirbtinės širdies hemodinamiką (Apel et al. 2001). Sirois ir kt., siekdami įvertinti turbulentinę tėkmę pereinamojoje zonoje, atliko kiekybinę hemodinaminę analizę prieš ir po TAVI procedūros, naudodami  $k-\epsilon$  turbulencijos modelį (Sirois et al. 2011). Pasienio sluoksnis buvo sutankintas dviem sluoksniais pagal tinklo sutankinimo pasienyje funkciją. Detalūs turbulencijos modelių tyrimai ir kiekybiniai palyginimai buvo atlikti tik labai paprastais arterijų stenozės (Varghese et al. 2008) ir kanalo tėkmės (Gorji et al. 2014) atvejais.

Apibendrinant galima pastebėti, kad dažniausiai turbulencija buvo modeliuojama supaprastintos geometrijos atvejais, arba mechaniniuose aortos vožtuvuose, kuriuose tėkmės greitis didesnis. Turbulencijos tyrimų individualaus paciento organiniams aortos vožtuvams trūksta, nes sudėtingai 3D geometrijai modeliuoti reikia kur kas didesnio kompiuterinių išteklių kiekio, o validuoti skaičiavimus reikiamo tikslumo eksperimentiniais matavimais sudėtinga.

### 1.3.3. Kraštinės sąlygos

Skaitinio uždavinio sprendinys labai priklauso nuo apibrėžtų kraštinių sąlygų. Modeliuojant tėkmę aortos vožtuve, didžiausi tėkmės greičiai ir slėgio gradientai vyrauja širdies susitraukimo (sistolės) fazėje, o greičio ir slėgio laukus skaičiavimo srityje labai veikia ištekėjimo kraštinės sąlygos (Kim et al. 2009). Standartinio tipo kraštinės sąlygos dėl sudėtingų diferencialinių lygčių ir modeliuojamų tėkmių aortos vožtuve ne visada atitinka specifinius uždavinio poreikius, o, apibrėžiant kraštines sąlygas uždavinio srities gale, neretai susiduriama su atgaline tėkme, dėl kurios skaitiniai sprendiniai gali nekonverguoti (Esmaily Moghadam et al. 2011; Chnafa et al. 2012; Hansen et al. 2016). Pastaraisiais metais padaryta didelė pažanga aprašant kraštines sąlygas kraujo tėkmės įvertinančiuose modeliuose (Chnafa et al. 2012; Sirois et al. 2011; Taylor et al. 2002; Katayama et al. 2008; Griffith 2012; Marom 2014; Stergiopulos et al. 1999). Kraujo tėkmės modelyje apibrėžiant ištekėjimo kraštines sąlygas, naudojamas pastovus ar nuo laiko priklausantis slėgis, nuliniai įtempiai ir greitis, tačiau tiksliai atkartoti tėkmių elgseną išlieka sudėtinga užduotimi (Kim et al. 2009; Marom 2014). Dėl šios priežasties, aprašant kraštines sąlygas, neretai taikomi daugialypiai modeliai, kuriais papildomai įvertinamas pasipriešinimas ir jungtiniai parametrai.

Skaitinio sprendinio divergavimas, nulemtas atgalinės tėkmės, yra dažna, tačiau iki galo neišspręsta problema širdies ir kraujagyslių tėkmės modeliavimo srityje. Atgalinės tėkmės srautas dažnai suformuoja neigiamas greičio komponentų reikšmes visoje ištekėjimo srityje, o tai apsunkina pačius skaičiavimus. Sveikoje aortoje atgalinė tėkmė susidaro ties aortos sienelėmis iškart po sistolės piko, kai kraujo tėkmės greitis aplink centrinę aortos vožtuvo ašį pradeda mažėti ir nuo aortos vožtuvo lapelių atsiskiria sūkuriu, judantys link ištekėjimo. Taip pat tam tikrais diastolės etapais kraujas iš aortos grįžta į vožtuvą visu skerspjuviu. Sūkurio susidarymą ir atgalinę tėkmę paveikti gali ir kraujo tėkmės sulėtėjimas, atsiradęs dėl pakitusių aortos geometrinių rodiklių esant įvairioms patologijoms (Taylor et al. 2002; Tango et al. 2018).

Neretai skaitinis sprendinys diverguoja daug ankstesniais laiko momentais, nei atgalinė tėkmė apima visą skerspjuvio plotą, todėl vienas paprasčiausių sprendimo būdų – dirbtinai prailginti uždavinio apibrėžimo sritį, taip atgalinę tėkmę atitolinant ir išsklaidant sūkurius, kol jie dar nebūna pasiekę ištekėjimo srities

(Kim et al. 2009; Marom 2014). Deja, pridėjus dirbtinį segmentą, sukuriama nefiziologinė srities dalis, kurioje skaičiavimai vykdomi sukurtuose regionuose. Tai ne tik padidina sunaudojamus skaičiavimų išteklius, bet ir gali pakeisti skysčio hemodinamiką dėl pailgėjusių kelio nuostolių.

Kitas galimas sprendimo būdas – pratęstoje skaičiavimo srityje pridėti papildomų kraujagyslių, dėl kurių įtakos kraujo tėkmė taptų vienusė, o Reinoldso skaičius ištekėjimo srityje sumažėtų (Vignon-Clementel et al. 2006). Toks metodas neišvengiamai padidina modelio generavimo ir skaičiavimo sąnaudas, tačiau gali būti naudojamas pacientui individualiai. Reikia nepamiršti, jog atgalinė tėkmė širdies cikle yra natūraliai pasireiškiantis fiziologinis reiškinys. Be to, modeliuojant kraujo tėkmę aortos vožtuve rekomenduojama dirbtinai nekeisti tėkmės dinamikos, siekiant gauti realistiškus duomenis (Marom 2014).

Ankstesniuose tyrimuose dažnai buvo daroma prielaida, jog kraujagyslėms, apibrėžiant kraštines sąlygas uždavinio srities gale, slėgio ar greičio profilis yra pastovus, tačiau atlikti *in vivo* tyrimai parodė, jog arterinei kraujotakai didelę įtaką daro distalinė kraujagyslių sistema (Wendell 2009; Pirola et al. 2017). Įvertinti pulsuojančios kraujo tėkmės arterinio kraujo spaudimo pokyčius (apibrėžiant ištekėjimo kraštines sąlygas) galima dažniausiai literatūroje randamu trijų elementų Windkessel modeliu (Stergiopulos et al. 1999; Westerhof et al. 2009; Watanabe et al. 2004; Pirola et al. 2017). Trijų elementų Windkessel modelis vertina kraujo spaudimo bangos judėjimo savybes – kai bangos greičio bei kraujo tankio santykis vertinamas su aortos skerspjūvio plotu. Siekiant sumažinti paklaidas žemų slėgių diapazone, papildomai buvo pasiūlytas ketvirtasis Windkessel modelio elementas, kuris padeda įvertinti bendrą arterijų inertiškumą (Stergiopulos et al. 1999). Windkessel modelis apibūdina slėgio ir tėkmės santykį ties riba, kai įvertinamas arterijų pasipriešinimas tėkmei, kraujagyslių sienelių įtaka ir kraujo inertiškumas (Westerhof et al. 2009). Tokiam modeliui taikyti slėgį ištekėjimo zonoje galima apskaičiuoti naudojant diferencialines lygtis, kai laiko išvestinės nariai diskretizuojami pirmosios eilės neišreikštine (angl. *first-order implicit*) schema, o skaičiavimams taikomas skaitinis skysčių dinamikos CFD (angl. *Computational Fluid Dynamics*) modelis (Watanabe et al. 2004). Taikant tokį modelį, skaičiavimai grindžiami slėgio ir debito vertėmis, kurios naudojamos iš ankstesniojo laiko žingsnio, o kraujo tėkmės greitis skaičiuojamuoju laiko žingsniu. Be to, Pirola ir kt. (2017), taikydami skirtingas kraštines sąlygas ištekėjime, pastebėjo, jog, taikant Windkessel modelį, pavyksta atkurti fiziologines aortos slėgio bangos formas, kurios sutampa su magnetinio rezonanso tomografu gautais rezultatais (Pirola et al. 2017).

Uždavinio apibrėžimo srities gale ištekėjimo kraštiniams sąlygoms apibrėžti autoriai siūlė ir labai sudėtingas koncepcijas. Formaggia ir kt. (2007) apibendrinto tipo slėgio kraštinei sąlygai įvesti pasiūlė specialią Navjė ir Stokso lygčių formu-

luotę. Apibendrinto tipo slėgio kraštinė sąlyga kontroliuoja energijos srautą, patenkantį į skaičiavimo sritį ir iš jos, kartu stabilizuoja skysčių dinamikos problemas, nustatydamas kinetinės energijos ribas. Navjė ir Stokso lygčių formuluotė buvo modifikuota, pridodant atgalinės tėkmės stabilizavimo narį kraštiniuose mazguose (Formaggia et al. 2007). Ankstesniuose Kim ir kt. darbuose (2009) buvo taikomas Lagranžo daugiklių metodas, tačiau, apibrėžiant greičio pasiskirstymą, ištekėjime buvo eliminuojama ir atgalinė tėkmė (Kim et al. 2009). Esmaily-Moghadam ir kt. (2011) atliko kiekybinį trijų metodų, skirtų atgalinei tėkmei modeliuoti, palyginimą, tačiau tam reikėjo iš esmės pakeisti baigtinių elementų metodo programinės įrangos kodą.

Analizuojant kraujo tėkmę įvertinančių modelių kraštines sąlygas, literatūroje randamai ir sudėtingi daugialypiai kraštinių sąlygų aprašymo metodai, apimantys ir visą širdies ciklo fazę (McQueen et al. 2000; Oertel et al. 2006). Daugialypio modeliavimo atveju kraujo tėkmės pokyčius gali veikti 3D modeliu aprašomas slėgis, kurio didžioji dalis nukreipiama į srauto vidų, tačiau neaprašomas greičio profilis. Vis dėlto tokiu atveju gali atsirasti nestabilumas, ypač dėl greičio pokyčių pereinant iš teigiamo į neigiamą širdies ciklo metu.

Apibendrinant galima teigti, kad literatūroje siūlomi problemos sprendimai eliminuoja atgalinę tėkmę, reikalauja netradicinių Navjė ir Stokso lygčių formuluočių arba pasižymi sudėtinga realizacija programinėje įrangoje.

## 1.4. Pirmojo skyriaus išvados ir disertacijos uždavinių formulavimas

Apžvelgus ir išanalizavus kraujo tėkmei aortos vožtuve taikomus skaitinius metodus, padarytos išvados:

1. Individualaus paciento aortos vožtuvo geometrijos išgavimą iš mediciniinių atvaizdų ap sunkina nepakankamas atvaizdų ryškumas, nedidelis plonų aortos vožtuvo lapelių ir juos supančio kraujo tankio skirtumas, nepakankama nuskenuotų atvaizdų rezoliucija ir nepakankamas 3D skenavimo įrangos greitis. Net naudojant šiuolaikinę klinikinę įrangą, sudėtinga gauti pakankamo detalumo atvaizdus, tinkamus išgauti 3D modeliui, kuris kinta laike. Todėl darbe tikslinga naudoti geometrinį modelį, kurio parametų reikšmės galima apskaičiuoti iš individualaus paciento mediciniinių atvaizdų.
2. Skaitinių aortos vožtuvo sprendinių konvergavimą ap sunkina atgalinė tėkmė iš aortos. Nežinomų greičio ir slėgio reikšmių ištekėjime atvejais rekomenduojama taikyti laisvo ištekėjimo kraštinę sąlygą, bet ją remiantis

apskaičiuoti sprendiniai prastai konverguoja esant atgalinei tėkmei. Literatūroje siūlomi problemos sprendimai eliminuoja atgalinę tėkmę arba pasižymi sudėtingu diegimu programinėje įrangoje.

3. Aortos vožtuvo tėkmėms būdinga mažais Reinoldso skaičiais charakterizuojama turbulencija, pasireiškianti greičiui mažėjant po sistolės piko, kai srovės skersplotis padidėja už aortos vožtuvo lapelių (Bluestein, Einav 2000). Dėl kompiuterinių išteklių stokos ir galimybės tiksliai išmatuoti turbulencijos padarinius medicinine įranga dauguma autorių modeliuoja tėkmę aortos vožtuve, neįvertindami turbulencijos įtakos. Todėl darbe tikslinga ištirti šią sudėtingą problemą, parinkti mažais Reinoldso skaičiais charakterizuojamai turbulentei tinkamą modelį ir įvertinti šio pasirinkimo įtaką skaitiniam sprendiniui.

Įvertinus mokslinėje literatūroje išnagrinėtus klausimus ir atsižvelgiant į disertacijos darbo tikslą, tikslinga spręsti šiuos uždavinius:

1. Ištirti skaitinių metodų ir parametrų įtaką tėkmės aortos vožtuve uždavinio sprendinio konvergavimui ir sprendimo laikui.
2. Ištirti kraštinių sąlygų įtaką atgalinės tėkmės susidarymui ir skaitinio sprendinio konvergavimui.
3. Parinkti tinkamą turbulencijos modelį mažais Reinoldso skaičiais charakterizuojamai tėkmei aortos vožtuve.
4. Validuoti sudarytą skaitinį modelį, remiantis individualaus paciento klinikinių matavimų rezultatais.

# 2

---

## Skaitinis kraujo tėkmės aortos vožtuve modelis

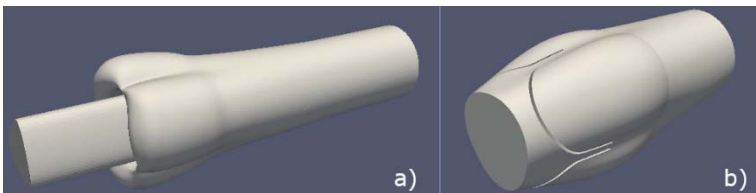
Darbo metodikos poskyryje aprašyti du geometriniai modeliai sudaryti iš parametrinių kreivių, rekonstruojant juos iš nuskenuotų aortos vožtuvų atvaizdų. Pateiktos diferencialinės Navjė ir Stokso lygtys papildytos šlyties įtempių transportavimą įvertinančiu  $k-\omega$  turbulencijos modeliu su trūkiojo perėjimo lygtimi. Atitinkamai parinktos kraštinės sąlygos, atsižvelgiant į darbo tikslams aktualią tėkmės fazę, bei pasiūlyta ištekėjimo kraštinė sąlyga atgalinės tėkmės problemai spręsti. Šiame skyriuje aprašytas kraujo tėkmės uždaviniui spręsti taikomas baigtinių tūrių metodas ir skaitinės schemas. Taip pat pateikti disertacijoje naudoti skirtingo tankumo nestruktūriniai tinklai. Turbulentinių tėkmių atveju daug dėmesio skirta pasienio sluoksniui diskretizuoti.

Šio skyriaus rezultatai paskelbti Kačeniauskas et al. 2015, Kačeniauskas et al. 2015 (2), Kačeniauskas et al. 2016, Stupak et al. 2017, Kačeniauskas et al. 2017, Starikovičius et al. 2017, Staškūnienė et al. 2017, Staškūnienė et al. 2018 mokslinėse publikacijose.

## 2.1. Aortos vožtuvo geometriniai modeliai

Pacientų aortos vožtuvai buvo skenuojami realiojo laiko 3D echokardiografijos „Philips IE 33“ aparatine įranga ir „PMS5.1 Ultrasound iE33\_6.3.3.145“ programine įranga. Echokardiografijos medicininė įranga veikia greičiau nei kompiuterinės tomografijos, o nuskenuoti atvaizdai yra pakankamai ryškūs. Dėl šios priežasties pasirinkta įranga tinkamesnė greitai kintančiai vožtuvo lapelių padėčiai nustatyti. Darbe buvo panaudoti 3D atvaizdai polinėje koordinatinių sistemoje sudaryti iš  $800 \times 600$  pikselių 2D atvaizdų. Polinės atvaizdų koordinatės buvo transformuotos į Dekarto koordinatinių sistemą QLAB programine įranga (Koninklijke et al. 2014). Transformuoti atvaizdai DICOM formatu (DICOM programinė įranga skirta medicininių vaizdų peržiūrai) buvo importuoti į atvirojo kodo MITK programinę įrangą (Maleike et al. 2009), siekiant išmatuoti pagrindinius geometrinis aortos vožtuvo ir aortos šaknies parametrus: didįjį aortos vožtuvo angos spindulį, mažąjį aortos vožtuvo angos spindulį ir aortos vožtuvo lapelių didžiausiąjį aukštį.

Disertacijoje buvo panaudoti iš parametrinių kreivių (Krivoshapko et al. 2015) sudaryti du geometriniai aortos vožtuvo modeliai (geometriniai modeliai sudaryti straipsnių bendraautorių). Jie tinka modeliuoti tokius aortos vožtuvus, kurie neturi didelių anatominių nukrypimų nuo sveiko žmogaus aortos vožtuvo. Pirmasis geometrinis modelis (2.1 a pav.) buvo sudarytas iš epicikloidinių ir hipocikloidinių kreivių (Šir et al. 2010). Aortos vožtuvo lapelių paviršiai buvo aproksimuoti hipocikloidinėmis kreivėmis, o aortos sinusai buvo aproksimuoti Curtate epicikloidinėmis kreivėmis. Deformuota vožtuvo lapelių forma apibrėžta sinusoidine lapelių aukščio kitimo funkcija. Sinusams ir aortai pratęsti  $z$  kryptimi pritaikyta eksponentinė skerspjūvio ploto mažėjimo funkcija. Nors 2.1 a paveiksle pateiktos geometrijos įtekėjimo į aortos vožtuvą skerspjūvio plotas išlaikytas nepakitęs, tačiau iš hipocikloidinių kreivių sudarytas paviršius yra grynai dirbtinis ir reikalingas tik skysčio tėkmei išsivystyti.

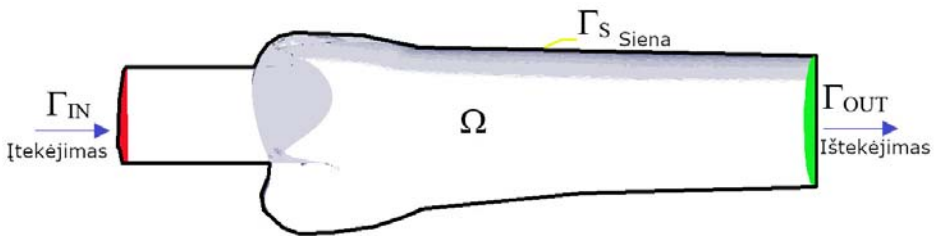


**2.1 pav.** Geometriniai modeliai: a) iš epicikloidų ir hipocikloidinių kreivių;  
b) iš epicikloidų ir cikloidinio tipo sukimosi paviršių

**Fig. 2.1.** Geometric models: a) from epicycloid and hypocycloid curves;  
b) from epicycloid and cycloid-type rotating surfaces



Antrasis geometrinis modelis (2.1 b pav.) buvo daug artimesnis aortos vožtuvo anatomijai (1.1 ir 1.2 pav.). Šiame geometriniame modelyje aortos sinusų paviršius buvo aproksimuotas epicikloidinėmis kreivėmis, o aortos vožtuvo lapelių paviršiai buvo sudaryti iš trijų cikloidinio tipo sukimosi paviršių. Atskiri NURBS (angl. *Non Uniform Rational B-Splines*) paviršiai kirtimo, jungimo ir glodinimo operacijomis sujungti į vientisą geometriją. NURBS paviršiais apibrėžta individualaus paciento aortos vožtuvo geometrija importuota į „ANSYS Design Modeler“ programinę įrangą (ANSYS 2015) uždavinio apibrėžimo sričiai diskretizuoti.



2.2 pav. Uždavinio apibrėžimo srities schema  
Fig. 2.2. Scheme of the solution domain

2.2 paveiksle pavaizduota tėkmės aortos vožtuve uždavinio apibrėžimo srities schema, kai vožtuvas yra visiškai atsivėręs. Kraujas įteka į uždavinio apibrėžimo sritį  $\Omega$  pro paviršius  $\Gamma_{IN}$ , vadinamą įtekėjimu (angl. *inlet*). Kraujas išteka iš uždavinio apibrėžimo srities  $\Omega$  pro paviršius  $\Gamma_{OUT}$ , vadinamą ištekėjimu (angl. *outlet*). Išteka toks pat kraujo kiekis, kaip ir įteka. Visą kitą srities  $\Omega$  paviršių  $\Gamma_S$  sudaro aortos vožtuvo sienelės. Klampaus skysčio atveju, koks ir yra kraujas, skystis prilimpa prie sienelių ir jo greitis laikomas lygus nuliui. Darbe sienelės buvo laikomos nejudančiomis, nes tyrimas buvo fokusuojamas į sistolės piką. Pasirinktas laiko intervalas atitinka skilvelių sistolės trukmę  $[0;0,3336s]$ , jame vyrauja didžiausi greičiai ir susidaro didžiausi slėgio skirtumai, taip pat šis laiko intervalas yra aktualiausias medicininėje praktikoje. Dėl šios priežasties nejudančių sienelių arba nekintančios uždavinio apibrėžimo srities prielaida pasiteisina, nors ji yra pagrįsta tik trumpame laiko intervale apie didžiausiąją greičio reikšmę. Skaitinį modelį smarkiai supaprastinanti prielaida leido nevertinti skysčio ir struktūros sąveikos (FSI), sumažinti skaitinio sprendinio divergavimo problemas, sutaupyti didelį kiekį kompiuterinių išteklių ir koncentruotis į sistolės piko modeliavimą. Uždavinio apibrėžimo srityje  $\Omega$  sprendžiamos diferencialinės lygtys bus suformuluotos 2.2 poskyryje, o kraštinės sąlygos paviršiuose  $\Gamma_{IN}$ ,  $\Gamma_{OUT}$  ir  $\Gamma_S$  bus apibrėžtos 2.3 poskyryje.

## 2.2. Kraujo tėkmės diferencialinės lygtys

Uždavinio apibrėžimo srityje  $\Omega$  (2.2 pav.) laminarusis nespūdžiojo skysčio tekėjimas aprašomas Navjė ir Stokso diferencialinių lygčių sistema (Acheson 1990), sudaryta iš judesio kiekio ir masės tvermės lygčių:

$$\rho \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \rho \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} = \nabla \cdot (-p\mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}), \quad (2.1)$$

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0, \quad (2.2)$$

čia  $\rho$  – kraujo tankis;  $\vec{u}$  – greičio vektorius;  $p$  – slėgis;  $\boldsymbol{\tau}$  – įtempių tenzorius. Nespūdiams niutoniniams skysčiams įtempių tenzorius užrašomas kaip

$$\tau_{ij} = 2\mu\epsilon_{ij}, \quad (2.3)$$

čia  $\mu$  – dinaminis skysčio klampis, o deformacijų greičių tenzorius lygus

$$\epsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left[ \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right]. \quad (2.4)$$

Aortoje kraujas yra laikomas niutoniniu skysčiu (1.1 skyrius).

Turbulencijai modeliuoti darbe pasirinkta Reinoldso vidurkinimo koncepcija (Chorin 1968), kai Navjė ir Stokso lygtys yra vidurkinamos laike ir gaunama diferencialinių lygčių sistema (angl. *Reynolds-averaged Navier-Stokes equations*) suvidurkintiems dydžiams: greičiams ir slėgiui. Ši sistema skiriasi nuo pradinės Navjė ir Stokso lygčių sistemos tik vienu nariu – Reinoldso įtempių tenzoriumi, kurį remiantis Boussinesqo hipoteze galima išreikšti suvidurkintų greičių gradientais:

$$-\overline{\rho u'_i u'_j} = \mu_t \left[ \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right] - \frac{2}{3} \left[ \rho k + \mu_t \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right] \delta_{ij}, \quad (2.5)$$

čia  $\mu_t$  – turbulentinis klampis. Pagrindinį šios hipotezės pranašumą sudaro santykinai maži skaičiavimo kaštai, nes reikia papildomai apskaičiuoti tik turbulentinį klampį. Jam rasti sudaromi papildomi modeliai. Darbe ištirtas kelių turbulencijos modelių tinkamumas nagrinėjamam uždaviniui spręsti.

Plačiausiai paplitusiame  $k$ - $\epsilon$  modelyje (Launder et al. 1972) turbulentinis klampis skaičiuojamas pagal formulę:

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\epsilon}, \quad (2.6)$$

čia  $k$  – turbulencijos kinetinė energija;  $\epsilon$  – kinetinės energijos disipacijos greitis. Šie dydžiai randami iš atitinkamų pernešimo lygčių:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho k \vec{u}) = \nabla \cdot \left( \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right) + G_k + G_b - \rho \epsilon - Y_M + S_k, \quad (2.7)$$

$$\frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\varepsilon\vec{u}) = \nabla \cdot \left( \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right) + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} (G_k + C_{3\varepsilon} G_b) - C_{2\varepsilon} \frac{\varepsilon^2}{k} + S_\varepsilon, \quad (2.8)$$

čia  $G_k$  – turbulencijos kinetinės energijos  $k$  generacijos narys dėl vidutinių greičio gradientų;  $G_b$  – turbulencijos kinetinės energijos  $k$  generacijos narys plūdrumo įtakai vertinti;  $Y_M$  žymi bendrą skysčio išsisklaidymą, atsirandantį dėl suspaudimo;  $S_k$  ir  $S_\varepsilon$  – vartotojo apibrėžti nariai;  $C_{1\varepsilon}$ ,  $C_{2\varepsilon}$ ,  $C_{3\varepsilon}$  ir  $C_\mu$ , – modelio konstantos;  $\sigma_k$  ir  $\sigma_\varepsilon$  – turbulentiniai Prandtlio skaičiai turbulencijos kinetinei energijai  $k$  ir disipacijos greičiui  $\varepsilon$ . (2.7) ir (2.8) lygčių šaltinių narių formules ir konstantas galima rasti (Chorin 1968; Launder et al. 1972):

$$C_{1\varepsilon} = 1,44, C_{2\varepsilon} = 1,92, C_{3\varepsilon} = \tanh \left[ \frac{v}{u} \right], C_\mu = 0,09, \sigma_k = 1,0, \sigma_\varepsilon = 1,3. \quad (2.9)$$

Mažesniais Reinoldso skaičiais charakterizuojamoms tĕkmĕms ( $Re < 10\,000$ ) dažniau taikomas  $k$ - $\omega$  modelis (Wilcox 1993). Darbe pasirinktas šlyties įtempių transportavimą įvertinantis  $k$ - $\omega$  modelis, kaip vienas iš universaliausių  $k$ - $\omega$  modelių, tinkantis mažais Reinoldso skaičiais charakterizuojamoms tĕkmĕms. Šiame modelyje turbulentinis klampis apskaičiuojamas pagal formulę:

$$\mu_t = \frac{1}{\alpha} \frac{\rho k}{\omega}, \quad (2.10)$$

čia  $k$  – turbulencijos kinetinė energija;  $\omega$  – kinetinės energijos specifinis disipacijos greitis;  $\alpha$  – turbulencijos šlyties įtempio transportavimo koeficientas, apskaičiuojamas pagal formulę:

$$\alpha = \max \left[ \frac{1}{\alpha^*}, \frac{SF}{\alpha_1 \omega} \right], \quad (2.11)$$

čia  $S$  – deformacijos greičio modulis;  $F$  – maišos / perėjimo funkcija. Koeficientas  $\alpha^*$  atlieka korekciją, kuria siekiama slopinti turbulentinį klampį. Dideliems Reinoldso skaičiams  $\alpha^*$  koeficientas (2.11) formulėje lygus 1. Mažiams Reinoldso skaičiams daroma korekcija:

$$\alpha^* = \alpha_\infty^* \left( \frac{\alpha_0^* + \frac{Re_t}{R_k}}{1 + \frac{Re_t}{R_k}} \right), \alpha_\infty^* = 1, \quad \alpha_0^* = \frac{\beta_i}{3}, \quad Re_t = \frac{\rho k}{\mu \omega}, \quad R_k = 6, \quad \alpha_1 = 0,31. \quad (2.12)$$

Tuomet, įvertinant šlyties įtempių transportavimą, turbulentinės kinetinės energijos pasiskirstymas ir savitasis disipacijos greitis randami iš atitinkamų pernešimo lygčių:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho k \vec{u}) = \nabla \cdot \left( \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right) + \tilde{G}_k - \tilde{Y}_k + \tilde{S}_k, \quad (2.13)$$

$$\frac{\partial(\rho \omega)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \omega \vec{u}) = \nabla \cdot \left( \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega} \right) \nabla \omega \right) + G_\omega - Y_\omega + D_\omega + S_\omega, \quad (2.14)$$

čia  $\sigma_k$  ir  $\sigma_\omega$  – turbulentiniai Prandtlio skaičiai turbulencijos kinetinei energijai  $k$  ir kininės energijos specifiniam disipacijos greičiui  $\omega$  atitinkamai;  $\tilde{G}_k$  – turbulencijos kininės energijos  $k$  generacijos narys dėl vidutinių greičio gradientų;  $G_\omega$  – savitojo disipacijos greičio  $\omega$  generacijos narys; slopinimo nariai  $\tilde{Y}_k$  ir  $Y_\omega$  žymi  $k$  ir  $\omega$  išsisklaidymą dėl turbulencijos;  $D_\omega$  – kryžminės difuzijos narys;  $S_k$  ir  $S_\omega$  – vartotojo apibrėžti nariai. (2.13) ir (2.14) lygčių šaltinių narių formules ir konstantas galima rasti (Menter, 1994).  $\sigma_k$ ,  $\sigma_\omega$  ir  $\beta_i$  iš formulės (2.12) apibrėžiami naudojant maišos funkciją  $F_1$ :

$$\beta_i = F_1 \beta_{i,1} + (1 - F_1) \beta_{i,2}, \quad \sigma_k = \frac{1}{\frac{F_1}{\sigma_{k,1}} + \frac{1-F_1}{\sigma_{k,1}}}, \quad \sigma_\omega = \frac{1}{\frac{F_1}{\sigma_{\omega,1}} + \frac{1-F_1}{\sigma_{\omega,1}}}. \quad (2.15)$$

Šlyties įtempių transportavimą įvertinančiame SST  $k$ - $\omega$  turbulencijos modelyje taikomos šios konstantos:

$$\sigma_{k,1} = 1,176, \quad \sigma_{\omega,1} = 2,0, \quad \sigma_{k,2} = 1,0, \quad \sigma_{\omega,2} = 1,168, \quad \alpha_1 = 0,31, \\ \beta_{i,1} = 0,075, \quad \beta_{i,2} = 0,082. \quad (2.16)$$

(2.15)–(2.16) lygčių šaltinių narių formules, maišos funkcijas ir konstantas galima rasti (Menter 1994).

Disertaciniame darbe kartu su SST  $k$ - $\omega$  modelio lygtimis (2.16) rekomenduota spręsti ir trūčiojo perėjimo  $\gamma$  (angl. *Intermittency Transition*) lygtį (Menter et al. 2015):

$$\frac{\partial(\rho \gamma)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \gamma \vec{u}) = \nabla \cdot \left( \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\gamma} \right) \nabla \gamma \right) + P_\gamma - E_\gamma, \quad (2.17)$$

kuri padeda įvertinti perėjimus iš laminariojo režimo į turbulentinį ir atgal, kas ypač aktualu pulsuojančioms tėkmėms aortos vožtuve. Šie nariai apibrėžiami formulėmis:

$$P_\gamma = F_{length} \rho S \gamma (1 - \gamma) F_{onset}, \quad (2.18)$$

$$E_\gamma = c_{a2} \rho \Omega^a \gamma F_{turb} (c_{e2} \gamma - 1), \quad (2.19)$$

čia  $\Omega^a$  – absoliučiojo sukuringumo modulis;  $F_{onset}$  – funkcija, aktyvuojanti šaltinio narį lygtyje (2.17). Funkcija  $F_{turb}$ , lokalus sukuringumo Reinoldso skaičius  $Re_v$ , ir modelio konstantos apibrėžiamos taip:

$$F_{turb} = e^{-\left(\frac{Re_t}{2}\right)^4}, \quad Re_v = \frac{\rho d_w^2 S}{\mu \omega}, \quad F_{length} = 100, \quad c_{e2} = 50, \\ c_{a2} = 0,06, \quad \sigma_\gamma = 1,0, \quad (2.20)$$

čia  $d_w$  – atstumas nuo sienelės. Likusias trūkiojo perėjimo modelio konstantas, įskaitant ir lokalaus sukuringumo Reinoldso skaičiaus eksperimentines koreliacijas, galima rasti straipsnyje (Menter et al. 2015).

Slyties įtempimų transportavimą įvertinantis SST  $k$ - $\omega$  turbulencijos modelis (2.10–2.16) su trūkiojo perėjimo lygtimi (2.17–2.20) buvo sudarytas modifikuojant pernešimo lygties (2.13) narius. Turbulencijos kinetinės energijos generacijos dėl vidutinių greičio gradientų narys  $\tilde{G}_k$  buvo gautas padauginus trūkiojo perėjimo kintamąjį  $\gamma$  su pradiniu generacijos nariu  $G_k$ .  $G_k$  buvo apskaičiuotas naudojant Kato-Launder formulę (Kato et al. 1993):

$$\tilde{G}_k = \gamma G_k = \gamma \mu_t S \Omega. \quad (2.21)$$

(2.21) formulės taikymas padeda išvengti per didelio turbulencijos intensyvumo sąstingio regionuose. Slopinimo koeficientas  $\tilde{Y}_k$  gaunamas iš pradinio  $Y_k$  slopinimo koeficiento:

$$\tilde{Y}_k = Y_k \max(\gamma, 0,1). \quad (2.22)$$

Verta paminėti, kad (2.14) lygtyje savitajam disipacijos greičiui  $\omega$  generacijos dėl vidutinių greičio gradientų ir slopinimo nariai nebuvo pakeisti.

### 2.3. Aortos vožtuvo tėkmės kraštinės sąlygos

Uždavinio apibrėžimo srityje  $\Omega$  (2.2 pav.) formuluojamos diferencialinės lygtys, o srities kraštuose  $\Gamma_{IN}$ ,  $\Gamma_{OUT}$  ir  $\Gamma_S$  reikia apibrėžti tinkamas kraštines sąlygas. Dažniausiai pasirenkamos standartinės kraštinės sąlygos, bet sudėtingų diferencialinių lygčių ir modeliujamų tėkmių atvejais tenka pritaikyti standartinių tipų kraštines sąlygas uždavinio poreikiams. Didžiausi tėkmės greičiai ir slėgio gradientai vyrauja širdies susitraukimo arba sistolės fazėje, todėl nagrinėjamas laiko intervalas ir kraštinės sąlygos parinktos atsižvelgiant į darbo tikslams aktualiausią etapą.

Dirichlė kraštinės sąlygos apibrėžiamos greičio vektoriui trimatės uždavinio apibrėžimo srities įtekėjime  $\Gamma_{IN}$  (2.2 pav.). Tangentinė greičio komponentė lygi nuliui, o normalinė komponentė  $U(t)$  kinta laike:

$$\vec{u} \cdot \vec{n} = U(t), \vec{u} \cdot \vec{\tau} = 0, \quad (2.23)$$

čia  $\vec{n}$  – normalinis vektorius;  $\vec{\tau}$  – tangentinis vektorius.

Nors kraujo fiziologinio greičio kreivė matuojama Doplerio efektu pagrįsta įranga, tačiau iš matavimų atvaizdo išgaunamų greičio pasiskirstymo kreivių reikšmės tuomet dažnai būna stipriai pasklidusios, o jų išvestinės laike osciliuoja gana dideliame reikšmių intervale, kas labai apsunkina skaitinio uždavinio sprendimą. Dėl šios priežasties rekomenduojama kreives glodinti (Baumgartner et al. 2009). Darbe pritaikytos analizinės išraiškos (Griffith 2012) greičių kreivėms parametruoti ir glodinti įtekėjime:

$$v_{in}(t) = \begin{cases} (v_{max}/2)(1 + \cos(2\pi t/2T_1)) & \text{for } 0 < t < T_1 \\ v_{max} \cos(2\pi(t - T_1)/(4(T_2 - T_1))) & \text{for } T_1 < t < T_2 \end{cases}, \quad (2.24)$$

čia  $v_{max}$  – didžiausioji greičio reikšmė;  $T_1$  – didžiausiosios greičio reikšmės laiko momentas;  $T_2$  – nagrinėjamo laiko intervalo ilgis.

Verta pažymėti, kad kiekvienu individualaus paciento atveju kraujo tėkmės aortos vožtuve greitis turi būti matuojamas atskirai, todėl pateikti keli fiziologinio greičio profiliai: 2.3 a paveiksle pateikta rankomis glodinta kraujo tėkmės greičio kreivė aortos stenozės atveju, kai kraujo tėkmės pikas (1,41 m/s) pasiekiamas laiko momentu  $T_1 = 1,1366$  s, o nagrinėjamo laiko intervalo ilgis  $T_2 = 0,36$  s. 2.3 b paveiksle pavaizduota sveiko žmogaus analizinėmis formulėmis (2.24) parametruota greičio kreivė, kai kraujo tėkmės pikas (0,65 m/s) pasiekiamas laiko momentu  $T_1 = 0,0776$  s, o nagrinėjamo laiko intervalo ilgis  $T_2 = 0,3336$  s.

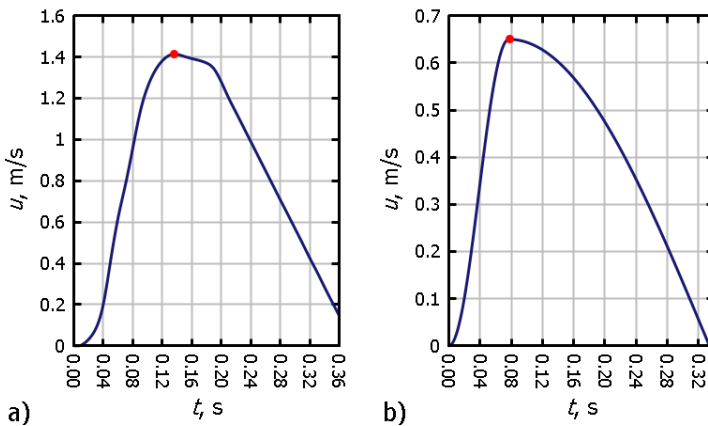
Prilipimo (angl. *no-slip*) kraštinės sąlygos apibrėžtos aortos vožtuvo sienelių paviršiuose  $\Gamma_S$  (2.2 pav.): greitis lygus nuliui ir slėgio išvestinė normalės kryptimi lygi nuliui.

Svarbu tinkamai apibrėžti kraštines sąlygas trimatės srities gale  $\Gamma_{OUT}$  (2.2 pav.), kur kraujas išteka (angl. *outlet*). Neumano sąlygos apibrėžiamos greičio vektoriui, kurio išvestinės prilyginamos nuliui:

$$\vec{n} \cdot \nabla \vec{u} = 0. \quad (2.25)$$

Dirichlė kraštinė sąlyga apibrėžiama slėgiui:

$$p = const. \quad (2.26)$$



**2.3 pav.** Greičio priklausomybė nuo laiko sistolės fazėje: a) aortos stenozės atveju; b) sveiko žmogaus atveju

**Fig. 2.3.** The time-dependent velocity in the systolic phase: a) in the case of aortic stenosis; b) in the case of a healthy person

Paprastu atveju slėgis prilyginamas konstantai, pvz., atskaitos slėgio reikšmei, kuri gali būti lygi 0 Pa arba 10 kPa (iki 10 kPa padidėja iš kairiojo skilvelio atitekančio kraujo slėgis).

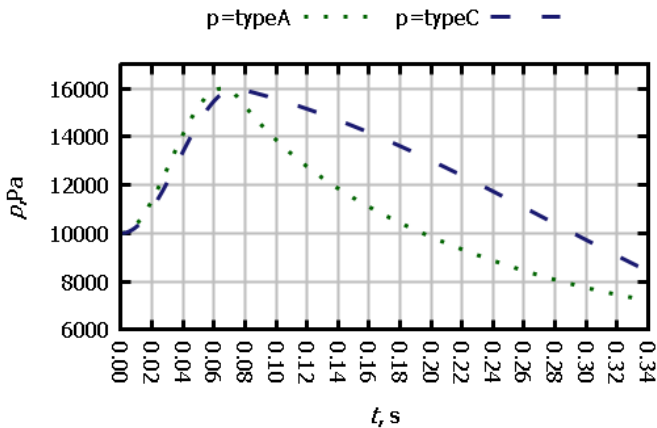
Ištekėjime Dirichlė kraštinė sąlyga slėgiui (2.26) gali būti naudojama kartu su debito tvermės ir vidutinio slėgio pataisomis. Remiantis Bernulio lygtimi, debito tvermės pataisa koreguoja apibrėžiamą slėgio reikšmę nedideliu dydžiu  $dp$ , kad iš srities ištekėtų reikiamas skysčio debitas ir kuo tiksliau būtų tenkinama debito tvermės lygtis (ANSYS 2016). Vidutinio slėgio pataisa leidžia ištekėjime slėgiui nežymiai kisti, išlaikant vidutinę reikšmę, apibrėžtą kraštinėje sąlygoje (2.26). Vidutinio slėgio pataisa sumažina slėgio bangų atspindėjimą nuo krašto ir nepageidautiną kraštinės sąlygos (2.26) įtaką laisvam skysčio ištekėjimui iš uždavinio apibrėžimo srities.

Deja, fiksuoto slėgio kraštinė sąlyga (2.26) ne visada tinka pulsuojančiai tėkmei aortos vožtuve, kai slėgis kinta laike. Modeliuojant sudėtingesnius atvejus laike kintanti slėgio reikšmė  $P_W(t)$  apskaičiuojama taikant Windkessel modelį (Frank 1990; Marom 2014; Burattini et al. 1994) ir ištekėjime apibrėžiama Dirichlė tipo kraštinė sąlyga:

$$p = P_W(t). \quad (2.27)$$

Trijų elementų Windkessel (oro kameros) modelis – tai metodas, kurio metu vertinami arterinio kraujo spaudimo pokyčiai, t. y. kraujo spaudimo bangos savybės (Marom 2014; Casas et al. 2017). Stergiopulos ir kt. teigia, jog bendra arterijų

kompliancija (stangrumas), charakteringas pasipriešinimas ir periferinis kraujagyslių pasipriešinimas gali būti imituojami žmogaus arterijų sistemoje (Stergiopoulos et al. 1999). 2.4 paveiksle pavaizduotos slėgio reikšmės, charakteringos dviejų tipų pacientams ir gautos pagal Windkessel modelį. Skirtingi modelio parametrų rinkiniai (Burattini et al. 1994) yra būdingi pacientams su padidintu bangos atspindėjimu (slėgio kreivė  $p = \text{typeA}$ ) ir mažu arba vėluojančiu bangos atspindėjimu (slėgio kreivė  $p = \text{typeC}$ ).



2.4 pav. Slėgio reikšmės, apskaičiuotos taikant Windkessel modelį

Fig. 2.4. Pressure values, calculated using the Windkessel model

Pastebėta, kad uždavinio apibrėžimo srityje su vienu ištekėjimu Windkessel modelis veikia kaip tik nuo laiko priklausanti slėgio konstanta (funkcija), pridėdama kiekviename srities taške. Prie skaitinio sprendinio slėgio reikšmių, gautų naudojant pastovią slėgio kraštinę sąlygą, pridėjus nuo laiko priklausančios konstantos (funkcijos) reikšmę buvo gaunamos slėgio reikšmės, apskaičiuotos taikant Windkessel modeliu pagrįstą kraštinę sąlygą (2.27).

Baigtinių tūrių programų paketuose rekomenduojama taikyti laisvo ištekėjimo kraštinę sąlygą (angl. *outflow boundary condition*), kai greičio ir slėgio reikšmės ištekėjime nėra žinomos. Ši kraštinė sąlyga pagrįsta Neumano kraštinėmis sąlygomis greičiui, kai greičio išvestinės prilyginamos nuliui (2.25), o slėgio reikšmės krašte ekstrapolijuojamos iš uždavinio apibrėžimo srities reikšmių. Laisvo ištekėjimo kraštinė sąlyga daro mažiausią poveikį atgalinei tėkmei ir leidžia susidarantiems sūkuriams netrikdomai formuotis, tačiau skaitinis sprendinys, apskaičiuotas taikant laisvo ištekėjimo kraštinę sąlygą, nekonverguoja atgalinės tėkmės atvejais.

Reikia pabrėžti, kad tinkamos ištekėjimo kraštinės sąlygos klausimas nėra trivialus (Esmaily Moghadam et al. 2011; Spühler et al. 2018). Kadangi atliekant



skaitinius eksperimentus buvo pastebėta, kad kraujo tekėjimo uždaviniams didelėse arterijose yra būdinga atgalinė tėkmė (angl. *backflow*), o skaitinis sprendinys nekonverguoja, pasiūlytos naujos slėgio kraštinės sąlygos atgalinei tekmei iš aortos modeliuoti. Jos pagerina skaitinio sprendinio konvergavimą ir padeda kontroliuoti iš aortos atgal įtekančio skysčio tūrį.

Pasiūlyta kraštinė sąlyga remiasi pastebėjimu, kad, taikant laisvo ištekėjimo kraštinę sąlygą, slėgis ištekėjime pasiskirsto pagal elipsinio paraboloido formulę:

$$\frac{p}{c} = \frac{x^2}{a} + \frac{y^2}{b}. \quad (2.28)$$

Nagrinėjama atveju koeficientai  $a$  ir  $b$  yra lygūs, o koeficientas  $c$  parenkamas pagal slėgio reikšmes. Skaičiuojant su laisvo ištekėjimo kraštine sąlyga, reikia sekti, kada susidaro atgalinė tėkmė iš aortos. Tada slėgio pasiskirstymą ištekėjime aproksimuoti pagal paraboloido formulę (2.28) ir tęsti skaičiavimus su bendriausia Dirichlė tipo kraštine sąlyga slėgiui:

$$p = P(x, y, z, t), \quad (2.29)$$

Labai svarbu, kad ištekėjime apibrėžto paraboloido reikšmės kistų laike pagal pulsuojančios kraujo tėkmės dėsnius, todėl paraboloidu aproksimuoto slėgio pasiskirstymo reikšmės laike keičiamos remiantis Windkessel modeliu.

Darbe pasiūlytas atgalinės tėkmės problemos sprendimas iš esmės skiriasi nuo kitų autorių taikomų metodų. Pasiūlyta kraštinė sąlyga yra universalesnė nei Lagranžo daugiklių metodas (Kim et al. 2009), kuris apibrėžia greičio pasiskirstymą ištekėjime eliminuodamas atgalinę tėkmę. Pasiūlyta kraštinė sąlyga leidžia modeliuoti atgalinę tėkmę, kuri turi gerai žinomą fiziologinę prigimtį. Analitiniu paraboliniu paviršiumi pagrįstos kraštinės sąlygos diegimas programinėje įrangoje yra daug lengvesnis nei netradicinių Navjė ir Stokso lygčių formuluočių, pasiūlytų Formaggia ir kt.(2007) bei Bazilevs ir kt. (2009). Paprastais atvejais pasiūlyta kraštinė sąlyga gali būti realizuota nekeičiant programinės įrangos kodo, todėl puikiai tinka net komercinei programinei įrangai. Sudėtingesniais atvejais pasiūlytas sprendimas realizuojamas vartotojo apibrėžtomis funkcijomis (UDF), kai slėgio paviršiaus aproksimacijai reikia informacijos apie skaitinį sprendinį einamuoju laiko momentu. Būtent toks atvejis darbo metu realizuotas komercinėje „ANSYS Fluent“ programinėje įrangoje, UDF funkcijoje.

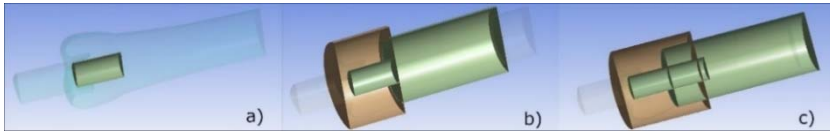
## 2.4. Baigtinių tūrių metodas ir tinklai kraujo tekmei aortos vožtuve modeliuoti

Kraujo tėkmės uždavinys sprendžiamas baigtinių tūrių metodu (Eymard et al. 2000), kuris laikomas tinkamesniu skysčių tėkmės uždaviniams spręsti lyginant

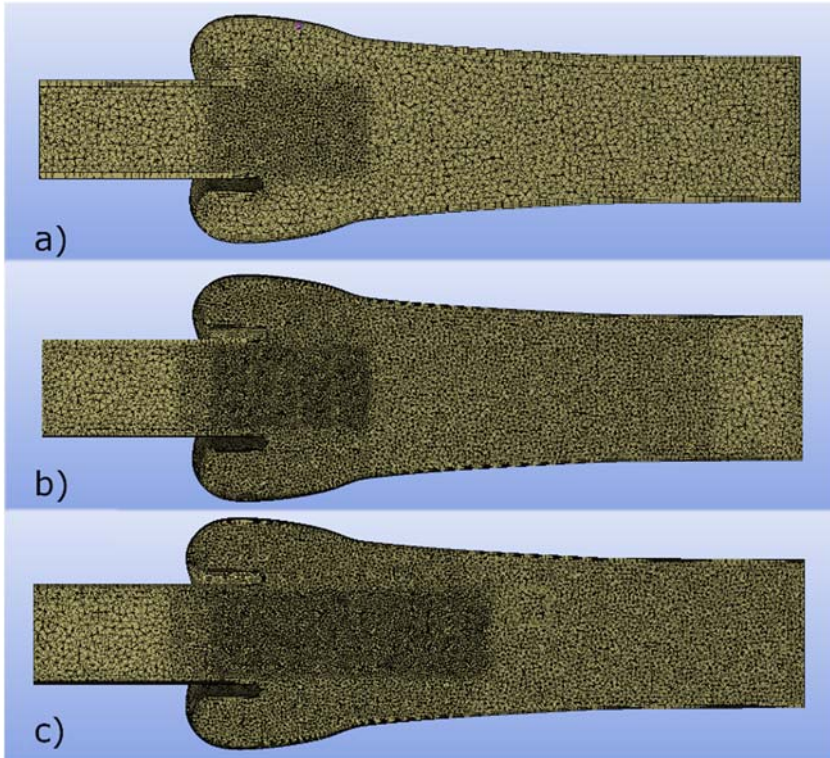
su kitais skaitiniais metodais (Stolarski et al. 2007). Diferencialinių lygčių laiko išvestinės nariai diskretizuoti pirmosios eilės neišreikštine (angl. *first-order implicit*) schema. Siekiant nuslopinti galimas oscilicijas ir subalansuoti skaitinę difuziją momentų lygtyse, konvekciniai lygčių nariai diskretizuoti antrosios eilės priešsrovinėmis schemomis (angl. *second-order upwind schemes*). Gradientai skaičiuojami *Green-Gauss* metodu baigtiniuose tūriuose (angl. *Green-Gauss cell-based method*). Darbe taikyta PRESTO! schema, kuri naudoja diskretųjį masės tvermės dėsnį slėgio reikšmėms apskaičiuoti paslinktojo baigtinio tūrio šoniniuose paviršiuose.

Navjė ir Stokso lygtis galima spręsti remiantis dviejų tipų skaitinėmis schemomis: susietosiomis ir atskyrimo. „ANSYS Fluent“ įdiegta susietoji schema (angl. *Coupled*) (ANSYS 2015) sprendžia greičio ir slėgio lygtis vienoje didelėje tiesinių lygčių sistemoje. PISO (angl. *Pressure-Implicit with Splitting of Operators*) skaitinė schema (Darwish et al. 2014) pagrįsta Chorino projekcijos metodu (Chorin 1968), todėl greičio komponentių ir slėgio lygtys sprendžiamos atskirai, viena po kitos. Šio skaitinio algoritmo iteracijos yra palyginti greitos, tačiau jame atsiranda skaidymo paklaida, kuri sulėtina skaitinio sprendinio konvergavimą. Susietoji schema leidžia naudoti didesnę laiko žingsnį, o jos sprendinys yra stabilus. Deja, ji naudoja kur kas daugiau kompiuterio atminties, o algoritmo iteracijos užtrunka ilgiau. Be didesnio nežinomųjų skaičiaus, tai paaiškinama tuo, kad šiuo atveju AMG (algebrinis daugiatainklis, angl. *Algebraic MultiGrid*) sprendiklis naudoja mažiau efektyvų sistemos matricos modifikatorių (angl. *preconditioner*) dėl sudėtingos matricos struktūros. Aortos vožtuve kraujo tėkmės struktūra yra labai sudėtinga, o skaitinis sprendinys gali diverguoti.

„ANSYS Design Modeler“ aplinkoje skirtingo tankumo nestruktūriniai tinklai buvo generuojami iš tetraedriųjų baigtinių tūrių, siekiant taupyti išteklius. Trimatė aortos vožtuvo geometrija pasirodė esanti labai sudėtinga, todėl bandymai diskretizuoti uždavinio apibrėžimo sritį tinklais, kurių pagrindą sudaro aštuonių mazgų heksaedrai, buvo nesėkmingi. Tokiuose tinkluose būdavo daug netaisyklingų baigtinių tūrių arba galutinis baigtinių tūrių skaičius daugiau nei aštuonis kartus viršijo tetraedrinio tinklo baigtinių tūrių skaičių. Siauras pasienio sluoksnis prie sienelių diskretizuotas prizminiais tūriais, taikant tiesinio augimo infliacijos metodiką. Srities pradžioje, kur nėra sprendinio oscilacijų, sąmoningai naudojamas retas baigtinių tūrių tinklas, o sudėtingesnio tekėjimo regionuose parinkti skirtingo tinklo tankio variantai. Tarp vožtuvo lapelių tinklas tankinamas BOI (angl. *Body of Influence*) metodika, kurios tikslas – sutankinti arba paretinti baigtinių tūrių tinklą, kai į pagrindinį geometrijos tinklą papildomai įterpiama nauja geometrija (kūnas). Įterptame cilindro formos BOI kūne sutankinamas baigtinių tūrių tinklas, tačiau ši geometrija lieka virtuali – ji nėra nei modelio geometrijos dalis, nei papildomas baigtinių tūrių tinklas (ANSYS 2016).



**2.5 pav.** Sudaryti BOI regionai baigtinių tūrių tinklams: a) Ret; b) Big; c) Tank  
**Fig. 2.5.** Created BOI regions used for the finite volume meshes: a) Ret; b) Big; c) Tank



**2.6 pav.** Skirtingo tankumo baigtinių tūrių tinklai: a) Ret; b) Big; c) Tank  
**Fig. 2.6.** The finite volume meshes of various mesh densities: a) Ret; b) Big; c) Tank

Baigtinių tūrių tinklo tankumui tirti buvo panaudotas skirtingas BOI regionų kiekis ir dydis. „Ret“ tinklui diskretizuoti panaudotas 1 BOI regionas tarp vožtuvo lapelių. „Big“ tinklui panaudoti 3 BOI regionai: tarp vožtuvo lapelių, aplink sudėtingos geometrijos aortos sinusus ir cilindriniam regionui už aortos sinusų. „Tank“ tinklui panaudoti tie patys 3 BOI regionai kaip ir „Big“ tinklui, tik šie regionai prailginti (2.5 pav.) siekiant gauti tikslius rezultatus tarp vožtuvo lapelių aortos ašyje, stebėti sukurių formavimąsi aortos sinusuose bei ištekėjime, kur apibrėžiamos kraštinės sąlygos. „Ret“ tinklas diskretizuotas 96 659 mazgais

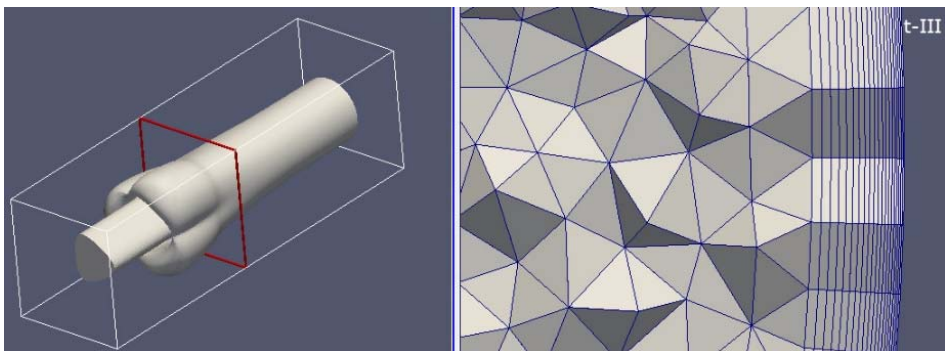
(420 476 baigtiniais tūriais), „Big“ 268 888 mazgais (1 279 246 baigtiniais tūriais), ir „Tank“ 319 175 mazgais (1 561 634 baigtiniais tūriais) (2.6 pav.).

Skaitiniais metodais tiriant turbulentes tėkmes, sudėtingiausia tiksliai modeliuoti procesus siaurame pasienio sluoksnyje dėl mažo jų dydžio ir didelio sudėtingumo. Dėl šios priežasties turbulentinių tėkmių atveju didelis dėmesys skirtas pasienio sluoksniui diskretizuoti. Turbulentinėms tėkmėms diskretizuoti buvo parinkti šeši skirtingo baigtinių tūrių tinklo tankumo tinklai: t-0, t-I, t-II, t-III, t-IV ir t-V (2.1 lentelė). Tinkluose nežymiai sutankinama zona vidurinėje vožtuvo dalyje ties lapeliais 1 BOI regionu. Šio tyrimo metu didžiausias dėmesys skirtas pasienio sluoksniu regiono diskretizacijai (2.7 ir 2.8 pav.). Pasienio sluoksniui diskretizuoti panaudota nuo 3 iki 20 elementų eilių, kurių bendras storis kito nuo  $5,02 \cdot 10^{-6}$  mm iki  $10^{-5}$  mm. Dėl šios priežasties atitinkamai skyrėsi ir mazgų bei baigtinių tūrių skaičius.

## 2.1 lentelė. Pagrindinės turbulentinės tėkmės tinklo tankumo charakteristikos

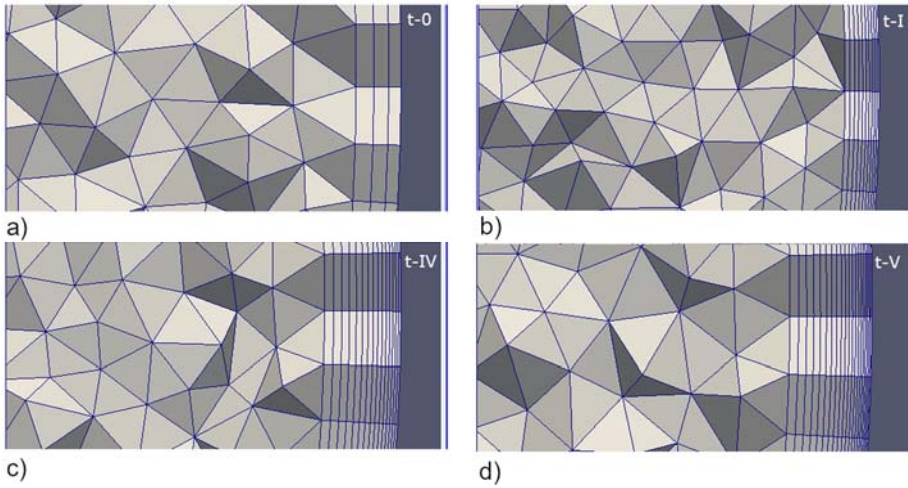
**Table 2.1.** The main characteristics of turbulent flow meshes

| Tinklas | Pasienio sluoksnių sk. | Bendras pasienio sluoksnių storis, m | Mazgų sk. | Baigtinių tūrių sk. |
|---------|------------------------|--------------------------------------|-----------|---------------------|
| t-0     | 3                      | $5,02 \cdot 10^{-6}$                 | 271 129   | 1 276 088           |
| t-I     | 10                     | $5,02 \cdot 10^{-6}$                 | 432 116   | 1 601 820           |
| t-II    | 10                     | $7,53 \cdot 10^{-6}$                 | 424 443   | 1 556 307           |
| t-III   | 15                     | $7,53 \cdot 10^{-6}$                 | 538 537   | 1 783 706           |
| t-IV    | 15                     | $10^{-5}$                            | 531 430   | 1 742 122           |
| t-V     | 20                     | $10^{-5}$                            | 645 532   | 1 969 995           |



**2.7 pav.** Pasienio sluoksniu diskretizacija baigtinių tūrių tinkle t-III: a) fragmento vieta geometrijoje (raudona plokštuma), b) baigtinių tūrių tinklo t-III fragmentas

**Fig. 2.7.** The discretization of the boundary layer of the FVM t-III: a) the fragment location in geometry (red plane), b) fragment of the finite volume mesh t-III



**2.8 pav.** Baigtinių tūrių tinklų fragmentai, kai pasienio sluoksnių storis  $5,02 \cdot 10^{-6} \text{m}$ :  
 a) t-0 tinkle 3 pasienio sluoksniai, b) t-I tinkle 10 pasienio sluoksnių;  
 baigtinių tūrių tinklų fragmentai, kai pasienio sluoksnių storis  $10^{-5}$   
 c) t-IV tinkle 15 pasienio sluoksnių, d) t-V tinkle 20 pasienio sluoksnių

**Fig. 2.8.** Fragments of the FVM, when thicknesses of boundary layer  $5.02 \cdot 10^{-6} \text{m}$ :  
 a) t-0 mesh used 3 boundary layer, b) t-I mesh used 10 boundary layers;  
 Fragments of the FVM, when thicknesses of boundary layer  $10^{-5} \text{m}$ :  
 c) t-IV mesh used 15 boundary layers, d) t-V mesh used 20 boundary layers

## 2.5. Antrojo skyriaus išvados

Išanalizavus sudarytą tėkmės aortos vožtuve skaitinį modelį padarytos išvados:

1. Darbe pritaikyti aortos vožtuvo geometriniai modeliai, sudaryti iš parametrinių kreivių, tinka aortos vožtuvui modeliuoti sistolės piko fazėje. Geometrinis modelis, sudarytas iš epicikloidinių kreivių ir cikloidinio tipo sukimosi paviršių, yra artimesnis aortos vožtuvo anatomijai. Pagrindinės modelio parametrinės kreivės tarpusavyje sujungtos be papildomų kreivių, taip supaprastinant geometrinį modelį ir sumažinant parametrų skaičių.
2. Parinktas šlyties įtempių transportavimą įvertinantis  $k-\omega$  turbulencijos modelis su trūkiojo perėjimo lygtimi yra sudarytas modeliuoti mažais Reinoldso skaičiais charakterizuojamoms tėkmėms ir įvertinti perėjimams iš laminariojo režimo į turbulentinį bei atgal iš turbulentinio į laminarųjį, todėl turi geras teorines galimybes pulsuojančiai tėkmei aortos vožtuve modeliuoti.

3. Darbe pasiūlyta ištekėjimo kraštinė sąlyga, pagrįsta elipsinio paraboloido formos išgaubtu slėgio paviršiumi turi galimybes sumažinti slėgio bangų atspindėjimą nuo krašto ir tiktai laisvam skysčio ištekėjimui bei atgalinei tėkmei modeliuoti. Skaitinis sprendinys, gautas taikant pasiūlytą Dirichlė tipo kraštinę sąlygą, turi galimybes geriau konverguoti už sprendinį, gautą taikant laisvo ištekėjimo kraštinę sąlygą.

# 3

---

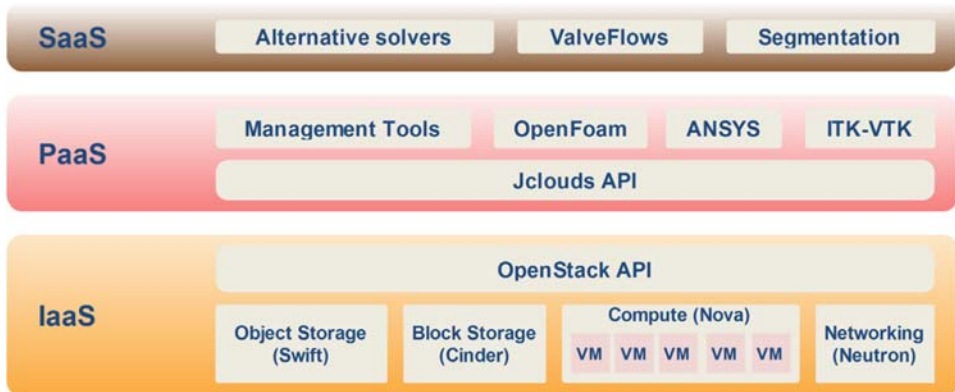
## Tėkmės aortos vožtuve modeliavimo rezultatai

Šiame skyriuje pateikti skaitinių eksperimentų, pagrįstų sudarytu kraujo tėkmės aortos vožtuve modeliu, rezultatai. Pirmajame poskyryje aprašoma skaičiuojamoji infrastruktūra ir skaičiavimų efektyvumas. Antrajame poskyryje aptarta pagrindinių skaitinių parametrų įtaka skaitiniam sprendiniui, nagrinėjami baigtinių tūrių tinklai ir laiko žingsnis. Trečiajame poskyryje išnagrinėti skaitiniai sprendiniai, apskaičiuoti taikant pasiūlytą ištekėjimo kraštinę sąlygą. Ketvirtajame poskyryje palyginti įvairių turbulencijos modelių rezultatai. Penktajame poskyryje skaitinis sprendinys palygintas su medicininių matavimų rezultatais. Pateikiamos bendrosios skyriaus išvados.

Šio skyriaus rezultatai paskelbti Kačeniauskas et al. 2015, Kačeniauskas et al. 2015 (2), Kačeniauskas et al. 2016, Stupak et al. 2017, Kačeniauskas et al. 2017, Starikovičius et al. 2017, Staškūnienė et al. 2017, Staškūnienė et al. 2018 mokslinėse publikacijose.

### 3.1. Skaičiuojamoji infrastruktūra ir skaičiavimų efektyvumas

Dideliam sudėtingų skaitinių eksperimentų kiekiui, geometrijos rekonstrukcijai ir vizualizavimui atlikti pritaikyta VILNIUS TECH palaikoma debesų kompiuterijos infrastruktūra. Remiantis Nacionalinio standartų ir technologijos instituto SPI paslaugų modelio rekomendacijomis (Mell et al. 2011), debesų kompiuterijos paslaugos skirstomos į tris sluoksnius: IaaS (infrastruktūros paslaugos), PaaS (platformos paslaugos) ir SaaS (programinės įrangos paslaugos). *OpenStack* (OpenStack 2017) debesų kompiuterijos infrastruktūros efektyvumas buvo iširtas testuojant greitaveiką sukurtose e. paslaugose, skirtose kraujo tėkmei aortos vožtuve modeliuoti. Sukurtos programinės įrangos paslaugos (SaaS), įdiegtos *OpenStack* debesų kompiuterijos infrastruktūroje, pateikiamos 3.1 paveiksle. Infrastruktūros paslaugos (IaaS) valdomos *OpenStack* API metodais atitinkamai: duomenų saugykla *Swift*, virtualusis diskas *Cinder*, skaičiavimų elementas *Nova* ir tinklo elementas *Neutron*. Platformos paslaugos (PaaS) valdomos *Jclouds* API sąsaja, kuri skirta dirbti su *OpenStack* debesų infrastruktūra, naudojant valdymo įrankius, *OpenFoam*, ANSYS, ITK ir VTK programas. Pusiau automatinis medicininio vaizdo segmentavimas buvo atliekamas virtualiosiose mašinose, kuriuose naudojamos interaktyvios grafikos paslaugos, siekiant gauti individualią paciento geometriją.



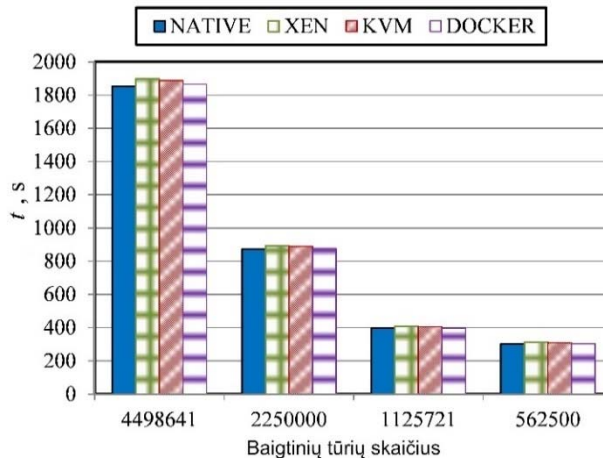
3.1 pav. Debesų kompiuterijos paslaugos  
**Fig. 3.1.** Cloud computing services

Kraujo tėkmės skaičiavimų rezultatams aortos vožtuve vizualizuoti pritaikyta debesų kompiuterijos e. paslauga VisLT. VisLT variklyje buvo įdiegti filtrai ir žemėlapiai, reikalingi tėkmės sukuriams ir greičių bei slėgių laukams vizualizuoti.



VisLT efektyvus atvaizdavimas atliekamas GPU, kuris, naudojant PCI tiesioginių kvietimų praleidimo technologiją, įdiegtas *Xen* aparatinės įrangos virtualiojoje mašinoje. Nustatytas 5,6 % vizualizavimo greitaveikos skirtumas tarp *Xen* virtualiosios mašinos ir realios aparatinės įrangos. Sukurtas tarpinės debesų kompiuterijos sisteminės programinės įrangos komponentas, vizualizuojant leidžiantis sumažinti duomenų siuntimą tarp debesų kompiuterijos infrastruktūros komponentų. Dalinis medicininių rezultatų persiuntimas iš debesų kompiuterijos duomenų saugyklos truko tik nuo 1,69 % iki 2,33 % visų skaičiavimų rezultatų failų siuntimo laiko.

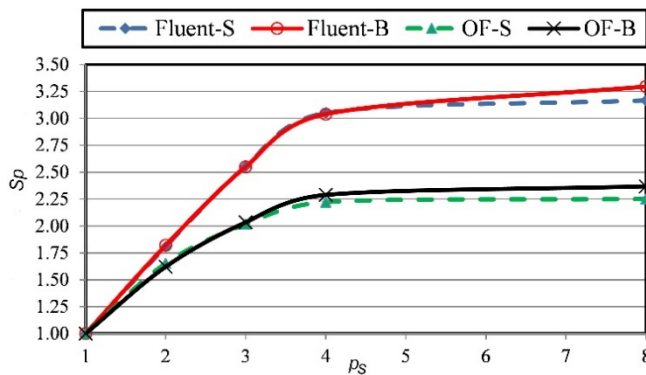
Įdiegtos ir iširtos kelios virtualizavimo technologijos: *Xen* (4.1.5 versija) aparatinės įrangos virtualiosios mašinos (angl. *Hardware Virtual Machine*), KVM (1.5.3 versija) virtualiosios mašinos (angl. *Kernel-based Virtual Machine*) ir *Linux* konteineriai *Docker* 1.5.0. Kraujo tėkmės aortos vožtuve uždaviniai ilgai sprendžiami dėl didelio baigtinių tūrių tinklo tankumo bei mažo laiko žingsnio. Lygiagrečiųjų skaičiavimo technologijų taikymas padeda sutrumpinti skaičiavimų laiką ir spręsti daug didesnius uždavinius. Pirmiausia išbandytas programinės įrangos paslaugos *ValveFlows*, veikiančios viename daugiagysliame mazge, lygiagrečiųjų skaičiavimų efektyvumas.



**3.2 pav.** Skaičiavimų programinės įrangos paslaugos našumas  
**Fig. 3.2.** The performance of the computational software service

3.2 paveiksle pateikiamas programinės įrangos *ValveFlows* vykdymo laikas, kad būtų galima palyginti *OpenStack* infrastruktūros virtualiųjų išteklių našumą su grynos aparatinės įrangos, veikiančios *CentOS*, rezultatais. Nagrinėjami skir-

tingo dydžio uždaviniai, siekiant ištirti skaičiavimams reikalingo laiko priklausomybę nuo baigtinių tūrių skaičiaus tinkle. Baigtinių tūrių tinklai sudaryti iš 420 476, 1 279 246, 2 250 000 ir 4 498 641 tūrių. Išmatuotas paslaugų vykdymo laikas atskleidė, kad tarp *Xen* aparatinės įrangos virtualiosios mašinos ir KVM virtualiosios mašinos našumo skirtumai svyravo nuo 1,8 % iki 3,5 % paslaugos vykdymo *Xen* aparatinės įrangos virtualiojoje mašinoje laiko. Ilgiausias vykdymo laikas buvo gautas naudojant *Xen* aparatinės įrangos virtualiąją mašiną. Išmatuotas našumo skirtumas svyravo nuo 2,5 % iki 3,5 %. Didžiausias skirtumas pastebimas naudojant mažiausiai baigtinių tūrių turintį tinklą. KVM virtualiosiose mašinose buvo išmatuotas kiek trumpesnis vykdymo laikas. Išmatuotas našumo skirtumas kito nuo 1,8 % iki 2,2 %. Virtualizacijos technologijų ir programinės įrangos testai parodė, kad efektyviausiai skaitinius eksperimentus galima atlikti *Linux* konteineriuose *Docker*, nes greitaveikos skirtumas *Docker* ir aparatinėje įrangoje siekė tik 0,6 %.



**3.3 pav.** Lygiagrečiųjų skaičiavimų pagreitėjimas mazge su keturiais realiais branduoliais

**Fig. 3.3.** Speedup of parallel computations on one node with 4 real cores

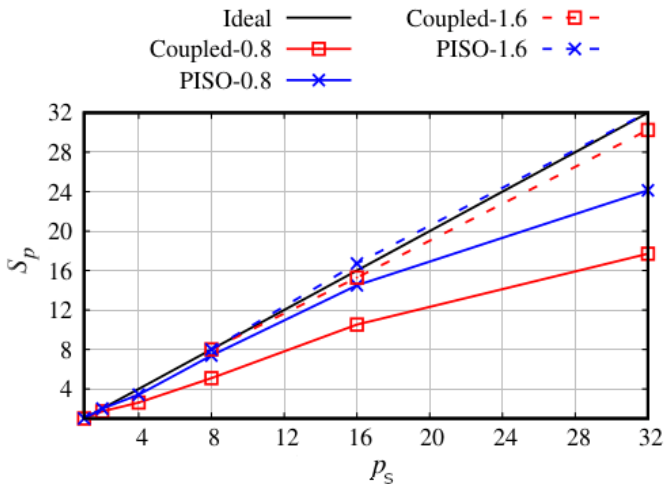
Darbe sudarytas skaitinis modelis įdiegtas dviejuose alternatyviuose programų paketuose: komerciniame „ANSYS Fluent“ (ANSYS 2016) ir atvirojo kodo „OpenFOAM“ (OpenFOAM 2016). 3.3 paveiksle pateiktas lygiagrečiųjų skaičiavimų pagreitėjimas naudojant „ANSYS Fluent“ ir „OpenFOAM“ programinę įrangą ant *Docker* konteinerių, kurie ankstesniuose bandymuose parodė geriausių virtualiųjų išteklių rezultatus. Lygiagrečiųjų skaičiavimų pagreitėjimas ( $S_p$ ) skaičiuojamas pagal šią formulę:

$$S_{p_s} = T_1/T_{p_s}, \quad (3.1)$$

čia  $T_{p_s}$  – sprendimo  $p_s$  procesais laikas;  $T_1$  – sprendimo vienu procesu laikas.

Atliekant lygiagrečiuosius skaičiavimus, buvo vertinamas laikas, sunaudojamas skaičiuoti, sprendžiant du skirtingo dydžio uždavinius. Kreivės „Fluent-S“ ir „OF-S“ parodo lygiagretųjį pagreitėjimą, gautą atitinkamai išsprendus uždavinį, naudojant mažesnę baigtinių tūrių tinklą (420 476 baigtinių tūrių) su „ANSYS Fluent“ ir „OpenFOAM“ programine įranga. Kreivės „Fluent-B“ ir „OF-B“ rodo lygiagretųjį pagreitėjimą, gautą išsprendus uždavinį, naudojant didesnę baigtinių tūrių tinklą (1 279 246 baigtinių tūrių) su „ANSYS Fluent“ ir „OpenFOAM“ platformomis.

Galima pastebėti, kad naudojama *Intel* hipergijų technologija (angl. *hyperthreading*) davė labai nedidelį lygiagrečiųjų skaičiavimų pagreitėjimo prieaugį, kuris pakilo nuo 3,04 (naudojant keturis procesus, kreivė „Fluent-B“) iki 3,30 (naudojant aštuonis procesus, kreivė „Fluent-B“). „OpenFOAM“ pagrindu sukurtos programos lygiagrečiųjų skaičiavimų pagreitėjimas buvo daug mažesnis ir pakilo nuo 2,29 (naudojant keturis procesus, „OF-B“ kreivė) iki 2,37 (naudojant aštuonis procesus, „OF-B“ kreivė). Nustatytas lygiagretus 0,57 efektyvumas su „OpenFOAM“ programa artimas kitų autorių gautiems rezultatams daugiagijėse architektūrose (Culpo 2011). Tokie rezultatai paprastai paaiškinami atminties pralaidumo prisotinimu. Apskritai skaičiavimai, atlikti naudojant „ANSYS Fluent“, buvo daug greitesni, nei gauti naudojant „OpenFOAM“.



3.4 pav. Lygiagrečiųjų skaičiavimų pagreitėjimas aštuoniuose vienuolikiuose mazguose

Fig. 3.4. Speedup of parallel computation on 8 homogeneous nodes

Sprendžiant kraujo tėkmės aortos vožtuve uždavinį, palygintas dviejų algoritmų, pagrįstų susietosios (*Coupled*) ir PISO schemomis, lygiagrečiųjų skaičiavimų pagreitis (3.4 pav.). Lygiagrečiųjų skaičiavimų rezultatai pateikiami sprendžiant du skirtingo baigtinių tūrių tinklo tankumo uždavinius – su 0,42 ir 1,13 mln. baigtinių tūrių (420 476 ir 1 279 246). 3.4 paveiksle pateikiamos lygiagrečiojo algoritminio pagreitėjimo išmatuotos reikšmės.

Vertinant 3.4 paveiksle pateiktus rezultatus, galima daryti išvadą, kad lygiagretus algoritmo, pagrįsto PISO skaitine schema, skaičiavimų pagreitis yra kur kas didesnis nei lygiagretaus algoritmo, pagrįsto susietąja schema. Natūralu, kad sprendžiant didesnę uždavinį su 1,13 mln. baigtinių tūrių išmatuotos didesnės lygiagrečiųjų skaičiavimų pagreitėjimo reikšmės. PISO algoritmu sprendžiant didesnę uždavinį netgi pastebėtas virštiesinis pagreitis, nes, atliekant mažiausią atskaitinį skaičiavimą, duomenys netilpo į mazgo greitąją atmintinę. Verta pažymėti, kad pradiniam nagrinėjamo uždavinio tyrimams patikimiau taikyti stabilę susietąją schemą. Mažesniems tėkmės greičiams arba geriau ištirtiems atvejams, kai skaitinis sprendinys gerai konverguoja, galima taikyti ir PISO schemą, trumpinant skaičiavimo laiką.

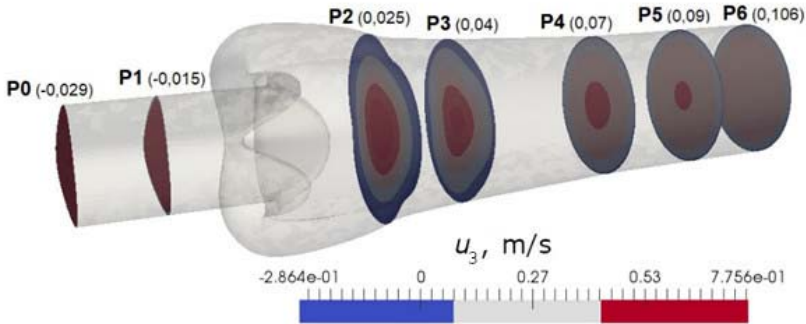
## 3.2. Skaitinių parametrų parinkimas sudarytam tėkmės aortos vožtuve modeliui

### 3.2.1. Baigtinių tūrių tinklų parinkimo tyrimas

Skaitiniais eksperimentais buvo ištirta skaitinio sprendinio priklausomybė nuo baigtinių tūrių tinklo tankumo laminariosios ir turbulentinės tėkmių atvejais. Skirtingo tankumo nestruktūriniai tinklai (2.6 pav.) buvo generuojami iš tetraedrinių baigtinių tūrių su siauru pasienio sluoksniu prie sienelių, diskretizuojant prizminiais tūriais (taikoma tiesinio augimo metodika). Baigtinių tūrių tinklo tankumui vertinti buvo naudojami gerokai didesni kraujo tėkmės greičiai, būdingi aortos stenozės atvejui (2.3 a pav.). Skaičiavimams naudojama susietoji (*Coupled*) schema ir  $dt = 0,0004$  s laiko žingsnis.

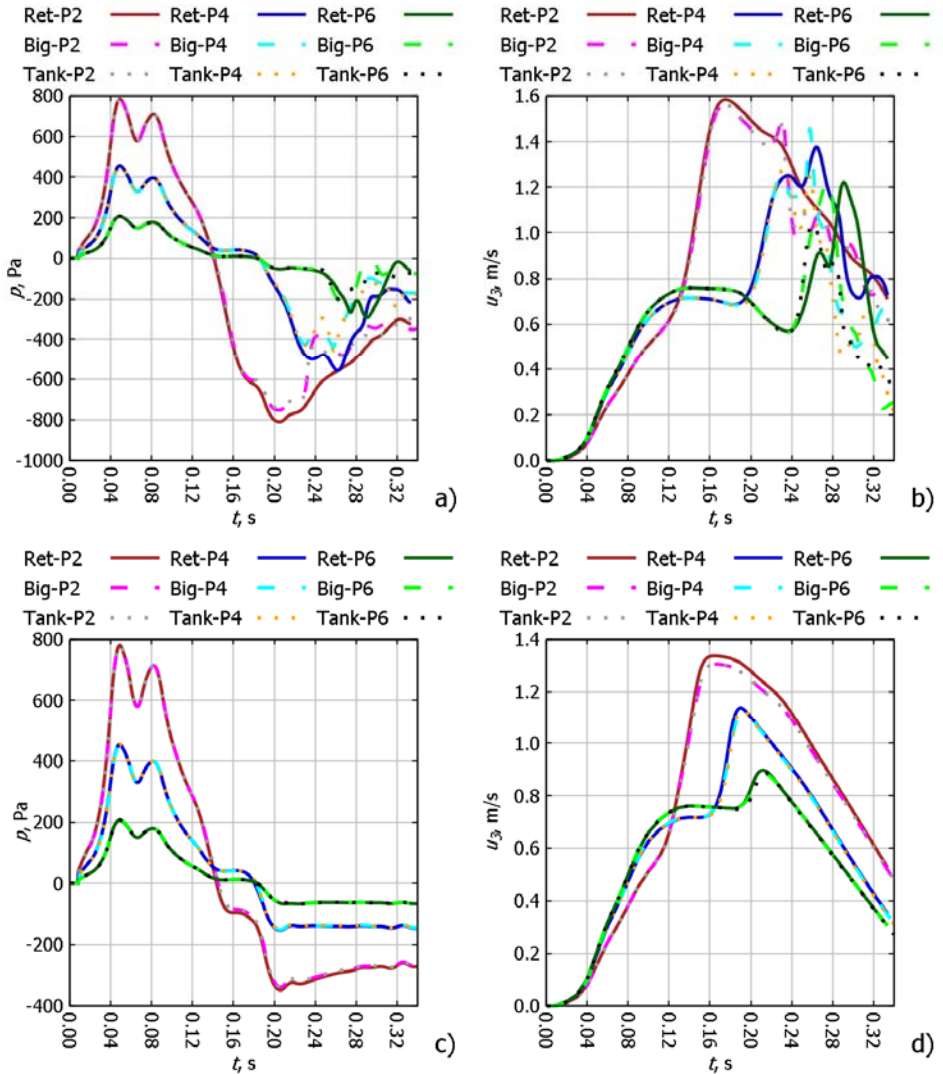
Skaitiniais eksperimentais yra nagrinėjamas slėgio ir greičio kitimas laike, naudojant nestruktūrinius baigtinių tūrių tinklus (2.6 pav.). Slėgio ir greičio reikšmės buvo lyginamos iš anksto pasirinktuose pjūviuose (3.5 pav.). Šių pjūvių koordinatės aortos centrinėje simetrijos ašyje išdėstytos atitinkamai: P0 – įtekėjimo kraštinės sąlygos  $x_3^0 = -0,029$  m), P1 – parinktas prieš aortos vožtuvą ( $x_3^1 = -0,015$  m), P2 – parinktas už aortos vožtuvo lapelių ( $x_3^2 = 0,025$  m), P3–P6 – pa-

rinkti atitinkamais atstumais ir skirti stebėti susidarančius ir ištekėjimo link judančius sūkurius: P3 taške  $x_3^3 = 0,04$  m, P4 taške  $x_3^4 = 0,07$  m, P5 taške  $x_3^5 = 0,09$  m ir P6 taške (ištekėjime)  $x_3^6 = 0,106$  m.



**3.5 pav.** Tyrimams naudojami charakteringi taškai ir pjūviai (P0–P6)  
**Fig. 3.5.** Characteristic points and planes used for research (P0–P6)

Skirtingiems baigtinių tūrių tinklams palygintos laminariosios tėkmės slėgių (3.6 a pav.) ir greičių (3.6 b pav.) reikšmės taškuose P2, P4 ir P6 laikui bėgant, o toliau pateikti analogiški rezultatai turbulentinės tėkmės atveju (3.6 c pav., 3.6 d pav.). Kadangi taškas P2 parinktas iš karto už aortos vožtuvo lapelių, jame apskaičiuotos slėgių ir greičių reikšmės yra didžiausios. Taškas P6 parinktas ties ištekėjimu, kur kraštinės sąlygos apibrėžia slėgį, lygų 0, todėl jame slėgio reikšmės kinta mažiausiai. Skirtingiems tinklams slėgių ir greičių kreivės laiko intervale  $[0,00;0,16]$  s sutampa tiek turbulentinės, tiek ir laminariosios tėkmės atvejais. Nuo 0,22 s laminariosios tėkmės atveju skaitiniai sprendiniai osciliuoja. Tai patvirtina žinomą faktą, kad aortos vožtuve turbulentiniai procesai prasideda greičiui mažėjant po sistolės piko (Bluestein et al. 2000). Laminariojo modelio atveju taikant skirtingus tinklus gauti osciliuojantys sprendiniai ženkliai skiriasi, lyginant tarpusavyje, tačiau visų jų tikslumu pasitikėti nebėra pagrindo. Turbulentinio modelio atveju taikant skirtingus tinklus gautos slėgio kreivės sutampa visame nagrinėjamame intervale, o greičio kreivės pradeda nežymiai skirtis, artėdamos prie didžiausiosios reikšmės. Verta pažymėti, kad tankesniuose tinkluose „Big“ ir „Tank“ apskaičiuotos greičio reikšmės sutampa, o rečiausiame tinkle „Ret“ apskaičiuotos reikšmės nuo jų skiriasi. Todėl galima padaryti išvadą, kad rečiausias tinklas „Ret“ yra per daug grubus, norint tiksliai apskaičiuoti didžiausiasias greičio reikšmes sistolėje.

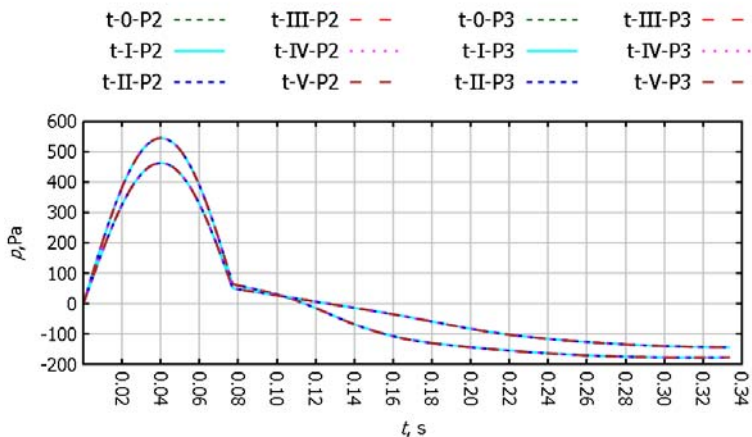


**3.6 pav.** Skaitinių eksperimentų priklausomybė nuo baigtinių tūrių tinklo tankumo: a) slėgio reikšmių kitimas laike laminariosios tėkmės atveju; b) greičio  $u_3$  komponentės kitimas laike laminariosios tėkmės atveju; c) slėgio reikšmių kitimas laike turbulentinės tėkmės atveju; d) greičio  $u_3$  komponentės kitimas laike turbulentinės tėkmės atveju

**Fig. 3.6.** The dependency of numerical solutions on density of the finite volume meshes: a) time variation of pressure values in the case of laminar flow; b) time variation of  $u_3$  velocity component in the case of laminar flow; c) variation of pressure values time in the case of turbulent flow; d) time variation of  $u_3$  velocity component in the case of turbulent flow

### 3.2.2. Baigtinių tūrių tinklų pasienio sluoksnyje parinkimo tyrimas

Skaitiniais metodais tiriant turbulentes tėkmes, sudėtingiausia tiksliai modeliuoti procesus siaurame pasienio sluoksnyje dėl mažo jų dydžio ir didelio sudėtingumo. Pasienio sluoksnio diskretizacijai rekomenduojama naudoti nuo 15 iki 30 eilių baigtinių tūrių (ANSYS 2016a), kad kuriuose būtų galima tiksliai apskaičiuoti skysčio jėgą sienelėms arba sienelių šlyties įtempį (angl. *wall shear stress*). Disertaciniame darbe sienelių šlyties įtempiai nebuvo detaliam nagrinėjami, nes Lietuvoje klinikinėmis sąlygomis jie nėra matuojami, todėl patikrinti skaičiavimų rezultato tikslumo nėra galimybių. Nepaisant to, išlieka atviri klausimai: kiek tėkmė pasienio sluoksnyje veikia rezultatus centrinėje aortos simetrijos ašyje; ar naudojami baigtinių tūrių tinklai smarkiai nesumažina sprendinio tikslumo ir kituose uždavinio apibrėžimo srities regionuose dėl nepakankamos pasienio sluoksnio diskretizacijos. Dėl šių priežasčių buvo atliktas turbulentių tėkmių tyrimas su baigtinių tūrių tinklais, sutankintais pasienio sluoksnyje.

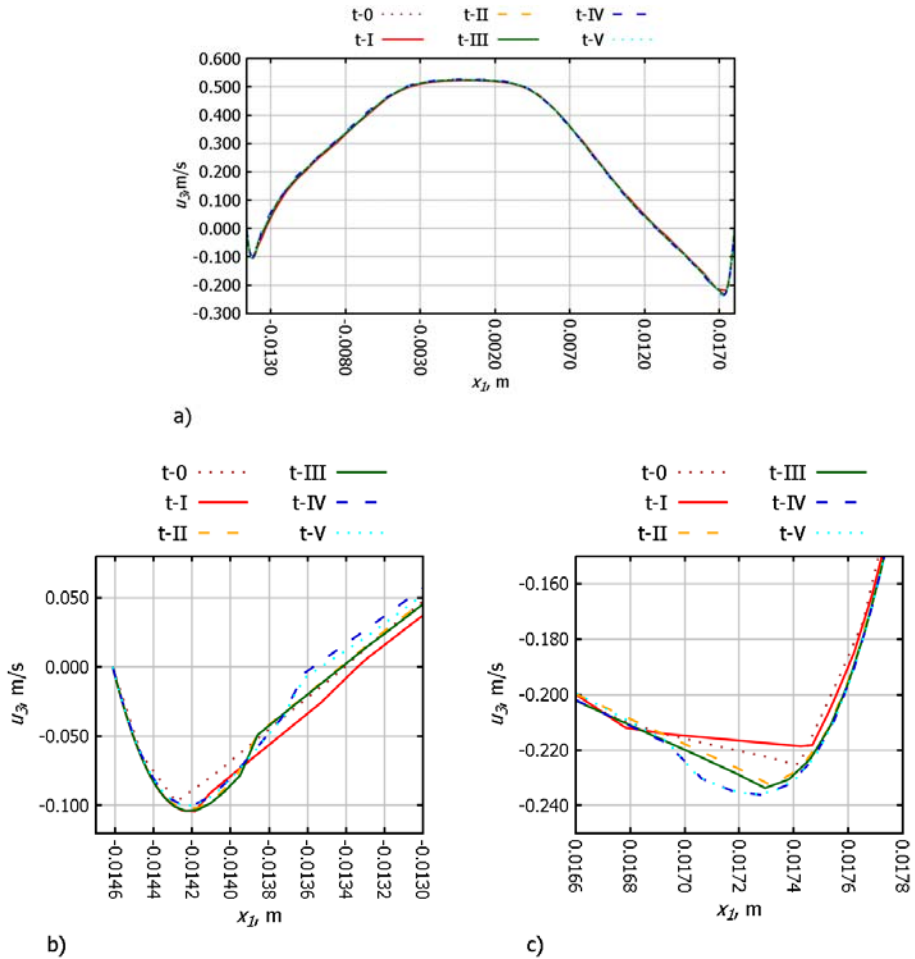


3.7 pav. Slėgio reikšmių priklausomybė nuo baigtinių tūrių tinklo tankumo turbulentių tėkmės atveju taškuose P2 ir P3

**Fig. 3.7.** The dependency of pressure values on the density of finite volume meshes in points P2 and P3, simulating turbulent flow

Turbulentių tėkmės diskretizuotos 6 skirtingo tankumo baigtinių tūrių tinklais t-0, t-I, t-II, t-III, t-IV ir t-V, kai pasienio sluoksniui diskretizuoti panaudota nuo 3 iki 20 elementų eilių, kurių bendras storis kito nuo  $5,02 \cdot 10^{-6}$  m iki  $10^{-5}$  m (2.1 lentelė). Turbulentių tėkmės tyrimams naudojama susietoji (*Coupled*) schema ir įtekančio greičio priklausomybė nuo laiko (2.3 b pav.). 3.7 paveiksle

pavaizduotas slėgio kitimas laike taškuose P2 ir P3, o 3.8 paveiksle pateiktas greičio komponentės  $u_3$  pasiskirstymas skersiniame pjūvyje  $x_3 = 0,025$  m per tašką P2 (3.8 a pav.) ir padidintuose skersinio pjūvio pasienio sluoksnio fragmentuose (3.8 b ir 3.8 c pav.).

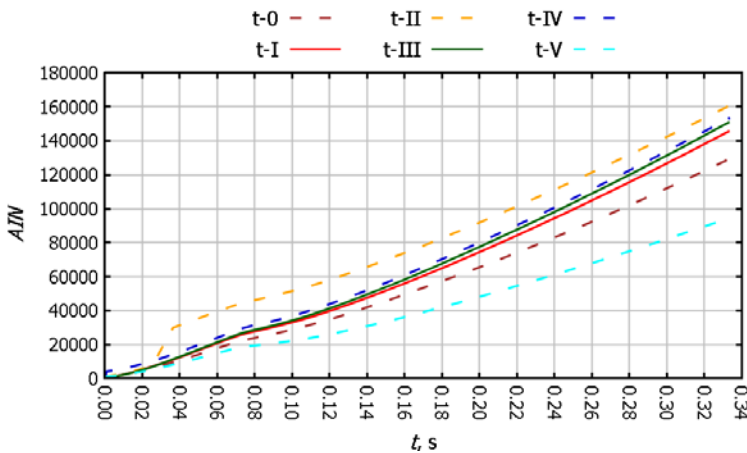


**3.8 pav.** Greičio komponentės  $u_3$  profilis  $x_3 = 0,025$  m,  $x_2 = 0,022$  m pjūvyje P2, kai  $t = 0,224$  s: a) visame skersiniame pjūvyje; b) padidintas pasienio sluoksnio fragmentas kairėje profilio pusėje; c) padidintas pasienio sluoksnio fragmentas dešinėje profilio pusėje

**Fig. 3.8.** Profile of velocity component  $u_3$ ,  $x_3 = 0,025$  m,  $x_2 = 0,022$  m in plane P2, when  $t = 0,224$  s: a) in the whole cross section; b) zoomed in fragment of the inflation layer on the left side of the profile; c) zoomed in fragment of the border layer on the right side of the profile



Vertinant skaitinių eksperimentų rezultatų priklausomybę nuo baigtinių tūrių tinklo tankumo, galima teigti, kad nagrinėjamos slėgio reikšmės P2 ir P3 taškuose visiškai sutampa (3.7 pav.), o greičių reikšmių skirtumus galime įžvelgti tik nagrinėjant greičio komponentės  $u_3$  pasiskirstymą pasienio sluoksnyje (3.8 b ir 3.8 c pav.). Laužytas tiesinis kreivės t-0 pobūdis rodo, kad rečiausias tinklas su trimis baigtinių tūrių sluoksniais pasienyje nėra tinkamas pasienio sluoksniui modeliuoti, nors centrinėje aortos vožtuvo ašyje gaunami gana tikslius rezultatai. Kreivė t-I yra glodesnė, nes naudojama 10 baigtinių tūrių sluoksnių, bet bendras sluoksnių storis  $5,02 \cdot 10^{-6}$  m yra per mažas. Kreivės t-II ir t-III gerai vizualizuoja storesnį pasienio sluoksnį, nes bendras sluoksnių storis yra didesnis ( $7,53 \cdot 10^{-6}$  m). Šioms kreivėms nežymiai pritrūksta glodumo pereinamoje zonoje tarp pasienio sluoksnio ir pagrindinės tėkmės. Kreivės t-IV ir t-V yra gana glodžios, nes naudojama 15 ir 20 baigtinių tūrių sluoksnių. Taikant tinklus t-IV ir t-V, bendras sluoksnių storis ( $10^{-5}$  m) apima didesnę prie sienelės susidariusio sūkurio dalį. 3.8 b paveiksle atveju sutankintas sluoksnis apima visas neigiamas  $u_3$  reikšmes, t. y. visą sūkurį, o tai labai padidina jo modeliavimo tikslumą. Skirtumas tarp t-IV ir t-V tinklų rezultatų beveik nepastebimas. 3.8 b paveiksle galima pastebėti, kad taikant tinklus t-IV ir t-V apskaičiuojamos kiek didesnės (neigiamos) greičio komponentės reikšmės, susidaranti pasienio sluoksnio sūkuryje. Taigi 3.8 b paveikslas ir 3.8 c paveikslas parodo, kad tankesniais tinklais su didesniu sluoksnių storiu tiksliau aptinkamos sūkurinės zonos. Verta pažymėti, kad abiejuose greičių profilio galuose ties aortos sinusu ir jungtimi susidaro skirtingo dydžio sūkuriai, todėl nagrinėjama tėkmė yra gana sudėtinga.



3.9 pav. Skaitinių sprendinių konvergavimo iteracijų suminio skaičiaus AIN kitimas laikui einant

Fig. 3.9. Time evolution of the total number of convergence iterations AIN

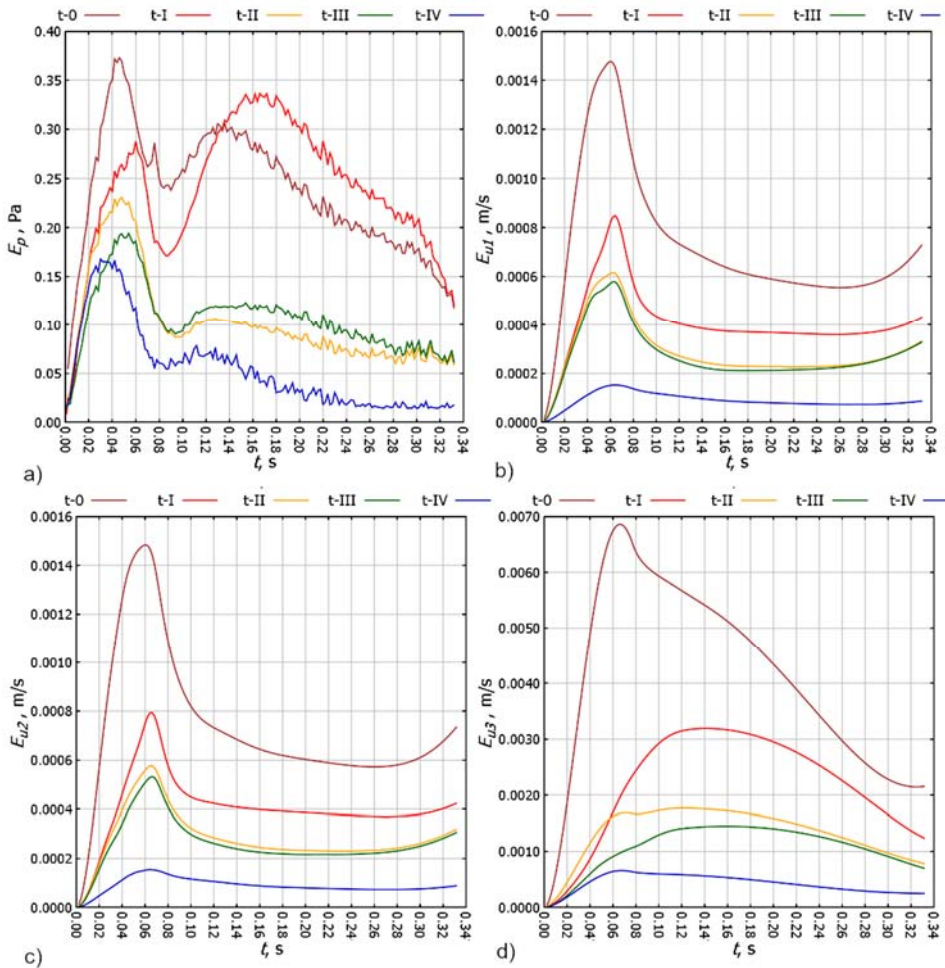
3.9 paveiksle pateiktas šešių skirtingų tinklų suminių iteracijų skaičiaus kitimas nagrinėjamame laiko intervale. Bendru atveju galima pastebėti gerai žinomą tendenciją – kuo tankesnis tinklas parenkamas, tuo lėčiau sprendinys konverguoja ir konvergavimui pasiekti reikalingas didesnis iteracijų skaičius (išskyrus t-II ir t-V atvejus). Taikant tinklą t-II, sprendinys keletą laiko žingsnių nekonvergavo ( $t = 0,0254$  s ir  $t = 0,0364$  s), todėl jo iteracijų skaičius pats didžiausias. Greičiausiai konvergavo paties tankiausio tinklo t-V sprendinys, ką galima paaiškinti taisyklina baigtinių tūrių forma, kurią sudėtinguose regionuose pavyko pasiekti tik dėl didelio baigtinių tūrių skaičiaus.

3.10 paveiksle pavaizduotas nagrinėjamų tinklų t-0, t-I, „-II, t-III, t-IV skaitinių sprendinių santykinių paklaidų, apskaičiuotų tankiausio ir tikėtina tiksliausio etaloninio tinklo t-V atžvilgiu, kitimas laike. Kitaip sakant,  $L_2$  normoje apskaičiuoti ir nubrėžti nagrinėjamų tinklų t-0, t-I, t-II, t-III, t-IV ir etaloninio tinklo t-V slėgio  $p$  (3.10 a pav.) ir greičio komponentių  $u_1$ ,  $u_2$  ir  $u_3$  (3.10 b, 3.10 c ir 3.10 d pav.) interpoliuotų reikšmių skirtumai:

$$\|y - y^V\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^m |y_i - y_i^V|^2}, \quad (3.2)$$

čia  $y$  – pasirinkto tinklo skaitinio sprendinio kintamasis (slėgis arba viena iš greičio komponentių);  $y^V$  – etaloninio tinklo t-V skaitinio sprendinio kintamasis;  $m$  – mazgų skaičius pasirinktame tinkle;  $y_i$  – pasirinkto tinklo skaitinio sprendinio kintamojo reikšmė mazge  $i$ ;  $y_i^V$  – etaloninio t-V tinklo skaitinio sprendinio kintamojo interpoliuota reikšmė mazge  $i$ . Nagrinėjamu atveju  $L_2$  norma parodo vidutinį dviejų skaitinių sprendimų skirtumą visoje uždavinio apibrėžimo srityje.

Analizuodami skirtingų baigtinių tūrių tinklų tankumo rezultatus, matome, kad gauti skirtumai, palyginti su etaloniniu skaitiniu sprendiniu, yra didžiausi sistolės piko momentu, kai greitis pasiekia savo didžiausiąją reikšmę. Slėgio kintamasis didžiausią skirtumą pasiekia anksčiau, kai slėgio kintamojo ir greičio išvestinės laike reikšmės yra didžiausios. Skirtumai mažėja didėjant tinklo tankumui, todėl mažiausia paklaida (skirtumas nuo t-V) pastebėta t-IV tinklo rezultatuose – 0,13 % nuo didžiausiosios greičio reikšmės ir 0,02 % – nuo didžiausiosios slėgio reikšmės P2 taške. Mažiausias skirtumas yra tarp t-II ir t-III tinkle rezultatų, kurie turi tokį patį pasienio sluoksnių storį, tačiau skirtingą pasienio sluoksnių skaičių. t-0 ir t-1 tinklų diskretizacijos paklaida yra pastebimai didesnė negu kitų tinklų, nors, lyginant su didžiausiosiomis kintamųjų reikšmėmis P2 taške ( $p_{\max} \approx 545$  Pa,  $u_3^{\max} \approx 0,63$  m/s) išlieka pakankamai maža: 0,12 % bei 0,06 % nuo didžiausiosios slėgio reikšmės ir 0,48 % bei 0,65 % nuo didžiausiosios greičio reikšmės atitinkamai. Galima padaryti išvadą, kad, tankinant baigtinių tūrių tinklą, skaitinių sprendinių diskretizacijos paklaida (arba skirtumas lyginant su etaloniniu tinklu) mažėja.



**3.10 pav.** Diskretizacijos santykinės paklaidos,  $L_2$  normoje apskaičiuotos skirtingo tankumo baigtinių tūrių tinklams t-0, t-I, t-II, t-III, t-IV, kitimas laike: a) slėgis;

b) greičio komponentė  $u_1$ ; c) greičio komponentė  $u_2$ ; d) greičio komponentė  $u_3$

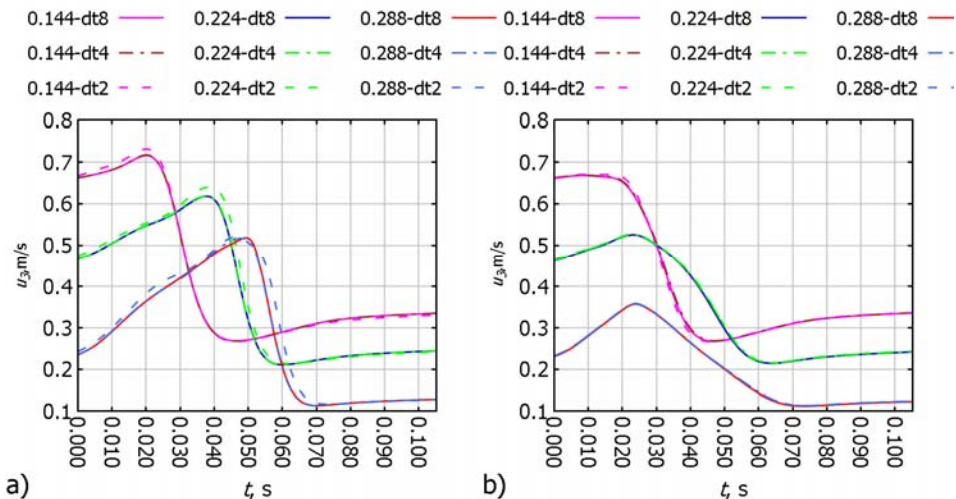
**Fig. 3.10.** Time evolution of relative discretization errors computed in  $L_2$  norm between the numerical solutions on five finite volume meshes of increasing density (t-0, t-I, t-II, t-III, t-IV): a) pressure; b) velocity component  $u_1$ ; c) velocity component  $u_2$ ; d) velocity component  $u_3$

### 3.2.3. Laiko žingsnių nustatymo tyrimas

Parenkant skaitinių parametų reikšmes, be baigtinių tūrių tinklo tankumo įvertinimo, nagrinėjama ir skirtingų laiko žingsnių įtaka laminariosios ir turbulentinės

tėkmių atveju. Atliekamo skaitinio modelio testui pasirinktas „Tank“ tinklas diskretizuotas 319 175 mazgais (1 561 634 baigtiniais tūriais) (2.6 c pav.). Skaičiavimams naudojama susietoji (*Coupled*) schema, o kraštine įtekėjimo sąlyga laikoma kraujo tėkmės fiziologinio greičio priklausomybė nuo laiko (2.3 b pav.) per visą sistolės ciklo intervalą, kurio trukmė 0,3336 s.

Palyginimams buvo pasirinkti  $dt = 0,0008$  s,  $dt = 0,0004$  s ir  $dt = 0,0002$  s laiko žingsniai (jie grafikuose atitinkamai žymimi dt8, dt4 ir dt2). Vertiname greičių pasiskirstymus centrinės aortos ašyje pasirinktais laiko momentais  $t = 0,144$  s,  $t = 0,224$  s ir  $t = 0,288$  s (3.11 pav.).



**3.11 pav.** Greičio pasiskirstymai centrinėje aortos ašyje naudojant skirtingus laiko žingsnius: a) laminariosios tėkmės atveju; b) turbulentinės tėkmės atveju

**Fig. 3.11.** Distribution of the velocity in the central axis of the aorta using different time steps: a) in the case of laminar flow; b) in the case of turbulent flow

Visais atvejais  $dt = 0,0008$  s ir  $dt = 0,0004$  s greičių pasiskirstymo kreivės tarpusavyje beveik sutampa, nors laminariosios ir turbulentinės tėkmės pobūdis iš esmės skiriasi (3.11 pav.). Taikant turbulentinį modelį,  $dt = 0,0002$  s greičių pasiskirstymo kreivės taip pat sutampa su greičio kreivėmis, apskaičiuotomis su didesniais laiko žingsniais (3.11 b pav.). Laminariojo modelio atveju (3.11 a pav.) tarp greičio kreivių, gautų su laiko žingsniu  $dt = 0,0002$  s ir didesniais laiko žingsniais, pastebimas nedidelis skirtumas, kuris atsiranda ties didžiausiomis greičio reikšmėmis ir vėlesniais laiko momentais ( $t = 0,224$  s ir  $t = 0,288$  s) kiek padidėja. Gerai žinoma, kad didesnių greičių (didesnių Reinoldso skaičių) atveju laminarioji tėkmė virsta turbulentine, o skaitiniai sprendiniai pradeda osciliuoti

(Bluestein, Einav 2000). Skaitiniai sprendiniai, gauti taikant tankesnius tinklus ar mažesnius laiko žingsnius, geriau aprašo smulkias greičio perturbacijas ir kartu labiau linkę osciliuoti, ką ir iliustravo skaitinis laminariosios tėkmės sprendinys, gautas taikant mažiausią laiko žingsnį  $dt = 0,0002$  s. Be to, yra žinoma, jog, taikant turbulentinį modelį, pridedami papildomi difuziniai nariai, kurie padeda nuguldinti osciliacijas greičių lauke. Dėl šios priežasties didžiausiosios greičių kreivijų reikšmės, gautos taikant turbulentinį modelį, yra mažesnės, nei taikant laminarųjį modelį, o skaitiniai sprendiniai, gauti taikant skirtingus laiko žingsnius ir turbulentinį modelį, beveik sutampa.

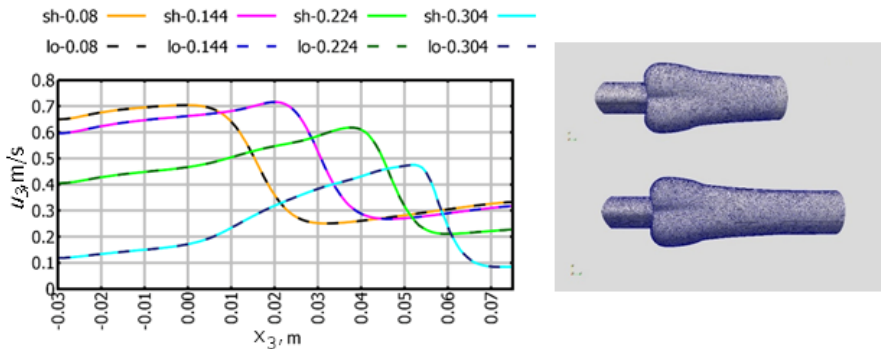
Atliktas tyrimas parodė, kad nagrinėtame reikšmių intervale laiko žingsnio pasirinkimas didelės įtakos skaitiniam sprendiniui neturi. Išimtį sudarė laminariojo tėkmės modelio skaitinis sprendinys, kuris mažiausio laiko žingsnio atveju įgavo osciliacinį pobūdį didesnių greičio reikšmių zonose. Paprastesnių tėkmių atveju, taupant kompiuterinį laiką, galima naudoti didesnę laiko žingsnį, o sudėtingesnių turbulentių tėkmių atveju, naudojant tankesnius tinklus, reikėtų rinktis mažesnę laiko žingsnį, siekiant neprarasti tikslumo. Daugumoje disertacijoje pateiktų turbulentių tėkmės skaičiavimų naudojamas laiko žingsnis  $dt = 0,0002$  s. Reikia pabrėžti, jog toks laiko žingsnis pasirinktas ne atsitiktinai: panašų laiko žingsnį naudoja ir kiti autoriai, sprenddami panašaus pobūdžio problemas. Pavyzdžiui, Jahandardoost ir kt. (2015), modeliuodami kraujo tėkmę per dvisparnį mechaninį vožtuvą su 2 030 000 baigtinių tūrių tinklu, skaičiavimams naudoja laiko žingsnį  $dt = 0,001$  s (Jahandardoost et al. 2015). Tokį patį laiko žingsnį renkasi ir Singh-Gryzbon ir kt. (2020), tirdami hemodinamių charakteristikų įtaką taikant transkateterinį širdies vožtuvą individualiam pacientui (Singh-Gryzbon et al. 2020). Le ir kt. (2012) aortos vožtuvo protezui modeliuoti panaudojo laiko žingsnį  $dt = 1,074 \cdot 10^{-4}$  s (Le et al. 2012). Taigi mūsų pasirinktas laiko žingsnio dydis artimas laiko žingsniams, kurie buvo naudojami panašių skaitinių metodų taikymo metu. Taip pat reikia nepaminti ir to, jog disertaciniame darbe naudojama gerokai sudėtingesnė uždavinio apibrėžimo srities geometrija (Esmaily Moghadam et al. 2011).

### 3.3. Tėkmės aortos vožtuve kraštinių sąlygų tyrimas

Skaitiniai aortos vožtuvo sprendiniai pasižymi prastu konvergavimu. Ypač skaitinio sprendinio konvergavimą apsunkina atgalinė tėkmė iš aortos. Po sistolės piko greitis pradeda mažėti, nuo aortos vožtuvo lapelių atsiskiria sūkurių, judantis link ištekėjimo, o ištekėjime, ties aortos sienelėmis, susidaro atgalinė tėkmė. Laikui bėgant iš uždavinio apibrėžimo srities aplink centrinę aortos vožtuvo ašį ištekancio kraujo kiekis mažėja, o atgalinė tėkmė didėja. Tam tikrais diastolės etapais kraujas iš aortos grįžta į vožtuvą visu skerspjūviu. Deja, skaitiniai modeliai

sunkiai aprašo tokias tĕkmės, todėl skaitinis sprendinys dažnai nustoja konverguoti daug ankstesniais laiko momentais, kai atgalinė tĕkmė dar neapėmė viso skerspjūvio.

Pirmiausia ištirtas standartinis šios problemos sprendimo, arba atitolinimo, būdas, prailginant uždavinio apibrėžimo sritį. Skaitinio modelio testui pasirinktas „Tank“ tinklas diskretizuotas 319 175 mazgais (1 561 634 baigtiniais tūriais) (2.6 c pav.). Skaičiuojant naudojama susietoji (*Coupled*) schema ir kraujo tĕkmės fiziologinio greičio priklausomybė nuo laiko (2.3 b pav.) per visą skilvelių sistolės ciklo intervalą, kurio trukmė – 0,3336 s. Darbe išnagrinėtos dvi sritys – 0,075 m ir 0,106 m ilgio, jose palyginti gauti skaitiniai rezultatai. 3.12 paveikslas iliustruoja srities prailginimo įtaką greičių pasiskirstymui centrinės aortos ašies atkarpoje  $[-0,03; 0,075]$  m įvairiais laiko momentais (0,08 s; 0,144 s; 0,224 s; 0,304 s). Nurodant ašies ilgį, nuline aortos ašies koordinate laikoma aortos sinusų pradžia, todėl  $-0,03$  m yra atstumas iki aortos sinusų. Išsitiesinės linijos „sh“ vaizduoja trumpesnės uždavinio apibrėžimo srities rezultatus, o punktyrinės „lo“ – ilgesnės.



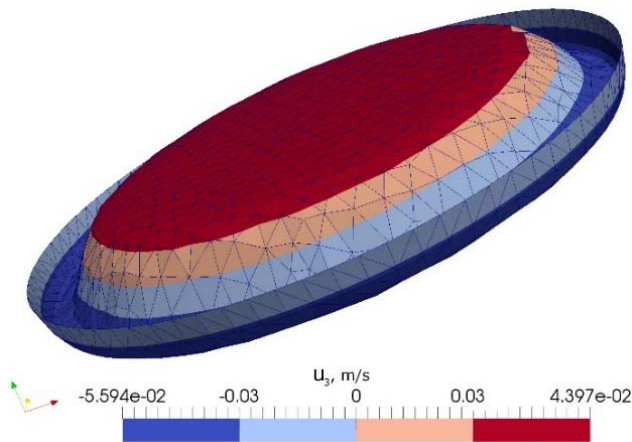
**3.12 pav.** Srities prailginimo įtaka greičių pasiskirstymui centrinėje aortos ašyje įvairiais laiko momentais

**Fig. 3.12.** Influence of domain elongation on velocity distribution in the central aortic axis at various time instances

Laminariosios tĕkmės atveju greičio reikšmių kreivės, apskaičiuotos skirtingo ilgio srityse, visiškai sutampa. Šis faktas įrodo, kad pasirinktas pakankamas uždavinio apibrėžimo srities ilgis. Verta paminėti, kad slėgio reikšmės turi skirtis dėl kelio nuostolių arba skirtingo nagrinėjamų taškų atstumo iki ištekėjimo krašto. Deja, uždavinio apibrėžimo srities prailginimas neišsprendžia atgalinės tĕkmės problemos, o tik ją atitolina.

3.13 paveiksle pateikiama kraujo tĕkmė ištekėjime, tiriamo laiko intervalo pabaigoje, kai  $t = 0,328$  s. Atgalinė kraujo tĕkmė iš aortos buvo gauta naudojant nulinio slėgio kraštines sąlygas (2.25 ir 2.26). Vizualizuota kraujo tĕkmė pagal

greičio vektorius, apskaičiuotus tĕkmĕs pulso pabaigoje. Gautas paviršius buvo vizualizuotas keturiomis įvairių spalvų juostomis pagal greičio komponentės  $u_3$  reikšmes, kad būtų galima atpažinti atgalinės tĕkmĕs sritį. Mėlynos spalvos rodo neigiamas greičio komponentės  $u_3$  reikšmes, susijusias su atgaline tĕkme. Be to, reikia paminėti, kad nagrinėjamu laiku atgalinės tĕkmĕs greičio dydis ( $-0,056$  m/s) buvo šiek tiek didesnis nei didžiausioji ištekiančios kraujo tĕkmĕs vertė ( $0,044$  m/s).

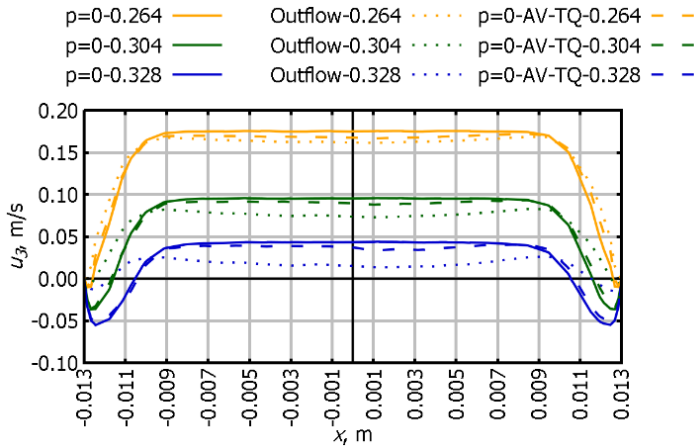


**3.13 pav.** Greičio komponentės  $u_3$  pasiskirstymas ištekėjime, tĕkmĕs pulso pabaigoje, kai  $t = 0,328$  s

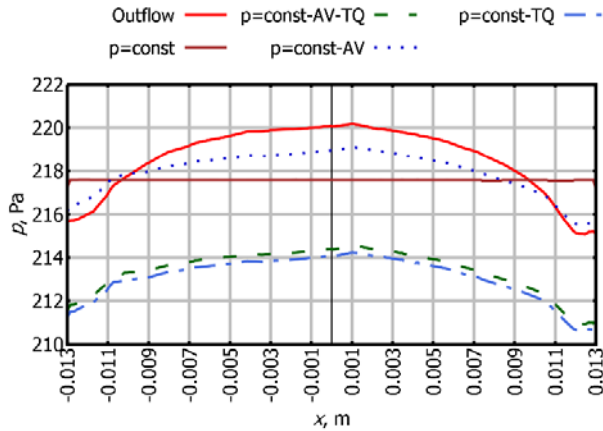
**Fig. 3.13.** Distribution of the velocity component  $u_3$  over the outlet at the end of the flow pulse, when  $t = 0.328$  s

3.14 paveiksle pateikiamas greičio komponentės profilis ištekėjimo pjūvyje, esant įvairioms kraštinėms sąlygoms. Kreivės  $p = 0-0,264$ , „Outflow-0.264“ ir  $p = 0-AV-TQ-0,264$  rodo greičio komponentės  $u_3$  vertes ištekėjimo angos pjūvyje, kai  $t = 0,264$  s. Šios vertės gaunamos atitinkamai naudojant nulinio slėgio kraštinę sąlygą ( $p = 0$ ), kuri apibrėžiama Neumano sąlyga greičio vektoriui (2.25) ir Dirichlė kraštine sąlyga slėgiui (2.26), laisvo ištekėjimo kraštinę sąlygą (*Outflow*), kuri daro mažiausią poveikį atgalinei tĕkmei ir leidžia susidarantiems sukuriams netrikdomai formuotis visoje uždavinio srityje (2.25) ir nulinio slėgio kraštinę sąlygą su įjungtomis vidutinio slėgio ir debito tvermės pataisomis ( $p = 0-AV-TQ$ ) (2.27). Atitinkamos kreivės žymi  $u_3$  reikšmes laiko momentais  $t = 0,304$  s ir  $t = 0,328$  s. Pirmą kartą labai maža atgalinė tĕkmĕ buvo pastebėta, kai  $t = 0,264$  s, o reikšminga atgalinė tĕkmĕ užfiksuota pulso bangos pabaigoje, kai  $t = 0,328$  s. Galima aiškiai matyti, kad atgalinė tĕkmĕ priklauso nuo pritaikytų kraštinių sąlygų. Dėl laisvo ištekėjimo kraštinės sąlygos susidarė daug mažesnė atgalinė tĕkmĕ nei

naudojant nulinio slėgio kraštinę sąlygą. Be to, nulinio slėgio kraštinė sąlyga su įjungtomis vidutinio slėgio ir debito tvermės pataisomis nežymiai sumažino atgalinę tėkmę, gautą taikant nulinio slėgio kraštinę sąlygą.



**3.14 pav.** Greičio komponentės  $u_3$  pasiskirstymas ištekėjimo pjūvyje  
**Fig. 3.14.** Distribution of the velocity component  $u_3$  over the diameter of the outlet



**3.15 pav.** Slėgio profilis ištekėjimo pjūvyje įvairių kraštinių sąlygų taikymo atvejais  
**Fig. 3.15.** Pressure distribution over the diameter of the outlet in the case of various boundary conditions

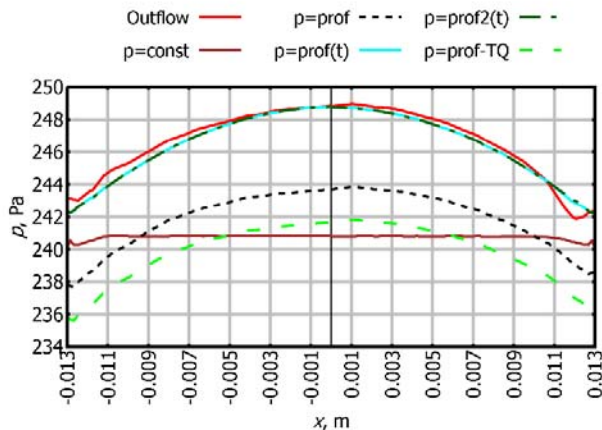
3.15 paveiksle pateikti slėgio pasiskirstymai ištekėjime įvairių kraštinių sąlygų taikymo atvejais, kai  $t = 0,224$  s. Kreivės „Outflow“,  $p = \text{const}$ ,  $p = \text{const-AV}$ ,  $p =$



const-TQ ir  $p = \text{const-AV-TQ}$  reprezentuoja laisvo ištekėjimo kraštinę sąlygą, pastovaus slėgio kraštinę sąlygą, pastovaus slėgio kraštinę sąlygą su vidutinio slėgio pataisa, pastovaus slėgio kraštinę sąlygą su debito tvermės pataisa ir pastovaus slėgio kraštinę sąlygą su vidutinio slėgio bei debito tvermės pataisomis, atitinkamai.

Pastebėta, kad, taikant laisvo ištekėjimo kraštinę sąlygą „Outflow“, slėgis ištekėjime pasiskirsto pagal elipsinio paraboloido dėsnį. Pastovaus slėgio kraštinę sąlyga su vidutinio slėgio pataisa, kuri mažina bangų atspindėjimą, taip pat išlenkia slėgio profilį. Debito tvermės pataisa sumažino apskaičiuotą slėgį tam tikra reikšme, todėl buvo gautos mažesnės slėgio reikšmės, negu taikant kitas slėgio kraštines sąlygas.

Nagrinėjamu atveju kraujo tėkmei aortos vožtuve vertinti tinkamiausia yra laisvo ištekėjimo kraštinė sąlyga, reprezentuojama kreive „Outflow“. Tačiau taikant šią kraštinę sąlygą ir prasidėjus atgalinei tėkmei, sprendinys nuo  $t = 0,312$  s diverguoja. Akivaizdu, jog tokia kraštinė sąlyga tinkama iki tol, kol neprasideda atgalinė tėkmė. Taip kilo idėja, jog „siekiant išvengti sprendinio divergavimo, reikia koreguoti laisvo ištekėjimo kraštinę sąlygą „Outflow“, ją taikant iki to momento, kai susidaro atgalinė tėkmė iš aortos ir sprendinys pradeda diverguoti. Tokiu atveju ištekėjimo kraštinė sąlyga buvo pakeista į pasiūlytą kraštinę sąlygą, taip išvengiant skaitinio sprendinio divergavimo. Pradedant formuoti atgalinei tėkmei, ištekėjime apskaičiuotos slėgio reikšmės aproksimuotos pagal paraboloido formulę (2.28), o toliau skaičiuojama su bendriausia Dirichlė tipo kraštine sąlyga slėgiui (2.29).

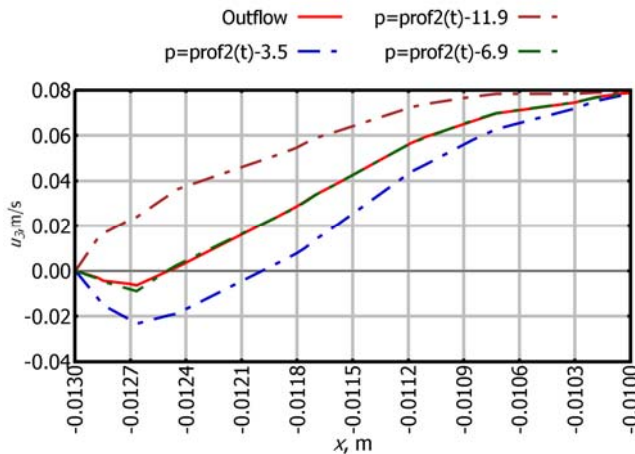


**3.16 pav.** Slėgio profilis ištekėjimo pjūvyje pasiūlytos kraštinės sąlygos taikymo atvejais  
**Fig. 3.16.** Pressure distribution on the outlet in the case of the proposed boundary conditions

3.16 paveiksle pavaizduoti slėgio profiliai pasiūlytos kraštinės sąlygos taikymo atvejais, kai  $t = 0,328$  s. Kreivės „Outflow“,  $p = \text{const}$ ,  $p = \text{prof}$  ir  $p = \text{prof-TQ}$  reprezentuoja slėgio rezultatus, gautus taikant laisvo ištekėjimo kraštinę sąlygą, pastovaus slėgio kraštinę sąlygą, pasiūlytą slėgio kraštinę sąlygą, kai slėgis nekinta laike, ir pasiūlytą slėgio kraštinę sąlygą su debito korekcija, atitinkamai.

Nagrinėjamu laiko momentu skaitinis sprendinys, gautas taikant laisvo ištekėjimo kraštinę sąlygą, divergavo, todėl ir slėgio profilis ištekėjime turi osciliacinį pobūdį. Visų kitų slėgio kraštinių sąlygų taikymo atvejais slėgis nekinta laike, todėl ir apskaičiuotos slėgio reikšmės mažesnės negu turėtų būti. Kreivės  $p = \text{prof}(t)$  ir  $p = \text{prof2}(t)$  reprezentuoja pasiūlytą slėgio kraštinę sąlygą, kurios reikšmės kinta laike pagal Windkessel modelį, pradėtą taikyti laiko momentais  $t = 0,3$  s ir  $t = 0,2$  s, atitinkamai. Kreivės  $p = \text{prof}(t)$  atveju skaičiavimai pradėti nuo  $t = 0,3048$  s ir modeliuotas trumpas laiko tarpas lygus  $0,0288$  s, bei kreivės  $p = \text{prof2}(t)$  atveju pradėta nuo  $t = 0,2008$  s ir modeliuotas daug ilgesnis laiko tarpas, lygus  $0,1328$  s. Kaip matome, slėgio kitimas laike sumodeliuotas gana tiksliai ir praktiškai nepriklauso nuo modeliuojamo laiko intervalo. Gauti rezultatai artimi laisvo ištekėjimo kraštinės sąlygos rezultatams, tik glodesni, nes skaitinis sprendinys konvergo ir nepasidavė osciliacijoms.

3.17 paveiksle pavaizduota atgalinės tėkmės priklausomybė nuo slėgio parabolinio paviršiaus išgaubtumo laiko momentu  $t = 0,304$  s. Kreivė „Outflow“ reprezentuoja skaitinį sprendinį, gautą taikant laisvo ištekėjimo kraštinę sąlygą.

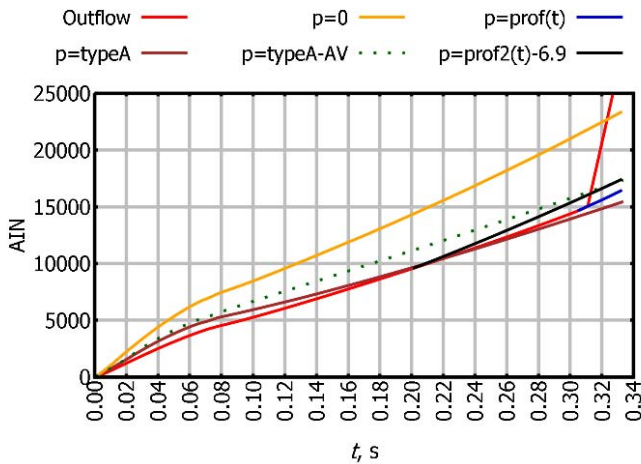


**3.17 pav.** Atgalinės tėkmės priklausomybė nuo ištekėjime apibrėžto slėgio paviršiaus išgaubtumo

**Fig.3.17.** Backflow dependency on the convexity of specified outlet pressure surface

Kreivės  $p = \text{prof2}(t)-3.5$ ,  $p = \text{prof2}(t)-6.9$  ir  $p = \text{prof2}(t)-11.9$  reprezentuoja kintančią laike pasiūlytą slėgio kraštinę sąlygą su skirtingu parabolinio paviršiaus išgaubtumu, kai vidutinis slėgio skirtumas aortos ašyje ir ties aortos sienelėmis lygus 3,5 Pa, 6,9 Pa ir 11,9 Pa atitinkamai. Čia slėgio reikšmės 3,5 Pa ir 11,9 Pa yra mažiausiojo ir didžiausiojo slėgio skirtumai ištekėjimo paviršiuje nagrinėjamaame laiko intervale. Slėgio skirtumas 6,9 Pa gautas iš skaitinio sprendinio, apskaičiuoto taikant laisvo ištekėjimo kraštinę sąlygą, ištekėjimo paviršiuje laiko momentu  $t = 0,304$  s. Kraštinė sąlyga pradėta taikyti nuo laiko momento  $t = 0,2$  s tam, kad būtų užfiksuota pastebima išgaubtumo įtaka. Slėgio skirtumas 6,9 Pa atitinka skaitinį sprendinį, gautą taikant laisvo ištekėjimo kraštinę sąlygą, laiko momentu  $t = 0,3$  s, todėl kreivės „Outflow“ ir  $p = \text{prof2}(t)-6.9$  beveik sutampa. Mažesnis slėgio paviršiaus išgaubtumas, atitinkantis 3,5 Pa, davė gerokai didesnę atgalinę tėkmę. Didėsnis slėgio paviršiaus išgaubtumas, atitinkantis 11,9 Pa, atgalinę tėkmę visiškai eliminavo. Vadinas, prireikus atgalinės tėkmės dydį galima kontroliuoti, keičiant pasiūlytos kraštinės sąlygos slėgio paviršiaus išgaubtumą.

3.18 paveiksle pateikta suminių iteracijų skaičių (AIN) kaita nagrinėjamo laiko intervalu. Suminių iteracijų skaičius parodo skaitinių sprendinių, gautų naudojant įvairias kraštines sąlygas, konvergavimo greitį.



**3.18 pav.** Skaitinių sprendinių konvergavimas  
**Fig. 3.18.** Convergence of numerical solutions

Kreivės „Outflow“,  $p = 0$ ,  $p = \text{typeA}$  ir  $p = \text{typeA-AV}$  reprezentuoja konvergavimą skaitinių sprendinių, gautų naudojant laisvo ištekėjimo kraštinę sąlygą, nulinio slėgio kraštinę sąlygą, A tipo Windkessel modelio slėgio kraštinę sąlygą

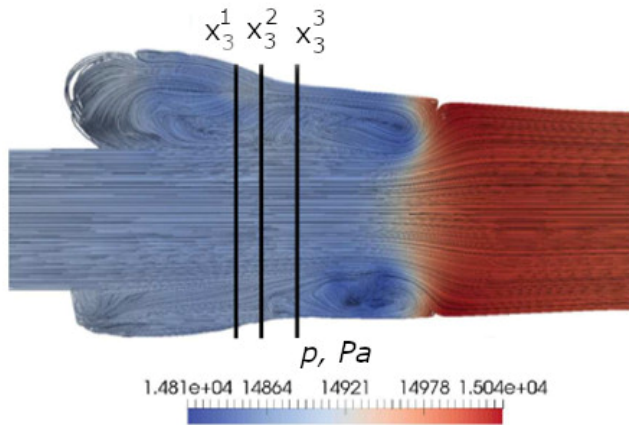
(2.27) ir A tipo Windkessel modelio slėgio kraštinę sąlygą su vidutinio slėgio pataisa atitinkamai. Likusios dvi kreivės  $p = \text{prof}(t)$  ir  $p = \text{prof}2(t)$  reprezentuoja laike kintančią pasiūlytą slėgio kraštinę sąlygą (2.27), pradėtą taikyti laiko momentais  $t = 0,304$  s ir  $t = 0,200$  s atitinkamai. Skaitinis sprendinys, gautas taikant laisvo ištekėjimo kraštinę sąlygą, divergavo nuo laiko momento  $t = 0,304$  s, todėl kreivėje „Outflow“ matomas staigus sukauptų suminių iteracijų skaičiaus padidėjimas. Skaitinis sprendinys, gautas taikant nulinio slėgio kraštinę sąlygą (kreivė  $p = 0$ ) reikalavo daugiausia iteracijų konvergavimui pasiekti. Greičiausias sprendinio konvergavimas pastebėtas naudojant A tipo Windkessel modelio slėgio kraštinę sąlygą (kreivė  $p = \text{typeA}$ ), o pritaikyta vidutinio slėgio pataisa smarkiai sumažino skaitinio sprendinio konvergavimo greitį (kreivė  $p = \text{typeA-AV}$ ). Ištirtos problemos atveju Windkessel modelis veikė kaip nuo laiko priklausanti slėgio konstanta, tačiau skaitinis sprendinys su pritaikytomis Windkessel modelio slėgio kraštinėmis sąlygomis konvergavo daug greičiau nei skaitinis sprendinys, gautas naudojant nulinę slėgio kraštinę sąlygą.

Laiko momentais  $t = 0,304$  s ir  $t = 0,200$  s pritaikius pasiūlytą kraštinę sąlygą vietoje laisvo ištekėjimo kraštinės sąlygos, skaitinio sprendinio divergavimo pavyko išvengti (kreivės  $p = \text{prof}(t)$  ir  $p = \text{prof}2(t)$ ), nors konvergavimo greitis sumažėjo ir suminių iteracijų skaičius pradėjo kisti panašiai kaip nulinio slėgio kraštinės sąlygos skaitinio sprendinio (kreivė  $p = 0$ ).

### 3.4. Turbulencijos modelių tyrimas

Darbe buvo nagrinėta turbulentinė tėkmė aortos vožtuve. Mažais Reinoldso skaičiais charakterizuojami turbulentiniai procesai pasireiškia greičiui mažėjant po sistolės piko, kai srovė išsiplečia už aortos vožtuvo lapelių (Bluestein, Einav 2000). Tokie atvejai ypač aktualūs aortos vožtuvo stenozės atvejais, kai vožtuve vyrauja didesni greičiai. Turbulencijos modelių testui pasirinktas t-V tinklas diskretizuotas 645 532 mazgais (1 969 995 baigtiniais tūriais), turintis 0,010 m bendrą pasienio sluoksnių storį (2.1 lentelė). Skaičiuojant naudojama susietoji (*Coupled*) schema ir įtekančio greičio priklausomybė nuo laiko (2.3 b pav.) per visą skilvelių sistolės ciklo intervalą, kurio trukmė – 0,3336 s, taikant laiko žingsnį  $dt = 0,0002$  s. Sistolės piko momentu Reinoldso skaičiaus reikšmė siekia 7103, kas atitinka mažais Reinoldso skaičiais charakterizuojamą turbulentinę tėkmę.

3.19 paveiksle pavaizduota sudėtinga 3D tėkmė aortos sinusų išilginiame pjūvyje, kai  $t = 0,165$  s. Tėkmės greičių laukas vizualizuotas srovės vamzdeliais, nuspalvintais pagal slėgio lauko reikšmes. Verta paminėti, kad laminariosios tėkmės greičio laukas  $t = 0,165$  s įgijo osciliacinį pobūdį dėl turbulentinių procesų po sistolės piko ( $t = 0,140$  s). Taigi, norint sušvelninti greičių lauko osciliacijas ir išvengti sprendinio divergavimo, taikomi turbulentiniai modeliai.



**3.19 pav.** Laminariosios tėkmės greičių laukas vizualizuotas tėkmės linijomis pagal slėgio lauką aortos sinusų išilginiame profilyje, kai  $t = 0,165$  s

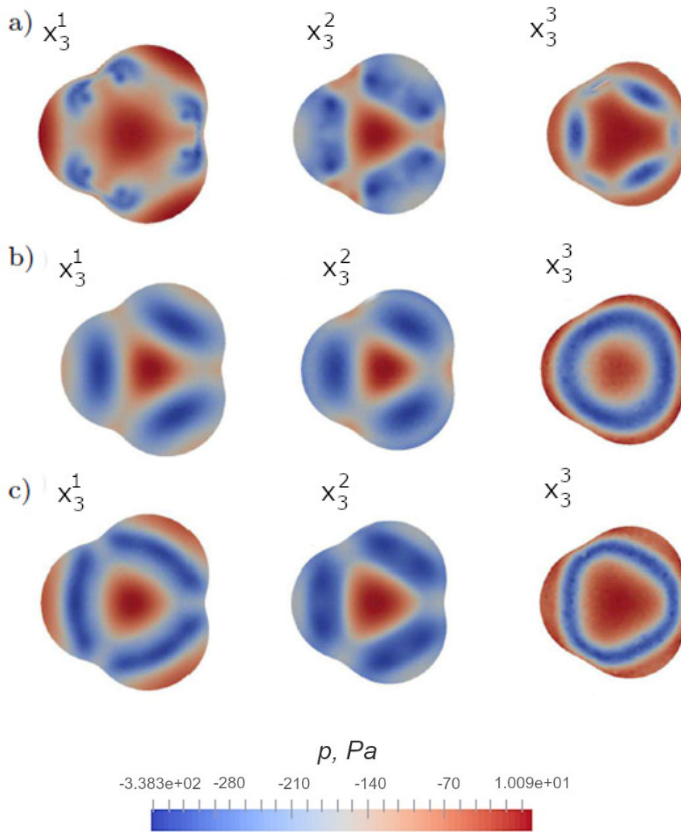
**Fig. 3.19.** The field of laminar flow velocities is visualized by streamlines according to the pressure field in the longitudinal profile of the aortic sinuses, at  $t = 0.165$  s

3.20 paveiksle pavaizduotas skaičiuojamojo slėgio pasiskirstymas  $t = 0,124$  s, kai kylantis kraujo tėkmės srautas aortos vožtuve artėja prie sistolės piko, aortos sinusų vertikaliuosiuose skerspjūviuose, kurių koordinatės  $x_3^1 = 0,021$  m,  $x_3^2 = 0,025$  m ir  $x_3^3 = 0,030$  m padėtyse. Skerspjūvių koordinatės aortos sinusų išilginiame profilyje pavaizduotos 3.19 paveiksle.

Spalvų žemėlapis vizualizuoja slėgio lauko pasiskirstymą, atskleidžiant sudėtingą srauto tėkmės pobūdį. Didesni sūkuriai susidaro aortos sinusuose, o mažesni – susidaro iškart už šių sinusų sankirtų. Paplitęs  $k-\varepsilon$  turbulencijos modelis, kuris labiausiai tinka dideliems Reinoldso skaičiams, labai stipriai nuglodina sūkurių lauką (3.20 b pav.). SST  $k-\omega$  modelio (3.20 c pav.) rezultatai yra artimesni laminariajam srautui (3.21 a pav.).

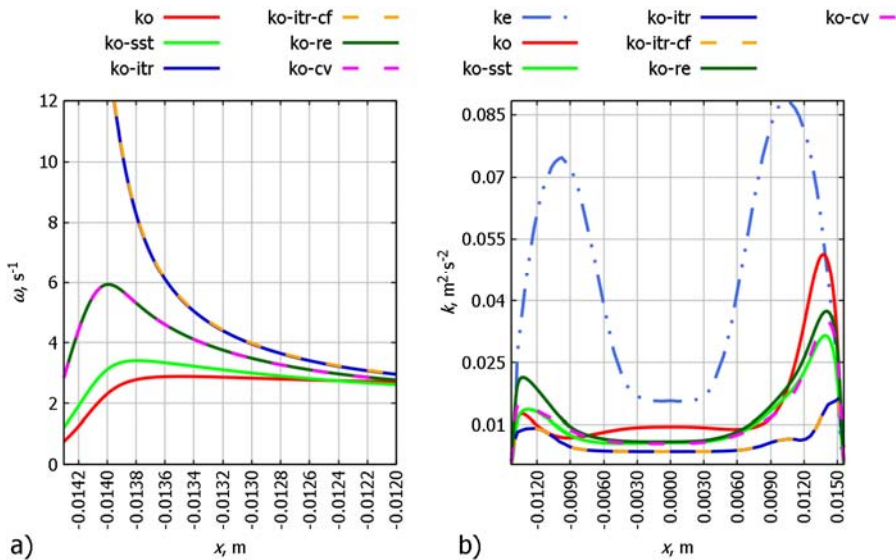
Pateikti slėgio laukai rodo, kad skirtingų turbulencijos modelių taikymas duoda skirtingus rezultatus (3.20 pav.), o pritaikytas turbulencijos modelis gali turėti didelę įtaką slėgio ir greičio rezultatams. Dėl šios priežasties, siekiant atlikti visą aortos vožtuvo hemodinaminę analizę, buvo detaliam iširti ir palyginti turbulentinių modelių rezultatai (3.21–3.25 pav.). Nagrinėjami turbulentiniai modeliai buvo detaliam aprašyti ir aptarti 2 skyriuje. Kalbant apie turbulentinius procesus, labiausiai paplitęs yra  $k-\varepsilon$  (3.21 pav. – kreivė „ke“) modelis (2.6–2.9), kuris dažniausiai naudojamas turbulentinėms tėkmėms tirti esant dideliems Reinoldso skaičiams tuo tarpu  $k-\omega$  (3.21 pav. – kreivė „ko“) turbulencijos modelis (2.10–2.15) dažniausiai naudojamas esant mažiems Reinoldso skaičiams ( $Re < 10\,000$ ). Kitas taip pat gerai žinomas modelis – šlyties įtempių transportavimą įvertinantis SST

$k-\omega$  modelis (3.21 pav.– kreivė „ko-sst“) (2.10–2.16). Be jau paminėtų literatūroje dažniausiai pasitaikančių turbulencijos modelių, disertacijoje dar buvo nagrinėtas SST  $k-\omega$  modelis, įvertinantis mažų Reinoldso skaičių korekciją ir reprezentuojamas kreive „ko-re“ (2.10–2.16) bei mažų Reinoldso skaičių korekciją ir tėkmės linijų kreivumą įvertinantis modelis „ko-cv“ (2.10-2.22). Kreivės „ko-itr“ ir „ko-itr-cf“ reiškia šlyties įtempių transportavimą įvertinantį  $k-\omega$  turbulencijos modelį su trūkiojo perėjimo lygtimi (2.17–2.20) ir tą patį modelį įvertinantį dar ir skersai tėkmę vykstantį perėjimą (2.21–2.22).



**3.20 pav.** Slėgio lauko pasiskirstymas aortos sinusų vertikaliuosiuose skerspjūviuose (koordinatės  $x_3^1 = 0,021$  m,  $x_3^2 = 0,025$  m ir  $x_3^3 = 0,030$  m), kai  $t = 0,124$  s: a) laminarusis srautas; b)  $k-\epsilon$  turbulencijos modelis; c) SST  $k-\omega$  turbulencijos modelis.

**Fig. 3.20.** Distribution of the pressure field in vertical cross-sections ( $x_3^1 = 0,021$  m,  $x_3^2 = 0,025$  m and  $x_3^3 = 0,030$  m) of the aortic sinuses at  $t = 0,124$  s: a) a laminar flow; b) the  $k-\epsilon$  turbulence model; c) the SST  $k-\omega$  turbulence model.

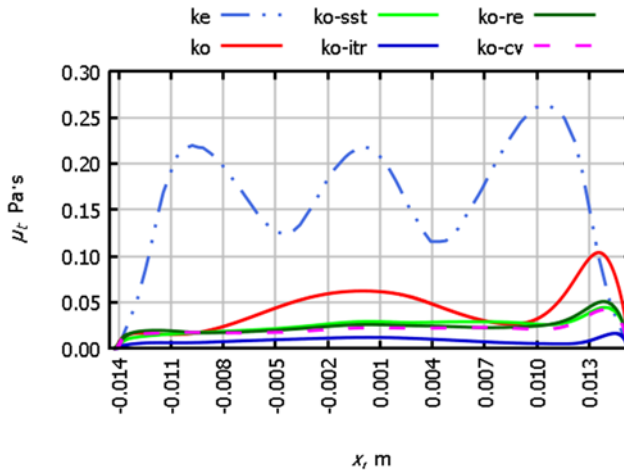


**3.21 pav.** Turbulentinių modelių kintamųjų palyginimas atkarpoje  $x_3 = 0,040\text{m}$ :  
 a) specifinis disipacijos greitis  $\omega$  prie sienelės laiko momentu  $t = 0,080\text{ s}$ ; b) turbulentinė kinetinė energija  $k$  laiko momentu  $t = 0,140\text{ s}$

**Fig. 3.21.** Distribution of turbulent variables on the line segment placed at  $x_3 = 0.040\text{ m}$ :  
 a) turbulent dissipation rate near at  $t=0.080\text{ s}$ ; b) turbulent kinetic energy at  $t=0.140\text{ s}$

3.21 paveiksle pateiktas šių turbulentiųjų modelių specifinio disipacijos greičio  $\omega$  ir turbulentinės kinetinės energijos  $k$  palyginimas atkarpoje, kurios koordinatė  $x_3 = 0,040\text{ m}$ . Verta pabrėžti, kad šlyties įtempių transportavimą įvertinantis  $k$ - $\omega$  turbulencijos modelis su trūkiojo perėjimo lygtimi generuoja didžiausias specifinio disipacijos greičio reikšmes prie sienelių ir mažiausias turbulentinės kinetinės energijos reikšmes visoje nagrinėjamoje atkarpoje. Pasienio sluoksnyje mažų Reynoldso skaičių korekciją įvertinantys modeliai, reprezentuojami kreivėmis „ko-re“ ir „ko-cv“, generuoja daug didesnes specifinio disipacijos greičio reikšmes, negu paprastesni  $k$ - $\omega$  turbulencijos modeliai.  $k$ - $\varepsilon$  modelis generuoja daug didesnes  $k$  reikšmes nei kiti nagrinėti turbulencijos modeliai, reprezentuojami kreivėmis „ko“ ir „ko-sst“. Kreivės „ko-itr“ ir „ko-itr-cf“ sutampa, todėl galima teigti, kad skersai tėkmę vykstantis perėjimas neturi pastebimos įtakos nagrinėjamu atveju.

3.22 paveiksle vaizduojamas turbulentinio klampio pasiskirstymas atkarpoje  $x_3 = 0,040\text{ m}$  laiko momentu  $t = 0,14\text{ s}$ .



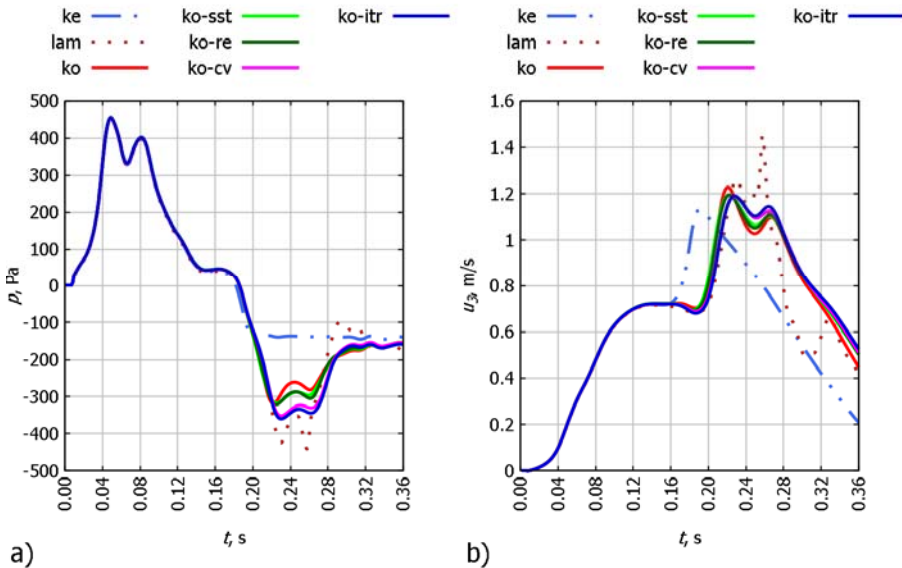
**3.22 pav.** Turbulentinio klampio pasiskirstymas atkarpoje  $x_3 = 0,040m$  laiko momentu  $t = 0,140 s$

**Fig. 3.22.** Distribution of turbulent viscosity values on a line segment ( $x_3 = 0,040 m$ ) in the case of the peak systole, when  $t = 0.140 s$

Pagrindinė tėkmė ir du dideli sūkuriai suformuoja tris didesnio turbulentinio klampio zonas. Kaip ir ankstesniame, taip ir 3.21 paveiksle  $k-\varepsilon$  modelis generuoja daug didesnes turbulentinės klamos reikšmes nei  $k-\omega$  turbulencijos modeliai. Tradicinio  $k-\omega$  modelio generuojamos reikšmės yra artimiausios  $k-\varepsilon$  modeliui, o šlyties įtempimų transportavimą įvertinantis  $k-\omega$  turbulencijos modelio su trūkiojo perėjimo lygtimi reikšmės pačios mažiausios, todėl jis mažiausiai glodina tėkmės sūkurius.

3.23 pav. pavaizduota nagrinėtų turbulencijos modelių įtaka slėgio ir  $u_3$  greičio komponentės priklausomybei nuo laiko centrinės aortos vožtuvo ašies taške su koordinatėmis  $x^1 = 0,000 m$ ,  $x^2 = 0,000 m$  ir  $x^3 = 0,070 m$ . Laminariojo modelio skaitinis sprendinys („lam“ kreivė), praėjus laiko tarpui po sistolės maksimumo (apytiksliai  $t = 0,24 s$ ), įgauna osciliacinį pobūdį.  $k-\varepsilon$  modelis (2.5–2.9) skirtas didelių Reinoldso skaičiaus reikšmių tėkmėms modeliuoti, todėl apskaičiuotos per didelės turbulentinio klampio reikšmės nuglodina daugumą smulkesnių sūkurių ir gaunama didesnė skaitinio sprendinio paklaida („k-e“ kreivė). Visų  $k-\omega$  turbulencijos modelių kreivės išsidėsto arčiau laminariosios tėkmės skaitinio sprendinio, bet praktiškai sutampa tarpusavyje.



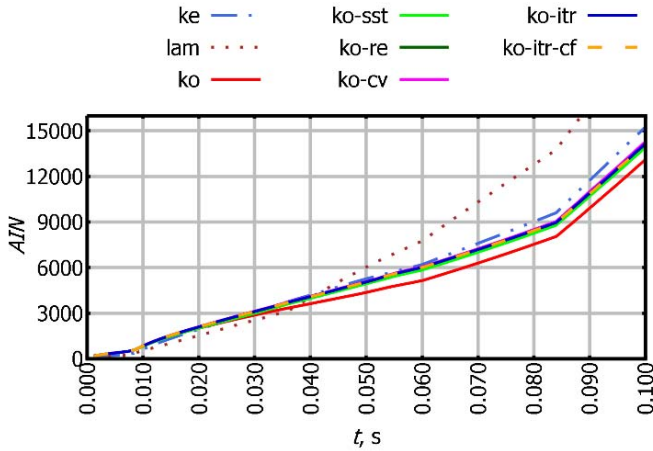


**3.23 pav.** Turbulencijos modelių įtaka kintamųjų priklausomybei nuo laiko centrinės aortos vožtuvo ašies taške su  $x_3$  koordinate 0,070 m: a) slėgio kitimas laike; b)  $u_3$  greičio komponentės kitimas laike.

**Fig. 3.23.** Influence of turbulence models on the time dependence of the variables at the point of the central aortic valve axis with the  $x_3$  coordinate 0.070 m: a) pressure; b)  $u_3$  velocity component

Šlyties įtempių transportavimą įvertinančio  $k-\omega$  turbulencijos modelio (2.13–2.16) skaitinis sprendinys tiksliau atspindi reiškinius tėkmėje, bet nuslopina osciliacijas ir pagerina sprendinio konvergavimą. Mažų Reinoldso skaičių korekcija (2.10–2.12) didelės įtakos skaitiniam sprendiniui neturėjo. Papildžius naudojama  $k-\omega$  modelį trūkiojo perėjimo lygtimi (2.17), skaitinis sprendinys dar tiksliau įvertino tėkmėje susidariusius sūkurius, bet skirtumas nebuvo ypatingai ženklus.

3.24 paveiksle pateiktas suminių iteracijų skaičiaus (AIN) kitimas nagrinėjamu laiko intervalu, kuris iliustruoja skaitinio sprendinio konvergavimo greitį. Pateikiama tik dalis laiko intervalo, kad kreivių skirtumai būtų akivaizdesni. Matyti, jog laminariosios tėkmės sprendinio konvergavimo greitis yra lėčiausias dėl mažų difuzijos narių reikšmių, atitinkančių didesnius Reinoldso skaičius. Be to, laminariosios tėkmės skaitinis sprendinys smarkiai išsiskiria nuo laiko momento  $t = 0,045$  s. Gana netikėta, tačiau  $k-\varepsilon$  turbulentinio modelio konvergavimo greitis buvo lėtesnis nei  $k-\omega$  modelių. Tradicinis  $k-\omega$  modelis (kreivė „ko“) leido pasiekti greičiausią konvergavimo greitį, o kiti  $k-\omega$  modeliai parodė taip pat panašų konvergavimo greitį. Nagrinėjamoje skalėje kreivės „ko-re“, „ko-itr“ ir „ko-itr-cf“ beveik sutapo, o tai rodo beveik identiškus konvergavimo greičius.

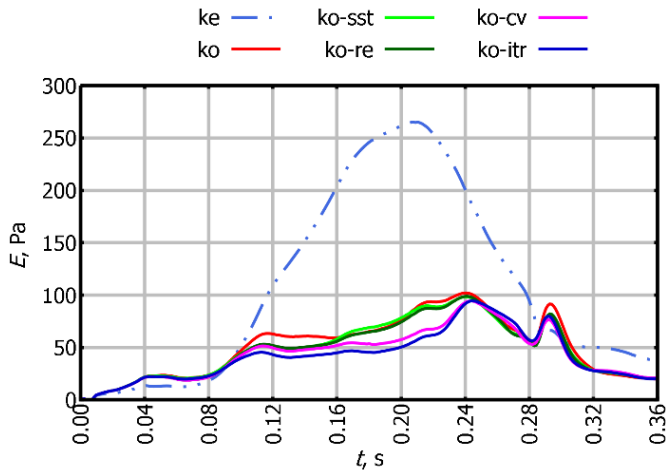


**3.24 pav.** Įvairių turbulencijos modelių sprendimų konvergavimas  
**Fig. 3.24.** Solution convergence of different turbulence models

Bendru atveju, neturint eksperimentinių matavimų, turbulencijos modelių skaitinius sprendinius galima palyginti su laminariojo modelio sprendiniu, apskaičiuotu labai tankiame tinkle, kuris laikomas labai tikslu (DNS sprendinys) (Ge et al. 2003; DeTullio et al. 2009; Dasi et al. 2007). Šis būdas turbulentinio modelio sprendinio tikslumui įvertinti panaudotas ir disertaciniame darbe. Laminariosios tėkmės modelio sprendinui apskaičiuoti naudotas tankus tinklas iš 1 366 500 mazgų ir 4 606 102 baigtinių tūrių (2.3 b pav.). 3.25 paveiksle pateiktas DNS ir turbulentių modelių slėgio sprendinių skirtumo, apskaičiuoto  $L_2$  normoje, kitimas laike. Kiekviena kreivė parodo skirtumą tarp laminariosios tėkmės slėgio  $p_{DNS}$  ir turbulentinės tėkmės slėgio  $p_{turb}$ , gauto naudojant tam tikrą turbulencijos modelį,  $L_2$  normoje, kuri įvertina vidutinius sprendinių skirtumus uždavinio apibrėžimo srityje:

$$E = \| p_{DNS} - p_{turb} \|_2 . \quad (3.2)$$

3.25 paveiksle akivaizdžiai matoma, kad didžiausias skirtumas yra tarp rezultatų, gautų naudojant  $k-\epsilon$  turbulencijos modelį, ir DNS sprendinio.



**3.25 pav.** DNS ir turbulentiniais modeliais apskaičiuoto slėgio  $L_2$  normoje skirtumai  
**Fig. 3.25.** Time evolution of pressure differences between the solutions of DNS and turbulent models in  $L_2$  norm

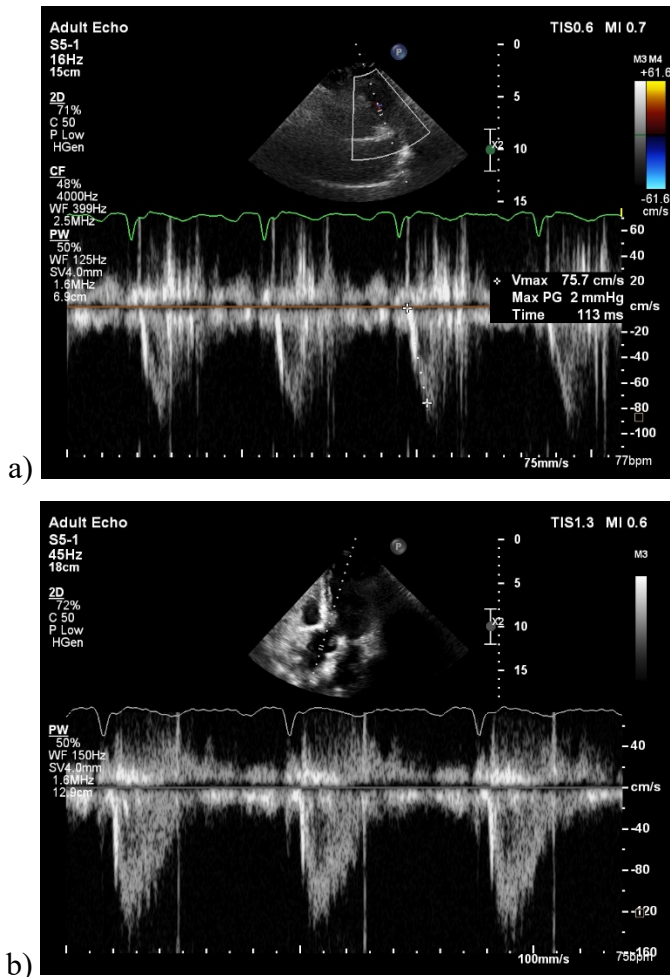
Visų  $k-\omega$  turbulencijos modelių gauti rezultatai yra artimesni DNS skaitiniam sprendiniui, nes jie skirti mažais Reinoldso skaičiais charakterizuojamoms turbulentinėms tėkmėms modeliuoti. Daugeliu atvejų SST  $k-\omega$  turbulencijos modelio su trūkiojo perėjimo lygtimi skirtumo reikšmės buvo mažiausios. Kreivė „ko-itr“ buvo identiška to paties modelio kreivei „ko-itr-cf“, kuri įvertino skersai tėkmę vykstantį perėjimą. Taigi galima daryti išvadą, kad nagrinėjamo aortos vožtuvo atveju skersai tėkmę vykstančio perėjimo įtaka nėra reikšminga.

### 3.5. Skaitinio sprendinio palyginimas su medicininių matavimų rezultatais

Klinikinėje praktikoje labai paplitę greičio matavimai, pagrįsti Doplerio efektu. Nors matavimų tikslumo ir kainos santykis yra geras klinikinės praktikos požiūriu, bet medicininės technikos galimybės yra ribotos atsižvelgiant į 3D skaitinio modelio tikslumą. Spalvinis tėkmės Doplerio žemėlapis (angl. *color flow Doppler map*) parodo tėkmės pobūdį fiksuotu laiko momentu, siedamas spalvas su atitinkamomis greičio reikšmėmis. Spalvų žemėlapis labiausiai tinka kokybiniam greičio laukų palyginimui, atsižvelgiant į mažiausiasias ir didžiausiasias reikšmes fiksuotu laiko momentu. Spektrinis Doplerio greičio kitimo laike grafikas (angl. *spectral Doppler time-velocity graph*) parodo greičio kitimą laikui bėgant fiksuotame tūryje. Matavimų tūris gali kisti nuo kelių milimetrų, taikant impulsinės bangos Doplerį (angl.

*pulsed-wave Doppler*), iki kelių centimetrų, taikant tolydžios bangos Doplerį (angl. *continuous-wave Doppler*). Kraujo tėkmė pro aortos vožtuvą pulsuoja ir labai kinta laike, o skaitinis sprendinys apskaičiuojamas konkrečiuose mazguose, todėl rezultatams validuoti natūraliausia taikyti impulsinės bangos Doplerio matavimus. Deja, tokie matavimai pasižymi rezoliucijos (angl. *aliasing*) paklaidomis ir pasklidusiomis reikšmėmis. Sudėtinga problema yra tiksliai susieti matavimų tūrio padėtį su konkrečiu 3D aortos vožtuvo tinklo mazgu, nes vožtuvo geometrija nustatoma darant kitus matavimus (3D atvaizdus), kitais laiko momentais. Be to, kiekvienas papildomas tyrimas reikalauja naujos aortos vožtuvo geometrijos rekonstrukcijos sukūrimo bei tikslų individualaus paciento medicininių matavimų (nes kiekvienu individualaus paciento atveju aortos vožtuve pratekančio kraujo greitis bus individualus), o tam reikia didelių laiko sąnaudų. Kadangi pagrindinis darbo tikslas – sudaryti skaitinį kraujo tėkmės aortos vožtuve modelį, tai buvo apsiribota vienu individualaus paciento validavimo tyrimu. Reikiamus matavimus galima atlikti magnetinio rezonanso įranga, bet jos taikymas yra ypač brangus ir klinikinėje praktikoje naudojamas tik nedidelėms sunkių pacientų grupėms. Alternatyvi kompiuterinės tomografijos medicininė įranga netinkama, atliekant matavimus aortos vožtuve dėl greito geometrijos ir tėkmės kitimo laike. Atsižvelgiant į ribotą disponuojamų duomenų kiekį, sudarytas skaitinis kraujo tėkmės aortos vožtuve modelis buvo validuotas vienu individualaus paciento tyrimu, pagrįstu impulsinės bangos Doplerio matavimais.

Doplerio efektu pagrįstu echoskopu sunkiai įmanoma tiksliai išmatuoti greitį aortos vožtuvo pjūviuose ir gauti greičio profilius prie sienelių, kurie nusakytų turbulentinės tėkmės sukūrimus. Tokia įranga galima nustatyti kraujo tėkmės greitį aortos vožtuvo centrinėje ašyje, t. y. kairiajame skilvelyje (prieš vožtuvą) ir aortoje (iš karto už vožtuvo) (Baumgartner et al. 2009). „Philips IE 33“ įranga atlikti greičio matavimai, pagrįsti Doplerio efektu, kurie reikalingi greičio kraštinei sąlygai apibrėžti įtekėjime ir skaičiavimams validuoti taške už aortos vožtuvo. 3.26 paveiksle pateikti individualaus paciento greičio matavimai pulsuojančiosios bangos pagrindu. 3.26 a paveiksle matavimai atlikti kairiajame skilvelyje prieš aortos vožtuvą. Išmatuotas greičio bangos pulsas apibrėžtas kaip kraštinė Dirichlė tipo kraštinė sąlyga greičiui, kuri kinta laike. 3.26 b paveiksle matavimai atlikti už aortos vožtuvo, todėl gautos didesnės greičių reikšmės. Tokie matavimai naujami greičių lauko skaičiavimams validuoti.

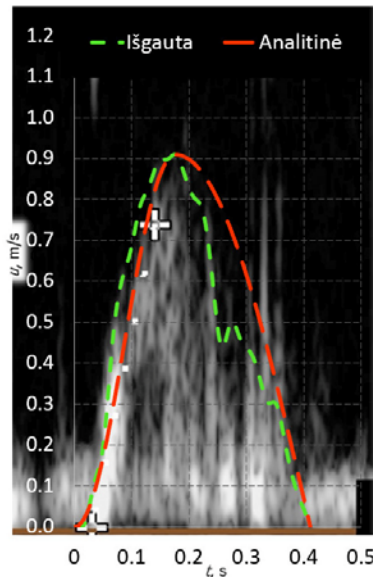


**3.26 pav.** Greičio matavimai pagrįsti Doplerio efektu (impulsinė banga): a) matavimai kairiajame skilvelyje; b) matavimai aortoje  
**Fig. 3.26.** Velocity measurements based on the Doppler effect (pulsating wave): a) measurements in the left ventricle; b) measurements in the aorta

Kraujo tėkmės greitis kairiojo skilvelio išstūmimo trakte (LVOT) (3.26 a pav.) ir aortoje (3.26 b pav.) nustatomi pagal Amerikos echokardiografijos draugijos rekomendacijas: didžiausias greitis matuojamas ties išoriniu tamsaus fono kraštu (Baumgartner et al. 2009). Smulkūs pavieniai linijiniai signalai kreivės smailėje ir stambūs pasikartojantys linijiniai signalai bangos pabaigoje (0,3–0,4 s intervale) atsiranda dėl tranzitinio laiko efekto, todėl jie neturėtų būti įtraukiami į matavimus. Taip pat reikia atkreipti dėmesį į tai, jog greičio reikšmės gali

būti „sulietos“, nes atvaizdo rezoliucija yra daug žemesnė nei laiko skalės tikslumas skaitiniame modelyje.

Iš atvaizdo išgaunamos greičio pasiskirstymo kreivės (3.27 pav. kreivė „Išgauta“), tikslumas nėra didelis ir tokios kreivės išvestinės laike osciliuoja dideliame reikšmių intervale, kas labai apsunkina skaitinio uždavinio sprendimą. Dėl šios priežasties darbe pritaikytos analizinės išraiškos (2.24) greičių kreivei parametrizuoti įtekėjime (3.27 pav. kreivė „Analitinė“).

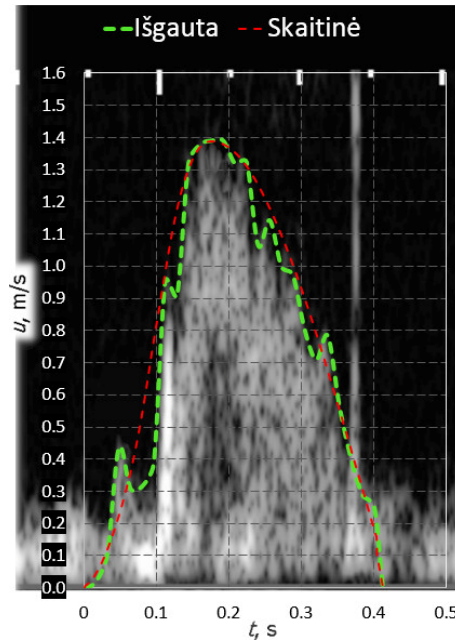


**3.27 pav.** Kraujo tėkmės greičio nustatymas kairiojo skilvelio išstūmimo trakte (įtekėjimo kraštinė sąlyga): iš natūrinių matavimų išgauta kreivė („Išgauta“) ir jos parametrinė aproksimacija („Analitinė“)

**Fig. 3.27.** Determination of blood flow rate in the left ventricular ejection tract (inlet boundary condition): the curve obtained from medical measurements (“Išgauta”) and its parametric approximation (“Analitinė”)

Kairiojo skilvelio išstūmimo trakte (3.27 pav.) individualaus paciento didžiausioji greičio reikšmė, gauta iš Doplerio atvaizdų, lygi 0,909 m/s; didžiausiosios greičio reikšmės laiko momentas  $T_1 = 0,176$  s ir nagrinėjamo laiko intervalo ilgis  $T_2 = 0,412$  s. Nors greičio reikšmes aproksimuojant analitinėmis išraiškomis taip pat neišvengiamos paklaidos, tačiau konverguojantį sprendinį apskaičiuoti daug lengviau, o didžiausioji greičių lauko reikšmė išlieka nepakitusi (3.27 kreivė „Analitinė“). Sistolės piko momentu Reinoldso skaičiaus reikšmė siekia 6218, o tai atitinka mažais Reinoldso skaičiais charakterizuojamą turbulentinę tėkmę.

Pritaikius įtekėjimo kraštines sąlygas (2.24), gauti skaitiniai kraujo tėkmės greičiai palyginti su klinikinių individualaus paciento kraujo greičių matavimų echoskopu rezultatais, pagrįstais Doplerio efektu (3.28 pav.).



**3.28 pav.** Kraujo tėkmės greičio nustatymas aortos pjūvyje P2: iš natūrinių matavimų išgauta kreivė („Išgauta“) ir skaitinis sprendinys („Skaitinė“)

**Fig. 3.28.** Determination of blood velocity in the aortic valve (plain P2): the curve obtained from measurements (“Išgauta”) and numerical solution (“Skaitinė”)

Natūriniais matavimais gauta didžiausioji greičio reikšmė lygi  $v_{\max} = 1,390$  m/s, o skaitinis sprendinys  $v_{\max} = 1,386$  m/s, kas sudaro 0,32 % paklaidą. Visame laiko intervale reguliariais intervalais parinktuose taškuose natūrinių greičio matavimų ir skaitinio sprendinio vidutinis skirtumas lygus 0,082 m/s, kas sudaro 5,9 % nuo didžiausiosios greičio reikšmės. Didžiausios paklaidos pastebėtos laiko intervalo pradžioje ( $t = [0,0; 0,128$  s]), kurių vidurkis siekė 7,7 % nuo didžiausiosios greičio reikšmės. Paklaidų, gautų modeliuojant krintančio greičio reikšmes laiko intervalo pabaigoje ( $t = [0,240; 0,412$  s]), vidurkis siekė 6,5 % nuo didžiausiosios greičio reikšmės. Galima apibendrinti, kad sudarytas skaitinis modelis tiksliai nusako didžiausiąją greičių lauko reikšmę sistolės pike, ko ir buvo siekta. Deja, tiek sistolės pradžioje, tiek ir pabaigoje paklaidos yra gerokai didesnės, nes modelis nevertina aortos vožtuvo lapelių judesio ir visos jų sąveikos su kraujo tėkme. Skaičiavimų ir kiekybinio palyginimo tikslumą neabejotinai mažina

matavimų įrangos paklaidos bei 3D skaitinio modelio ir matavimų rezultatų sąsajos problemos, kurios buvo aptartos šio poskyrio pradžioje.

### 3.6. Trečiojo skyriaus išvados

Išanalizavus skaitinių eksperimentų rezultatus, padarytos išvados:

1. 32 branduoliais skaičiuojant kraujo tėkmės aortos vožtuve uždavinį su 1,13 mln. baigtinių tūrių tinklu, pavyko pasiekti didelį lygiagrečiųjų skaičiavimų pagreitėjimą, lygų 31,9 ir 30,1 PISO ir susietojo algoritmų atvejais, atitinkamai.
2. Baigtinių tūrių tinklų tankumo įtakos skaitiniam sprendiniui tyrimo metu nustatyta, kad turbulentinio modelio atveju skaitiniai sprendiniai, gauti taikant 1 561 634 ir 1 279 246 baigtinių tūrių tinklus, grafiškai sutapo, o rečiausio tinklo, sudaryto iš 420 476 baigtinių tūrių, skaitinis sprendinys skyrėsi nuo kitų. Tinklų sutankinimo pasienio sluoksnyje įtaka rezultatams vožtuvo centrinėje ašyje neužfiksuota, tačiau siauroje pasienio zonoje sukuriai modeliuojami detaliau.
3. Nustatyta, kad nagrinėtame intervale [ $dt = 0,0002$ ;  $dt = 0,0008$ ] s laiko žingsnio pasirinkimas didelės įtakos skaitiniam sprendiniui neturėjo, todėl mažiausią laiko žingsnį 0,0002 s privaloma naudoti tik kartu su pasienio sluoksnyje sutankintais tinklais turbulentinėms tėkmėms modeliuoti.
4. Ištyrus ištekėjimo kraštinių sąlygų įtaką atgalinei tėkmei į aortos vožtuvą ir skaitinio sprendinio konvergavimui parodyta, kad, taikant laisvo ištekėjimo kraštinę sąlygą, kuri teoriškai laikoma tinkamiausia nežinomo greičio ir slėgio pasiskirstymo ištekėjime atvejais, sprendinys nekonverguoja sistolės pabaigoje. Taikant laisvo ištekėjimo kraštinę sąlygą, dėl susidarančio išgaubto slėgio paviršiaus apskaičiuojama mažesnė atgalinė tėkmė negu nulinio slėgio kraštinės sąlygos atveju. Laisvo ištekėjimo kraštinę sąlygą pakeitus pasiūlyta kraštinė sąlyga su apibrėžiamu išgaubtu slėgio paviršiumi, išvengta skaitinio sprendinio osciliacijų ir divergavimo. Atgalinės tėkmės dydį galima kontroliuoti, keičiant pasiūlytos kraštinės sąlygos slėgio paviršiaus išgaubtumą.
5. Turbulencijos modelių skaitiniai sprendiniai palyginti su laminariojo modelio sprendiniu, apskaičiuotu tankiame baigtinių tūrių tinkle (DNS sprendiniu). Taikant populiariausią  $k-\epsilon$  modelį, apskaičiuotos didžiausios turbulentinio klampio reikšmės nugludina daugumą smulkesnių sūkurių. Taikant įvairius  $k-\omega$  turbulencijos modelius, gaunamos mažesnės turbulentinio klampio reikšmės, o skaitiniai sprendiniai yra artimesni



DNS sprendiniui. Šlyties įtempių transportavimą, mažų Reinoldso skaičių korekciją ir tėkmės linijų kreivumą įvertinančio  $k-\omega$  turbulencijos modelio su trūkiojo perėjimo lygtimi rezultatai buvo artimiausi DNS sprendiniui.

6. Skaitinio sprendinio palyginimas su medicininių matavimų rezultatais parodo, kad sudarytas skaitinis modelis tiksliai nusako didžiausiąją greičių lauko reikšmę sistolėje. Išmatuoto ir apskaičiuoto greičio skirtumas siekia tik 0,32 % didžiausiosios greičio reikšmės. Deja, visame nagrinėtame laiko intervale išmatuotų ir apskaičiuotų greičių skirtumų modulių vidurkis sudaro 5,9 % didžiausiosios greičio reikšmės. Tiek sistolės pradžioje, tiek pabaigoje paklaidos yra gerokai didesnės, nes modelis nevertina aortos vožtuvo lapelių judesio ir visos jų sąveikos su kraujo tėkme.



---

## Bendrosios išvados

1. Atlikus literatūros apžvalgą, analizę ir tėkmės aortos vožtuve modelių skaitinių parametru tyrimą, nustatyta, kad tėkmės aortos vožtuve sprendiniai, pagrįsti laminariosios tėkmės modeliu, turi osciliacinį pobūdį ir dažnai diverguoja sistolės pabaigoje dėl susidariusios atgalinės tėkmės.
2. Skaičiavimų metu laisvo ištekėjimo iš aortos vožtuvo kraštine sąlyga pakeitus pasiūlyta ištekėjimo kraštine sąlyga, pagrįsta elipsinio paraboloido formos išgaubtu slėgio paviršiumi, skaitinio sprendinio konvergavimas prailgintas iki nagrinėjamo laiko intervalo pabaigos. Parinkus slėgio paviršiaus išgaubtumą, buvo gauta tokia pati atgalinė tėkmė, kaip ir taikant laisvo ištekėjimo kraštine sąlyga.
3. Aortos vožtuve vyraujančių, mažais Reinoldso skaičiais charakterizuojamų, turbulentinių tėkmių atveju atliktas įvairių  $k-\omega$  ir  $k-\epsilon$  turbulencijos modelių rezultatų palyginimas su DNS sprendiniu. Nustatyta, kad parinktas šlyties įtempių transportavimą įvertinantis  $k-\omega$  turbulencijos modelis su trūkiojo perėjimo lygtimi sumažina Navjė ir Stokso lygčių skaitinio sprendinio osciliacijas bei pagreitina konvergavimą, o parinkto turbulencijos modelio ir DNS sprendinių vidutinis skirtumas  $L_2$  normoje yra mažiausias.

4. Skaitinio sprendinio palyginimas su medicininės echokardiografijos įrangos, pagrįstos Doplerio efektu, matavimais parodė, kad sistolės piko taške greičio reikšmių skirtumas sudarė tik 0,32 % išmatuotos greičio reikšmės. Visame nagrinėtame laiko intervale išmatuotų ir apskaičiuotų greičių skirtumų modulių vidurkis sudarė 5,9 % didžiausios greičio reikšmės sistolėje. Vadinasi, sudarytas skaitinis modelis tiksliai nusako didžiausią greičių lauko reikšmę sistolėje.

---

## Literatūra ir šaltiniai

Acheson D. J. 1990. *Elementary fluid dynamics*. Oxford University Press. URL: <https://www.waterstonesmarketplace.com/Elementary-Fluid-Dynamics-D-J-Acheson/book/1997496>.

Aftab S. M. A., Mohd Rafie A. S., Razak N. A., Ahmad K. A. 2016. Turbulence model selection for low Reynolds number flows Wang, X. D., sud., *PLOS ONE* 11(4): e0153755. DOI: 10.1371/journal.pone.0153755.

Aggarwal A., Aguilar V. S., Lee C. H., Ferrari G., Gorman J. H., Gorman R. C., Sacks M. S. 2013. Patient-specific modeling of heart valves: from image to simulation *Center for turbulence research*. DOI: 10.1007/978-3-642-38899-6\_17.

Anastasiou D., Spyrogiani S., Paras S. V 2010. Experimental study of pulsatile blood flow in micro channels, *7th european Congress of Chemical Engineering ECCE-7* URL: <http://hydra.cheng.auth.gr/philon/site/sdocs/paper-767.pdf>.

Annerel S., Claessens T., Degroote J., Segers P., Vierendeels J. 2014. Validation of a numerical FSI simulation of an aortic BMHV by in vitro PIV experiments, *Medical engineering & physics* 36(8): 1014–1023. DOI: 10.1016/j.medengphy.2014.05.004.

ANSYS 2015. *ANSYS: Engineering simulation and 3D design software*. DOI: 10.1016/B978-0-12-373932-2.00084-3.

ANSYS 2016. *ANSYS Fluent theory guide 15.0* Thecho, Canonsburg. URL: <https://studentcommunity.ansys.com/thread/ansys-fluent-2020-r1-theory-guide-user-guide-full-pdf/>.

Apel J., Paul R., Klaus S., Siess T., Reul H. 2001. Assessment of hemolysis related quantities in a microaxial blood pump by computational fluid dynamics, *Artificial Organs* 25(5): 341–347. DOI: 10.1046/j.1525-1594.2001.025005341.x.

Astorino M., Gerbeau J. F., Pantz O., Traoré K. F. 2009. Fluid-structure interaction and multi-body contact: Application to aortic valves, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 198(45–46): 3603–3612. DOI: 10.1016/j.cma.2008.09.012.

Bach D. s. 2010. Echo/Doppler evaluation of hemodynamics after aortic valve replacement, *JACC: Cardiovascular Imaging* 3(3): 296–304. DOI: 10.1016/j.jcmg.2009.11.009.

Bartel T., Müller S. 2013. Preserved ejection fraction can accompany low gradient severe aortic stenosis: impact of pathophysiology on diagnostic imaging., *European Heart Journal* 34(25): 1862–3. DOI: 10.1093/eurheartj/eh157.

Basri A. A., Zuber M., Basri E. I., Zakaria M. S., Aziz A. F. A., Tamagawa M., Ahmad K. A. 2020. Fluid structure interaction on paravalvular leakage of transcatheter aortic valve implantation related to aortic stenosis: a patient-specific case, *Computational and Mathematical Methods in Medicine* 2020: 1–22. DOI: 10.1155/2020/9163085.

Basri A. A., Zuber M., Zakaria M. S., Basri E. I., Aziz A. F. A., Ali R. M., Tamagawa M., Ahmad K. A. 2016. The hemodynamic effects of paravalvular leakage using fluid structure interaction; Transcatheter aortic valve implantation patient, *Journal of Medical Imaging and Health Informatics* 6(6): 1513–1518. DOI: 10.1166/jmihi.2016.1840.

Baumgartner H., Hung J., Bermejo J., Chambers J. B., Evangelista A., Griffin B. P., Iung B., Otto C. M., Pellikka P. A., Quiñones M. 2009. Echocardiographic assessment of valve stenosis: EAE/ASE recommendations for clinical practice, *J Am Soc Echocardiogr* 22(1): 1–23. DOI: 10.1016/j.echo.2008.11.029.

Bavo A. M., Rocatello G., Iannaccone F., Degroote J., Vierendeels J., Segers P. 2016. Fluid-structure interaction simulation of prosthetic aortic valves: comparison between immersed boundary and arbitrary Lagrangian-Eulerian techniques for the mesh representation, *PLoS ONE* 11(4): 17. DOI: 10.1371/journal.pone.0154517.

Bazilevs Y., Gohean J. R., Hughes T. J. R., Moser R. D., Zhang Y. 2009. Patient-specific isogeometric fluid-structure interaction analysis of thoracic aortic blood flow due to implantation of the Jarvik 2000 left ventricular assist device, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 198: 3534–3550. DOI: 10.1016/j.cma.2009.04.015.

Bianchi M., Marom G., Ghosh R. P., Rotman O. M., Parikh P., Gruberg L., Bluestein D. 2019. Patient-specific simulation of transcatheter aortic valve replacement: impact of deployment options on paravalvular leakage, *Biomechanics and Modeling in Mechanobiology* 18(2): 435–451. DOI: 10.1007/s10237-018-1094-8.

Biesevičienė M. 2017. Kylančios aortos dilatacija: aortos biomechanikos ir histologinių rodiklių įvertinimas ir jų tarpusavio sąsajų nustatymas *Daktaro disertacija. Biomedicinos mokslai, medicina (06B)*. Kaunas: Lietuvos sveikatos mokslų universitetas Medicinos akademija.

Bluestein D., Einav S. 2000. Techniques in the Stability Analysis of Pulsatile Flow Through Heart Valves *Biomechanical Systems*. CRC Press. DOI:

10.1201/9781420049534.CH-04.

Bluestein D., Li Y. M., Krukenkamp I. B. 2002. Free emboli formation in the wake of bi-leaflet mechanical heart valves and the effects of implantation techniques, *Journal of Biomechanics* 35(12): 1533–1540. DOI: 10.1016/S0021-9290(02)00093-3.

Bluestein D., Rambod E., Gharib M. 2000. Vortex shedding as a mechanism for free emboli formation in mechanical heart valves, *Journal of biomechanical engineering* 122(2): 125–134. DOI: 10.1115/1.429634.

Borazjani I. 2013. Fluid–structure interaction, immersed boundary-finite element method simulations of bio-prosthetic heart valves, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 257: 103–116. DOI: 10.1016/j.cma.2013.01.010.

Borazjani I., Ge L., Sotiropoulos F. 2008. Curvilinear immersed boundary method for simulating fluid structure interaction with complex 3D rigid bodies, *Journal of Computational Physics* 227(16): 7587–7620. DOI: 10.1016/j.jcp.2008.04.028.

Borazjani I., Ge L., Sotiropoulos F. 2010. High-resolution fluid-structure interaction simulations of flow through a bi-leaflet mechanical heart valve in an anatomic aorta, *Annals of Biomedical Engineering* 38(2): 326–344. DOI: 10.1007/s10439-009-9807-x.

Brown S., Wang J., Ho H., Tullis S. 2013. Numeric simulation of fluid-structure interaction in the aortic arch, *Computational Biomechanics for Medicine*, New York, NY: Springer New York. DOI: 10.1007/978-1-4614-6351-1\_3.

Burattini R., Fogliardi R., Campbell K. B. 1994. Lumped model of terminal aortic impedance in the dog, *Annals of Biomedical Engineering* 22(4): 381–391. DOI: 10.1007/BF02368244.

Casas B., Lantz J., Viola F., Cedersund G., Bolger A. F., Carlhäll C. J., Karlsson M., Ebbens T. 2017. Bridging the gap between measurements and modelling: a cardiovascular functional avatar, *Scientific Reports* 7(1): 1–15. DOI: 10.1038/s41598-017-06339-0.

Chandra S., Rajamannan N. M., Sucusky P. 2012. Computational assessment of bicuspid aortic valve wall-shear stress: implications for calcific aortic valve disease., *Biomech Model Mechanobiol* 11(7): 1085–96. DOI: 10.1007/s10237-012-0375-x.

Cho Y. I., Kensey K. R. 1991. Effects of the non-Newtonian viscosity of blood on flows in a diseased arterial vessel. Part 1: Steady flows., *Biorheology* 28 (February 1991): 241–262.

Chorin A. J. 1968. Numerical solution of the Navier-Stokes equations, *Mathematics of computation* 22(104): 745–762. DOI: 10.1090/S0025-5718-1968-0242392-2.

Claiborne T. E., Sheriff J., Kuetting M., Steinseifer U., Slepian M. J., Bluestein D. 2013. In vitro evaluation of a novel hemodynamically optimized trileaflet polymeric prosthetic heart valve, *Journal of Biomechanical Engineering* 135(2). DOI: 10.1115/1.4023235.

Culpo M. 2011. Current bottlenecks in the scalability of OpenFOAM on massively parallel clusters, *PRACE Partnership for Advanced Computing in Europe*: 1–13. URL: [http://www.prace-ri.eu/IMG/pdf/Current\\_Bottlenecks\\_in\\_the\\_Scalability\\_of\\_OpenFOAM\\_on\\_Massively\\_Parallel\\_Clusters-2.pdf%5Cnpapers3://publication/uuid/55A0715F-3674-45DE-9A64-D3F9CE41031A](http://www.prace-ri.eu/IMG/pdf/Current_Bottlenecks_in_the_Scalability_of_OpenFOAM_on_Massively_Parallel_Clusters-2.pdf%5Cnpapers3://publication/uuid/55A0715F-3674-45DE-9A64-D3F9CE41031A).

Darwish M., Moukalled F. 2014. A fully coupled Navier-Stokes solver for fluid flow at

all speeds, *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals* 65(5): 410–444. DOI: 10.1080/10407790.2013.869102.

Dasi L. P., Ge L., Simon H. A., Sotiropoulos F., Yoganathan A. P. 2007. Vorticity dynamics of a bileaflet mechanical heart valve in an axisymmetric aorta, *Physics of Fluids* 19(6). DOI: 10.1063/1.2743261.

De Hart J., Peters G. W. M., Schreurs P. J. G., Baaijens F. P. T. 2000. A two-dimensional fluid-structure interaction model of the aortic valve, *Journal of biomechanics* 33: 1079–1088.

De Hart J. 2002. Fluid-Structure Interaction in the Aortic Heart Valve a three-dimensional computational analysis *Dissertation*. Universiteitsdrukkerij Technische Universiteit Eindhoven.

De Tullio M. D., Cristallo A., Balaras E., Verzicco R. 2009. Direct numerical simulation of the pulsatile flow through an aortic bileaflet mechanical heart valve, *Journal of Fluid Mechanics* 622: 259. DOI: 10.1017/S0022112008005156.

Dowling C., Bavo A. M., El Faquir N., Mortier P., de Jaegere P., De Backer O., Sondergaard L., Ruile P., Mylotte D., Mc Conkey H., Rajani R., Laborde J. C., Brecker S. J. 2019. Patient-specific computer simulation of transcatheter aortic valve implantation in bicuspid aortic valve morphology, *Heart, Lung and Circulation* 28: S261–S262. DOI: 10.1016/j.hlc.2019.06.299.

Esmaily Moghadam M., Bazilevs Y., Hsia T. Y., Vignon-Clementel I. E., Marsden A. L. 2011. A comparison of outlet boundary treatments for prevention of backflow divergence with relevance to blood flow simulations, *Computational Mechanics* 48(3): 277–291. DOI: 10.1007/s00466-011-0599-0.

Eymard R., Gallouët T., Herbin R. 2000. Finite volume methods, *Handbook of Numerical Analysis* 7: 713–1018. DOI: 10.1016/S1570-8659(00)07005-8.

Formaggia L., Moura A., Nobile F. 2007. On the stability of the coupling of 3D and 1D fluid-structure interaction models for blood flow simulations, *ESAIM: Mathematical Modelling and Numerical Analysis* 41(4): 743–769. DOI: 10.1051/m2an:2007039.

Frank O. 1990. The basic shape of the arterial pulse. First treatise: mathematical analysis, *Journal of molecular and cellular cardiology* 22(3): 255–77. DOI: 10.1016/0022-2828(90)91460-O.

Garcia D., Pibarot P., Durand L. G. 2005. Analytical modeling of the instantaneous pressure gradient across the aortic valve., *Journal of biomechanics* 38(6): 1303–11. DOI: 10.1016/j.jbiomech.2004.06.018.

Ge L., Leo H. L., Sotiropoulos F., Yoganathan A. P. 2005. Flow in a mechanical bileaflet heart valve at laminar and near-peak systole flow rates: CFD simulations and experiments, *Journal of Biomechanical Engineering* 127(5): 782. DOI: 10.1115/1.1993665.

Ge L., Jones S. C., Sotiropoulos F., Healy T. M., Yoganathan A. P. 2003. Numerical simulation of flow in mechanical heart valves: grid resolution and the assumption of flow symmetry, *Journal of biomechanical engineering* 125(5): 709–718. DOI: 10.1115/1.1614817.

Ghasemiasl R., Ostadhossein R., Javadi M. A., Hoseinzadeh S. 2018. Blood flow



simulation in an aorta with a mild coarctation using magnetic resonance angiography and finite volume method, *International Journal of Engineering, Transactions A: Basics* 31(4): 673–678. DOI: 10.5829/ije.2018.31.04a.20.

Goldstein S. A., Evangelista A., Abbara S., Arai A., Asch F. M., Badano L. P., Bolen M. A., Connolly H. M., Cuéllar-Calàbria H., Czerny M., Devereux R. B., Erbel R. A., Fattori R., Isselbacher E. M., Lindsay J. M., McCulloch M., Michelena H. I., Nienaber C. A., Oh J. K., Pepi M., Taylor A. J., Weinsaft J. W., Zamorano J. L., Dietz H., Eagle K., Elefteriades J., Jondeau G., Rousseau H., Schepens M. 2015. Multimodality imaging of diseases of the thoracic aorta in adults: From the American society of echocardiography and the european association of cardiovascular imaging: Endorsed by the society of cardiovascular computed tomography and society for cardiova, *Journal of the American Society of Echocardiography* 28(2): 119–182. DOI: 10.1016/j.echo.2014.11.015.

Gorji S., Seddighi M., Ariyaratne C., Vardy A. E., O'Donoghue T., Pokrajac D., He S. 2014. A comparative study of turbulence models in a transient channel flow, *Computers & Fluids* 89: 111–123. DOI: 10.1016/j.compfluid.2013.10.037.

Grbic S., Ionasec R., Vitanovski D., Voigt I., Wang Y., Georgescu B., Navab N., Comaniciu D. 2012. Complete valvular heart apparatus model from 4D cardiac CT, *Medical image analysis* 16(5): 1003–1014. DOI: 10.1016/j.media.2012.02.003 .

Griffith B. E. 2012. Immersed boundary model of aortic heart valve dynamics with physiological driving and loading conditions, *International Journal for Numerical Methods in Biomedical Engineering* 28(May): 317–345. DOI: 10.1002/cnm.

Grigioni M., Daniele C., Del Gaudio C., Morbiducci U., Balducci A., D'Avenio G., Barbaro V. 2005. Three-dimensional numeric simulation of flow through an aortic bileaflet valve in a realistic model of aortic root, *ASAIO Journal* 51(3): 176–183. DOI: 10.1097/01.MAT.0000159384.36271.2C.

Gunning P. S., Vaughan T. J., McNamara L. M. 2014. Simulation of self expanding transcatheter aortic valve in a realistic aortic root: implications of deployment geometry on leaflet deformation, *Annals of Biomedical Engineering* 42(9): 1989–2001. DOI: 10.1007/s10439-014-1051-3.

Guyton A., Hall J. E. 2016. *Guyton and Hall Textbook of Medical Physiology 12th Edition* University of Mississippi Medical Center, Department of Physiology and Biophysics.

Haj-Ali R., Marom G., Ben Zekry S., Rosenfeld M., Raanani E. 2012. A general three-dimensional parametric geometry of the native aortic valve and root for biomechanical modeling, *Journal of biomechanics* 45(14): 2392–2397. DOI: 10.1016/j.jbiomech.2012.07.017.

De Hart J., Baaijens F. P. T., Peters G. W. M., Schreurs P. J. G. 2003. A computational fluid-structure interaction analysis of a fiber-reinforced stentless aortic valve, *Journal of biomechanics* 36(5): 699–712. DOI: 10.1016/S0021-9290(02)00448-7.

De Hart J., Peters G. W. M., Schreurs P. J. G., Baaijens F. P. T. 2003. A three-dimensional computational analysis of fluid-structure interaction in the aortic valve, *Journal of biomechanics* 36(1): 103–112. URL: <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/12485644>.

Iliina A., Lasso A., Jolley M. A., Wohler B., Nguyen A., Scanlan A., Baum Z.,

Mc Gowan F., Fichtinger G. 2017. Patient-specific pediatric silicone heart valve models based on 3D ultrasound, *Medical Imaging 2017: Image-Guided Procedures, Robotic Interventions, and Modeling* 10135: 1013516. DOI: 10.1117/12.2255849 .

Ionasec R. I., Voigt I., Georgescu B., Wang, Y., Houle H., Vega-Higuera F., Navab N., Comaniciu D. 2010. Patient-specific modeling and quantification of the aortic and mitral valves from 4-D cardiac CT and TEE, *IEEE Transactions on Medical Imaging* 29(9): 1636–1651. DOI: 10.1109/TMI.2010.2048756.

Jabbour A., Ismail T. F., Moat N., Gulati A., Roussin I., Alpendurada F., Park B., Okoroafor F., Asgar A., Barker S., Davies S., Prasad S. K., Rubens M., Mohiaddin R. H. 2011. Multimodality imaging in transcatheter aortic valve implantation and post-procedural aortic regurgitation: Comparison among cardiovascular magnetic resonance, cardiac computed tomography, and echocardiography, *Journal of the American College of Cardiology* 58(21): 2165–2173. DOI: 10.1016/j.jacc.2011.09.010.

Jahandardoost M., Fradet G., Mohammadi H. 2015. A novel computational model for the hemodynamics of bileaflet mechanical valves in the opening phase, *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part H: Journal of Engineering in Medicine* 229(3): 232–244. DOI: 10.1177/0954411915576944.

Jatene M. B., Monteiro R., Guimarães M. H., Veronezi S. C., Koike M. K., Jatene F. B., Jatene D. 1999. Aortic valve assessment. Anatomical study of 100 healthy human hearts, *Arq Bras Cardiol* 73(1): 75–86. URL: <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/10684143>.

Kato M., Launder B. E. 1993. The modeling of turbulent flow around stationary and vibrating square cylinders, *Ninth Symposium on Turbulent Shear Flows. Aug.16-18: 10.4.1-10.4.6*. DOI: 10.1007/s13398-014-0173-7.2.

Khanafar K. M., Gadhoke P., Berguer R., Bull J. L. 2006. Modeling pulsatile flow in aortic aneurysms: effect of non-Newtonian properties of blood., *Biorheology* 43(5): 661–79. URL: <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/17047283>.

Kim H. J., Figueroa C. A., Hughes T. J. R., Jansen K. E., Taylor C. A. 2009. Augmented Lagrangian method for constraining the shape of velocity profiles at outlet boundaries for three-dimensional finite element simulations of blood flow, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 198: 3551–3566. DOI: 10.1016/j.cma.2009.02.012.

Kiris C., Kwak D., Rogers S., Chang I. D. 1997. Computational approach for probing the flow through artificial heart devices, *Journal of Biomechanical Engineering* 119(4): 452–460. DOI: 10.1115/1.2798293.

Krishnamurthy G., Itoh A., Swanson J. C., Miller D. C., Ingels N. B. J. 2010. Transient stiffening of mitral valve leaflets in the beating heart., *American journal of physiology. Heart and circulatory physiology* 298(6): H2221–H2225. DOI: 10.1152/ajpheart.00215.2010.

Krivoshapko S. N., Ivanov V. N. 2015. *Encyclopedia of analytical surfaces* Springer international publishing. DOI: 10.1007/978-3-319-11773-7.

Kwon J., Lee S. Y., Jeon K., Lee Y., Kim K., Park J., Oh B., Lee M. 2020. Deep learning–based algorithm for detecting aortic stenosis using electrocardiography, *Journal of the American Heart Association* 9(7): e014717. DOI: 10.1161/JAHA.119.014717.

- Labrosse M. R., Beller C. J., Robicsek F., Thubrikar M. J. 2006. Geometric modeling of functional trileaflet aortic valves: development and clinical applications, *Journal of biomechanics* 39(14): 2665–2672. DOI: 10.1016/j.jbiomech.2005.08.012.
- Langtry R. B., Menter F. R. 2009. Correlation-based transition modeling for unstructured parallelized computational fluid dynamics codes, *AIAA Journal* 47(12): 2894–2906. DOI: 10.2514/1.42362.
- Lantz J., Ebberts T., Engvall J., Karlsson M. 2013. Numerical and experimental assessment of turbulent kinetic energy in an aortic coarctation Numerical and Experimental Assessment of Turbulent Kinetic Energy in an Aortic Coarctation, (46): 1851–1858.
- Lantz J. 2013. On aortic blood flow simulations scale-resolved image-based CFD *Dissertation*. Linköping University, Department of Management and Engineering.
- Lantz J., Renner J., Karlsson M. 2011. Wall shear stress in a subject specific human aorta - Influence of fluid-structure interaction, *International Journal of Applied Mechanics* 4(3): 759–778.
- Lauder B. E., Spalding D. B. 1972. *Lectures in mathematical models of turbulence*, London, New York: Academic Press. URL: [http://catalogue.nla.gov.au/Record/1970799?lookfor=author:%22Lauder, B. E. \(Brian Edward\)%22&offset=1&max=2](http://catalogue.nla.gov.au/Record/1970799?lookfor=author:%22Lauder, B. E. (Brian Edward)%22&offset=1&max=2).
- Le T. B., Sotiropoulos F. 2013. Fluid-structure interaction of an aortic heart valve prosthesis driven by an animated anatomic left ventricle, *Journal of Computational Physics* 244: 41–62. DOI: 10.1016/j.jcp.2012.08.036.
- Le T. B., Sotiropoulos F. 2012. On the three-dimensional vortical structure of early diastolic flow in a patient-specific left ventricle., *European Journal of Mechanics B/Fluids* 35: 20–24. DOI: 10.1016/j.euromechflu.2012.01.013.
- van Loon R., Anderson P. D., Baaijens F. P. T., van de Vosse F.N. 2005. A three-dimensional fluid-structure interaction method for heart valve modelling, *Comptes Rendus Mecanique* 333(12): 856–866. DOI: 10.1016/j.crme.2005.10.008.
- van Loon R. 2010. Towards computational modelling of aortic stenosis, *International Journal for Numerical Methods in Biomedical Engineering* 26: 405–420. DOI: 10.1002/cnm.
- Marom G., Haj-Ali R., Raanani E., Schäfers H. J., Rosenfeld M. 2012. A fluid-structure interaction model of the aortic valve with coaptation and compliant aortic root., *Med Biol Eng Comput* 50(2): 173–82. DOI: 10.1007/s11517-011-0849-5.
- Marom G., Kim H. S., Rosenfeld M., Raanani E., Haj-Ali R. 2013. Fully coupled fluid-structure interaction model of congenital bicuspid aortic valves: Effect of asymmetry on hemodynamics, *Medical and Biological Engineering and Computing* 51(8): 839–848. DOI: 10.1007/s11517-013-1055-4.
- Marom G. 2014. Numerical methods for fluid-structure interaction models of aortic valves, *Archives of Computational Methods in Engineering* 22(4): 595–620. DOI: 10.1007/s11831-014-9133-9.
- Marquez S., Hon R. T., Yoganathan A. P. 2001. Comparative hydrodynamic evaluation of bioprosthetic heart valves, *The Journal of heart valve disease* 10(6): 802–811. URL: <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/11767190>.

- Menter F. R., Smirnov P. E., Liu T., Avancha R. 2015. A one-equation local correlation-based transition model, *Flow, Turbulence and Combustion* 95(4): 583–619. DOI: 10.1007/s10494-015-9622-4.
- Menter F. R. 1994. Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications, *AIAA Journal* 32(8): 1598–1605. DOI: 10.2514/3.12149.
- Moosavi M. H., Fatourae N., Katoozian H., Pashaei A., Camara O., Frangi A. F. 2014. Numerical simulation of blood flow in the left ventricle and aortic sinus using magnetic resonance imaging and computational fluid dynamics, *Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering* 17(7): 740–749. DOI: 10.1080/10255842.2012.715638.
- Morganti S., Auricchio F., Benson D. J., Gambarin F. I., Hartmann S., Hughes T. J. R., Reali A. 2015. Patient-specific isogeometric structural analysis of aortic valve closure, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 284: 508–520. DOI: 10.1016/j.cma.2014.10.010.
- Morganti S., Conti M., Aiello M., Valentini A., Mazzola A., Reali A., Auricchio F. 2014. Simulation of transcatheter aortic valve implantation through patient-specific finite element analysis: Two clinical cases, *Journal of Biomechanics* 47(11): 2547–2555. DOI: 10.1016/j.jbiomech.2014.06.007.
- Morsi Y. S., Yang W. W., Wong C. S., Das S. 2007. Transient fluid-structure coupling for simulation of a trileaflet heart valve using weak coupling., *The Japanese Society for Artificial Organs* 10(2): 96–103. DOI: 10.1007/s10047-006-0365-9.
- Niazmand H., Ebrahimi E. 2008. Non-Newtonian pulsatile blood flow in a curved artery *The 16th Annual Conference of the CFD Society of Canada*.
- Nichols W., O'Rourke M., Vlachopoulos C., Hoeks A., Reneman R. 2011. *McDonald's blood flow in arteries: Theoretical, experimental and clinical principles* Taylor & Francis Group. DOI: 10.1097/00024382-199806000-00013.
- Nobili M., Morbiducci U., Ponzini R., Del Gaudio C., Balducci A., Grigioni M., Maria Montecchi F., Redaelli A. 2008. Numerical simulation of the dynamics of a bileaflet prosthetic heart valve using a fluid-structure interaction approach, *Journal of biomechanics* 41(11): 2539–2550. DOI: 10.1016/j.jbiomech.2008.05.004.
- OpenFOAM 2016. OpenFOAM. The open source Computational Fluid Dynamics Toolbox: OpenFOAM. URL: <http://www.openfoam.com/>.
- Orwat S., Kaleschke G., Kerckhoff G., Radke R., Baumgartner H. 2013. Low flow, low gradient severe aortic stenosis: diagnosis, treatment and prognosis, *EuroIntervention* 9: S38–S42. DOI: 10.4244/EIJV9SSA8.
- Papademetris X., Sinusas A. J., Dione D. P., Duncan J. S. 2001. Estimation of 3D left ventricular deformation from echocardiography, *Medical Image Analysis* 5(1): 17–28. DOI: [https://doi.org/10.1016/S1361-8415\(00\)00022-0](https://doi.org/10.1016/S1361-8415(00)00022-0).
- Pasta S., Rinaudo A., Luca A., Pilato M., Scardulla C., Gleason T. G., Vorp D. 2013. Difference in hemodynamic and wall stress of ascending thoracic aortic aneurysms with bicuspid and tricuspid aortic valve., *Journal of biomechanics* 46(10): 1729–38. DOI: 10.1016/j.jbiomech.2013.03.029.

- Peskin C., McQueen D. M. 1980. Modeling prosthetic heart-valves for numerical-analysis of blood-flow in the heart, *Journal of Computational Physics* 37(1): 113–132. URL: <https://nyuscholars.nyu.edu/en/publications/modeling-prosthetic-heart-valves-for-numerical-analysis-of-blood->
- Peskin C. S. 1972. Flow patterns around heart valves: a numerical method, *Journal of Computational Physics* 10(2): 252–271. DOI: 10.1016/0021-9991(72)90065-4.
- Piatti F., Sturla F., Marom G., Sheriff J., Claiborne T. E., Slepian M. J., Redaelli A., Bluestein D. 2016. Hemodynamic and thrombogenic analysis of a trileaflet polymeric valve using a fluid-structure interaction approach, *Journal of Biomechanics* 48(13): 3650–3658. DOI: 10.1016/j.jbiomech.2015.08.009.
- Pirola S., Cheng Z., Jarral O., O'Regan D., Pepper J., Athanasiou T., Xu X. 2017. On the choice of outlet boundary conditions for patient-specific analysis of aortic flow using computational fluid dynamics, *Journal of biomechanics* 60(0): 15–21. DOI: <https://dx.doi.org/10.1016/j.jbiomech.2017.06.005>.
- Poskas R., Poskas P., Bartkus G. 2010. Mišrios konvekcijos esant priešingų krypteiū tėkmėms ir oro tankio stratifikacijos sąveikos skaitinis modeliavimas plokščiaame kanale, *Energetika* 56. Nr.3–4(October 2015): 267–278.
- Pouch A. M., Wang H., Takabe M., Jackson B. M., Sehgal C. M., Gorman J. H., Gorman R. C., Yushkevich P. A. 2013. Automated segmentation and geometrical modeling of the tricuspid aortic valve in 3D echocardiographic images, *Medical image computing and computer-assisted intervention* 16: 485–492. URL: <http://www.pubmedcentral.nih.gov/articlerender.fcgi?artid=3918680&tool=pmcentrez&rendertype=abstract>.
- Quarteroni A., Lassila T., Rossi S., Ruiz-Baier R. 2017. Integrated Heart–Coupling multiscale and multiphysics models for the simulation of the cardiac function, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 314: 345–407. DOI: 10.1016/j.cma.2016.05.031.
- Rajamannan N. M., Evans F. J., Aikawa E., Grande-Allen K. J., Demer L. L., Heistad D. D., Simmons C. A., Masters K. S., Mathieu P., O'Brien K. D., Schoen F. J., Towler D. A., Yoganathan A. P., Otto C. M. 2011. Calcific aortic valve disease: not simply a degenerative process: a review and agenda for research from the national heart and lung and blood institute aortic stenosis working group. Executive summary: calcific aortic valve disease-2011 Update, *NIH Public Access. Circulation*. 124(16): 1783–1791. DOI: 10.1161/CIRCULATIONAHA.110.006767.Calcific.
- Ranga A., Bouchot O., Mongrain R., Ugolini P., Cartier R. 2006. Computational simulations of the aortic valve validated by imaging data: evaluation of valve-sparing techniques, *Interactive CardioVascular and Thoracic Surgery* 5: 373–378. DOI: 10.1510/icvts.2005.121483.
- Rankin J. S., Bone M. C., Fries P. M., Aicher D., Schäfers H. J., Crooke P. S. 2012. A refined hemispheric model of normal human aortic valve and root geometry., *Acquired Cardiovascular Disease* 146(1): 103-108.e1. DOI: 10.1016/j.jtcvs.2012.06.043.
- Reul H., Vahlbruch A., Giersiepen M., Schmitz-Rode T., Hirtz V., Effert S. 1990. The geometry of the aortic root in health, at valve disease and after valve replacement, *Journal*

*of Biomechanics* 23(2): 181–191. DOI: 10.1016/0021-9290(90)90351-3.

Schenkel T., Malve M., Reik M., Markl M., Jung B., Oertel H. 2009. MRI-based CFD analysis of flow in a human left ventricle: methodology and application to a healthy heart, *Annals of Biomedical Engineering* 37(3): 503–515. DOI: 10.1007/s10439-008-9627-4.

Shadden S. C., Astorino M., Gerbeau J. F. 2010. Computational analysis of an aortic valve jet with Lagrangian coherent structures, *Chaos* 20(1): 017512. DOI: 10.1063/1.3272780.

Singh-Gryzbon S., Ncho B., Sadri V., Bhat S. S., Kollapaneni S. S., Balakumar D., Wei Z. A., Ruile P., Neumann F. J., Blanke P., Yoganathan A. P. 2020. Influence of Patient-Specific Characteristics on Transcatheter Heart Valve Neo-Sinus Flow: An In Silico Study, *Annals of Biomedical Engineering*. DOI: 10.1007/s10439-020-02532-x.

Shih T. H., Lumley J. L. 1993. Kolmogorov Behavior of Near-Wall Turbulence and its Application in Turbulence Modeling, *International Journal of Computational Fluid Dynamics* 1(1): 43–56. DOI: 10.1080/10618569308904463.

Sirois E., Wang Q., Sun W. 2011. Fluid simulation of a transcatheter aortic valve deployment into a patient-specific aortic root, *Cardiovascular Engineering and Technology* 2(3): 186–195. DOI: 10.1007/s13239-011-0037-7.

Sochi T. 2013. Non-Newtonian Rheology in Blood Circulation, *Q. Sensei Scholar*: 1–31.

Soncini M., Votta E., Zinicchino S., Burrone V., Fumero R., Mangini A., Lemma M., Antona C., Redaelli A. 2006. Finite element simulations of the physiological aortic root and valve sparing corrections, *Journal of Mechanics in Medicine and Biology* 06(01): 91–99. DOI: 10.1142/S0219519406001790.

Spühler J. H., Jansson J., Jansson N., Hoffman J. 2018. 3D fluid-structure interaction simulation of aortic valves using a unified continuum ALE FEM model, *Frontiers in Physiology* 9(APR): 1–16. DOI: 10.3389/fphys.2018.00363.

Stergiopoulos N., Westerhof B. E., Westerhof N. 1999. Total arterial inertance as the fourth element of the windkessel model, *American Journal of Physiology - Heart and Circulatory Physiology* 276(1 45-1). DOI: 10.1152/ajpheart.1999.276.1.h81.

Stevanella M., Krishnamurthy G., Votta E., Swanson J. C., Redaelli A., Ingels N. B. 2011. Mitral leaflet modeling: Importance of in vivo shape and material properties, *Journal of biomechanics* 44(12): 2229–35. DOI: 10.1016/j.jbiomech.2011.06.005.

Stolarski T., Nakasone Y., Yoshimoto S. 2007. *Engineering analysis with ANSYS software* Elsevier Butterworth-Heinemann. DOI: 10.1016/B978-075066875-0/50037-5.

Sturla F., Votta E., Stevanella M., Redaelli A., Conti C. A. 2013. Impact of modeling fluid – structure interaction in the computational analysis of aortic root biomechanics, *Medical Engineering and Physics* 35(12): 1721–1730. DOI: 10.1016/j.medengphy.2013.07.015.

Su B., Zhong L., Wang X. K., Zhang J. M., Tan R. S., Allen J. C., Soon K. T., Kim S., Leo H. L. 2014. Numerical simulation of patient-specific left ventricular model with both mitral and aortic valves by FSI approach, *Computer methods and programs in biomedicine* 113(2): 474–482. DOI: 10.1016/j.cmpb.2013.11.009.

Thubrikar M. J. 1990. *The aortic valve*, CRC Press, Boca Raton. DOI: 10.1002/jcc.540110605.

Tian F. B., Zhu L., Fok P. W., Lu X. Y. 2013. Simulation of a pulsatile non-Newtonian flow past a stenosed 2D artery with atherosclerosis., *Computers in biology and medicine* 43(9): 1098–113. DOI: 10.1016/j.compbimed.2013.05.023.

Tuliszka-Sznitko E., Kielczewski K. 2016. Direct numerical simulation of the Taylor-Couette flow with the asymmetric end-wall boundary conditions, *Archives of Mechanics* 68(5): 395–418.

Varghese S. S., Frankel S. H., Fischer P. F. 2008. Modeling transition to turbulence in eccentric stenotic flows, *Journal of Biomechanical Engineering* 130(1). DOI: 10.1115/1.2800832.

Veronesi F., Corsi C., Sugeng L., Mor-Avi V., Caiani E. G., Weinert L., Lamberti C., Lang R. M. 2009. A study of functional anatomy of aortic-mitral valve coupling using 3D matrix transesophageal echocardiography, *Circulation. Cardiovascular imaging* 2(1): 24–31. DOI: 10.1161/CIRCIMAGING.108.785907.

Vigmostad S. C., Udaykumar H. S., Lu J., Chandran K. B. 2010. Fluid – structure interaction methods in biological flows with special emphasis on heart valve dynamics, *International Journal for Numerical Methods in Biomedical Engineering* (October 2009): 435–470. DOI: 10.1002/cnm.

Vignon-Clementel I. E., Alberto Figueroa C., Jansen K. E., Taylor C. a. 2006. Outflow boundary conditions for three-dimensional finite element modeling of blood flow and pressure in arteries, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 195: 3776–3796. DOI: 10.1016/j.cma.2005.04.014.

Voigt I., Mansi T., Ionasec R. I., Mengue E. A., Houle H., Georgescu B., Hornegger J., Comaniciu D. 2011. Robust physically-constrained modeling of the mitral valve and subvalvular apparatus, *Medical image computing and computer-assisted intervention: MICCAI. International Conference on Medical Image Computing and Computer-Assisted Intervention* 14(Pt 3): 504–11. URL: <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/22003737>.

Votta E., Le T. B., Stevanella M., Fusini L., Caiani E. G., Redaelli A., Sotiropoulos F. 2013. Toward patient-specific simulations of cardiac valves: state-of-the-art and future directions, *Journal of biomechanics* 46(2): 217–228. DOI: 10.1016/j.jbiomech.2012.10.026.

Wang Q., Kodali S., Primiano C., Sun W. 2015. Simulations of transcatheter aortic valve implantation: implications for aortic root rupture, *Biomechanics and Modeling in Mechanobiology* 14(1): 29–38. DOI: 10.1007/s10237-014-0583-7.

Weinberg E. J., Kaazempur Mofrad M. R. 2008. A multiscale computational comparison of the bicuspid and tricuspid aortic valves in relation to calcific aortic stenosis., *Journal of biomechanics* 41(16): 3482–7. DOI: 10.1016/j.jbiomech.2008.08.006.

Weinberg E. J., Mofrad M. R. K. 2007. Transient, Three-dimensional, Multiscale Simulations of the Human Aortic Valve, *Cardiovascular Engineering* 7(4): 140–155. DOI: 10.1007/s10558-007-9038-4.

Weinberg E. J., Schoen F. J., Mofrad M. R. K. 2009. A computational model of aging and calcification in the aortic heart valve, *PLoS ONE* 4(6): 1–10. DOI: 10.1371/journal.pone.0005960 .

Westerhof N., Lankhaar J. W., Westerhof B. E. 2009. The arterial windkessel, *Medical and Biological Engineering and Computing* 47(2): 131–141. DOI: 10.1007/s11517-008-0359-2.

Wilcox D. C. 1993. *Turbulence modeling for CFD*, DCW Industries, Inc. La Canada, California. URL: <http://www.crcnetbase.com/doi/pdf/10.1201/b13568-1>.

Wu W., Pott D., Mazza B., Sironi T., Dordoni E., Chiastra C., Petrini L., Pennati G., Dubini G., Steinseifer U., Sonntag S., Kuetting M., Migliavacca F. 2016. Fluid-structure interaction model of a percutaneous aortic valve: comparison with an in vitro test and feasibility study in a patient-specific case, *Annals of Biomedical Engineering* 44(2): 590–603. DOI: 10.1007/s10439-015-1429-x.

Yavuz Z., Köse C. 2017. Blood vessel extraction in color retinal fundus images with enhancement filtering and unsupervised classification, *Journal of Healthcare Engineering* 2017. DOI: 10.1155/2017/4897258.

Youssefi P., Gomez A., He T., Anderson L., Bunce N., Sharma R., Figueroa C. A., Jahangiri M. 2017. Patient-specific computational fluid dynamics-assessment of aortic hemodynamics in a spectrum of aortic valve pathologies, *Journal of Thoracic and Cardiovascular Surgery* 153(1): 8-20.e3. DOI: 10.1016/j.jtcvs.2016.09.040.

Zhu Y., Papademetris X., Sinusas A., Duncan J. 2012. Automated Segmentation of Using an Incompressibility Constraint, *Echocardiography-New Techniques*: 85–102.



---

# Autorės mokslinių publikacijų disertacijos tema sąrašas

## Straipsniai recenzuojamuose mokslo žurnaluose

Staškūnienė, M.; Kačeniauskas, A.; Maknickas, A.; Starikovičius, V.; Stupak, E.; Pacevič, R. Investigation of the backflows and outlet boundary conditions for computations of the patient-specific aortic valve flows//*Technology and health care*. Amsterdam: IOS Press. ISSN 0928-7329. eISSN 1878-7401. 2018, vol. 26, no. S2, p. 553–563. DOI: 10.3233/THC-182502 (Clarivate Analytics Web of Science).

Kačeniauskas, A.; Pacevič, R.; Starikovičius, V.; Maknickas, A.; Staškūnienė, M.; Davidavičius, G. Development of cloud services for patient-specific simulations of blood flows through aortic valves//*Advances in engineering software*. Oxford: Elsevier Science. ISSN 0965-9978. eISSN 1873-5339. 2017, Vol. 103, p. 57–64. DOI: 10.1016/j.advengsoft.2016.01.013 (Clarivate Analytics Web of Science).

Starikovičius, V.; Kačeniauskas, A.; Maknickas, A.; Stupak, E.; Pacevič, R.; Staškūnienė, M.; Davidavičius, G. On efficiency of parallel solvers for the blood flow through aortic valve//*Mathematical modelling and analysis*. Vilnius; Londonas: Technika; Taylor & Francis. ISSN 1392-6292. eISSN 1648-3510. 2017, Vol. 22, iss. 5, p. 601–616. DOI: 10.3846/13926292.2017.1339642 (Clarivate Analytics Web of Science).

Stupak, E.; Kačianauskas, R.; Kačeniauskas, A.; Starikovičius, V.; Maknickas, A.; Pacevič, R.; Staškūnienė, M.; Davidavičius, G.; Aidiētis, A. The geometric model-based patientspecific simulations of turbulent aortic valve flows//*Archives of mechanics* =

*Archiwum mechaniki stosowanej*. Warszawa: Polish Academy of Sciences. Institute of Fundamental Technological Research. ISSN 0373-2029. 2017, Vol. 69, iss. 4–5, p. 317–345 (Clarivate Analytics Web of Science).

Kačeniauskas, A.; Pacevič, R.; Staškūnienė, M.; Šešok, D.; Rusakevičius, D.; Aidietis, A.; Davidavičius, G. Private cloud infrastructure for applications of mechanical and medical engineering//*Information technology and control*. Kaunas: Technologija. ISSN 1392-124X. eISSN 2335-884X. 2015, Vol. 44, no. 3, p. 254–261. DOI: 10.5755/j01.itc.44.3.7379 (Clarivate Analytics Web of Science).

### **Straipsniai kituose leidiniuose**

Kačeniauskas, A.; Stupak, E.; Maknickas, A.; Starikovičius, V.; Pacevič, R.; Staškūnienė, M.; Davidavičius, G. Numerical simulation of aortic valve//*Mechanika'2016: proceedings of the 21th international scientific conference*, 12–13, May, 2016, Kaunas University of Technology, Lithuania. Kaunas: Kauno technologijos universitetas. ISSN 1822-2951. 2016, p. 107–110 (Clarivate Analytics Web of Science).

Staškūnienė, M.; Kačeniauskas, A.; Starikovičius, V.; Maknickas, A.; Stupak, E.; Pacevič, R. Parallel simulation of the aortic valve flows on the OpenStack cloud//*Civil-Comp proceedings*. Proceedings of the fifth international conference on parallel, distributed, grid and cloud computing for engineering, 2017, Vol. 111/edited by: P. Iványi, B.H.V. Topping and G. Várady. Stirlingshire, UK: Civil-Comp Press, 2017, art. no. 16. ISBN 9781905088669. ISSN 1759-3433. p. 1–15.

Kačeniauskas, A.; Pacevič, R.; Staškūnienė, M.; Starikovičius, V.; Davidavičius, G. Development of cloud software services for computational analysis of blood flows//*Civil-Comp proceedings: proceedings of the fourth international conference on parallel, distributed, grid and cloud computing for engineering*, Dubrovnik, Croatia 24–27 March, 2015. Vol. 107. Stirlingshire, UK: Civil-Comp Press. ISSN 1759-3433. 2015, p. 100–111. DOI: 10.4203/ccp.107.19.

---

# Summary in English

## Introduction

### Problem formulation

The normal tricuspid aortic valve of healthy human has three leaflets, which opens and closes during systole and diastole and controls the flow of blood out from the heart to the rest of the body. When tricuspid aortic valve has become narrowed (aortic stenosis) – the opening of the valve becomes smaller, obstructing the flow of blood out of the heart; when tricuspid aortic valve is leaky (aortic regurgitation) – the valve allows blood to flow back through into the heart. It is important to conduct a lot of research analyzing the structure and function of aortic valve. A patient-specific structural and hemodynamic analysis is being increasingly used in biomechanics of blood circulation.

At physiological flow rates, the flow through the aortic valve is known to become turbulent after the peak systole, when the fluid jet expands downstream of the valve. However turbulence models are rarely applied to patient-specific simulations of the native aortic valve flows. Various turbulence models of the RANS equations have been employed in mechanical prosthetic aortic valve simulations. The most popular  $k-\varepsilon$  turbulence model significantly smoothest the vortex field. For this reason, the dissertation provides the study and comparison of various turbulence models in the case of turbulent aortic valve flows at low Reynolds numbers.

## Relevance of the thesis

Valvular heart diseases produce a number of physiological changes to the heart tissue, which change the hemodynamics of cardiovascular system with potentially disastrous consequences. The emergence of a hemodynamic theory of aortic valve calcification has motivated the investigation of aortic valve hemodynamics at higher resolutions using computational approaches. The velocity and pressure field of the valve flow are the main quantities of interest for the assessment of stenotic severity. Sufficiently accurate computational models combined with medical imaging can serve as an alternative tool for medical research providing a better quantitative knowledge of the heart flow haemodynamics required for improving the diagnostic and patient care. Despite significant advances in imaging modalities for studying cardiac hemodynamics, present-day *in vivo* measurement techniques can only resolve large-scale blood flow features (Moosavi et al. 2014). Circulatory modeling can be useful when hesitating between the choice of surgical procedure and possible non-invasive methods.

## The object of research

The object of research – aortic valve flow at low Reynolds numbers turbulence and its numerical models.

## The aim of the thesis

The aim of the thesis is to develop and investigate a numerical model for turbulent aortic valve flow at low Reynolds numbers.

## The tasks of the thesis

In order to achieve the aim the following tasks are to be completed in the thesis:

1. To examine the influence of numerical methods and parameters to the solution time and convergence of the numerical solution of aortic valve flow.
2. To investigate the influence of boundary conditions to the backflow and convergence of numerical solution.
3. To select the appropriate turbulence model for aortic valve flow at low Reynolds numbers.
4. To validate the developed numerical model by using patient-specific clinical measurements.

## Research methodology

The methods of literature and comparative analysis were used to investigate the research object and the numerical methods for turbulent aortic valve flows. The differential equations, describing aortic valve flow, were solved by the numerical finite volume method implemented in the ANSYS Fluent software. The geometrical models based on parametric

curves were used to describe patient-specific geometry of aortic valve. The developed numerical model was validated by using Doppler velocity measurements performed by Philips iE33 ultra sonographic system. Large-scale computations were performed on the OpenStack cloud infrastructure.

### Scientific novelty of the thesis

The novelty of the work consists of:

1. A novel outlet boundary condition based on a convex parabolic pressure surface was developed for aortic valve flow to improve the convergence of the numerical solution and to model the backflow.
2. First time a  $k-\omega$  turbulence model, evaluating the shear stress transport and the intermittency transition, was applied to turbulent aortic valve flows at small Reynolds numbers.

### Practical value of the research findings

The results of the research may be useful in medicine for digital structural examinations of the aortic valve. With modeling results, engineering analysis could provide additional information to physicians during cardiac surgery, preventing dilatation of the ascending aorta (aneurysms and ectasy). Circulatory modeling can be useful when hesitating between the choice of surgical procedure and possible non-invasive methods. The performed research would also be useful for developing new technologies and medical devices, predicting the consequences of surgical operations and implants.

### The defended statements

1. The proposed aortic valve outlet boundary condition based on a convex parabolic pressure surface extends convergence time interval of the numerical solution and controls the backflow by varying the pressure surface convexity specified on the outlet.
2. The  $k-\omega$  turbulence model with intermittency transition equation applied to turbulent aortic valve flows at low Reynolds numbers reduces the oscillations of the laminar flow solution of the Navier-Stokes equations, but the results of the turbulent model remain close enough to the DNS solution.
3. The developed numerical model is suitable for calculating accuracy the maximum velocity value in the peak systole, which can be measured by medical echocardiography equipment based on pulsed wave Doppler effect.

### Approval of the research findings

The main results of this thesis were published in 8 scientific papers: five articles in journals with impact factor indexed in *Clarivate Analytics Web of Science* database (Staškūnienė et al. 2018; Kačeniauskas et al. 2017; Starikovičius et al. 2017; Stupak et al. 2017;

Kačeniauskas et al. 2015), one paper in international *Conference proceedings* (Kačeniauskas et al. 2016), two articles in other international database publications (Staskuniene et al. 2017; Kačeniauskas et al. 2015).

These results were presented at 5 international conferences:

1. 5th International Conference on Parallel, Distributed, Grid and Cloud Computing for Engineering “PARENG 2017”, held in Pécs (Hungary) on May 30–31, 2017.
2. 14th International Symposium Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering (CMBBE 2016), held in Tel Aviv (Israel) on September 20–22, 2016.
3. 40th International Conference “SOLMECH 2016”, held in Warsaw (Poland) on August 29 – September 2, 2016.
4. 21st International Scientific Conference “Mechanics 2016”, held in Kaunas (Lithuania) on May 12–13, 2016.
5. 4th International Conference on Parallel, Distributed, Grid and Cloud Computing for Engineering “PARENG 2015”, held in Dubrovnik (Croatia) on March 24–27, 2015.

## Structure of the dissertation

The dissertation consists of an introduction, four main chapters, general conclusions, references, a list of publications by the author on the topic of the dissertation, and a summary in English. The volume of this thesis is 108 pages (without annexes), including 39 figures, 1 table, and 31 numbered equations. A total of 138 references were cited in the thesis.

## 1. Review of literature and numerical methods blood flow modelling in aortic valve

The heart is a complex system governed by hemodynamics (Moosavi et al. 2014), structural dynamics and electromagnetics (Quarteroni et al. 2017). Despite significant advances in imaging modalities for studying cardiac hemodynamics, present-day *in vivo* measurement techniques can only resolve large-scale blood flow features (Moosavi et al. 2014). Understanding the aortic valve flow patterns at physiologic conditions and scales sufficiently fine for establishing quantitatively the links between the aortic valve disease and haemodynamics is still a major research challenge (Quarteroni et al. 2017).

The approaches to the numerical analysis of the aortic valve can be broadly classified into two categories, including the approaches based on the fluid-structure interaction (FSI) and the approaches based on the prescribed heart motion. A number of methods have been proposed in the literature that compute the FSI of the aortic valve and the blood flow (Quarteroni et al. 2017). With the advent of massively parallel computational platforms and continuous algorithmic advances (Bazilevs et al. 2009), the 3D FSI simulations of the heart valves in patient-specific left heart anatomies could be performed. However, FSI computations require profound knowledge of the complex tissue rheology, the electrical properties or even the external load due to the surrounding organs. It is hardly possible to obtain the required data in a non-invasive way today.

The second approach is based on the geometry extracted from medical images, therefore, can neglect the interplay between the leaflets and blood. With the advent of ultrasound, computer tomography and magnetic resonance imaging modalities, as well as with advances in image processing techniques, it is now possible to obtain patient-specific, morphologically realistic 3D images of the heart valves at various time instances in the cardiac cycle. The initial attempts to simulate the blood flow in the heart chambers were based on simplified geometries, e.g. straight axisymmetric aortic lumens (Griffith 2012). Bluestein et al. (Bluestein et al. 2002) have performed the 2D unsteady turbulent simulations of the mechanical valve for the fixed leaflet position to study platelet activation. Marquez et al. (2001) have shown that different aortic valve geometries have significantly different haemodynamics in the valve wake. A series of the valve leaflet deformed geometries, from the valve opening to the valve closure, were extracted from the finite element simulation and used to create a series of hemodynamic models by Sirois et al. (2011). Computational fluid dynamics (CFD) computations based on the geometry extracted from medical images seem to be well suited for patient-specific analysis and are compatible with clinical routine (Moosavi et al. 2014).

At physiological flow rates, the flow through the aortic valve is known to become turbulent when the fluid jet expands downstream of the valve. Under the pulsatile flow conditions, the turbulence is intermittent, peaking only in the deceleration phase, following the peak systole (Bluestein, Einav 2000). This turbulence is known to be a predominant factor, influencing the energy losses caused by the aortic stenosis. Various turbulence models of the Reynolds-averaged Navier-Stokes (RANS) equations were employed in mechanical prosthetic aortic valve simulations. Kiris et al. (1997) have used a finite volume method with overset grids to solve the 3D RANS equations closed with the mixing-length turbulence model for simulating the flow through the Björk–Shiley mechanical valve. In their turbulence model, the turbulent viscosity is determined only by the profile of the boundary layer and the distance from the wall. Bluestein et al. (Bluestein et al. 2002; Bluestein, Rambod, et al. 2000) have employed Wilcox  $k-\omega$  model in simulations of mechanical valves because this turbulence model is better suited for the low Reynolds number transitional flows. Transient and turbulent simulation (Bluestein, Rambod, et al. 2000) depicted the intricate dynamics of the shed vortices in the wake, with the results validated using a digital particle image velocimetry. Sirois et al. (2011) have performed a quantitative analysis of hemodynamics before and after the transcatheter-aortic valve intervention by using the  $k-\epsilon$  model to describe the turbulent flow in the transition range. In the direct numerical simulation (DNS), full Navier-Stokes equations have been solved without any averaging or assumptions about the production and dissipation of turbulence (Tuliszka-Sznitko et al. 2016). The DNS method has been employed in the models of the pulsatile flow through bileaflet mechanical heart valves (MHV), including the valves with the fixed leaflets (Ge et al. 2005) and full FSI simulations (Nobili et al. 2008; Labrosse et al. 2006). The DNS of the pulsatile flow through a bileaflet MHV mounted in an idealized axisymmetric aorta geometry has been carried out in (Dasi et al. 2007) by prescribing the leaflet motion from the experimental data. However, the DNS approach requires very fine temporal and spatial discretization and, consequently, very large com-

putational resources. Moreover, turbulent models are rarely applied to patient-specific simulations of the native aortic valve flows. Hence, the validation of these models for clinically relevant problems is expected to be the topic of future research.

However, patient-specific CFD simulation of the aortic valve flow requires accurate description of the flow boundary conditions (Vignon-Clementel et al. 2006). Simulation divergence due to the backflow is a common, but not fully addressed, problem in the field of cardiovascular flow simulations. Backflow divergence can occur, when complex flow structures propagate to the outlet boundary. The local flow separation or flow recirculation is commonly caused by complex geometries such as aortic stenosis, large vessel curvature or increased cross sectional area.

Simulation divergence due to partial reversal of the flow through the outlet requires careful consideration of the outlet boundary conditions. The simplest solution to the backflow issue is to artificially extend the vessel with a long, straight segment (Marom 2014), thereby dissipating the vortices before they reach the outlet. However, the addition of this segment creates an artificial and non-physiologic part in the computational domain and can cause a significant part of the computational domain to reside in regions of no interest. Another option is to add additional vessels to the model until the flow becomes unidirectional and the Reynolds number near the outlet is reduced (Vignon-Clementel et al. 2006). This method significantly increases the model generation and computational costs.

There have been different studies to resolve challenges associated with the outlet boundary conditions and backflows in computational hemodynamics. Formaggia et al. (2007) have implemented a total pressure boundary condition by constructing a special formulation of the Navier-Stokes equations. The total pressure boundary condition has controlled the energy flux, entering and exiting the computational domain and thus has stabilized fluid dynamics problems by setting energy bounds. The weak formulation has been modified by adding a backflow stabilization term to the boundary nodes in (Bazilevs et al. 2009). In the work of Kim et al. (2009), an augmented Lagrangian method has been used to enforce the constraints on the shape of the velocity profile on the outlet or at the interface between the 3D computational domain and the downstream analytic domain. The quantitative comparison of three backflow treatment methods has been performed by Esmaily-Moghadam et al. (2011) by using a single finite element code. However, some of the discussed approaches have required an unconventional formulation of the Navier-Stokes equations, which has led to significant development efforts.

## 2. Numerical model of aortic valve flow

A transient flow of viscous incompressible fluid was described by the Navier-Stokes equations (Acheson 1990) as follows:

$$\rho \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \rho \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} = \nabla \cdot \sigma, \quad (\text{S2.1})$$

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0, \quad (\text{S2.2})$$

where  $\vec{u}$  is the velocity vector;  $\rho$  is density;  $\nabla$  is the gradient operator;  $\nabla \cdot$  is the divergence operator. In the case of the Newtonian incompressible fluid, stress tensor  $\sigma_{ij}$  can be expressed by the formula:



$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad (S2.3)$$

where  $p$  is pressure;  $\mu$  is viscosity;  $\delta_{ij}$  is Kronecker delta. The Newtonian flow model was considered, since the blood in the aorta and large arteries behaves accordingly (Nichols et al. 2011). The non-Newtonian blood behavior becomes relevant only in the cases of slow flows in the capillaries, whose diameter can be even smaller than that of a red cell, but they are not relevant to our study. The blood density is set to  $\rho=1060$  kg/m<sup>3</sup>, while the dynamic viscosity coefficient is  $\mu=0.004028$  kg/(m s).

The differential flow equations (S2.1–2.3) were solved by the finite volume method on collocated grids (Stolarski et al. 2007). The pressure-based solver with the first order implicit transient formulation was used for fluid simulations. The under-relaxation of equations, is used in the pressure-based solver to stabilize the convergence behavior of the outer nonlinear iterations. The coupled or the PISO schemes were considered for the solution of momentum and continuity equations. Gradients were evaluated by using the least squares cell-based scheme to ensure sufficient accuracy on unstructured meshes with skewed and distorted finite volumes. The second order upwind scheme was applied to discretize the convective terms in momentum equations. The second order accurate pressure discretization scheme was used to reduce the number of nonlinear iterations. The blood was modelled as an incompressible Newtonian fluid with the density set to  $\rho=1060$  kg/m<sup>3</sup>. The dynamic viscosity coefficient was  $\mu=0.004028$  kg/(m s).

The need for turbulence modelling arises because the local Reynolds number of the blood flow past the aortic valve might reach high values in the deceleration phase, following the peak systole (Bluestein, Einav 2000). The RANS equations used for turbulence modelling have the same general form as the instantaneous Navier-Stokes equations (S2.1-2.3), with the time-averaged velocities and the Reynolds stresses. The Boussinesq hypothesis is applied to model the Reynolds stress terms:

$$-\rho \overline{u_i' u_j'} = \mu_t \left[ \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right] - \frac{2}{3} \left[ \rho k + \mu_t \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right] \delta_{ij}, \quad (S2.4)$$

where  $\mu_t$  is turbulent viscosity,  $k$  is the turbulent kinetic energy.

In this work, the two-equation Shear-Stress Transport (SST)  $k$ - $\omega$  model (Menter 1994) was used to avoid the explicit simulation of the smallest scales, because it could be applied for the computation of the turbulent flows with a relatively low Reynolds number. The SST  $k$ - $\omega$  model accounts for the transport of the turbulent shear stress, introducing a limiter  $\alpha$  to the formulation of turbulent viscosity:

$$\mu_t = \frac{1}{\alpha} \frac{\rho k}{\omega}, \quad (S2.5)$$

where  $k$  is turbulent kinetic energy;  $\omega$  is the specific dissipation rate. The proper transport behaviour of the turbulent shear stress was obtained, specifying

$$\alpha = \max \left[ \frac{1}{\alpha^*}, \frac{SF}{a_1 \omega} \right], \quad (S2.6)$$

where  $S$  is the strain rate magnitude;  $F$  is the blending function. The coefficient  $\alpha^*$  damps the turbulent viscosity causing the low-Reynolds number correction:

$$\alpha^* = \alpha_\infty^* \left( \frac{\alpha_0^* + \frac{Re_t}{6}}{1 + \frac{Re_t}{6}} \right), Re_t = \frac{\rho k}{\mu \omega}, \alpha_0^* = \frac{\beta_i}{3}, \alpha_\infty^* = 1, \alpha_1 = 0.31. \quad (S2.7)$$

Since the  $k$ - $\omega$  model had been modified over the years, the production terms were added to both the  $k$  and  $\omega$  equations, which improved the accuracy of the model for predicting free shear flows. The distribution of turbulent kinetic energy and the specific dissipation rate were described by the equations:

$$\rho \frac{\partial k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho k \vec{u}) = \nabla \cdot \left( \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right) + \tilde{G}_k - \tilde{Y}_k + S_k, \quad (S2.8)$$

$$\frac{\partial(\rho\omega)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\omega \vec{u}) = \nabla \cdot \left( \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega} \right) \nabla \omega \right) + G_\omega - Y_\omega + D_\omega + S_\omega, \quad (S2.9)$$

where  $\sigma_k$  and  $\sigma_\omega$  are the turbulent Prandtl numbers for  $k$  and  $\omega$ , respectively; the production term  $\tilde{G}_k$  denotes the generation of turbulence kinetic energy due to the mean velocity gradients; the production term  $G_\omega$  means the generation of  $\omega$ ; the destruction terms  $\tilde{Y}_k$  and  $Y_\omega$  denote the dissipation of  $k$  and  $\omega$  due to turbulence, respectively;  $D_\omega$  is the cross-diffusion term;  $S_k$  and  $S_\omega$  are user-defined source terms. In different regions,  $\beta_i$  from formula (S2.7), as well as  $\sigma_k$  and  $\sigma_\omega$ , were defined by using the blending function  $F_1$ :

$$\beta_i = F_1 \beta_{i,1} + (1 - F_1) \beta_{i,2}, \sigma_k = \frac{1}{\frac{F_1}{\sigma_{k,1}} + \frac{1-F_1}{\sigma_{k,1}}}, \sigma_\omega = \frac{1}{\frac{F_1}{\sigma_{\omega,1}} + \frac{1-F_1}{\sigma_{\omega,2}}}. \quad (S2.10)$$

The constants of the applied turbulence model are as follows:

$\beta_{i,1} = 0.075$ ,  $\beta_{i,2} = 0.0828$ ,  $\sigma_{k,1} = 1.176$ ,  $\sigma_{\omega,1} = 2.0$ ,  $\sigma_{k,2} = 1.0$  and  $\sigma_{\omega,2} = 1.168$ . Other details of the applied turbulence model can be found in (Menter 1994).

The formulation of the SST  $k$ - $\omega$  model was enhanced by the intermittency transport equation to evaluate laminar-turbulent transition of the boundary layers of the wall. The intermittency transition model (Menter et al. 2015) was considered as a further development of the  $\gamma$ - $Re_\theta$  transition model (Langtry et al. 2009). The following transport equation for intermittency  $\gamma$  was used:

$$\frac{\partial(\rho\gamma)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \gamma) = \nabla \cdot \left( \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\gamma} \right) \nabla \gamma \right) + P_\gamma - E_\gamma. \quad (S2.11)$$

The boundary condition for  $\gamma$  is zero normal flux on the aortic wall, while the value of  $\gamma$  is equal to 1 on the inlet. The transition and relaminarization source terms were defined as follows:

$$P_\gamma = F_{length} \rho S \gamma (1 - \gamma) F_{onset}, \quad (S2.12)$$

$$E_\gamma = c_{a2} \rho \Omega \gamma F_{turb} (c_{e2} \gamma - 1), \quad (S2.13)$$

where  $S$  is the strain rate magnitude;  $\Omega$  is the magnitude of the absolute vorticity rate. The formulation of the function  $F_{onset}$ , included the ratio of the local vorticity Reynolds number to the critical Reynolds number. The function  $F_{turb}$ , the local vorticity Reynolds number  $Re_\gamma$ , and the constants of the intermittency model were defined as follows:

$$F_{turb} = e^{-\left(\frac{Re_t}{z}\right)^4}, Re_v = \frac{\rho d_w^2 S}{\mu \omega}, F_{length} = 100, c_{e2} = 50, c_{a2} = 0.06, \sigma_\gamma = 1.0 \quad (S2.14)$$

where  $d_w$  is the wall distance. The details of the intermittency transition model, including experimental correlations of the critical Reynolds number, can be found in (Menter et al. 2015).

The coupling of the intermittency transition model (2.11-2.14) with the SST  $k$ - $\omega$  model (S2.5-2.10) was accomplished by modifying the source terms of equation (S2.8). The production term  $\tilde{G}_k$  was obtained by multiplying  $\gamma$  and the original term of the turbulent kinetic energy equation,  $G_k$ , which was computed using the Kato-Launder formulation (Kato et al. 1993):

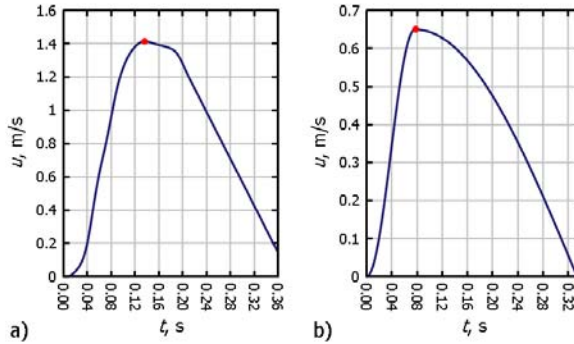
$$\tilde{G}_k = \gamma G_k = \gamma \mu_t S \Omega. \quad (S2.15)$$

This formulation helps to avoid the excessive levels of the turbulence intensity in stagnation regions. The destruction term  $\tilde{Y}_k$  was obtained from the original term  $Y_k$  by using the formula:

$$\tilde{Y}_k = Y_k \max(\gamma, 0.1). \quad (S2.16)$$

It is worth noting that the production and destruction terms of the  $\omega$ -equation (S2.9) were not modified.

The systolic phase of the cardiac cycle was simulated by applying a time-dependent velocity of the plug flow as the inflow boundary condition. The normal velocity component  $U(t)$  was defined by using the clinical Doppler measurements of a human subject and analytic approximations (Fig. S2.1). Fig. S2.1a shows time-dependent velocity in the case of aortic stenosis, and Fig. S2.1b shows time-dependent velocity in the case of a healthy person.



**Fig. S2.1.** The time-dependent velocity in the systolic phase: a) in the case of aortic stenosis; b) in the case of a healthy person

The no-slip boundary conditions were prescribed for velocity on the aorta walls and leaflet surfaces, and they were set to zero.

The so-called outflow boundary condition (ANSYS 2016) is commonly used to model the flow exits in the cases, when the flow velocity and pressure at the outlet are not known prior to solving the flow problem. The required information is extrapolated from the interior of the solution domain, which results in zero diffusion flux. However, the outflow boundary condition usually leads to solution divergence in the case of backflows.

Alternatively, constant (usually zero) pressure is prescribed on the outlet boundary:

$$p = \text{const.} \quad (\text{S2.17})$$

However, this boundary condition is not consistent with the nature of the physiological pulsatile flow through the aortic valve. Therefore, the time-dependent pressure values  $P_W(t)$  can be computed by using the lumped Windkessel models and prescribed on the outlet:

$$p = P_W(t). \quad (\text{S2.18})$$

The three-element Windkessel model (Marom 2014) was employed in the present work. Several sets of the parameters, such as the total arterial compliance, characteristic resistance and peripheral resistance can be considered to imitate human arterial systems (Westerhof et al. 2009). It was observed that the Windkessel model (S2.18) worked as the time-dependent reference pressure constant in the considered case of one outlet.

In general, all Dirichlet boundary conditions for the pressure can be written in a universal form as follows:

$$p = P(x, y, z, t), \quad (\text{S2.19})$$

where the specified pressure function  $P$  can vary in space and time. However, non-uniform and time dependent pressure distribution is rarely prescribed on the outlet boundaries because of the complexity and unavailable experimental data. Some additional possibilities are available for the pressure boundary conditions (S2.17–2.19) in the finite volume codes. It is possible to allow the pressure to vary along the outlet boundary, but maintain an averaged pressure equal to the specified value. For this boundary condition, the allowed pressure variation slightly diminishes the reflectivity of the boundary as compared with the uniform pressure specification. Another possibility is to take advantage of meeting the target mass flow rate. The simple Bernoulli's equation can be used to adjust the pressure on the outlet at every iteration.

In this work, it was observed that application of outflow boundary condition led to pressure distribution of the parabolic shape. Thus, the pressure values on the outlet were extracted from the convergent numerical solution and were approximated by the analytical parabolic surface of revolution known as a paraboloid (Krivoshapko et al. 2015):

$$\frac{p}{c} = \frac{x^2}{a} + \frac{y^2}{b}, \quad (\text{S2.20})$$

In the considered case, coefficients  $a$  and  $b$  were equal, while the coefficient  $c$  was obtained from the pressure values of the numerical solution. It is worth noting that the proposed boundary condition helped to achieve a convergent solution and was able to produce a backflow, which was nearly identical to the backflow yielded by the outflow boundary condition.

### 3. Numerical results of aortic valve flow

In general, the outflow boundary condition is the most suitable for the aortic valve flows until the backflow occurs because it has the laminar flow smallest impact on the upstream flow solution. However, in the investigated case, the solution based on the outflow boundary condition did not converge from the time instance  $t = 0.312$  s. It is worth noting that the analytical approximation of the waveform (Fig. S2.1b)] with comparatively low maximal velocity (0.65m/s) was used as the inflow boundary condition. The following computational procedure was developed to solve the divergence issues. The computations were started by using the outflow boundary condition and were run until the backflow with the following convergence difficulties was observed. For the considered problem, the pressure values on the outlet were extracted from the convergent numerical solution and were approximated by the analytical parabolic surface of revolution known as a paraboloid (Krivoshapko et al. 2015). Then, the outflow boundary condition was changed to the specified pressure boundary condition (S2.19) based on the analytically defined paraboloid to resume computations with the reduced sensitivity to the occurred backflow and the improved convergence. At each time step, the defined pressure surface could be adjusted by the time-dependent constant from the Windkessel model or the other simulated case because of the pulsatile nature of the aortic valve flow. Moreover, the parameters of the analytical surface can vary in time to adapt the developed boundary condition to other transient phenomena. Different modifications of the described procedure were implemented in the user-defined function of ANSYS Fluent to ensure high universality and sufficient automation level.

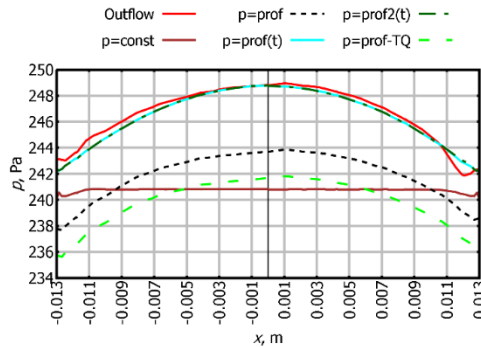


Fig. S3.1 Pressure distribution on the outlet in the case of the proposed boundary conditions

Fig. S3.1 presents pressure profiles on the outlet at the time instance  $t = 0.328$  s computed by using different variants of the proposed boundary condition. The curves “Outflow”, “ $p = \text{const}$ ”, “ $p = \text{prof}$ ” and “ $p = \text{prof-TQ}$ ” represent the pressure values obtained by using the outflow boundary condition, the constant pressure boundary condition (S2.17), the time-independent analytical surface and the time-independent analytical surface with the target mass flow rate, respectively. At  $t = 0.328$  s, the solution obtained by using the outflow boundary condition did not converge, therefore, the resulting pressure distribution

presented for comparison reasons was of the non-smooth oscillating character. The pressure boundary condition based on the time-independent analytical surfaces underestimated the pressure values during the flow deceleration phase. Other curves, “ $p = \text{prof}(t)$ ” and “ $p = \text{prof}2(t)$ ”, denote the outlet pressure values of computations restarted at different time instances  $t = 0.304\text{s}$  and  $t = 0.200\text{ s}$ , respectively. The generated analytical surface (S2.19) was adjusted by the time-dependent constant from the Windkessel model at each time step to follow the pulsatile flow character. The outlet pressure distribution obtained by using the time-dependent analytical surfaces was very close to that obtained by using the outflow boundary condition. Different restart times were considered to assess how well the developed computational procedure, implementing the proposed boundary condition, approximated pressure distribution yielded by the outflow boundary condition in the case of a longer simulation time. Nearly identical values could be observed for different restart times, which showed that, in terms of accuracy, the implemented procedure was not sensitive to the number of simulated time steps or the length of the simulated time interval in the case of the performed computations.

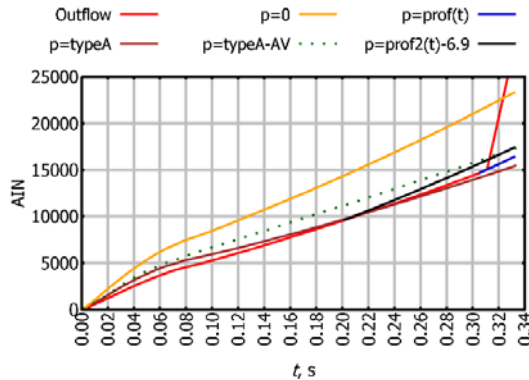


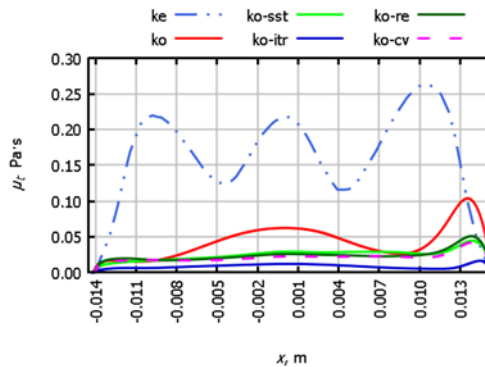
Fig. S3.2. Convergence of numerical solutions

Fig. S3.2 presents time evolution of the accumulated iteration number (AIN), which illustrates the convergence of the numerical solutions obtained by using various boundary conditions. Usually, the curves “Outflow”, “ $p = 0$ ”, “ $p = \text{typeA}$ ” and “ $p = \text{typeA-AV}$ ” represent the convergences (AIN) of the numerical solutions obtained by using the outflow boundary condition, the zero pressure boundary condition, the Windkessel pressure boundary condition (S2.18) relevant to the “type A” beat and the Windkessel pressure boundary condition relevant to the “type A” beat with the averaged pressure. Other curves, such as, “ $p = \text{prof}(t)$ ” and “ $p = \text{prof}2(t)$ ”, denote the solutions, obtained by using the proposed boundary condition (S2.19) based on the time-dependent analytical pressure surfaces that were restarted at different time instances  $t = 0.304\text{ s}$  and  $t = 0.200\text{ s}$ , respectively. The fastest solution convergence could be observed applying the Windkessel pressure boundary condition. The applied averaged pressure correction decreased the convergence rate. In the case of the investigated problem, the Windkessel model worked just as the time-dependent reference pressure constant. However, the solution based on the Windkessel pressure boundary condition converged much faster than the solution obtained by using

the zero pressure boundary condition. As mentioned above, the solution based on the outflow boundary condition did not converge from the time instance  $t = 0.312$  s, which was shown by a sudden increase in the accumulated iteration number. The curves “ $p = \text{prof}(t)$ ” and “ $p = \text{prof2}(t)$ ” show that the application of the proposed boundary condition at time instances  $t = 0.304$  s and  $t = 0.200$  s just slightly decreased the convergence rate observed in the case of the outflow boundary condition.

In the present research,  $k-\varepsilon$  model and various modifications of the  $k-\omega$  model were investigated to evaluate the effects of the low Reynolds number turbulence in the pulsatile aortic valve flow. Moreover, the obtained results were compared with those of the DNS. The high inflow velocity was specified according to the measured waveform shown in Fig. S2.1a. The Reynolds number reaches 7103, which is relevant to low Reynolds number turbulent flow. The dense finite volume mesh “t-V” with 1 969 995 finite volumes was employed for analysis of turbulence models.

The curve “ke” denotes the results yielded by the standard  $k-\varepsilon$  turbulence model. The curves “ko”, “ko-sst”, “ko-re”, “ko-cv” and “ko-itr” present the results obtained by using the standard  $k-\omega$  model, the SST  $k-\omega$  model (S2.5–2.10), the SST  $k-\omega$  model with the low Reynolds number correction (S2.7), the SST  $k-\omega$  model with the low Reynolds number correction and curvature correction, as well as the SST  $k-\omega$  model enhanced by the intermittency transition equation (S2.11), respectively. The transitional turbulence model based on the intermittency transition equation includes the corrections of the low Reynolds number, the curvature and cross flow transition. The transition model, which does not evaluate the cross flow transition was also investigated.

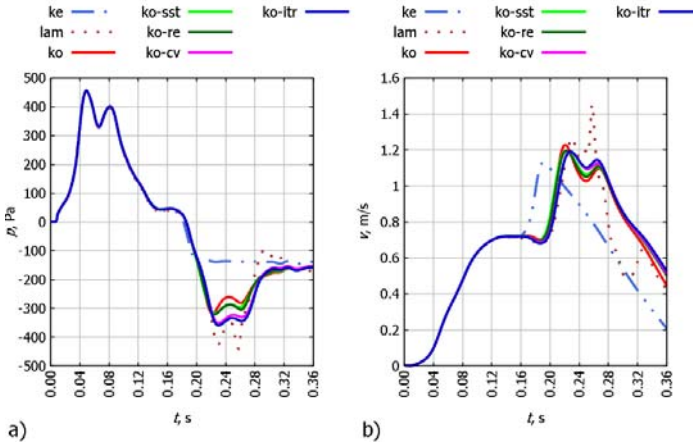


**Fig. S3.3.** Turbulent viscosity values on a line segment ( $x_3 = 0.040$  m) in the case of the peak systole, when  $t = 0.140$  s

Fig. S3.3 shows the distribution of turbulent viscosity in the case of the peak systole, when  $t = 0.140$  s. The main flow and two large vortices resulted in three peaks of turbulent viscosity values that can be clearly seen in the curve “ke” of the  $k-\varepsilon$  model. All  $k-\omega$  models generated much lower turbulent viscosity, but the turbulent viscosity values of the standard  $k-\omega$  model most closely matched those of the  $k-\varepsilon$  model. The lowest turbulent viscosity values of the SST  $k-\omega$  were obtained using the intermittency transition model, and this resulted in the lowest diffusion of laminar flow vortices. Other variants of  $k-\omega$  turbulence

models produced slightly different turbulent viscosity values, but the curve “ko-cv”, representing the SST  $k-\omega$  model with the low Reynolds number correction and curvature correction, most closely matched the curve “ko-itr”.

Fig. S3.4 presents time evolution of the pressure and  $z$  velocity component at the centerline point with the coordinates  $x^1=0.000$  m,  $x^2=0.000$  m or  $x^3=0.070$  m. The laminar solution had an oscillating nature in the case of both variables. The application of the  $k-\varepsilon$  model resulted in an over diffusive solution. The results yielded by the  $k-\omega$  models were much closer to the laminar solution. In most cases, the SST  $k-\omega$  model enhanced by intermittency transition produced the lowest turbulent viscosity values (Fig. S3.4), therefore, its solution most closely matched the laminar one. It is worth noting that the curve “ko-cv” was closer to the curve “ko-itr” than the other ones. Therefore, the SST  $k-\omega$  model with the low Reynolds number correction and curvature correction can also be useful for predicting the velocity and pressure fields.



**Fig. S3.4.** Influence of turbulence models on the time dependence of the variables at the point of the central aortic valve axis with the  $x_3$  coordinate 0.070 m: a) pressure, b)  $u_3$  velocity component

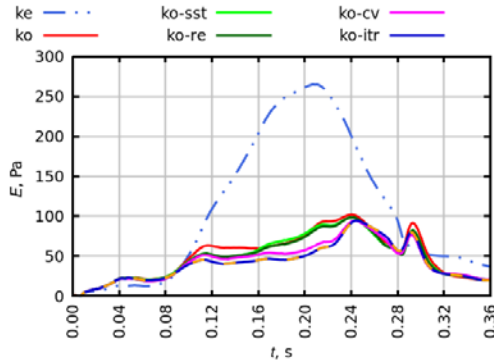
Fig. S3.5 shows time evolution of pressure differences between the DNS and turbulent solutions. Each curve represents the difference between the DNS flow pressure  $p_{DNS}$  and the turbulent flow pressure  $p_{turb}$  obtained by using the particular turbulence model in  $L_2$  norm:

$$E = \|p_{DNS} - p_{turb}\|_2, \quad (S3.1)$$

which shows medium variation of the pressure differences in the solution domain. It is evident that the difference between the results obtained by using the  $k-\varepsilon$  model and the DNS is the largest. The results yielded by all  $k-\omega$  models are closer to the DNS solution, which is natural for low Reynolds number turbulence flows. In most of the time instances, the  $k-\omega$  with intermittency transition model revealed the smallest difference. Its curve “ko-itr” was identical to the curve “ko-itr-cf” of the same model, which did not evaluate the

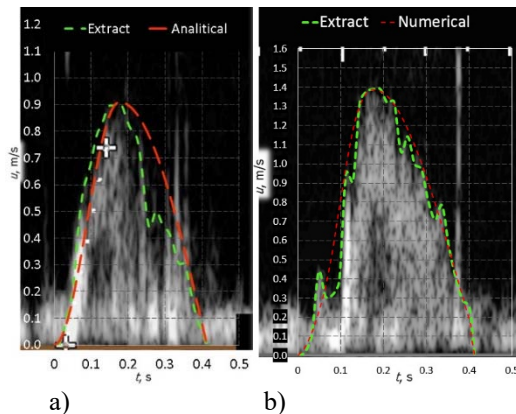


cross flow transition. Therefore, it can be concluded that the influence of the cross flow transition is not significant in the investigated aortic valve flows.



**Fig. S3.5.** Time evolution of pressure differences between the laminar and turbulent solutions in  $L_2$  norm

The developed numerical model was validated by using pulsed-wave Doppler velocity measurements. The solution domain was defined by the geometrical model (Fig. S2.1b), which was constructed according to patient-specific parameters. The flow was described by differential Navier-Stokes equations (S2.1–S2.3) and SST  $k-\omega$  turbulence model (S2.4–S2.10) with the intermittency transport equation (S2.11–S2.16). The inlet boundary condition was obtained from analytical approximation of Doppler velocity measurements in the left ventricular ejection tract (Fig. S3.6 a). At the peak velocity 0.909 m/s the Reynolds number reaches 6218, which is relevant to low Reynolds number turbulent flow. Numerical velocity values were compared with Doppler velocity measurements in (Fig. S3.6 b) the point P2 ( $x_3^2=0.025$ ) located on the aortic valve axis.



**Fig. S3.6.** Determination of blood velocity: a) in the left ventricular ejection tract (inlet boundary condition); b) in the aorta (point at „P2“)

The maximal velocity  $v_{\max}$  extracted from Doppler image was equal 1.390 m/s, while the numerically computed velocity equaled 1.386 m/s. The difference was only 0.32% of the measured maximal velocity at the peak systole. In time instances selected at regular intervals, the average difference of the natural velocity measurements and the numerical solution is 0.082 m/s, which is 5.9% of the maximum velocity value. The largest error was observed at the beginning of the time interval ( $t=[0.0; 0.128$  s]), with the mean value equal 7.7% of the maximum velocity. Meanwhile, the mean of numerical error observed at the end of the time interval ( $t=[0.240; 0.412$  s]) was equal to 6.5% of the maximum velocity value.

It can be summarized that the developed numerical model accurately determines the maximum value of the velocity field in the systolic peak, which is the aim of the performed research. However, at the beginning and at the end of the systole, the errors are significantly higher because the model does not consider the movement of aortic valve leaflets and their full interaction with blood flow. The accuracy of the calculations and quantitative comparison is undoubtedly reduced by the measurement errors and the problems of the coincidence between the 3D numerical solution domain and the measurement probe location.

## General conclusions

1. The literature review and study of numerical parameters showed that numerical solutions based on the laminar flow model had the non-smooth oscillating character. Moreover, the solution divergence might occur due to the significant backflow at the end of the pulse wave.
2. The novel outlet boundary conditions based on the parabolic pressure surface extended the convergence of numerical solution to the end of the considered time interval. The convexity of the pressure surface extracted from the computational outlet pressure values produced the backflow, which was very close to the backflow yielded by the outflow boundary condition.
3. A comparative study of the DNS solution and the numerical results obtained by using various  $k-\omega$  and  $k-\varepsilon$  turbulence models was performed for the low Reynolds number turbulent aortic valve flows. The shear-stress transport  $k-\omega$  model supplemented with the intermittency transition equation damped numerical oscillations, improved the convergence of numerical solution and revealed the smallest differences between the DNS and turbulent flows.
4. Comparison of the numerical solution with the measurements of medical echocardiography equipment based on the Doppler Effect showed that the difference in velocity values at the peak systole was only 0.32% of the measured velocity value. The mean of the modulus of the velocity differences over the time period considered was 5.9% of the maximum velocity value at the systolic peak. Thus, the generated numerical model accurately determines the maximum value of the velocity field on the peak systole.

---

## Priedai<sup>3</sup>

**A priedas.** Disertacijos autorės sąžiningumo deklaracija

**B priedas.** Bendraautorių sutikimai teikti publikacijose skelbtą medžiagą disertacijoje

**C priedas.** Autorės mokslinių publikacijų disertacijos tema kopijos

---

<sup>3</sup> Priedai pateikiami pridėtoje kompaktinėje plokštelėje.

Miglė STAŠKŪNIENĖ

MAŽAIS REINOLDSO SKAIČIAIS  
CHARAKTERIZUOJAMOS TURBULENTINĖS  
TĖKMĖS AORTOS VOŽTUVE MODELIAVIMAS

Daktaro disertacija

Technologijos mokslai,  
Mechanikos inžinerija (T 009)

MODELLING OF LOW REYNOLDS  
NUMBERS TURBULENT FLOW  
IN THE AORTIC VALVE

Doctoral Dissertation

Technological Sciences,  
Mechanical Engineering (T 009)

2021 02 17. 10,0 sp. I. Tiražas 20 egz.  
Leidinio elektroninė versija <https://doi.org/10.20334/2021-003-M>  
Vilniaus Gedimino technikos universitetas,  
Saulėtekio al. 11, 10223 Vilnius,  
Spausdino BĮ UAB „Baltijos kopija“,  
Kareivių g. 13B, 09109 Vilnius

## **A priedas. Disertācijas autorēs sūžiningumo deklaracija**

**B priedas. Bendraautorių sutikimai teikti publikacijose skelbtą medžiagą disertacijoje**



























**C priedas. Autorės mokslinių publikacijų disertacijos  
tema kopijos**