

Análisis tridimensional de la interacción fluido-estructura en una válvula cardíaca mecánica doble hoja utilizando la ecuación generalizada de lattice Boltzmann

O. Pelliccioni, M. Cerrolaza

Instituto Nacional de Bioingeniería, IMME, Facultad de Ingeniería
Universidad Central de Venezuela
PO BOX 50.361, Caracas 1050-A, Venezuela
Tel./fax: 58 212 605 3115
e-mail: orlandocebio@cantv.net, mcerrola123@cantv.net

M. Herrera

Servicio de Hemodinamia, Hospital Vargas de Caracas
Esquina San Simón a Montecarlo, San José
Parroquia Altigracias, Caracas Zona Postal 1010, Venezuela
Tel./fax: 58 212 862 2400/862 1198
e-mail: mherrera@cantv.net

Resumen

Se presenta un modelo para la simulación del flujo tridimensional que pasa a través de una válvula artificial de corazón en posición aórtica utilizando la ecuación generalizada de lattice Boltzmann bajo un modelo de multi-relajación. Se presentan resultados gráficos de velocidades, líneas de corriente, vorticidad y esfuerzos de corte a lo largo del flujo por la arteria. La simulación combina la aplicación del modelo de lattice Boltzmann con un método de multi-reflexión para el condicionamiento de contornos sólidos en movimiento. Esta aplicación es utilizada para estudiar los cambios del flujo de sangre producidos por la interacción con una prótesis mecánica de válvula aórtica implantada en la raíz aórtica.

Palabras clave: contornos móviles, interacción fluido-estructura, lattice Boltzmann, válvula mecánica cardíaca.

THREE-DIMENSIONAL FLUID-STRUCTURE ANALYSIS IN A BILEAFLET MECHANICAL HEART VALVE USING THE GENERALIZED LATTICE BOLTZMANN EQUATION

Summary

An algorithm for the mathematical representation of blood flowing through a mechanical heart valve is proposed. The generalized lattice Boltzmann equation with a multi-reflection model is used for the numerical fluid-structure coupling (blood – heart valve). The versatility and power of the algorithm discussed herein are shown by some numerical examples. Velocity, streamlines, vorticity and shear stresses are showed.

Keywords: moving boundaries, fluid-structure interaction, lattice Boltzmann, mechanical heart valve.

INTRODUCCIÓN

Las dolencias cardíacas producto del mal funcionamiento de las válvulas de corazón han afectado a millones de personas por todo el mundo y han conducido por año aproximadamente a 250.000 reparaciones o reemplazos de la válvula³⁸. El mal funcionamiento de una válvula nativa degenera su funcionamiento mecánico/hemodinámico eficiente. Las válvulas artificiales del corazón se han utilizado desde 1960²¹ para sustituir las válvulas nativas enfermas salvando millones de vidas. Desafortunadamente, y a pesar de cuatro décadas de uso, estos dispositivos son menos que ideales y arrastran muchas complicaciones. Muchos de estos problemas se relacionan directamente con la fluidomecánica propia del diseño geométrico de estos dispositivos artificiales.

Diversos modelos numéricos han sido desarrollados para describir estructuralmente el comportamiento de la válvula aórtica ignorando su interacción con la sangre^{1,4,5,9,24}. La rutina de apertura y cierre de estas válvulas durante la sístole muestra, sin embargo, una fuerte interacción entre la sangre y el tejido del contorno. Se han efectuado estudios intensivos para analizar la dinámica de la válvula usando modelos de interacción numérica fluido-estructura. Horsten²⁰ modeló la interacción de una hoja bidimensional en un canal de flujo rígido. Perskin y McQueen³² desarrollaron un modelo tridimensional incluyendo las paredes arteriales vecinas. En todo caso, estos modelos usaron simplificaciones en su descripción para las estructuras y eran aplicables solamente para números de Reynolds no fisiológicos relativamente bajos. Un modelo cercano al comportamiento real de la válvula natural, que determine el fenómeno que ocurre durante la fase sistólica y que considere la interacción fluido estructura, aún no ha sido desarrollado¹⁰.

La interacción fluido-estructura es un punto de gran interés en la simulación de flujo sanguíneo. Tang et al.³⁵ analizaron un modelo tridimensional no lineal de pared delgada con interacción del fluido con las paredes para simular el flujo de sangre en arterias carótidas. Ellos consideraron una geometría de estenosis asimétrica para cuantificar los efectos de su severidad patológica, excentricidad y condiciones de presión tanto del flujo sanguíneo como la compresión de la arteria. De Hart et al.¹¹ utilizaron un multiplicador de Lagrange basado en un dominio ficticio para un modelo tridimensional de elementos finitos en una válvula aórtica distendida. Estudios más recientes^{6,15,36,37} aplican una formulación Lagrangiana-Euleriana arbitraria (ALE en inglés), que debe ser obligatoriamente compatible con el movimiento de la interfaz fluido-estructura.

Otros trabajos han aplicado los métodos lattice Boltzmann para la simulación de flujo de sangre en la arteria carótida, enfocándose principalmente en las condiciones de contorno^{3,13}. Krafczyk et al.²³ representaron, bajo régimen laminar, los efectos del flujo transitorio a través de una válvula mecánica de corazón. Su investigación se enfocó en los cambios del torrente sanguíneo cuando una válvula mecánica de posición aórtica se incorpora al flujo, utilizando la ecuación de lattice Boltzmann. Para este caso particular, los autores simplificaron el problema asumiendo que las hojas de la válvula permanecían fijas en el flujo y las evaluaron a distintos ángulos de apertura entre la hoja y el plano xy. Pelliccioni et al.²⁷ simularon el flujo a través de un modelo de válvula mecánica cardíaca Björk-Shiley con la hoja fija a diferentes ángulos de apertura. El modelo que presentaron parte con un perfil de velocidad parabólico totalmente desarrollado a la entrada, y la salida consideraba una condición de contorno con dependencia temporal sujeta al ciclo cardíaco, de manera que ésta promoviera un bajo número de Reynolds y simulase un flujo Newtoniano laminar estacionario.

Diferentes técnicas han sido estudiadas para la evaluación de las fuerzas hidrodinámicas en las simulaciones de la ecuación de lattice Boltzmann, todas basadas en el intercambio de cantidad de movimiento y la integración del tensor de esfuerzos, para contornos curvos y en movimiento tanto en dos como en tres dimensiones^{2,25,26}. Todas estas técnicas pro-

ponen una combinación del esquema bounce-back e interpolaciones espaciales de primer o segundo orden. La condición de bounce-back (choque y rebote) define el comportamiento más simple de la partícula de fluido con la estructura sólida para asegurar que no exista deslizamiento: Las partículas al chocar con la superficie rebotan en la misma dirección de donde venían. Esta consideración es apropiada siempre que la pared sólida presente una rugosidad suficiente para prevenir cualquier movimiento del fluido en la pared.

En este trabajo se combina la aplicación del modelo de lattice Boltzmann con un método de condicionamiento de contorno sólido en movimiento para analizar el flujo de fluido biológico. Este modelo es utilizado para estudiar los cambios del flujo de sangre producidos por la interacción con una prótesis mecánica de válvula aórtica colocada en la arteria^{28,29,30}. Se calculan y discuten patrones de velocidad y esfuerzo de corte en la sangre. Se incluyen también resultados del campo rotacional de manera de cuantificar valores de vorticidad en los alrededores de la válvula artificial.

MATERIALES Y MÉTODOS

El objetivo es analizar la interacción fluido-estructura en la válvula aórtica artificial bajo la ecuación de lattice Boltzmann. El análisis se ajusta a un modelo mecánico de dos hojas con propiedades geométricas y condiciones de contorno especificadas más adelante. Primero se presentará la formulación matemática que describe al fluido y la estructura.

Ecuación generalizada de lattice Boltzmann

La ecuación de lattice Boltzmann es la representación discretizada de la ecuación continua de Boltzmann. Ella permite evaluar la distribución en espacio y tiempo de una población de partículas de fluido como consecuencia de sus colisiones. Dado un conjunto de velocidades discretas, $\{e_\theta\}$ con sus correspondientes funciones de distribución $\{f_\theta\}$ se puede construir un espacio vectorial k-dimensional Ψ^k basado en el conjunto de velocidades discretas y esto es, precisamente, lo que se presenta en los modelos lattice Boltzmann. La variable k representa el número total de velocidades discretas posibles para el desplazamiento de las partículas dentro de la rejilla que define el espacio de control del modelo numérico (Ψ^k).

Uno también puede construir un espacio M basado en los momentos de las velocidades de $\{f_\theta\}$. Obviamente existirán k momentos independientes del conjunto de velocidades discretas. Este nuevo plano ofrece ciertas ventajas: es bien conocido en el contexto de la teoría cinética que varios procesos físicos en los fluidos pueden ser aproximadamente descritos por emparejamientos o interacciones entre modos (del operador de colisión) y estos *modos* se encuentran relacionados directamente con los momentos. La representación por momentos provee una manera conveniente y efectiva para la incorporación de la física dentro de los modelos lattice Boltzmann. De esta forma también los parámetros de relajación de los momentos están directamente relacionados a los diversos coeficientes de transporte y permite controlarlos a cada uno de manera independiente.

Para el modelo de célula tridimensional D3Q15 (donde k=15), las quince velocidades discretas se definen de la siguiente manera

$$\{e_\theta\} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 \end{pmatrix} \quad (1)$$

Bajo este modelo de célula la transformación de Ψ^k hacia el plano M y viceversa se logra por

$$|m\rangle = M|f\rangle \quad \text{y} \quad |f\rangle = M^{-1}|m\rangle \quad (2)$$

La matriz de transformación M se construye como⁸

$$M = \begin{pmatrix} \rho \\ e \\ \epsilon \\ j_x \\ q_x \\ j_y \\ q_y \\ j_z \\ q_z \\ 3p_{xx} \\ p_{ww} \\ p_{xy} \\ p_{yz} \\ p_{zx} \\ m_{xyz} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -2 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 16 & -4 & -4 & -4 & -4 & -4 & -4 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 \\ 0 & -4 & 4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -4 & 4 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -4 & 4 & 1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & 2 & 2 & -1 & -1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 \end{pmatrix} \quad (3)$$

Las filas de la matriz de transformación M se organizaron en función del tensor correspondiente. El estado local en el espacio M será

$$|m\rangle = (\rho, e, \epsilon, j_x, q_x, j_y, q_y, j_z, q_z, 3p_{xx}, p_{ww}, p_{xy}, p_{yz}, p_{zx}, m_{xyz})^T \quad (4)$$

que puede interpretarse físicamente así: $m_1 = \rho$ es la densidad de masa, $m_2 = e$ está relacionado a la energía cinética independiente de la densidad, $m_3 = \epsilon$ está relacionado a la energía cinética cuadrada independiente de la densidad y la energía cinética, $m_{4,6,8} = j_{x,y,z}$ son las componentes x,y,z de cantidad de movimiento, $m_{5,7,9} = q_{x,y,z}$ son proporcionales a las componentes x,y,z del flujo de energía independiente del flujo másico. Las componentes de la diagonal del tensor de esfuerzos viscosos están dadas por $m_{10} = 3 p_{xx}$, $m_{11} = p_{ww} = p_{yy} - p_{zz}$ (con $p_{xx} + p_{yy} + p_{zz} = 0$) y las componentes fuera de la diagonal $m_{12,13,14} = p_{xy,yz,zx}$; y un momento antisimétrico de orden tres $m_{15} = m_{xyz}$.

Modelo de multi-relajación en el tiempo de lattice Boltzmann

La dinámica del flujo sanguíneo se describe a través de un desplazamiento discreto en espacio y tiempo bajo la ecuación generalizada de Boltzmann con multi-relajación en el tiempo. Una vez llevada al plano vectorial M, la ecuación discreta de Boltzmann se convierte en

$$|f(r_j + e_\theta \delta_t, t_n + \delta_t)\rangle - |f(r_j, t_n)\rangle = -M^{-1} \hat{S} [|m(r_j, t_n)\rangle - |m^{(0)}(r_j, t_n)\rangle] \quad (5)$$

donde f representa la distribución de la población de partículas de fluido dentro del volumen de control, m es la distribución en el plano vectorial M transformada por la matriz M. La nueva distribución en cada uno de los espacios r de la rejilla se determina con ayuda del operador de colisión $[|m(r_j, t_n)\rangle - |m^{(0)}(r_j, t_n)\rangle]$. Los términos de $|m^{(0)}(r_j, t_n)\rangle$ representan la distribución de partículas en dicha ubicación para el tiempo actual bajo un estado de equilibrio local de cada una de las propiedades que se ven afectadas en la ecuación generalizada de lattice Boltzmann; de esta manera el operador de colisión cuantifica la colisión como el desequilibrio presentado en la distribución de partículas desde su estado de equilibrio local. La velocidad de convergencia de la solución es controlada a través de

coeficientes de relajación particulares para cada una de los vectores involucrados en la matriz m . Los valores propios de estos coeficientes se encuentran almacenados en el vector de multi-relajación en el tiempo definido como $\hat{S}$. Los valores $N+1$ de $\hat{S}$ se encuentran todos entre 0 y 2 distribuidos en el siguiente orden⁸

$$\hat{S} \equiv \text{diag}(0, s_2, s_3, 0, s_5, 0, s_5, s_{10}, s_{10}, s_{12}, s_{12}, s_{12}, s_{15}) \quad (6)$$

los valores nulos corresponden a la conservación de los momentos de los términos correspondientes.

Condiciones de contorno

Tres condiciones de contorno son requeridas en este modelo: una en el extremo izquierdo donde existe el ventrículo izquierdo, una en las paredes estáticas (para la simulación) del ventrículo y la aorta, así como también del anillo de fijación de la prótesis, y otra en el contorno dinámico de las hojas de la válvula.

Se estimó la distribución de densidades para cada una de las células a partir de las componentes de la velocidad y se registró para dicho contorno. Se incorpora un nuevo modelo de interpolación para ajustar las condiciones de contorno en la interfaz fluido-estructura conocido como modelo de multi-reflexión para condiciones de contorno en la ecuación de lattice Boltzmann.

Para representar el movimiento de apertura y cierre de la válvula dentro de la rejilla lattice Boltzmann, en cada paso de tiempo se redibuja la nueva posición de las hojas y se actualizan únicamente las definiciones de las células que en un momento fueron asignadas de tipo sólido a tipo fluido, y viceversa. Los movimientos de apertura y cierre de la válvula son gobernados por la dinámica del cuerpo sólido y tienen únicamente libertad de rotación en un eje fijo definido por la propia geometría del dispositivo.

Condiciones de contorno por multi-reflexión

Ginzburg y d'Humières¹⁶ proponen una generalización de los esquemas ya conocidos que trabajan con bounce-back, interpolación lineal, cuadrática, etc. De esta manera logran una herramienta para estudiar de manera teórica el grado de precisión de los diferentes modelos para ajustar condiciones de contorno en la ecuación discreta de Boltzmann y derivan formalmente un modelo con orden tres de precisión aplicando una reconstrucción de las distribuciones de densidad de población f desconocidas a partir de una expansión de Chapman-Enskog de segundo orden.

Para la propuesta del modelo de multi-reflexión, las definiciones de células tipo fluido y tipo sólido se mantienen. Para el caso particular de la célula tipo contorno, parten de las bases de una célula tipo fluido en la que en una o más de sus direcciones de desplazamiento (15 en el modelo utilizado) su vecino en la rejilla no es un fluido. Las condiciones de contorno se darán únicamente en aquellas direcciones donde el fluido choca con una superficie sólida al desplazarse a su próxima posición.

El modelo solamente permite incorporar condiciones de Dirichlet correspondientes a una velocidad definida para el desplazamiento de la estructura sólida ($\vec{u}_w$). El momento lineal asociado estará definido por

$$\vec{j}_w = \tilde{\rho}_b \vec{u}_w \quad (7)$$

donde la densidad será igual a la densidad de referencia para los modelos de fluido incompresible.

Siendo r_b la célula tipo contorno evaluada en la dirección y $r_b + e_q$ una de las posibles células tipo sólido con la que colisiona, la distribución de densidad de población $f_{\vec{q}}(\vec{r}_b, t+1)$

que se reconstruye estará definida por la expresión

$$\begin{aligned}
 f_{\bar{q}}(\vec{r}_b, t+1) &= A_1 + A_2 + A_3 + A_4 + A_5 + A_6 \\
 A_1 &= k_1 f_q(\vec{r}_b + \vec{e}_q, t+1) \\
 A_2 &= k_0 f_q(\vec{r}_b, t+1) \\
 A_3 &= k_{-1} f_q(\vec{r}_b - \vec{e}_q, t+1) \\
 A_4 &= \bar{k}_{-1} f_{\bar{q}}(\vec{r}_b - \vec{e}_q, t+1) \\
 A_5 &= \bar{k}_{-2} f_{\bar{q}}(\vec{r}_b - 2\vec{e}_q, t+1) \\
 A_6 &= -w_q t_p^* j_{qw} + t_p^* F_{\bar{q}}^{P.C.}
 \end{aligned} \tag{8}$$

Los términos marcados en q con una barra son las cantidades asociadas con la dirección opuesta a e_q . Todos los coeficientes k se encuentran resumidos en la Tabla I y están referidos a las interpolaciones del método de multi-reflexión. El término $w_q t_p^* j_{qw}$ es utilizado para ajustar las condiciones de Dirichlet. El término $F_{\bar{q}}^{P.C.}$ está asociado a fuerzas externas que actúen directamente sobre la estructura sólida (ver más detalles en Ginzburg y d'Humières¹⁶). El término t_p^* es un coeficiente de peso para equilibrar la ecuación, y sus valores están dados en la Tabla II.

	BB	ULI	DLI	UQI	DQI	MR
δ_q	$\frac{1}{2}$	$[0, \frac{1}{2}]$	$[\frac{1}{2}, +\infty)$	$[0, \frac{1}{2}]$	$[\frac{1}{2}, 1)$	$[0, \frac{1}{2}]$
k_1	1	$2\delta_q$	$\frac{1}{2\delta_q}$	$\delta_q(1+2\delta_q^2)$	$\frac{1}{\delta_q(1+2\delta_q)}$	$\frac{k^* k_f}{k_s} - 1$
k_0	0	$1 - 2\delta_q$	0	$1 - 4\delta_q^2$	0	$2 - k^*$
k_{-1}	0	0	0	$-\delta_q(1 - 2\delta_q)$	0	$k_1 - k_{-2} - 1$
$\bar{k}_{-1}$	0	0	$\frac{2\delta_q - 1}{2\delta_q}$	0	$\frac{2\delta_q - 1}{\delta_q}$	$2 - \frac{k^* k_t}{k_s}$
$\bar{k}_{-2}$	0	0	0	0	$-\frac{2\delta_q - 1}{1 + 2\delta_q}$	$\frac{k^*(k_t - 2)}{k_s} - 1$
w_q	2	2	$\frac{1}{\delta_q}$	2	$\frac{2}{\delta_q(2\delta_q + 1)}$	$\frac{4k^*}{k_s}$
$F_{\bar{q}}^{P.C.}$	0	0	0	0	0	$\frac{k^* \Lambda^2 \bar{f}_q^{(2)}}{f_p^* f_{ks} \nu}$
k_t				$3 + 2\delta_q$		
k_s				$1 + 6\delta_q + 4\delta_q^2$		
k_f				$2(1 + \delta_q)^2 \max\left\{1, \frac{k_s}{k_t}\right\} \leq k^* \leq \frac{2k_s}{k_f}$		
				MR1		MR2
k^*				$\frac{2k_s}{k_f}$		$\frac{1}{15} [15 + (15 + 4\sqrt{3})\delta_q - (4\sqrt{3} - 3)\delta_q^2]$

Tabla I. Rango válido para δ_q y los coeficientes k , w_q y F_q^{PC} para los diferentes modelos de condiciones de contorno; BB: bounce-back, ULI: interpolación upwind linear, DLI: interpolación downwind linear, UQI: interpolación upwind cuadrática, DQI: interpolación downwind cuadrática, y MR: multi-reflexión¹⁶.

	t_0^*	t_1^*	t_2^*	t_3^*
D3Q15	$(3 - 7c_s^2)/(3c_s^2)$	1/3	-	1/24

Tabla II. Pesos de equilibrio t_p^* (ver Ginzburg y d'Humières¹⁶)

Ginzburg y d'Humières¹⁶ extienden su propuesta para sólidos móviles dentro del flujo de fluido con ciertas recomendaciones: *“La velocidad del cuerpo sólido debe ser menor que la unidad lattice Boltzmann por cada paso de tiempo discreto en cualquiera de las direcciones de manera que las células fluido/sólido no cambien su condición sin haber permanecido por lo menos una iteración en la región del contorno”*.

Prueba experimental

Actualmente sigue siendo muy escaso el material sobre ensayos experimentales de flujo a través de válvulas cardíacas mecánicas, básicamente porque forma parte del material confidencial de las diferentes casas comerciales.

Después de una revisión exhaustiva de publicaciones técnicas se pudo acceder al trabajo de investigación doctoral de Mary J. King²² sobre estudios computacionales y experimentales de flujo a través de una válvula mecánica de doble hoja cardíaca. Estos resultados in vitro son aprovechados en el presente trabajo para compararlos con los datos arrojados por el modelo numérico utilizando la ecuación de lattice Boltzmann.

Equipo de prueba pulsátil

King describe con detalle en su trabajo la configuración del equipo de prueba, diseñado según las especificaciones de Fisher *et al.*¹⁴. La Figura 1 muestra un diagrama del equipo. El ventrículo en la sección aórtica fue modelado como un cilindro hueco uniforme de 60mm de diámetro totalmente maquinado. La válvula cardíaca de prueba se incorporó entre el ventrículo y la sección aórtica (sección cilíndrica totalmente rectilínea de 29mm de diámetro). La longitud de la aorta fue de 140mm. Las componentes restantes del equipo de prueba son una cámara de amortiguamiento, resistencias periféricas, depósito atrial, y una válvula mitral (modelo Björk-Shiley de disco basculante) para cerrar el circuito. Una bomba servo-controlada de desplazamiento positivo se utilizó para impulsar el fluido de manera controlada a través de equipos digitales programables. La carga se ajustó para operar en un rango de presión 120/80mmHg.

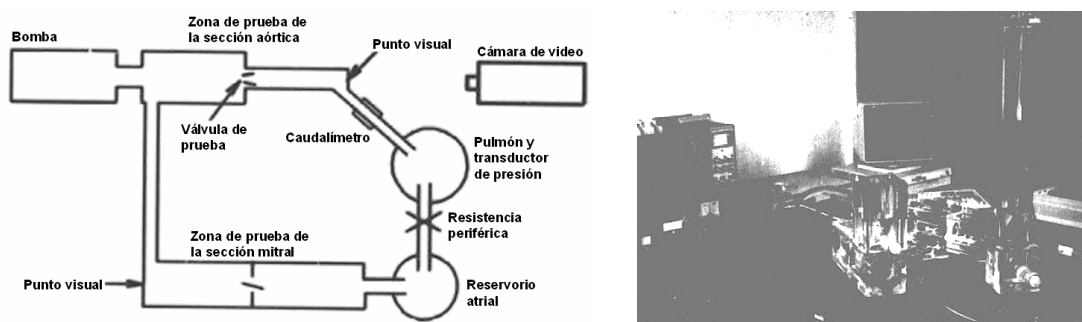


Figura 1. Diagrama del equipo de prueba pulsátil y fotografía del montaje²²

Las imágenes visuales del comportamiento de apertura y cierre de la válvula se registraron utilizando una cámara de video de alta velocidad de la casa KODAK con capacidad de captura almacenamiento de 1000frames/s y una velocidad de disparo de 0.001s. La autora utilizó dos modelos de prótesis mecánica de válvula para las pruebas: un modelo Carbomedic doble hoja de 25mm y una válvula St. Jude Medical también de 25mm. El fluido fue impulsado recreando un pulso de tipo $Q = Q_p \sin(\omega t)$ donde Q_p representa el caudal por pulso y ω la frecuencia de la onda de desplazamiento. Se estudiaron comportamientos para frecuencias de 60, 72, 80, 100 y 120 ciclos por minuto con sus respectivos caudales por pulso de 60, 70, 80, 80 y 60 ml.

El fluido con el cual operó el equipo fue una solución de glycerol diluido al 33% por volumen (viscosidad $4 \cdot 10^{-3} \text{Pas}$), esto se hizo con la intención de aproximar las condiciones a una viscosidad dinámica similar a la de la sangre. Se mantuvo durante todo los experimentos un número de Strouhal $St = 0.1$ y un Reynolds máximo de 1500. Para la visualización, se incorporaron a la solución partículas reflectivas que permitían registrar en video su trayectoria dentro del fluido.

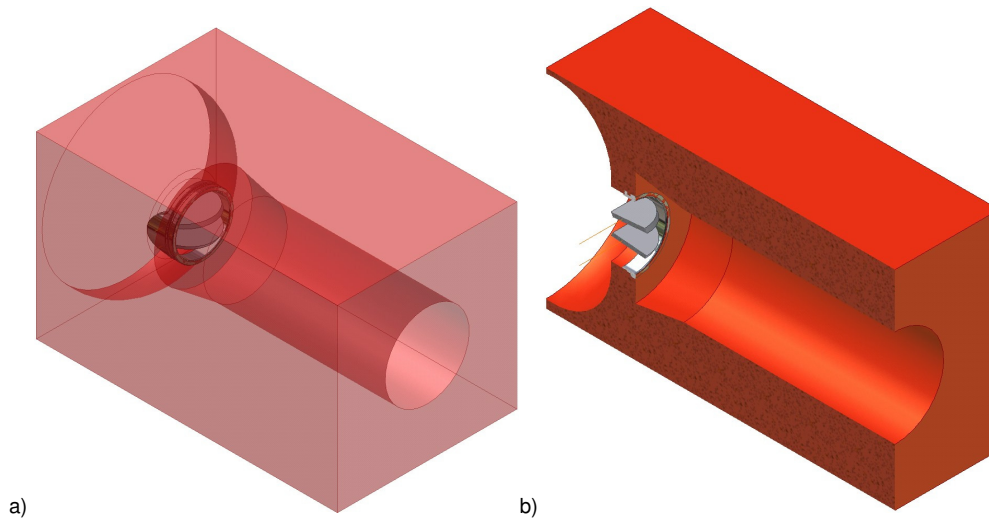
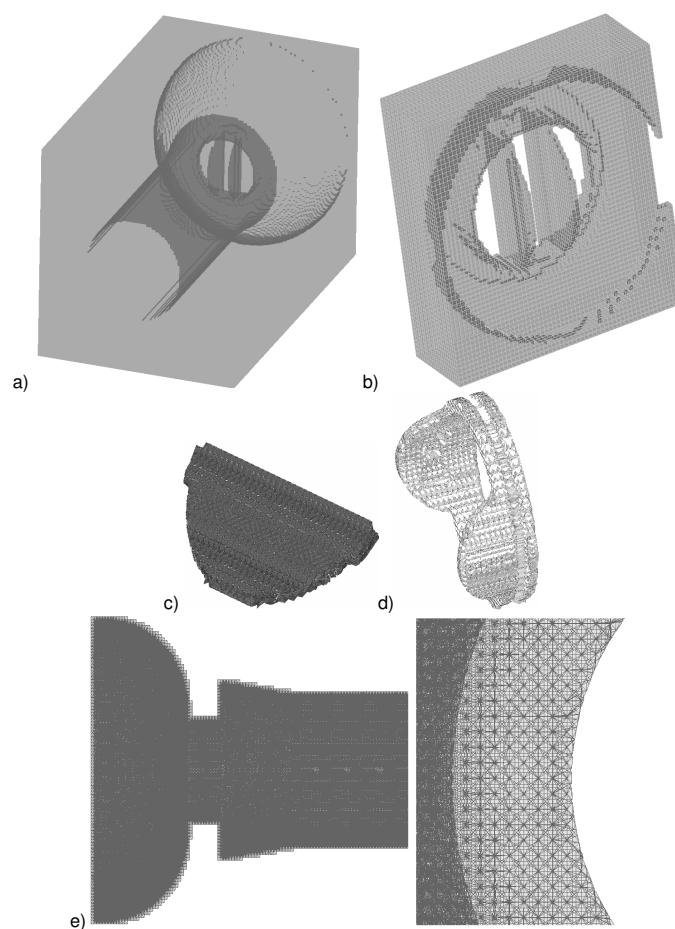


Figura 2. Diagrama del ensamble ventrículo izquierdo + válvula mecánica + aorta utilizado en el banco de pruebas pulsátil de King y que fue utilizado como geometría para la simulación por lattice Boltzmann. Se muestra a) el montaje completo en vista isométrica, b) corte en el plano de simetría xz

Simulación numérica

El modelo en estudio lo constituye básicamente una población de células autómatas de tipo D3Q15 de geometría con forma de cubo, de manera que tesela completamente el volumen de control definido por el contorno que representa la porción de ventrículo izquierdo, el segmento de la válvula aórtica y parte de la aorta (ver Figura 2). Existen modelos de célula con mayor número de dimensiones ($k = 19, 27$, etc), pero se eligió este modelo por ser el más simple dentro del grupo de células con comportamiento isotrópico; así el consumo de memoria física del computador y la cantidad de órdenes sería menor. La geometría del conjunto ventrículo y raíz aórtica utilizada fue modelada a través de herramientas CAD basándose en datos tomados de la literatura^{7,22,33,34}. La geometría de la válvula seleccionada fue el modelo bivalva de la St. Jude Medical³⁹ y se realizó utilizando las dimensiones reales para conservar la proporcionalidad. Las células ordenadas de manera regular y uniforme se clasificaron una a una de acuerdo a su función dentro de la simulación como: células tipo fluido, células tipo sólido y células tipo contorno. Para los resultados mostrados en este trabajo se utilizó una malla de aproximadamente 1772 células definidas como contorno móvil y 576.322 células definidas como fluido. El acople fluido-estructura es directo (el contorno de los nodos y elementos coincide a lo largo de la interfase). La Figura 3 muestra la configuración de la rejilla global y detalles de la zona de la válvula. Como puede observarse en la imagen, la geometría de la válvula se adaptó a la geometría regular de la malla lattice Boltzmann.



Modelo geométrico mallado para lattice Boltzmann. Se muestra detalle de la rejilla lattice Boltzmann

Figura 3. Modelo geométrico mallado para lattice Boltzmann. Se muestra detalle de la rejilla lattice Boltzmann para a) la malla completa [177x105x105 células], y b) para la válvula [19x44x36 células]. Arreglos Qs para c) la hoja [13.290 nodos y 21.264 elementos], d) el anillo [26.805 nodos y 42.888 elementos], y e) en el ensamble ventrículo y aorta [752.010 nodos y 1.203.216 elementos]

En este sistema se asumió un flujo laminar para un fluido de comportamiento isotérmico, incompresible y newtoniano. Los efectos del implante valvular en las prótesis mecánicas se analizaron a través de simulaciones numéricas en el tiempo del flujo de sangre a través de ellas. Las condiciones fisiológicas del implante se modelaron cuidadosamente y la geometría de la cavidad aórtica se modificó ajustándola al modelo del equipo de pruebas *in vitro*²².

Las propiedades físicas de la sangre utilizadas para el modelo fueron la densidad del fluido $\rho = 1.050 \cdot 10^3 \text{ kg/m}^3$ y la viscosidad dinámica $\nu = 4 \text{ mm}^2/\text{s}$. A las simulaciones numéricas se les asignó un flujo de salida de 70 ml/pulso y un pulso cardíaco de 72bpm (0.820s, Womersley $\alpha^2 = D^2\omega/\nu = 256.4$) resultando un $Sr = 0.1$. Los valores del perfil de velocidad variable en función del tiempo para las condiciones de entrada fueron asumidos como una curva de tipo senoidal. Los valores de las velocidades fueron adimensionalizados utilizando el número de Reynolds.

De manera adicional, el segmento aórtico trazado en la geometría fue extendido en su longitud hasta cuatro veces su diámetro, con el objeto de eliminar efectos numéricos en el contorno de salida. El diámetro aórtico se consideró de 29mm.

Las subrutinas típicas incluidas en el lazo principal de los algoritmos lattice Boltzmann con interacción fluido-estructura se resumen en la Tabla III.

1	Subrutina de Propagación
	Se distribuye la población f de una manera macroscópica a su entorno vecino ¹⁸
2	Subrutina para la Regeneración de la malla
	Cada célula de la rejilla se redefine como tipo líquido o sólido, según la nueva ubicación del sólido dentro del fluido ³¹
3	Subrutina de Colisión
	Se calcula el operador de colisión de la ecuación de Boltzmann ⁸
4	Subrutina para el ajuste de las Condiciones del Contorno
	De acuerdo con el flujo pulsátil, se asignan las condiciones para el contorno fijo, la entrada y salida del flujo de fluido y las interpolaciones del contorno móvil ¹⁶
5	Subrutina para el cálculo de Dinámica de Sólidos
	Los movimientos de traslación y rotación para estructuras sólidas dentro del fluido son obtenidas por las ecuaciones clásicas de dinámica de sólidos ¹²

Tabla III. Lazo principal para un código lattice Boltzmann con contorno en movimiento

Se definió un perfil parabólico de flujo de sangre partiendo del segmento de ventrículo izquierdo de la malla. En las simulaciones el paso de tiempo se definió para un período como $T = 227$ iteraciones ($\omega = 2\pi/T$). La distribución de velocidades en el dominio se inicializó en cero para todo el sistema y luego se desarrolló la simulación en $40T$ para definir el tiempo cero ($t=0$) del cálculo numérico, respetando el criterio de convergencia

$$\sum_i \frac{\|u(x_i, t+T) - u(x_i, t)\|}{\|u(x_i, t+T)\|} \leq 10^{-7} \quad (9)$$

donde la sumatoria es aplicada a la totalidad del sistema.

ANÁLISIS DE LOS RESULTADOS Y CONCLUSIONES

La Figura 4 muestra valores de cambios de presión en el flujo antes y después de pasar por la válvula mecánica a diferentes cortes de la sección volumétrica. Puede observarse en detalle la dinámica altamente compleja que controla la interacción fluido-estructura de las hojas de la válvula.

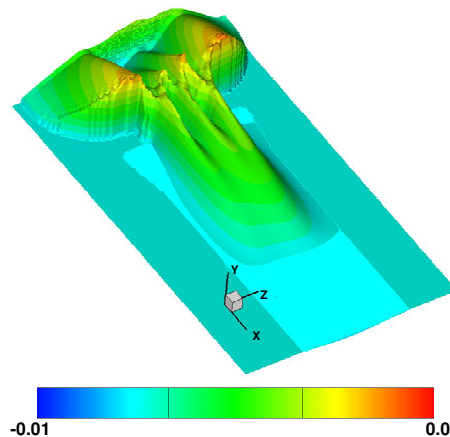


Figura 4. Mapa del diferencial de presiones en el plano xz para el eje de simetría del modelo: $0.10T$ ($t = 0.08$ s) $\Delta p/p_{ref}$

La Figura 5 muestra valores de líneas de corriente al inicio de la sístole. Se pueden comparar con algunas de las imágenes publicadas en el trabajo de King²² y el resultado cualitativo es bastante parecido. Las partículas fotosensibles capturadas por la cámara de alta velocidad al momento de máxima apertura de la válvula, muestran a la salida de ésta una distribución axial del flujo con una mayor concentración de partículas en la zona central (Figura 5a, plano XY, mayor contraste en la imagen). Los resultados numéricos presentan los valores máximos de velocidad obtenidos justamente en esta zona y en dirección axial. Por su parte el plano XZ muestra las tres direcciones de flujo (central y laterales) en forma de abanico. Las partículas en la Figura 5b van formando remolinos justamente donde el modelo representativo de la aorta pasa de un diámetro mayor y se reduce luego al diámetro final de la arteria; la imagen obtenida con los resultados de lattice Boltzmann reflejan el sentido de retorno del flujo justamente en esta zona, y las líneas de corriente muestran el nivel de turbulencia que allí se presenta. También se puede observar como las líneas de corriente de la región central que se desplazan en dirección axial hacia la aorta se van abriendo como un abanico de acuerdo a las tres secciones libres de flujo que deja la válvula mecánica cuando las dos hojas están en su máxima apertura.

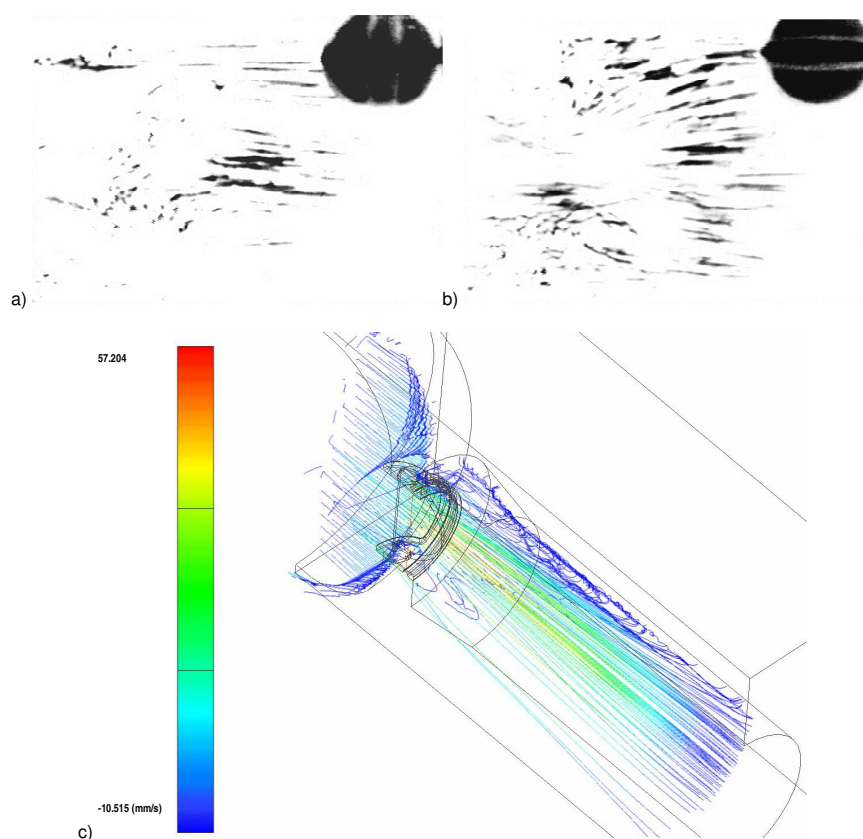


Figura 5. Visualización del flujo capturadas por PIV a la salida de la válvula SJM al inicio de la sístole durante las pruebas en el banco pulsátil²²: a) para el plano xy en el eje de simetría, y b) para el plano xz en el eje de simetría; c). trazado de las líneas de corriente obtenidas por lattice Boltzmann al inicio de la sístole 0.10T ($t = 0.08$ s) se muestran los resultados a partir del corte del plano xy en el eje de simetría

La Figura 6 presenta valores cuantificados de vorticidad en el flujo alrededor de la válvula mecánica. La imagen concuerda con el comportamiento típico de las válvulas de doble hoja durante un flujo pulsátil. Pueden verse claramente regiones de alta vorticidad aguas arriba de la válvula, así como también la formación de los tres jets de flujo. Pueden observarse incluso regiones con vórtices que nunca podrían haberse considerado bajo modelos de cálculo en dos dimensiones.

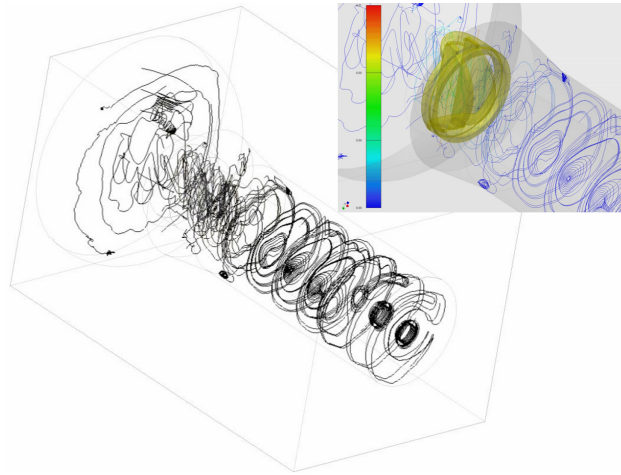


Figura 6. Distribución numérica de los valores de vorticidad a lo largo del trayecto del flujo pulsátil al inicio de la sístole: $0.10T$ ($t = 0.08$ s). Se muestra un detalle ampliado de la zona donde se ubica la válvula mecánica y se concentran los máximos valores obtenidos por el cálculo de lattice Boltzmann

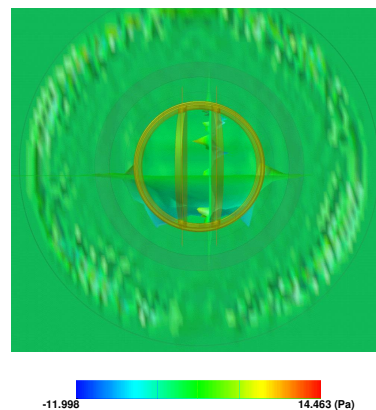


Figura 7. Esfuerzos de corte en los planos xy , yz , zx ubicados en el eje de simetría de la válvula mecánica y para el trayecto de una de las hojas móviles del dispositivo. Se muestran los rangos mínimos y máximos al inicio de la sístole: $0.10T$ ($t = 0.08$ s)

La Figura 7 muestra los valores de esfuerzos de corte, enfocados en su mayoría alrededor de las hojas móviles y la zona de contacto entre la hoja móvil y el anillo de la válvula. Los esfuerzos que se producen durante el jet de flujo y el reflujo en las zonas de interfase líquido-estructura con valores elevados, contribuyen a la formación de placa (situación desfavorable para la salud del paciente). Actualmente la relación entre los esfuerzos de corte y los

gradientes de velocidad media es bien conocida¹⁹; de hecho, en la ecuación de equilibrio el término de producción energética es proporcional al gradiente de velocidad. Por lo tanto, las regiones con variaciones importantes de velocidad -como el contorno de las hojas-, están envueltos en la generación de turbulencia¹⁷. Niveles más detallados de estas zonas de concentración de esfuerzos requieren un nivel mucho mayor de resolución de la malla lattice Boltzmann y por supuesto mucha más exigencia de cómputo. Lo más importante que se puede ver con estos resultados iniciales es la fortaleza del método para estudiar modelos biomecánicos de alta complejidad y la posibilidad de estudiar un mayor número de variables asociadas a la geometría del sólido en movimiento.

La Figura 8 muestra valores de la componente axial de velocidad a diferentes cortes en el volumen de control. Se puede visualizar el comportamiento del flujo a través del conjunto ventrículo, válvula y aorta a diferentes instantes del ciclo cardíaco.

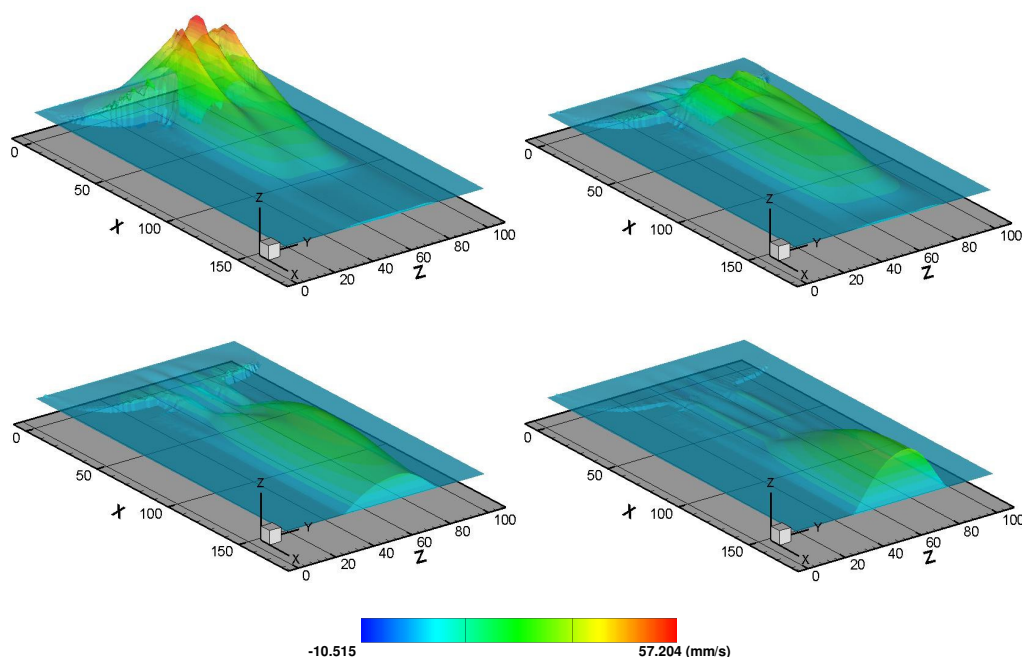


Figura 8. Dinámica transitoria de arriba hacia abajo y de izquierda a derecha: 0.0T ($t = 0.0$ s), 0.33T ($t = 0.264$ s), 0.66T ($t = 0.528$ s) y 0.99T ($t = 0.792$ s); magnitud de la velocidad axial $|u_x|$

Discusión de resultados

Se implementó la ecuación general de lattice Boltzmann en un código computacional que modela la interacción fluido-estructura en válvulas mecánicas de corazón con flujo pulsátil y contorno movable. El método describe el comportamiento microscópico de partículas en movimiento a través de reglas sencillas de comportamiento, y a un nivel macroscópico ofrece una descripción media del fluido de manera correcta. La velocidad media de partículas representa en tiempo y espacio el comportamiento del fenómeno físico que modela, mostrando una relación directa entre el fenómeno discreto microscópico y el continuo macroscópico. El método se caracteriza por cálculos simples e implementación sencilla de las condiciones de contorno, además de una versatilidad para ser implementado mediante cómputo en paralelo. El sistema se ejecutó en un cluster no dedicado de 5 nodos bajo la configuración maestro-esclavo (las especificaciones se comentan en detalle en Pellicioni³¹). Para el postproceso de los resultados se utilizó el programa comercial AVS de la *Advanced Visual Systems*⁴⁰.

Se aplicó el método lattice Boltzmann para simular la respuesta de una válvula mecánica de corazón sometida externamente a presión ventricular y aórtica. Los cálculos muestran que la dinámica de apertura y cierre de la válvula con la sangre se deben esencialmente a un proceso cinemático gobernado por el flujo del fluido. El número de Reynolds máximo obtenido en la válvula fue aproximadamente de 1500 bajo un $Sr = 0.1$ y Womersley $\alpha^2 = 222$, los cuales definirían las inestabilidades numéricas comúnmente presentes para un nivel de refinamiento de malla como el utilizado en este modelo. Por otra parte, este trabajo se centró en el uso del método numérico para investigar la importancia de la interacción fluido-estructura más que en la aproximación del fenómeno fisiológico en detalle.

Los métodos aplicados son descritos para el caso tridimensional con interacción del fluido con estructuras dinámicas de geometría compleja, demostrando su potencialidad para reproducir el comportamiento estos modelos.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen el apoyo del Consejo de Desarrollo Científico y Humanístico (C.D.C.H.) de la Universidad Central de Venezuela mediante el proyecto PG 09-10-4413-2003(II), y del Fondo Nacional de Ciencia, Tecnología e Innovación (FONACIT).

REFERENCIAS

- 1 M.M. Black, I.C. Howard, X. Huang y E.A. Patterson, "A three-dimensional analysis of a bioprosthetic heart valve", *Journal of Biomechanics*, Vol. **24**, N° 9, pp. 793-801, (1991).
- 2 M. Bouzidi, M. Firdaouss y P. Lallemand, "Momentum transfer of a lattice-Boltzmann fluid with boundaries", *Physics of Fluids*, Vol. **13**, N° 11, pp. 3452-3459, (2001).
- 3 J. Boyd, J.M. Buick, J.A. Cosgrove y P. Stansell, "Application of the lattice Boltzmann method to arterial flow simulation: investigation of boundary conditions for complex arterial geometries", *Australas Phys. Eng. Sci. Med.*, Vol. **27**, N° 4, pp. 207-12, (2004).
- 4 G. Cacciola, G.W.M Peters y P.J.G. Schreurs, "A three-dimensional mechanical analysis of a stentless fibre-reinforced aortic valve prosthesis", *Journal of Biomechanics* Vol. **33**, N° 5, pp. 521-530, (2000).
- 5 K.B. Chandran, H.H. Kim y G. Han, "Stress distribution on the cusps of a polyurethane trileaflet heart valve prosthesis in the closed position", *Journal of Biomechanics*, Vol. **24**, N° 6, pp. 385-395, (2000).
- 6 R. Cheng, YG. Lai y KB. Chandran, "Three-dimensional fluid-structure interaction simulation of bileaflet mechanical heart valve flow dynamics", *Ann. Biomed. Eng.*, Vol. **32**, N° 11, pp. 1471-83, (2004)
- 7 R. Clark y E. Finke, "Scanning and light microscopy of human aortic leaflets in stressed and relaxed states", *J. of Thoracic and Cardiovascular Surgery*, Vol. **67**, N° 5, pp. 792-804, (1974).
- 8 D. d'Humières, I. Ginzburg, M. Krafczyk, P. Lallemand y L. -S. Luo, "Multiple-relaxation-time lattice Boltzmann models in three dimensions", *The Royal Society, Phil. Trans. R. Soc. Lond.*, A **360**, pp. 437-451, (2002).
- 9 J. De Hart, G. Cacciola, P.J.G. Schreurs y G.W.M. Peters, "A three-dimensional analysis of a fibre-reinforced aortic valve prosthesis", *Journal of Biomechanics*, Vol. **31**, N° 7, pp. 629-638, (1998).
- 10 J. De Hart, "Fluid-structure interaction in the aortic heart valve: a three-dimensional computational analysis", Tesis Ph.D., Eindhoven University of Technology, Eindhoven, The Netherlands, (2002).

- 11 J. De Hart, G. Peters, P. Schreurs y F. Baaijens, "A three-dimensional computational analysis of fluid-structure interaction in the aortic valve", *Journal of Biomechanics* Vol. 36 1°, pp. 103-12, (2003).
- 12 F. Doyle, "Static and dynamic analysis of structures", in: *Solid Mechanics and Its Applications*, Kluwer Academic Publishers, ISBN: 0792312082.
- 13 H. Fang, Z. Wang, Z. Lin y M. Liu, "Lattice Boltzmann method for simulating the viscous flow in large distensible blood vessels", *Phys. Rev. E Stat. Nonlin. Soft. Matter. Phys.* Vol. 65, N° 5, pp. 051925(11), (2002).
- 14 J. Fisher, I.J. Reece y D.J. Wheatley, "In Vitro evaluation of six mechanical and six bioprosthetic heart valves", *J. Thorac. Cardiovas. Surg.*, Vol. 34, pp. 157-162, (1986).
- 15 J.F. Gerbeau, M. Vidrascu y P. Frey, "Fluid-structure interaction in blood flows on geometries based on medical imaging", *Computers & Structures*, Vol. 83, N° 2-3, pp. 155-165, (2005).
- 16 I. Ginzburg y D. d'Humieres, "Multireflection boundary conditions for lattice Boltzmann models", *Phys. Rev. E Stat. Nonlin. Soft. Matter. Phys.*, Vol. 68 6, Pt 2, pp. 066614(30), (2003).
- 17 M. Grigioni, C. Daniele, G. D'Avenio y V. Barbaro, "The influence of the leaflets' curvature on the flow field in two bileaflet prosthetic heart valves", *Journal of Biomechanics*, Vol. 34, pp. 613 - 621, (2001).
- 18 X. He y L. -S. Luo, "Lattice Boltzmann model for the incompressible Navier-Stokes equation", *Journal of Statistical Physics*, Vol. 88, pp. 927-945, (1997).
- 19 J.O. Hize, *Turbulence*, McGraw-Hill, New York, (1987).
- 20 J.B.A.M. Horsten, "On the analysis of moving heart valves: a numerical fluid-structure interaction model", Tesis Ph.D., Eindhoven University of Technology, Eindhoven, The Netherlands, (1990).
- 21 C. Hufnagel y W. Harvey, "Surgical correction of aortic insufficiency: Preliminary report", *Bull. Georgetown Univ. Med. Ctr.* 6, (1953).
- 22 M. King, "Computational and experimental studies of flow through a bileaflet mechanical heart valve", Tesis Ph.D., University of Leeds, UK, (1994).
- 23 M. Krafczyk, M. Cerrolaza, M. Schulz y E. Rank, "Analysis of 3D transient blood flow passing through an artificial aortic valve by Lattice-Boltzmann methods", *Journal of Biomechanics*, Vol. 31, N° 5, pp. 453-462, (1998).
- 24 S. Krucinski, I. Vesely, M.A. Kokainish, G. Campbell, "Numerical simulation of leaflet flexure in bioprosthetic valves mounted on rigid and expansile stents", *Journal of Biomechanics* 26, Vol. 8, pp. 929-943, (1993).
- 25 P. Lallemand, L. -S. Luo, "Lattice Boltzmann method for moving boundaries", *J. of Comp. Phys.*, Vol. 184, pp. 406-421, (2003).
- 26 H. Li, X. Lu, H. Fang y Y. Qian, "Force evaluations in lattice Boltzmann simulations with moving boundaries in two dimensions", *Phys. Rev. E Stat. Nonlin. Soft. Matter. Phys.*, Vol. 70, N°2, Pt 2, pp. 026701(9), (2004).
- 27 O. Pelliccioni, M. Cerrolaza y M. Herrera, "Flujo tridimensional a través de la válvula artificial Björk-Shiley en posición aórtica: Análisis computacional entre el MEF y métodos Lattice", *Métodos Numéricos en Ingeniería y Ciencias Aplicadas*, Vol. 2, CIMNE-CIMAT, Barcelona-España, (2002).
- 28 O. Pelliccioni, M. Krafczyk y M. Herrera, "Bidirectional fluid-structure simulation of blood flow based on the lattice Boltzmann method: Two-dimensional analysis for SJM and BJS valves", en: *International Congress on Computational Bioengineering 2003*, I3A Instituto de Investigación en Ingeniería de Aragón 2, pp. 644-653, (2003).

- 29 O. Pelliccioni, M. Cerrolaza y M. Herrera, "Lattice Boltzmann dynamic simulation of a mechanical heart valve device", submitted to the *Mathematics and Computers in Simulation*, Elsevier B.V., (2004).
- 30 O. Pelliccioni, M. Krafczyk y M. Herrera, "Simulación de flujo sanguíneo por el método GLBE considerando contornos en movimiento", en: *II Congreso Venezolano de Ingeniería Biomédica 2004*, Avances en Ingeniería Biomédica, Taller de publicaciones de la Universidad de los Andes 1, pp. 315-322, (2004).
- 31 O. Pelliccioni, "Análisis de flujo transitorio de sangre a través de válvulas mecánicas de corazón utilizando métodos lattice Boltzmann", Tesis doctoral, Universidad Central de Venezuela, Venezuela, (2005).
- 32 C.S. Perskin, D.M. McQueen, "A general method for the computer simulation of biological systems interacting with fluids", *Symposia of the Society for Experimental Biology*, Vol. **49**, pp. 265-276, (1995).
- 33 A. Sauren, "The Mechanical Behaviour of the Aortic Valve", Tesis Ph.D., Eindhoven University of Technology, Eindhoven, (1981).
- 34 W. Swanson y R. Clark, "Dimensions and geometric relationships of the human aortic valve as function of pressure", *Circulation Research*, Vol. **35**, N° 6, pp. 871-882, (1974).
- 35 D. Tang, C. Yang, S. Kobayashi, J. Zheng y R.P. Vito, "Effect of stenosis asymmetry on blood flow and artery compression: a three-dimensional fluid-structure interaction model", *Ann Biomed Eng.*, Vol. **31**, N° 10, pp. 1182-93, (2003).
- 36 P. Teixeira y A. Awruch, "Numerical simulation of fluid-structure interaction using the finite element method", *Computers & Fluids*, Vol. **34**, N° 2, pp. 249-273, (2005).
- 37 A. Van Zuijlen y H. Bijl, "Implicit and explicit higher order time integration schemes for structural dynamics and fluid-structure interaction computations", *Computers & Structures*, Vol. **83**, N° 2-3, pp. 93-105, (2005).
- 38 A. Yoganathan, -Z. He y -S. Casey, "Fluid mechanics of heart valves", *Annu. Rev. Biomed. Eng.*, Vol. **6**, pp. 331-62, (2004).
- 39 Sitio web oficial de la empresa ©St. Jude Medical, Inc. (<http://www.sjm.com>).
- 40 Sitio web oficial de la empresa Advanced Visual Systems (<http://www.avs.com>).