

Научная статья

**ПЕРСОНАЛИЗИРОВАННОЕ 0D–3D-МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕЧЕНИЯ КРОВИ  
У НОВОРОЖДЕННЫХ ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ РИСКОВ ОСЛОЖНЕНИЙ  
ПОСЛЕ ОПЕРАТИВНОГО ЛЕЧЕНИЯ****А.Г. Кучумов<sup>1</sup>, М.Р. Камалтдинов<sup>2</sup>, А.Р. Хайрулин<sup>1</sup>, М.В. Кочергин<sup>1</sup>, М.И. Шмурак<sup>1</sup>**<sup>1</sup>Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Россия, 614990, г. Пермь, Комсомольский проспект, 29<sup>2</sup>Федеральный научный центр медико-профилактических технологий управления рисками здоровью населения, Россия, 614045, г. Пермь, ул. Монастырская, 82

*Аномалии развития сердечно-сосудистой системы являются распространенными врожденными пороками. Применение методов вычислительной гидродинамики и математического моделирования позволяет выполнять количественные прогнозные оценки гемодинамических характеристик в различных условиях.*

*Работа посвящена разработке сопряженной 0D–3D-модели течения крови у новорожденных для прогнозирования рисков осложнений после оперативного лечения. Основы построения 0D-модели системного кровотока заключаются в использовании аналогии между течением крови в сосудах и протеканием тока по электрической цепи. Участок аорты и легочной артерии с шунтом заменяется 3D-моделью с двусторонним взаимодействием «жидкость – твердое тело» (FSI). Участок сосуда с аортальным клапаном рассматривается в отдельной 3D-модели. Трехмерная геометрия создается на основе реальных снимков компьютерной томографии пациента. Алгоритм сопряжения моделей разного уровня основан на соблюдении условий равенства давлений и объемных расходов крови на границе взаимодействия.*

*Разработан алгоритм идентификации персональных параметров из результатов решения оптимизационной задачи. В результате численных экспериментов с различной индивидуальной геометрией аорты и клапана были проанализированы скорости течения крови, пристеночные напряжения, течения, деформации клапана. Наблюдаемые в результатах пристеночные напряжения могут рассматриваться как факторы риска возникновения кальцификации на створках клапана и других заболеваний клапана.*

*В результате численного решения в 3D-системе «аорта – шунт – легочная артерия» были получены пространственные распределения скоростей, давлений, пристеночных напряжений и других важных с точки зрения развития патологий характеристик. Разработанные подходы, в первую очередь, могут быть полезны для принятия решений в хирургической практике для прогнозирования риска послеоперационных осложнений. В дальнейшем планируется учет в модели процессов сатурации и кислородного обмена для оценки адекватности снабжения легких кислородом.*

**Ключевые слова:** 0D–3D-модель кровотока, алгоритм сопряжения, идентификация параметров, пациент-ориентированный, аорта, клапан сердца, новорожденный, шунт, риск послеоперационных осложнений.

Обструктивные поражения выводного тракта правого желудочка, изолированные или сочетающиеся с другими врожденными пороками сердца, составляют 25–30 % врожденных аномалий сердца [1]. Прорывным решением в хирургическом лечении

цианотических врожденных пороков сердца, таких как тетрада Фалло, атрезия клапана легочной артерии и некоторых других, оказалось создание межсистемного шунта (в частности модифицированного шунта Блэлока – Тауссига) [2, 3]. Важно отметить, что мо-

© Кучумов А.Г., Камалтдинов М.Р., Хайрулин А.Р., Кочергин М.В., Шмурак М.И., 2022

**Кучумов Алексей Геннадьевич** – доктор физико-математических наук, доцент кафедры вычислительной математики, механики и биомеханики (e-mail: kuchumov@inbox.ru; тел.: 8 (342) 239-17-02; ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-0466-175X>).

**Камалтдинов Марат Решидович** – кандидат физико-математических наук, заведующий лабораторией ситуационного моделирования и экспертно-аналитических методов управления (e-mail: kmr@fcrisk.ru; тел.: 8 (342) 237-18-04; ORCID: <http://orcid.org/0000-0003-0969-9252>).

**Хайрулин Александр Рафаилович** – студент кафедры вычислительной математики, механики и биомеханики (e-mail: s.xayrulin@mail.ru; тел.: 8 (342) 239-17-02; ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-7506-5568>).

**Кочергин Максим Владимирович** – студент кафедры вычислительной математики, механики и биомеханики (e-mail: breakingkeyboard@gmail.com; тел.: 8 (342) 239-17-02).

**Шмурак Марина Ивановна** – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры вычислительной математики, механики и биомеханики (e-mail: shmurak2007@yandex.ru; тел.: 8 (342) 239-17-02; ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-8060-7643>).

дифицированный шунт Блэлока – Тауссига продолжает оставаться процедурой высокого риска, которая может привести к чрезмерной объемной нагрузке и острому тромбозу [4, 5]. Выбор оптимального диаметра шунта является важной задачей, которая не решена по настоящее время [6, 7].

Заболевание аортального клапана является одним из наиболее распространенных сердечно-сосудистых заболеваний, при этом нарушения клапанов могут быть врожденными, как в случае формирования двустворчатого клапана, или могут развиваться позже в течение жизни в виде кальцификации створок [8, 9]. Обычно диагностика заболевания клапана проводится путем визуального изучения медицинских изображений пациента врачом, что является субъективной оценкой [10]. Существует потребность в точных методах, позволяющих количественно оценить функцию аортального клапана. С помощью подходов компьютерного моделирования можно точно моделировать движение аортального клапана и извлекать информацию для качественной и количественной оценки функции клапана [11].

Применение методов вычислительной гидродинамики и математического моделирования несет несколько преимуществ. Во-первых, можно прогнозировать характеристики кровотока при различных сценариях оперативного вмешательства. Во-вторых, по результатам моделирования можно получить критические уровни характеристик здоровья у конкретного пациента, свидетельствующие о целесообразности проведения операции. Кроме того, применение биомеханического моделирования может предсказать некоторые фундаментальные закономерности, характерные для патологических процессов.

На текущий момент сложилось понимание, что необходимо разрабатывать комплексные многомасштабные модели для решения подобного рода задач [12]. Разработаны основные принципы сопряжения 0D, 1D, 3D для получения характеристик кровотока [13, 14]. В исследовании [15] рассматривалось соединение 1D–3D-моделей, при этом учитывалась упругость стенки сосудов. В работе [16] реализовано объединение конечно-элементной модели аорты и левого желудочка с 0D-моделью кровообращения для пациента с диагнозом легочной артериальной гипертензии. В результатах исследований [17] рассмотрены характеристики объединения 3D-твердотельной двухжелудочковой модели сердца с 0D-моделью сердечно-сосудистой системы с замкнутым контуром на основе приложения CircAdapt. В работе [18] представлена модель течения крови при коарктации аорты, при этом непосредственно дуга аорты рассматривалась как трехмерная область, а остальные сосуды были представлены 0D- и 1D-моделями. Моделирование сложной гидродинамики и движения створок аортального клапана требует применения подхода взаимодействия жидкости и твердого

тела (FSI) [19, 20]. Двумерные (2D) исследования FSI имеют некоторые ограничения из-за высокой турбулентности аортального клапана, и эти 2D-модели должны быть адаптированы к реалистичной геометрии 3D-модели [21, 22].

Проблема, с которой сталкиваются врачи, связана с объективизацией оперативного вмешательства при коарктации аорты и оценке влияния параметров шунта и места его установки на кровоток для правильного развития легких у детей с врожденными патологиями сердца. Для решения проблемы целесообразно построение персонализированной модели кровотока на нескольких масштабных уровнях. На предыдущем этапе работы была разработана концептуальная 0D–3D-схема системного кровотока у новорожденных с модифицированным шунтом Блэлок – Тауссига (рис. 1), подробно рассмотрены результаты 0D-модели [23]. Основы построения 0D-модели системного кровотока заключаются в использовании аналогии между течением крови в сосудах и протеканием тока по электрической цепи. Участок аорты и легочной артерии с шунтом заменяется 3D-моделью с двусторонним взаимодействием «жидкость – твердое тело» (FSI). Участок сосуда с аортальным клапаном рассматривается в отдельной 3D-модели. В данной работе рассмотрены алгоритмы сопряжения разработанных моделей разного уровня и некоторые результаты 3D-моделирования, позволяющие прогнозировать эффективность шунтирования и риски развития осложнений после операции.

**Цель исследования** – разработка сопряженной 0D–3D-модели течения крови у новорожденных для прогнозирования рисков осложнений после оперативного лечения.

**Материалы и методы.** Математическая постановка задачи 0D включает несколько десятков дифференциальных и алгебраических уравнений, для их численного решения использованы схемы Рунге – Кутты 4-го порядка точности [23].

Геометрия 3D-модели аортального клапана создается на основе реальных снимков компьютерной томографии пациента (рис. 2). Снимки преобразованы в трехмерную твердотельную модель с помощью программного обеспечения InVesalius. С использованием программного продукта Meshmixer была построена расчетная сетка. Уравнения потока решаются с помощью программного пакета CFD FLUENT, используются уравнения Навье – Стокса и неразрывности для несжимаемой и однородной текучей среды. Влиянием силы тяжести и теплопередачи между кровью и аортальным клапаном в моделях пренебрегают из-за их незначительного воздействия на деформацию створки. Для моделирования турбулентного характера в аортальном клапане используется модель  $k-\epsilon$  [24]. Аорта и створки клапана моделируются как гиперупругие, закон упругости задается моделью Огдена первого порядка [24].

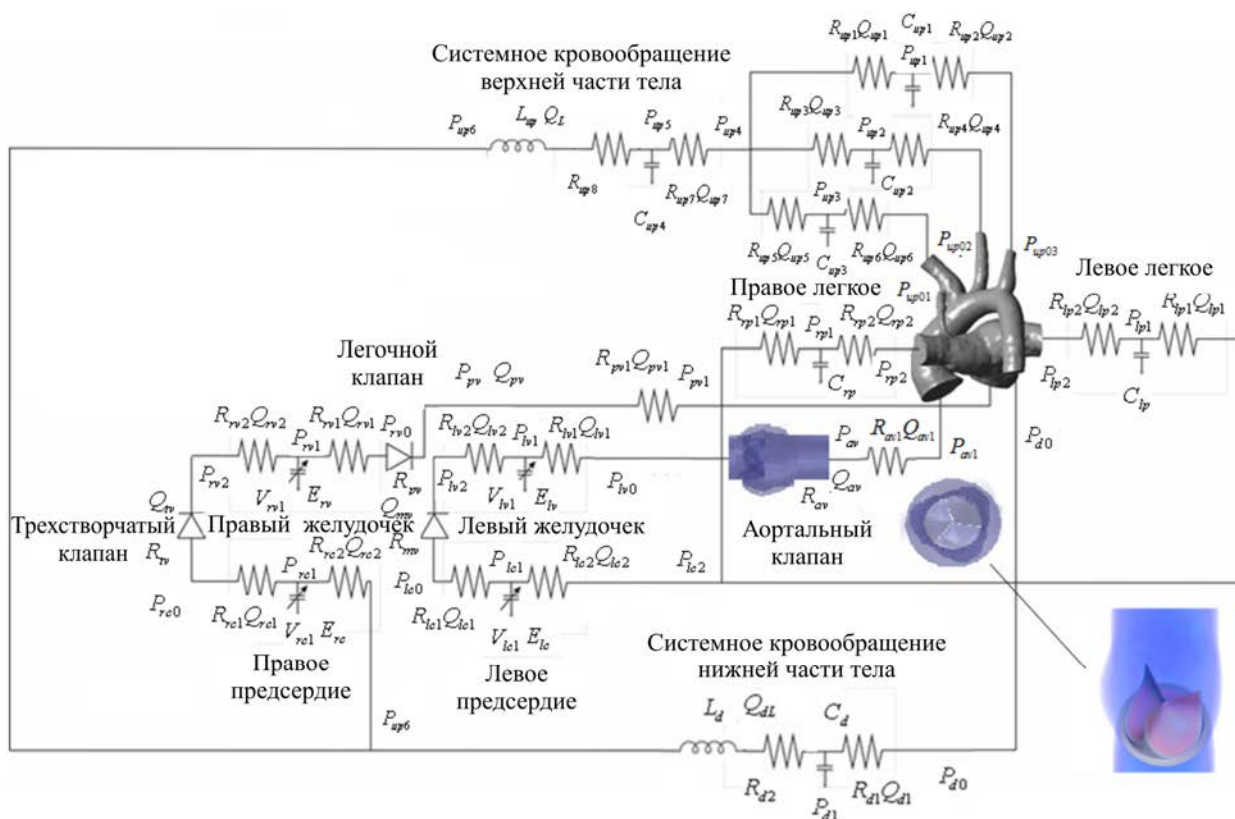


Рис. 1. Концептуальная схема системного кровотока [23]

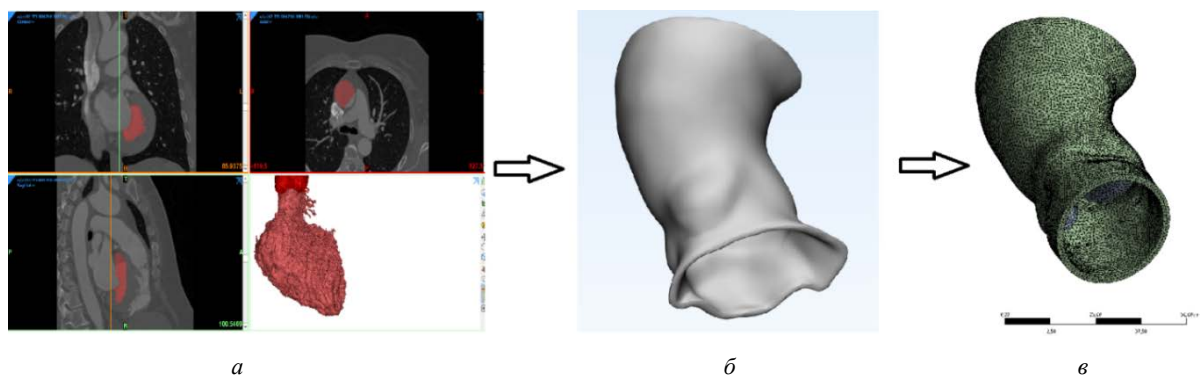


Рис. 2. Аортальный клапан: а – КТ-снимки грудной клетки; б – твердотельная модель; в – построенная расчетная сетка

Аналогичный подход используется для моделирования трехмерного течения в участке аорты и легочной артерии с шунтом.

Алгоритм сопряжения 0D-модели полного системного кровотока и 3D-моделей основан на соблюдении условий равенства давлений и объемных расходов крови на границе взаимодействия [25]. Рассмотрим этапы итерационного алгоритма: 1) определенные на этапе инициализации расходы и давления передаются в 3D-модель для решения; 2) в 3D-модели в стационарной задаче рассчитываются значения давлений на входе и расходов на выходах; 3) рассчитанные на этапе 2 значения снова возвращаются в 0D-модель в качестве граничных условий для решения и определения значений расходов на входе в аор-

ту и легочную артерию, давления на выходах; 4) проверяются условия сходимости на границах:

$$\begin{aligned} |P_{(i)}^{(0)(k)} - P_{(i)}^{(0)(k-1)}| &< \delta P_{(i)}; \\ |Q_{(i)}^{(0)(k)} - Q_{(i)}^{(0)(k-1)}| &< \delta Q_{(i)}, \end{aligned} \quad (1)$$

где  $P_{(i)}^{(0)(k)}$  – давление на  $i$ -й границе в нулевой момент времени на  $k$ -й итерации (для первой итерации  $k = 1$ );

$Q_{(i)}^{(0)(k)}$  – объемный расход на  $i$ -й границе в нулевой момент времени на  $k$ -й итерации;

$\delta P_{(i)}, \delta Q_{(i)}$  – значения критериев сходимости.

В том случае, если критерии (1) выполняются, считается, что получено решение на нулевом шаге,



Рис. 3. Визуальное представление расчетных сеток (слева направо: внутреннее сечение аорты, стенка аорты, створки клапана)

и можно осуществлять переход к следующему временному шагу. В противном случае, значения  $Q_{(i)}^{(0)(k)}$  на входах и  $P_{(i)}^{(0)(k)}$  на выходах снова передаются в 3D-модель, и алгоритм повторяется с этапа 2.

Алгоритм идентификации персональных параметров основан на нахождении такого решения оптимизационной задачи, которое обеспечивало бы периодичность решения по кровотоку и давлению в любой точке 0D-модели. Подробно алгоритм идентификации будет рассмотрен в последующих публикациях авторов.

**Результаты и их обсуждение.** Зависящая от времени величина скорости на входе в аортальный клапан задавалась в виде синусоиды при максимальной скорости потока 0,4 м/с во время систолы. Для крупных артерий скорость деформации сдвига в потоке превышает  $50 \text{ с}^{-1}$ , а вязкость крови почти постоянна из-за высокой скорости сдвига [26]. Поэтому кровь принимается как ньютоновская жидкость с постоянной плотностью  $1050 \text{ кг/м}^3$  и динамической вязкостью  $0,0035 \text{ Па}\cdot\text{с}$  [20].

В результате численных экспериментов было проанализировано несколько характеристик течения с различной индивидуальной геометрией аорты и клапана. На рис. 3 представлена наиболее подходящая расчетная сетка с учетом лучшей сходимости для случая, в котором наблюдаются пиковые значения характеристик течения, свойственных патологическим состояниям.

На рис. 4, а, представлено распределение скоростей в аорте. Пиковая скорость потока в самых узких местах достигает 1,874 м/с, что в 4,68 раза превышает скорость потока на входе в аорту, также отчетливо видны зоны турбулентности. Наибольшее значение пристеночных касательных напряжений проявляется на створках клапана со стороны входящего потока (рис. 4, б). Пиковое значение составляет 209,4 Па, в свою очередь пристеночное касательное напряжение на стенке аорты достигает только 15 Па. На рис. 4, в, представлены перемещения относительно начальной позиции (в нулевой момент времени) до ее положения после расчета. На рис. 4, г, красным выделены участки, которые

больше всего подвержены упругим деформациям – межстворчатые треугольники. Результаты показывают перемещения створок клапана и стенок аорты, а также можно наблюдать завихрения крови в районе полулунных заслонок. Наблюдаемые пристеночные напряжения с медицинской точки зрения могут рассматриваться как факторы риска возникновения кальцификации на створках клапана и других заболеваний клапана.

В качестве расчетной области в 3D-системе «аорта – шунт – легочная артерия» была взята модель с центральным расположением шунта. В результате решения задачи были получены распределения важных с медицинской точки зрения гемодинамических параметров, таких как: скоростные характеристики кровотока, давление на стенки сосуда, пристеночные касательные напряжения, осредненные за сердечный цикл пристеночные касательные напряжения. Результаты были получены в момент времени, соответствующий максимальному значению объемного расхода кровотока  $t = 0,125 \text{ с}$ . Распределение скоростей при использовании 0D-граничных условий хорошо согласуется с имеющимися литературными данными [25] (рис. 5, а), несмотря на различные геометрии моделей. Максимальные значения скоростей наблюдаются в области стыка шунта с аортой и в самом шунте, а низкие – в области легочной артерии. Максимальных значений кровотока достигает в области шунта (значения колеблются в пределах 6 м/с). Что касается распределения касательных напряжений, то также стоит отметить, что результаты имеют как качественное, так и количественное согласование с имеющимися литературными данными [25] (рис. 5, б). Максимальные значения локализуются в областях ответвлений аорты и шунте и колеблются в пределах 100 Па. Минимальные же значения наблюдаются в основном в легочной артерии, восходящей и нисходящей части аорты. При сравнении результатов нужно отметить и различия, которые возникли при моделировании. Результаты распределения скоростей отличаются от имеющихся литературных данных, где максимальные скорости составили только 3,6 м/с [27]. Аналогичная ситуация и с распределением касательных напряжений, давлений, осредненных за

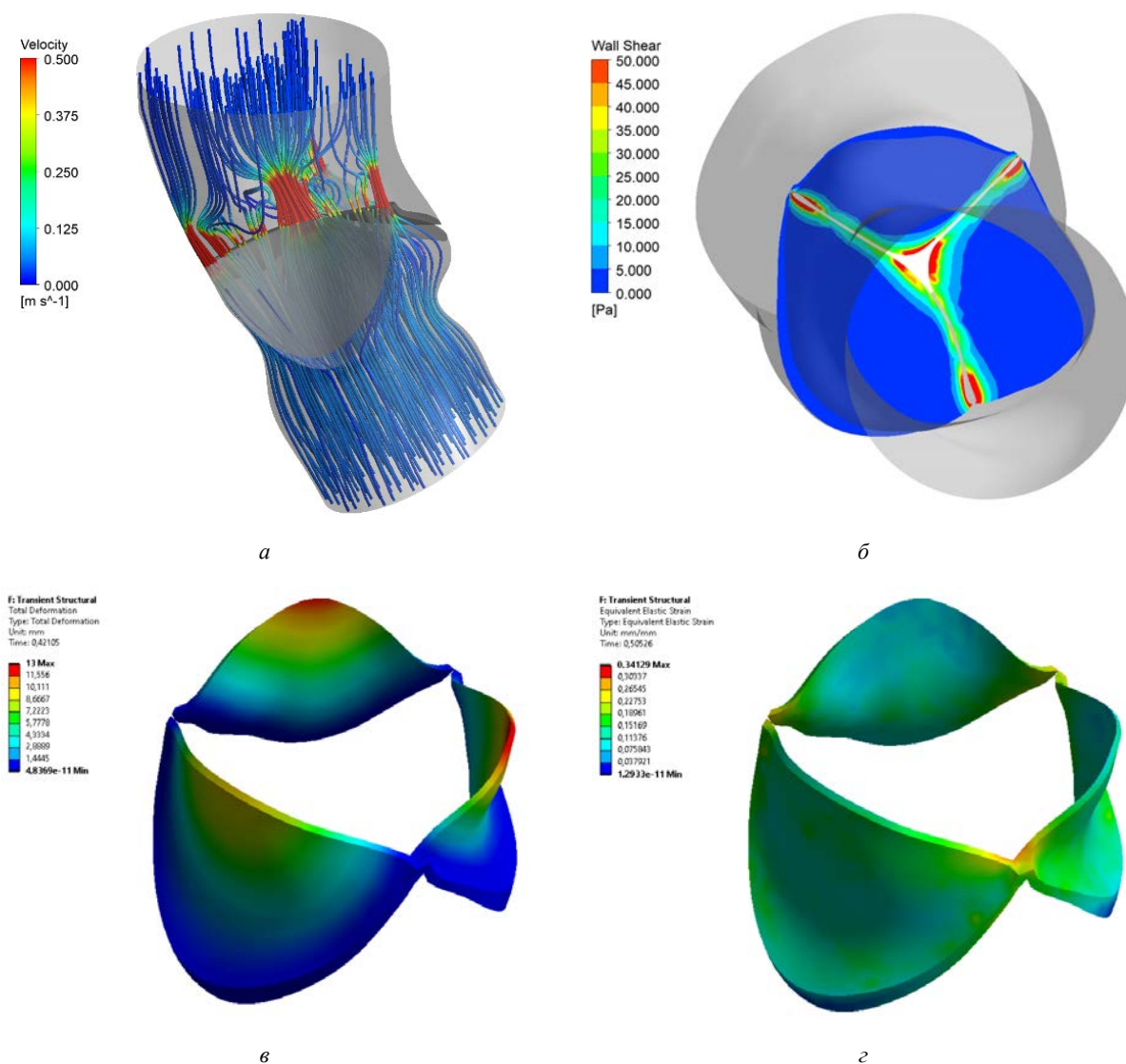


Рис. 4. Распределение характеристик течения в аорте: *а* – скоростей; *б* – пристеночных касательных напряжений; *в* – перемещений створок аортального клапана; *г* – эквивалентных упругих деформаций створок аортального клапана

сердечный цикл касательных напряжений. Максимальные значения касательных напряжений различаются более чем в 2 раза: 40 Па в работах [27, 28] и 100 Па на рис. 5, *б*. Максимальные значения давлений различаются в 2 раза: 13,89 кПа в работах [27, 28] и 26 кПа в данной работе (рис. 5, *в*). Максимальные значения осредненных за сердечный цикл касательных напряжений различаются более чем в 3 раза: 45 Па в работах [27, 28] и 150 Па на рис. 5, *г*. Данные различия объясняются только лишь различием подходов в моделировании течения кровотока, а именно в граничных условиях. В [27] задаются некоторые осредненные профили скорости на входе и константы давления на выходах. В данной же статье граничные условия определяются из совместного решения 0D–3D-модели системного кровотока. Полученный результат для инди-

вида можно трактовать как высокий риск развития осложнений в среднесрочной перспективе при использовании центрального расположения шунта.

**Выводы.** Разработана сопряженная 0D–3D-модель течения крови у новорожденных для прогнозирования рисков осложнений после оперативного лечения. Результаты 0D-моделирования позволяют прогнозировать распределение кровотока в различных частях организма, оценивать изменения потоков крови в легкие после установки шунта. С другой стороны, трехмерные постановки задачи течения крови в аортальном клапане, системе «аорта – шунт – легочная артерия» позволяют прогнозировать важные гемодинамические параметры с пространственным распределением, что делает возможным визуализацию наиболее критических точек.

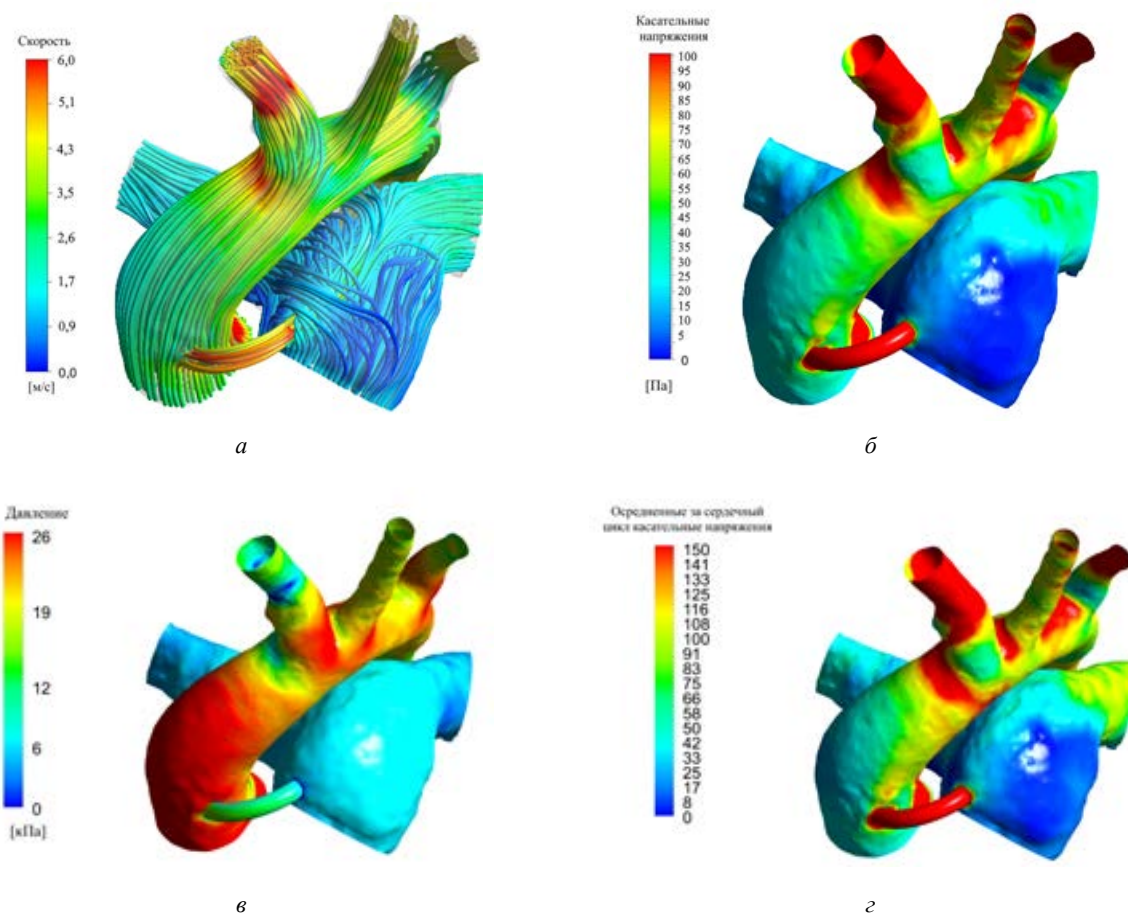


Рис. 5. Распределение характеристик течения в 3D-системе «аорта – шунт – легочная артерия»: а – скоростей; б – касательных напряжений; в – давления; г – осредненных за сердечный цикл пристеночных касательных напряжений

Показано, что результаты индивидуального моделирования при использовании сопряженных моделей могут давать существенно разные гемодинамические характеристики, что подчеркивает важность использования пациент-ориентированных параметров модели. Разработанные подходы, в первую очередь, могут быть полезны для принятия решений в хирургической практике для прогнозирования риска осложнений в различных вариантах оперативного лечения. На данный момент это может быть затруднено из-за большой требуемой вычислительной мощности для проведения расчетов.

В дальнейшем планируется разработать алгоритм подбора оптимальных параметров шунтирования, места установки шунта, его размеров на основе численного эксперимента. Также целесообразно разрабатывать подходы для оценки риска тромбоза шунта. Планируется учет в модели процессов сатурации и кислородного обмена для оценки адекватности снабжения легких кислородом.

**Финансирование.** Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Пермского края в рамках научного проекта № 20-41-596005.

**Конфликт интересов.** Авторы сообщают об отсутствии конфликта интересов.

### Список литературы

1. Occurrence risk for congenital heart defects in relatives of patients with aortic stenosis, pulmonary stenosis, or ventricular septal defect / D.J. Driscoll, V.V. Michels, W.M. Gersony, C.J. Hayes, J.F. Keane, L. Kidd, D.R. Pieroni, L.J. Rings, [et al.] // *Circulation*. – 1993. – Vol. 87, Suppl. 2. – P. I114–I120.
2. Classic versus modified Blalock-Taussig shunts in neonates and infants / A.L. Moulton, J.I. Brenner, R. Ringel, A. Nordenberg, M.A. Berman, S. Ali, J. Burns // *Circulation*. – 1985. – Vol. 72, № 3, pt 2. – P. II35–II44.
3. Modified Blalock-Taussig shunt. Use of subclavian artery orifice as flow regulator in prosthetic systemic-pulmonary artery shunts / M.R. de Leval, R. McKay, M. Jones, J. Stark, F.J. Macartney // *J. Thorac. Cardiovasc. Surg.* – 1981. – Vol. 81, № 1. – P. 112–119.
4. Outcomes of systemic to pulmonary artery shunts in patients weighing less than 3 kg: analysis of shunt type, size, and surgical approach / J.W. Myers, N.S. Ghanayem, Y. Cao, P. Simpson, K. Trapp, M.E. Mitchell, J.S. Tweddell, R.K. Woods // *J. Thorac. Cardiovasc. Surg.* – 2014. – Vol. 147, № 2. – P. 672–677. DOI: 10.1016/j.jtcvs.2013.09.055

5. Modified Blalock-Taussig shunt: immediate and short-term follow-up results in neonates / U. Ahmad, S.H. Fatimi, I. Naqvi, M. Atiq, S.S. Moizuddin, K.B. Sheikh, S. Shahbuddin, T.M. Naseem, M.A. Javed // *Heart Lung Circ.* – 2008. – Vol. 17, № 1. – P. 54–58. DOI: 10.1016/j.hlc.2007.06.003
6. Modified Blalock Taussig shunt: a not-so-simple palliative procedure / V. Dirks, R. Prêtre, W. Knirsch, E.R. Valsangiacomo Buechel, B. Seifert, M. Schweiger, M. Hübler, H. Dave // *Eur. J. Cardiothorac. Surg.* – 2013. – Vol. 44, № 6. – P. 1096–1102. DOI: 10.1093/ejcts/ezt172
7. Risk factors for acute shunt blockage in children after modified Blalock-Taussig shunt operations / M. Gedicke, G. Morgan, A. Parry, R. Martin, R. Tulloh // *Heart Vessels.* – 2010. – Vol. 25, № 5. – P. 405–409. DOI: 10.1007/s00380-009-1219-1
8. Sun L., Chandra S., Sucosky P. Ex vivo evidence for the contribution of hemodynamic shear stress abnormalities to the early pathogenesis of calcific bicuspid aortic valve disease // *PLoS One.* – 2012. – Vol. 7, № 10. – P. e48843. DOI: 10.1371/journal.pone.0048843
9. Ruiz J.L., Hutcheson J.D., Aikawa E. Cardiovascular calcification: current controversies and novel concepts // *Cardiovasc. Pathol.* – 2015. – Vol. 24, № 4. – P. 207–212. DOI: 10.1016/j.carpath.2015.03.002
10. Valvular heart disease: diagnosis and management / K. Maganti, V.H. Rigolin, M.E. Sarano, R.O. Bonow // *Mayo Clin. Proc.* – 2010. – Vol. 85, № 5. – P. 483–500. DOI: 10.4065/mcp.2009.0706
11. Toward patient-specific simulations of cardiac valves: state-of-the-art and future directions / E. Votta, T.B. Le, M. Stevanella, L. Fusini, E.G. Caiani, A. Redaelli, F. Sotiropoulos // *J. Biomech.* – 2013. – Vol. 46, № 2. – P. 217–228. DOI: 10.1016/j.jbiomech.2012.10.026
12. Patient-Specific Multi-Scale Model Analysis of Hemodynamics Following the Hybrid Norwood Procedure for Hypoplastic Left Heart Syndrome: Effects of Reverse Blalock-Taussig Shunt Diameter / A. Ceballos, R. Prather, E. Divo, A.J. Kassab, W.M. DeCampi // *Cardiovasc. Eng. Technol.* – 2019. – Vol. 10, № 1. – P. 136–154. DOI: 10.1007/s13239-018-00396-w
13. An integrated approach to patient-specific predictive modeling for single ventricle heart palliation / C. Corsini, C. Baker, E. Kung, S. Schievano, G. Arbia, A. Baretta, G. Biglino, F. Migliavacca [et al.] // *Comput. Methods Biomech. Biomed. Engin.* – 2014. – Vol. 17, № 14. – P. 1572–1589. DOI: 10.1080/10255842.2012.758254
14. Application of multiscale coupling models in the numerical study of circulation system / Z. Chi, L. Beile, L. Deyu, F. Yubo // *Medicine in Novel Technology and Devices.* – 2022. – Vol. 14. – P. 100117. DOI: 10.1016/j.medntd.2022.100117
15. Dobroserdova T., Olshanskii M., Simakov S. Multiscale coupling of compliant and rigid walls blood flow models // *International journal for numerical methods in fluids.* – 2016. – Vol. 82, № 12. – P. 799–817. DOI: 10.1002/fld.4241
16. Multiscale Modeling Framework of Ventricular-Arterial Bi-directional Interactions in the Cardiopulmonary Circulation / S.M. Shavik, C. Tossas-Betancourt, C.A. Figueroa, S. Baek, L.C. Lee // *Front. Physiol.* – 2020. – Vol. 11. – P. 2. DOI: 10.3389/fphys.2020.00002
17. A computationally efficient physiologically comprehensive 3D–0D closed-loop model of the heart and circulation / C.M. Augustin, M.A.F. Gsell, E. Karabelas, E. Willemen, F.W. Prinzen, J. Lumens, E.J. Vigmond, G. Plank // *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* – 2021. – Vol. 386. – P. 114092. DOI: 10.1016/j.cma.2021.114092
18. Subject-specific simulation for non-invasive assessment of aortic coarctation: Towards a translational approach / M. Mercuri, K. Wustmann, H. von Tengg-Kobligk, C. Göksu, D.R. Hose, A. Narracott // *Med. Eng. Phys.* – 2020. – Vol. 77. – P. 69–79. DOI: 10.1016/j.medengphy.2019.12.003
19. Fully-coupled fluid-structure interaction simulation of the aortic and mitral valves in a realistic 3D left ventricle model / W. Mao, A. Caballero, R. McKay, C. Primiano, W. Sun // *PLoS One.* – 2017. – Vol. 12, № 9. – P. e0184729. DOI: 10.1371/journal.pone.0184729
20. 3D Fluid-Structure Interaction Simulation of Aortic Valves Using a Unified Continuum ALE FEM Model / J.H. Spühler, J. Jansson, N. Jansson, J. Hoffman // *Front. Physiol.* – 2018. – Vol. 9. – P. 363. DOI: 10.3389/fphys.2018.00363
21. Fluid-structure interaction analysis of bioprosthetic heart valves: Significance of arterial wall deformation / M.C. Hsu, D. Kamensky, Y. Bazilevs, M.S. Sacks, T.J. Hughes // *Comput. Mech.* – 2014. – Vol. 54, № 4. – P. 1055–1071. DOI: 10.1007/s00466-014-1059-4
22. Evaluation of an aortic valve prosthesis: Fluid-structure interaction or structural simulation? / G. Luraghi, W. Wu, F. De Gaetano, J.F. Rodriguez Matas, G.D. Moggridge, M. Serrani, J. Stasiak, M.L. Costantino, F. Migliavacca // *J. Biomech.* – 2017. – Vol. 58. – P. 45–51. DOI: 10.1016/j.jbiomech.2017.04.004
23. Камалтдинов М.Р., Кучумов А.Г. Применение математической модели системного кровообращения для определения параметров операции шунтирования у новорожденных // *Российский журнал биомеханики.* – 2021. – Т. 25, № 3. – С. 313–330. DOI: 10.15593/RZhBiomeh/2021.3.07
24. Assessment of calcified aortic valve leaflet deformations and blood flow dynamics using fluid-structure interaction modeling / A. Amindari, L. Saltik, K. Kirkkopru, M. Yacoub, H.C. Yalcin // *Inform. Med. Unlocked.* – 2017. – Vol. 9. – P. 191–199. DOI: 10.1016/j.imu.2017.09.001
25. Hemodynamic effects of the anastomoses in the modified Blalock–Taussig shunt: a numerical study using a 0D/3D coupling method / X. Zhao, Y. Liu, J. Ding, X. Ren, F. Bai, M. Zhang, L. Ma, W. Wang [et al.] // *J. Mech. Med. Biol.* – 2015. – Vol. 15, № 01. – P. 1550017. DOI: 10.1142/S0219519415500177
26. Young D.F. Fluid mechanics of arterial stenosis // *J. Biomech. Eng.* – 1979. – Vol. 101, № 3. – P. 157–175. DOI: 10.1115/1.3426241
27. Оценка эффективности установки модифицированного шунта Блэлок – Тауссиг у детей с врожденным пороком сердца / А.Г. Кучумов, А.Р. Хайрулин, А.Н. Биянов, А.А. Породииков, В.Б. Арутюнян, Ю.С. Синельников // *Российский журнал биомеханики.* – 2020. – Т. 24, № 1. – С. 76–96. DOI: 10.15593/RJBiomech/2020.1.08
28. The Effects of the Mechanical Properties of Vascular Grafts and an Anisotropic Hyperelastic Aortic Model on Local Hemodynamics during Modified Blalock-Taussig Shunt Operation, Assessed Using FSI Simulation / A.G. Kuchumov, A. Khairulin, M. Shmurak, A. Porodikov, A. Merzlyakov // *Materials (Basel).* – 2022. – Vol. 15, № 8. – P. 2719. DOI: 10.3390/ma15082719

*Персонализированное 0D–3D-моделирование течения крови у новорожденных для прогнозирования рисков осложнений после оперативного лечения / А.Г. Кучумов, М.Р. Камалтдинов, А.Р. Хайрулин, М.В. Кочергин, М.И. Шмурак // Анализ риска здоровью.* – 2022. – № 4. – С. 159–167. DOI: 10.21668/health.risk/2022.4.15

Research article

**PATIENT-SPECIFIC 0D–3D MODELING OF BLOOD FLOW IN NEWBORNS TO PREDICT RISKS OF COMPLICATIONS AFTER SURGERY****A.G. Kuchumov<sup>1</sup>, M.R. Kamaltdinov<sup>2</sup>, A.R. Khairulin<sup>1</sup>, M.V. Kochergin<sup>1</sup>, M.I. Shmurak<sup>1</sup>**<sup>1</sup>Perm National Research Polytechnic University, 29 Komsomolskii Ave., Perm, 614990, Russian Federation<sup>2</sup>Federal Scientific Center for Medical and Preventive Health Risk Management Technologies, 82 Monastyrskaya Str., Perm, 614045, Russian Federation

*Abnormal developments of the cardiovascular system are common congenital malformations. Computational fluid dynamics and mathematical modeling can be used to perform quantitative predictive assessments of hemodynamic properties in varied conditions.*

*This article addresses the development of a coupled 0D–3D model of blood flow in newborns to predict risks of complications after surgery. The 0D-model of systemic circulations is created by using the analogy between the blood flow in vessels and the flow of current through an electric circuit. A shunted section of the aorta and pulmonary artery is replaced with a 3D-model with two-way fluid-solid interaction (FSI). A section in a vessel with the aortic valve is examined in a separate 3D-model. Three-dimensional geometry is based on real CT-scans of a patient. The algorithm for coupling models of different levels relies on meeting the condition that pressures and volumetric blood flows are equal at the interaction boundary.*

*We have developed an algorithm for identifying personal parameters from the results obtained by solving an optimization problem. Computational experiments with different individual geometry of the aorta and aortic valve made it possible to analyze blood flow velocities, near-wall stresses, flows, and valve deformations. Observable near-wall stresses can be considered risk factors that could cause calcification on valve leaflets and other valve diseases.*

*Computational solutions in the “aorta – shunt – pulmonary artery” 3D-system allowed obtaining spatial distributions of velocities, pressures, near-wall stresses and other parameters that are significant in respect to probable pathology development. The developed approaches are primarily relevant for decision-making in surgical practice to predict risks of post-operative complications. In future, our plans are to develop the model so that it covers also saturation and oxygen exchange. This is necessary for assessing whether oxygen supply to the lungs is adequate.*

**Keywords:** 0D–3D model of blood flow, coupling algorithm, identification of parameters, patient-oriented, aorta, heart valve, newborn, shunt, risk of postoperative complications.

**References**

1. Driscoll D.J., Michels V.V., Gersony W.M., Hayes C.J., Keane J.F., Kidd L., Pieroni D.R., Rings L.J. [et al.]. Occurrence risk for congenital heart defects in relatives of patients with aortic stenosis, pulmonary stenosis, or ventricular septal defect. *Circulation*, 1993, vol. 87, suppl. 2, pp. I114–I120.
2. Moulton A.L., Brenner J.I., Ringel R., Nordenberg A., Berman M.A., Ali S., Burns J. Classic versus modified Blalock-Taussig shunts in neonates and infants. *Circulation*, 1985, vol. 72, no. 3, pt 2, pp. II35–II44.
3. De Leval M.R., McKay R., Jones M., Stark J., Macartney F.J. Modified Blalock-Taussig shunt. Use of subclavian artery orifice as flow regulator in prosthetic systemic-pulmonary artery shunts. *J. Thorac. Cardiovasc. Surg.*, 1981, vol. 81, no. 1, pp. 112–119.
4. Myers J.W., Ghanayem N.S., Cao Y., Simpson P., Trapp K., Mitchell M.E., Tweddell J.S., Woods R.K. Outcomes of systemic to pulmonary artery shunts in patients weighing less than 3 kg: analysis of shunt type, size, and surgical approach. *J. Thorac. Cardiovasc. Surg.*, 2014, vol. 147, no. 2, pp. 672–677. DOI: 10.1016/j.jtcvs.2013.09.055
5. Ahmad U., Fatimi S.H., Naqvi I., Atiq M., Moizuddin S.S., Sheikh K.B., Shahbuddin S., Naseem T.M., Javed M.A. Modified Blalock-Taussig shunt: immediate and short-term follow-up results in neonates. *Heart Lung Circ.*, 2008, vol. 17, no. 1, pp. 54–58. DOI: 10.1016/j.hlc.2007.06.003

© Kuchumov A.G., Kamaltdinov M.R., Khairulin A.R., Kochergin M.V., Shmurak M.I., 2022

**Alex G. Kuchumov** – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor of Computational Mathematics, Mechanics and Biomechanics Department (e-mail: kychymov@inbox.ru; tel.: +7 (342) 239-15-64; ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-0466-175X>).

**Marat R. Kamaltdinov** – Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Head of the Situation Modeling and Expert and Analytical Management Techniques Laboratory (e-mail: kmr@fcrisk.ru; tel.: +7 (342) 237-18-04; ORCID: <http://orcid.org/0000-0003-0969-9252>).

**Alexander R. Khairulin** – student of Computational Mathematics, Mechanics and Biomechanics Department (e-mail: s.xayrulin@mail.ru; tel.: +7 (342) 239-17-02; ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-7506-5568>).

**Maxim V. Kochergin** – student of Computational Mathematics, Mechanics and Biomechanics Department (e-mail: breakingkeyboard@gmail.com; tel.: +7 (342) 239-17-02).

**Marina I. Shmurak** – Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor of Computational Mathematics, Mechanics and Biomechanics Department (e-mail: shmurak2007@yandex.ru; tel.: +7 (342) 239-17-02; ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-8060-7643>).



6. Dirks V., Prêtre R., Knirsch W., Valsangiacomo Buechel E.R., Seifert B., Schweiger M., Hübler M., Dave H. Modified Blalock Taussig shunt: a not-so-simple palliative procedure. *Eur. J. Cardiothorac. Surg.*, 2013, vol. 44, no. 6, pp. 1096–1102. DOI: 10.1093/ejcts/ezt172
7. Gedicke M., Morgan G., Parry A., Martin R., Tulloh R. Risk factors for acute shunt blockage in children after modified Blalock-Taussig shunt operations. *Heart Vessels*, 2010, vol. 25, no. 5, pp. 405–409. DOI: 10.1007/s00380-009-1219-1
8. Sun L., Chandra S., Sucosky P. Ex vivo evidence for the contribution of hemodynamic shear stress abnormalities to the early pathogenesis of calcific bicuspid aortic valve disease. *PLoS One*, 2012, vol. 7, no. 10, pp. e48843. DOI: 10.1371/journal.pone.0048843
9. Ruiz J.L., Hutcherson J.D., Aikawa E. Cardiovascular calcification: current controversies and novel concepts. *Cardiovasc. Pathol.*, 2015, vol. 24, no. 4, pp. 207–212. DOI: 10.1016/j.carpath.2015.03.002
10. Maganti K., Rigolin V.H., Sarano M.E., Bonow R.O. Valvular heart disease: diagnosis and management. *Mayo Clin. Proc.*, 2010, vol. 85, no. 5, pp. 483–500. DOI: 10.4065/mcp.2009.0706
11. Votta E., Le T.B., Stevanella M., Fusini L., Caiani E.G., Redaelli A., Sotiropoulos F. Toward patient-specific simulations of cardiac valves: state-of-the-art and future directions. *J. Biomech.*, 2013, vol. 46, no. 2, pp. 217–228. DOI: 10.1016/j.jbiomech.2012.10.026
12. Ceballos A., Prather R., Divo E., Kassab A.J., DeCampli W.M. Patient-Specific Multi-Scale Model Analysis of Hemodynamics Following the Hybrid Norwood Procedure for Hypoplastic Left Heart Syndrome: Effects of Reverse Blalock-Taussig Shunt Diameter. *Cardiovasc. Eng. Technol.*, 2019, vol. 10, no. 1, pp. 136–154. DOI: 10.1007/s13239-018-00396-w
13. Corsini C., Baker C., Kung E., Schievano S., Arbia G., Baretta A., Biglino G., Migliavacca F. [et al.]. An integrated approach to patient-specific predictive modeling for single ventricle heart palliation. *Comput. Methods Biomech. Biomed. Engin.*, 2014, vol. 17, no. 14, pp. 1572–1589. DOI: 10.1080/10255842.2012.758254
14. Chi Z., Beile L., Deyu L., Yubo F. Application of multiscale coupling models in the numerical study of circulation system. *Medicine in Novel Technology and Devices*, 2022, vol. 14, pp. 100117. DOI: 10.1016/j.medntd.2022.100117
15. Dobroserdova T., Olshanskii M., Simakov S. Multiscale coupling of compliant and rigid walls blood flow models. *International journal for numerical methods in fluids*, 2016, vol. 82, no. 12, pp. 799–817. DOI: 10.1002/fld.4241
16. Shavik S.M., Tossas-Betancourt C., Figueroa C.A., Baek S., Lee L.C. Multiscale Modeling Framework of Ventricular-Arterial Bi-directional Interactions in the Cardiopulmonary Circulation. *Front. Physiol.*, 2020, vol. 11, pp. 2. DOI: 10.3389/fphys.2020.00002
17. Augustin C.M., Gsell M.A.F., Karabelas E., Willemen E., Prinzen F.W., Lumens J., Vigmond E.J., Plank G. A computationally efficient physiologically comprehensive 3D–0D closed-loop model of the heart and circulation. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 2021, vol. 386, pp. 114092. DOI: 10.1016/j.cma.2021.114092
18. Mercuri M., Wustmann K., von Tengg-Kobligk H., Göksu C., Hose D.R., Narracott A. Subject-specific simulation for non-invasive assessment of aortic coarctation: Towards a translational approach. *Med. Eng. Phys.*, 2020, vol. 77, pp. 69–79. DOI: 10.1016/j.medengphy.2019.12.003
19. Mao W., Caballero A., McKay R., Primiano C., Sun W. Fully-coupled fluid-structure interaction simulation of the aortic and mitral valves in a realistic 3D left ventricle model. *PLoS One*, 2017, vol. 12, no. 9, pp. e0184729. DOI: 10.1371/journal.pone.0184729
20. Spühler J.H., Jansson J., Jansson N., Hoffman J. 3D Fluid-Structure Interaction Simulation of Aortic Valves Using a Unified Continuum ALE FEM Model. *Front. Physiol.*, 2018, vol. 9, pp. 363. DOI: 10.3389/fphys.2018.00363
21. Hsu M.C., Kamensky D., Bazilevs Y., Sacks M.S., Hughes T.J. Fluid-structure interaction analysis of bioprosthetic heart valves: Significance of arterial wall deformation. *Comput. Mech.*, 2014, vol. 54, no. 4, pp. 1055–1071. DOI: 10.1007/s00466-014-1059-4
22. Luraghi G., Wu W., De Gaetano F., Rodriguez Matas J.F., Moggridge G.D., Serrani M., Stasiak J., Costantino M.L., Migliavacca F. Evaluation of an aortic valve prosthesis: Fluid-structure interaction or structural simulation? *J. Biomech.*, 2017, vol. 58, pp. 45–51. DOI: 10.1016/j.jbiomech.2017.04.004
23. Kamaltdinov M.R., Kuchumov A.G. Application of a mathematical model of systemic circulation for determination of blood flow parameters after modified Blalock-Taussig shunt operation in newborns. *Russian Journal of Biomechanics*, 2021, vol. 25, no. 3, pp. 268–284. DOI: 10.15593/RJBiomech/2021.3.07
24. Amindari A., Saltik L., Kirkkopru K., Yacoub M., Yalcin H.C. Assessment of calcified aortic valve leaflet deformations and blood flow dynamics using fluid-structure interaction modeling. *Inform. Med. Unlocked*, 2017, vol. 9, pp. 191–199. DOI: 10.1016/j.imu.2017.09.001
25. Zhao X., Liu Y., Ding J., Ren X., Bai F., Zhang M. Hemodynamic effects of the anastomoses in the modified Blalock-Taussig shunt: a numerical study using a 0D/3D coupling method. *J. Mech. Med. Biol.*, 2015, vol. 15, no. 01, pp. 1550017. DOI: 10.1142/S0219519415500177
26. Young D.F. Fluid mechanics of arterial stenosis. *J. Biomech. Eng.*, 1979, vol. 101, pp. 157–175. DOI: 10.1115/1.3426241
27. Kuchumov A.G., Khairulin A.R., Biyanov A.N., Porodikov A.A., Arutyunyan V.B., Sinelnikov Yu.S. Effectiveness of Blalock-Taussig shunt performance in the congenital heart disease children. *Russian Journal of Biomechanics*, 2020, vol. 24, no. 1, pp. 65–83. DOI: 10.15593/RJBiomech/2020.1.08
28. Kuchumov A.G., Khairulin A., Shmurak M., Porodikov A., Merzlyakov A. The Effects of the Mechanical Properties of Vascular Grafts and an Anisotropic Hyperelastic Aortic Model on Local Hemodynamics during Modified Blalock-Taussig Shunt Operation, Assessed Using FSI Simulation. *Materials (Basel)*, 2022, vol. 15, no. 8, pp. 2719. DOI: 10.3390/ma15082719

Kuchumov A.G., Kamaltdinov M.R., Khairulin A.R., Kochergin M.V., Shmurak M.I. Patient-specific 0D–3D modeling of blood flow in newborns to predict risks of complications after surgery. *Health Risk Analysis*, 2022, no. 4, pp. 159–167. DOI: 10.21668/health.risk/2022.4.15.eng

Получена: 23.08.2022

Одобрена: 03.10.2022

Принята к публикации: 18.12.2022