

взаимосвязи между биокаталитической активностью и физико-химическими свойствами наночастиц.

СПИСОК ИСТОЧНИКОВ

1. Rzigalinski B. A., Carfagna C. S., Ehrich M. Cerium oxide nanoparticles in neuroprotection and considerations for efficacy and safety. Wiley Interdiscip. Rev. Nanomed. Nanobiotechnol. – 2016; 9(4): 1-17.
2. Pro-oxidant therapeutic activities of cerium oxide nanoparticles in colorectal carcinoma cells / Datta A., Mishra S., Manna K. et al. // ACS omega. – 2020; 5(17): 9714-9723.
3. Antioxidant activities of cerium dioxide nanoparticles and nanorods in scavenging hydroxyl radicals / Filippi A., Liu F., Wilson J. et al. // RSC Advances. – 2019; 9(20): 11077-11081.
4. Synthesis and study physicochemical properties of nanocrystalline ceria / Baksheev E., Pronina M., Mashkovtsev M. et al. // AIP Conference Proceedings. – 2019; 2174(1): 020156.
5. Size-and defect-controlled antioxidant enzyme mimetic and radical scavenging properties of cerium oxide nanoparticles / Vinothkumar G., Arunkumar P., Mahesh A. et al. // New Journal of Chemistry. – 2018; 42(23): 18810-18823.
6. Сирота Т. В. Цепная реакция автоокисления адреналина – модель хиноидного окисления катехоламинов // Биофизика. – 2020. – Т. 65, № 4. – С. 646-655.
7. Щербаков А.Б., Иванова О.С., Спивак Н.Я. Синтез и биомедицинские применения нанодисперсного диоксида церия. - Томск: Издательский Дом Томского государственного университета, 2016. - 474 с.

Сведения об авторах

Н.Ю. Офицерова – студент магистратуры

И.Н. Бажукова – кандидат физико-математических наук, доцент

А.В. Мышкина – аспирант

Information about the authors

N.Yu. Ofitserova – M.S. student

I.N. Bazhukova – Candidate of Science (Physics and Mathematics), Associate Professor

A.V. Myshkina – postgraduate student

УДК: 004.942

ИССЛЕДОВАНИЕ ГЕМОДИНАМИКИ КРОНАРНЫХ СОСУДОВ МЕТОДАМИ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ НА ОСНОВЕ ДАННЫХ КОМПЬЮТЕРНОЙ ТОМОГРАФИИ

Евгений Вячеславович Павлюк¹, Сергей Юрьевич Соколов²

^{1,2}ФГБОУ ВО «Уральский государственный медицинский университет»

Минздрава России, Екатеринбург, Россия

^{1,2}ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина», Екатеринбург, Россия

¹ephouse@yandex.ru

Аннотация

Введение. В работе рассматривается алгоритм построения 3D-геометрии коронарных артерий для последующего моделирования движения крови методами вычислительной гидродинамики. **Цель исследования** – разработка методов построения 3D описания коронарных артерий для моделирования кровотока методами вычислительной гидродинамики. **Материалы и методы.** В статье предлагается новый подход к построению 3D-модели артерии, основанный на методологии определения функции объема жидкости (VOF), а не на построении трехмерной сетки поверхности сосуда. В качестве исходных данных использовались результаты многосрезовой компьютерной томографии сердца и окружающих его сосудов. Представлен алгоритм получения функции VOF участка артерии со стенозом по данным компьютерной томографии. **Результаты.** Приведен пример, иллюстрирующий построенную 3D модель участка артерии. **Обсуждение.** Указаны источники погрешностей при реализации алгоритма. **Выводы.** На данный момент место предлагаемого подхода к построению 3D геометрии коронарных артерий – экспресс-анализ участков сосуда с хорошим качеством изображения.

Ключевые слова: компьютерная томография, вычислительная гидродинамика, компьютерное моделирование, коронарные артерии.

STUDY OF THE HEMODYNAMICS OF THE CORONARY VESSELS BY THE METHODS OF MATHEMATICAL MODELING BASED ON COMPUTED TOMOGRAPHY DATA

Evgeny V. Pavlyuk¹, Sergey Yu. Sokolov²

^{1,2}Ural state medical university, Yekaterinburg, Russia

^{1,2}Ural federal university, Yekaterinburg, Russia

¹ephouse@yandex.ru

Abstract

Introduction. The paper considers an algorithm for constructing a 3D geometry of the coronary arteries for subsequent modeling of blood flow using computational fluid dynamics methods. **The aim of the study** – to develop methods for constructing a 3D description of the coronary arteries for modeling blood flow using computational fluid dynamics methods. **Materials and methods.** The article proposes a new approach to constructing a 3D model of an artery based on the methodology for determining the fluid volume function (VOF), rather than building a three-dimensional mesh of the vessel surface. The results of multislice computed tomography of the heart and surrounding vessels were used as initial data. An algorithm for obtaining the VOF function of an artery section with stenosis based on computed tomography data is presented. **Results.** An example is given illustrating the constructed 3D model of an artery section. **Discussion.** The sources of errors in the implementation of the algorithm are indicated. **Conclusions.** At the moment, the

place of the proposed approach to the construction of 3D geometry of the coronary arteries is the express analysis of vessel sections with good image quality.

Keywords: computed tomography, computational fluid dynamics, computer simulation, coronary arteries.

ВВЕДЕНИЕ

Одной из наиболее распространенных форм заболеваний сердца и сосудов является атеросклеротическая болезнь коронарных артерий. Образование холестериновой бляшки на стенке артерии формирует сужение (стеноз) коронарных артерий, что препятствует кровоснабжению миокарда. Поэтому правильная оценка локализации, геометрии и гемодинамической значимости стеноза является актуальной проблемой кардиологии. Результаты этой оценки определяют дальнейшую тактику лечения пациентов - хирургическую или терапевтическую. В настоящее время метод фракционного резерва кровотока (FFR) [1], основанный на внутрисосудистой манометрии, является эталонным методом оценки влияния стеноза сосуда на кровоток через него. Однако внедрение FFR связано с относительно дорогостоящим оборудованием, несет определенный риск для пациента и требует высококвалифицированного медицинского персонала, выполняющего необходимые манипуляции.

В последнее десятилетие быстрое развитие методов и техники компьютерной томографии (КТ) [2] привело к появлению многосрезовой компьютерной томографии, позволяющей получать высокодетализированные изображения сердца и прилегающих кровеносных сосудов в наборе из 320 или 640 томографических срезов за короткий промежуток времени.

Также в последнее время начали развиваться методы, основанные на компьютерном моделировании кровотока в области стеноза с использованием методов вычислительной гидродинамики (CFD). Это позволяет предсказать результат реваскуляризации путем внесения соответствующих изменений в геометрию сосуда, используемую при моделировании. Пример такого подхода показан в нашем предыдущем исследовании [3], где метод CFD использовался для анализа особенностей кровотока в области бифуркации стенотического сосуда.

Необходимым шагом перед компьютерным моделированием кровотока в артерии является построение 3D-модели артерии (по крайней мере, интересующей области) для конкретного пациента. В качестве входных данных используются растровые изображения компьютерной томографии сердца и сосудов в формате DICOM.

Цель исследования – разработка методов построения 3D модели коронарных артерий в формате, наиболее подходящем для моделирования кровотока методами CFD.

МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Основная идея и новизна разрабатываемого алгоритма заключается в использовании методологии VOF (Метод объема жидкости) [4] для описания нечеткой границы стенки сосуда и перевода ее геометрии из растрового

изображения непосредственно в вычислительную геометрию решателя CFD. Традиционно VOF представляет собой метод моделирования свободной поверхности, для которого реализован численный метод отслеживания и позиционирования границы раздела между двумя твердыми фазами. Этот метод успешно использовался при моделировании CFD в различных модификациях и является стандартным подходом для неявного позиционирования границы. Он использует маркер объемной доли каждой фазы в элементарном объеме (обычно совпадающий с ячейкой вычислительной сетки). Если мы рассматриваем области внутри и снаружи коронарного сосуда как отдельные фазы, межфазный интерфейс VOF будет внутренней границей его стенки, что позволяет использовать подход VOF в качестве альтернативы явным геометрическим методам.

В исходных DICOM данных (рис. 1) производится локализация кальцинированного участка и выделение поддомена, содержащего интересующие коронарные сосуды. Производится фильтрация исходных данных с помощью фильтра Гаусса.

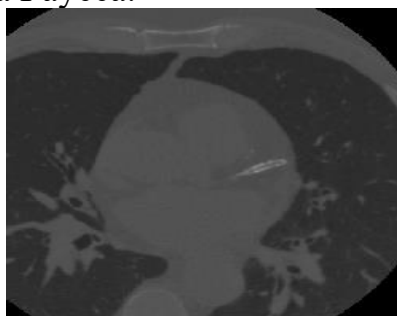


Рис. 1. Исходные данные. Яркое пятно в центре изображения - кальцинированный сосуд со стенозом

Для выделения границ сосудов используется детектор Канни (результат его работы – рис. 2). Для того чтобы получить более точные границы используются методы суперразрешения на основе трилинейной интерполяции.

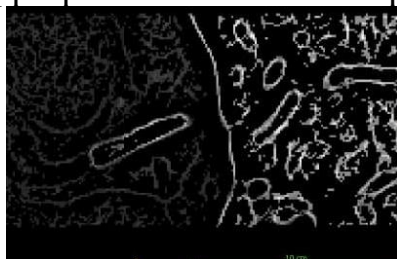


Рис. 2. Результат работы детектора Канни на поддомене со стенозом

Фильтрация границ, найденных на предыдущем шаге. Отбрасываются точки, найденные детектором Канни, не образующие непрерывную границу сосудов. Далее строится VOF функция на основе найденных границ сосудов. При этом значение функции в каждой ячейке вычисляется на основе яркости в соседних ячейках в увеличенном сглаженном КТ-снимке.

Массив вокселей и определенная на нем функция VOF передаются в решатель CFD и преобразуются там в неявно определенную поверхность непосредственно в топологии вычислительной геометрии.

РЕЗУЛЬТАТЫ

На рис. 3 приведен пример построенной предложенными методами 3D модели участка коронарной артерии с зоной кальциноза в виде VOF функции.

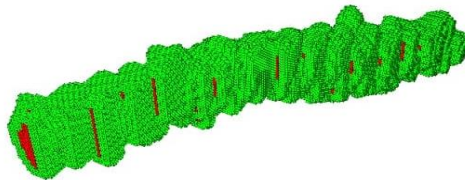


Рис. 3. Пример VOF функции участка сосуда. Красным обозначен кровоток ($VOF = 1$), зеленым — стенки сосуда ($0 < VOF < 1$)

ОБСУЖДЕНИЕ

Таким образом, метод позволяет воспроизвести с помощью компьютерной модели особенности движения жидкости (крови) по трубке с произвольной геометрией (кровеносный сосуд), в результате можно оценить FFR без проведения прямых измерений давления в артерии (так называемый cFFR - вычислительный FFR [5]).

К ограничениям такого подхода можно отнести более сильную зависимости точности и стабильности построения геометрии коронарных артерий от качества исходных данных КТ. К источникам погрешности при КТ можно отнести шумы, возникающие в электронной аппаратуре томографа, а также неточности алгоритмов восстановления распределения коэффициентов поглощения. Недостаточное пространственное разрешение КТ также является ограничением полноценного применения нашего подхода.

ВЫВОДЫ

В настоящей работе рассмотрены подходы к построению 3D геометрии коронарных артерий для дальнейшего использования в методах CFD. В качестве исходных данных использовались результаты многосрезовой спиральной КТ сердца и окружающих его сосудов. В отличие от традиционного подхода, при котором строится 3D меш поверхности сосуда, наш подход основан на генерации так называемой VOF функции – трехмерный массив, в котором каждый элемент пространства характеризует долю ячейки, занятую потоком жидкости.

На данный момент место предлагаемого подхода к построению 3D геометрии коронарных артерий – экспресс-анализ участков сосуда с хорошим качеством изображения. По мере совершенствования аппаратуры КТ, повышения пространственного разрешения исходных данных, снижения уровня помех будет расширяться сфера применимости нашего подхода.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Государственного задания Минздрава РФ (№ 121032200048-1).

СПИСОК ИСТОЧНИКОВ

1. Influence of Anatomical and Clinical Characteristics on Long-Term Prognosis of FFR-Guided Deferred Coronary Lesions / Cho Y.-K., Hwang J., Lee C. H. et al. // JACC. Cardiovasc. Interv. - 2020; 13(16): 1907–1916.
2. De Feyter P.J., Nieman K. Acute Coronary Syndromes: A Companion to Braunwald's Heart Disease (Second Edition). - Saunders, 2011. – 434 p.
3. In-silico study of hemodynamic effects in a coronary artery with stenosis / Starodumov I. O., Blyakhman F. A., Sokolov S. Yu. et al. // European Physical Journal: Special Topics. – 2020; 229(19-20): 3009-3020.
4. Hirt C. W., Nichols B. D. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. Journal of Computational Physics. – 1981; 39(1): 201-225.
5. High precision invasive FFR, low-cost invasive iFR, or non-invasive CFR?: optimum assessment of coronary artery stenosis based on the patient-specific computational models / Tajeddini F., Nikmaneshi M. R., Firoozabadi B. et al. // Int. J. Numer. Method. Biomed. Eng. – 2020; 36(10): e3382.

Сведения об авторах

Е.В. Павлюк – младший научный сотрудник

С.Ю. Соколов – кандидат физико-математических наук, доцент

Information about the authors

E.V. Pavlyuk – Researcher

S.Yu. Sokolov – Candidate of Science (Physics and Mathematics), Associate Professor

УДК: 541.64

СИНТЕЗ КРУПНЫХ СФЕРИЧЕСКИХ НАНОКОМПОЗИТНЫХ ГЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ ПОЛИАКРИЛАМИДА И ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА НАБУХАНИЯ

Павел Андреевич Шабадров¹, Александр Петрович Сафронов², Феликс Абрамович Бляхман³

^{1,3}ФГБОУ ВО «Уральский государственный медицинский университет»

Минздрава России, Екатеринбург, Россия

¹⁻³ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого

Президента России Б. Н. Ельцина», Екатеринбург, Россия

¹P.Shabadrov@mail.ru

Аннотация

Введение. Область применения нанокompозитных полимерных сфер обширна и разнообразна, поэтому разработка эффективной методики получения таких материалов имеет высокую актуальность. **Цель исследования** – получение и характеристика сферических композитных гелей крупного размера. **Материалы и методы.** Исследуемые образцы представляют собой сферические гели, наполненные магнитными наночастицами оксида железа (феррогели) на основе полиакриламида и альгината кальция. **Результаты.**