

VALIDIERUNG DER NUMERISCHEN BERECHNUNGEN DURCH LDA-MESSUNGEN IN KORONARGEFÄSSEN

L. Goubergrits¹, F.O. Bartz², Ch.N. Nayeri², C.O. Paschereit², U. Kertzsch¹, K. Affeld¹

¹Labor für Biofluidmechanik, Charité - Universitätsmedizin Berlin

²Hermann-Föttinger Institut, TU Berlin

Zusammenfassung

Die Erfassung von Strömungsparametern und insbesondere der Wandschubspannungsverteilung in Arterien ist von enormer Bedeutung für die Analyse pathologischer Gefäßwandveränderungen (z. B. Atherosklerose) sowie für die Untersuchung ihrer Ursachen. Numerische Strömungsberechnungen mit realen klinischen Ausgangsdaten können für die klinisch relevanten Studien mit mehreren Gefäßen sehr hilfreich bzw. die einzig durchführbare Untersuchungsmethode sein. Es stellt sich allerdings grundsätzlich die Frage nach der Validierung der numerischen Strömungsberechnungen. In der vorliegenden Arbeit wurden zur Validierung der Strömungsberechnungen in Koronarien zwei 2,5fach vergrößerte Modelle des linken Koronargefäßes - ein vereinfachtes Modell und ein Modell auf Basis eines realen Gefäßausgusses - aus transparentem Silikon hergestellt. Die stationäre Strömung in beiden Modellen wurde mit Hilfe einer 2-Komponenten-LDA-Anlage der Firma DANTEC in jeweils 6 verschiedenen Querschnitten erfasst. Die Geschwindigkeitsprofile wurden dann mit den numerischen Ergebnissen verglichen. Die numerischen Strömungssimulationen wurden mit dem Programm FLUENT durchgeführt. Die Ergebnisse zeigten eine sehr gute Übereinstimmung zwischen experimentellen und numerischen Geschwindigkeiten mit einer mittleren Differenz unter 5%.

Einleitung

Die Atherosklerose ist neben Krebs die führende Todesursache in der westlichen Welt. Diese Krankheit ist das Ergebnis eines komplexen Wechselspiels zwischen Blut, Strömung und Gefäßgeometrie. Häufig betroffene und besonders wichtige Gefäße sind die Koronarien, über die die Blutversorgung des Herzens erfolgt. Von ihrer Funktion hängen das Herz und damit der gesamte Kreislauf ab. Die experimentelle Erfassung der Strömungsparameter in Modellen der Koronarien ist sehr aufwändig. Hinzu kommt, dass die Modellherstellung sehr teuer und zeitaufwändig ist. Deshalb sind klinisch relevante Studien an mehreren Koronarien nicht realistisch. Besonders problematisch ist auch die Erfassung des wichtigsten Parameters – der Wandschubspannung. Hier können numerische Strömungsberechnungen mit realen klinischen Ausgangsdaten sehr hilfreich sein. Es stellt sich allerdings die Frage nach der Überprüfung der numerischen Strömungsberechnungen, die für laminare Strömungen mit Reynoldszahlen $Re < 500$ in komplexen Geometrien der Koronarien durchgeführt werden. Die Komplexität der Koronarien ergibt sich aus den Gefäßverzweigungen und den oft stark gekrümmten Segmenten. Deswegen wurde zur Validierung der numerischen Strömungsberechnungen in Koronarien ein Vergleich zwischen numerisch berechneten und mit LDA gemessenen Geschwindigkeitsprofilen in zwei Koronarmodellen durchgeführt.

Modelle der Koronargefäße

Für experimentelle Untersuchungen der Strömung wurden zwei 2,5fach vergrößerte Modelle der linken Koronarie hergestellt. Das erste Modell ist ein vereinfachtes Modell der Hauptverzweigung der linken Koronararterie. Die Geometrie wurde anhand der Literaturdaten (siehe Changizi et al 2000 und Geigy 1990) mit folgenden Parametern generiert (Originalmaßstab): Hauptgefäß (LMA) mit Durchmesser 4 mm und Länge 15 mm; erster Abzweig (LAD) mit Durchmesser 3,2 mm, Länge von 20 mm bis zum nächsten abzweigenden Segment D1 und dem Winkel der Abzweigung vom Hauptgefäß von 15 Grad; zweiter Abzweig (LCX) mit Durchmesser 3,1 mm, Länge von 10 mm bis zum nächsten abzweigenden Segment PL und dem Winkel vom Hauptgefäß von 60 Grad (siehe Abb. 1 links). Die Verzweigung hat einen Krümmungsradius von 50 mm, was der mittleren Krümmung der Herzwand entspricht (siehe Geigy 1990). Die Geometrie wurde mit dem 3D-CAD-Programm SolidWorks (Solidworks Corp., USA) hergestellt und im STL-Format gespeichert.

Das zweite Modell wurde auf Basis eines realen Gefäßausgusses hergestellt (siehe Abb. 1 rechts). Der Gefäßausguss wurde post mortem in der Pathologie des Dr. C.J. Finlay Klinikum, Havanna, Kuba unter definiertem transmuralen Druck von 100 mmHg (13330 Pa) in einem dafür konstruierten Gerät (siehe Affeld et al 1998) hergestellt. Der Ausguss der linken Koronararterie wurde mit einer optischen Methode digitalisiert. Diese Digitalisierung wurde von der GFal (Gesellschaft zur Förderung angewandter Informatik e.V.), Abteilung 3D-Datenverarbeitung, durchgeführt. Die optische Erfassung der Geometrie erfolgte nach dem „greyscale-phaseshift“ Verfahren mit einem von der GFal entwickelten Gerät. Die aufgenommenen Daten wurden mit der von der GFal entwickelten Software FinalSurface weiterbearbeitet. Sich überlagernde Punkte wurden gefiltert und aus den resultierenden Punkten nach dem „Marching Cubes“ Verfahren eine Fläche generiert. Die Fläche wurde danach geglättet – Punkte, die zu einer Krümmung weniger als 1° führten, wurden rausgefiltert. Die resultierende Datei im STL-Format repräsentiert den Gefäßausguss mit einer Auflösung von 0,15 mm. Bei beiden Computermodellen wurde am Eintritt ein Würfel angefügt (siehe Abb. 1). Dieser Würfel diente in den experimentellen Modellen zur Befestigung des Einlaufrohrs mit einem weiteren Würfel. Die Würfel ermöglichen eine genauere Positionierung des experimentellen Modells im 3D-Raum, um den Vergleich mit den numerischen Ergebnissen zu erleichtern. Aus beiden Computermodellen wurden mit dem ThermoJet-Verfahren 2,5fach vergrößerte Modelle aus Wachs (siehe Abb. 1 links) bei der Firma Materialise GmbH (München, Deutschland) hergestellt. Die Herstellung der experimentellen Hohlmodelle erfolgte anschließend aus transparentem Silikon ELASTOSIL® RT 601 mit dem Brechungsindex $n=1,4$ (siehe Abb. 1 rechts). Die Wachsmodelle wurden in Silikon eingebettet und nach der Aushärtung des Silikons im Ofen ausgeschmolzen.

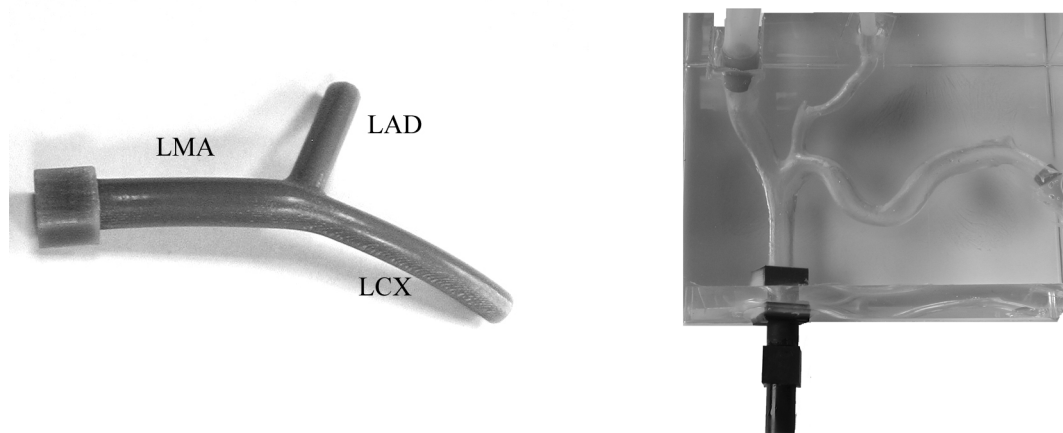


Abb. 1: Links ist ein Photo des Wachsmodells der vereinfachten linken Koronarverzweigung und rechts ein Photo des Silikonmodells des realen linken Koronargefäßes dargestellt.

LDA Messungen

Die experimentellen Strömungsuntersuchungen erfolgten mit Hilfe einer 2-Komponenten-LDA-Anlage von DANTEC. Die Anlage enthält einen Ar-Laser von Ion Laser Technology mit einer Leistung von 490 mW. Die Strahlen haben eine Wellenlänge von 514,5 nm (grün) mit einer Leistung von 20 mW im Messvolumen (verwendet für die Messung der U-Komponente), und 488 nm (blau) mit einer Leistung von 7 mW im Messvolumen (verwendet für die Messung der V-Komponente). Die verwendete Linse hat eine Brennweite von 310 mm. Das Messvolumen hat eine Größe in Luft von $46\mu\text{m} \times 0,38\text{mm} \times 45\mu\text{m}$. Durch den Brechungsindex des Silikonmodells ($n = 1,4$) vergrößert sich das Messvolumen in der Strahlrichtung um diesen Faktor. Die Strahlen schneiden sich unter einem Winkel von 0.242 rad. Als Traversierung wurde eine Traverse von ISEL und die dazugehörige Schrittmotorsteuerung ISEL-Automation CNC Controller 10E/A mit einer Genauigkeit von 0,01 mm verwendet. Die Tracerpartikel bestanden aus Siliziumcarbid und hatten einen mittleren Durchmesser von etwa $5\mu\text{m}$. Die benutzte Software ist Burstware 3.21 von DANTEC.

Die Geschwindigkeiten in beiden Modellen wurden unter stationären Bedingungen bei $Re = 100$ gemessen. Diese Reynoldszahl entspricht dem mittleren Volumenstrom im linken Koronargefäß von 150 ml/min. Die Strömung wurde mit einer Kreiselpumpe Isoflow® erzeugt. Beide Modelle besaßen ein Einlaufrohr mit 300 mm Länge, um ein voll ausgebildetes parabolisches Geschwindigkeitsprofil am Eintritt des Modells zu erzeugen. Das Volumenstromverhältnis in den zwei Abzweigungen der beiden Modelle wurde mit 50:50 eingestellt. Der dritte kleine Ast des realen Modells wurde vollständig abgeklemmt. In jedem Modell wurden Geschwindigkeitsprofile an drei bis fünf parallelen Geraden an sechs verschiedenen Querschnitten vermessen. Insgesamt wurde an etwa 1000 Punkten in jedem Modell Messungen durchgeführt. Abbildung 2 zeigt die Geraden, entlang denen die Messungen durchgeführt wurden. Zur Anpassung des Brechungsindex wurde eine Glycerin/Wasser Mischung verwendet. Die resultierende kinematische Zähigkeit der Mischung unter einer Raumtemperatur von 23°C betrug $3,55 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$ mit der Standardabweichung $<1\%$ (5 Messungen). Die kinematische Zähigkeit der Mischung wurde mit dem Cannon-Fenske-Routineviskosimeter der Firma SCHOTT, Typ 50101/0a mit einem Innendurchmesser der Kapillare von $d = 1,01 \text{ mm}$ gemessen.

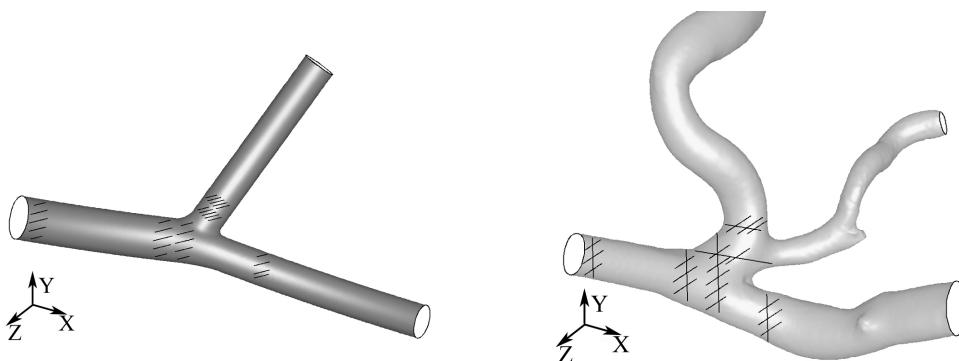


Abb. 2: Links ist ein Computermodell der vereinfachten und rechts ist ein Computermodell der realen linken Koronararterie mit den Geraden dargestellt, an den LDA Messungen durchgeführt wurden.

Simulationen

Die numerischen Berechnungen der Strömung in beiden Modellen erfolgten mit dem CFD-Programm FLUENT6 (Fluent Inc., USA) unter den gleichen Randbedingungen wie die expe-

rimentellen Untersuchungen. Die Geometrien wurden auf die Größe der experimentellen Modelle skaliert. Die Strömung wurde mit dem „second order upwind“-Diskretisierungsschema und dem „pressure-velocity coupling“-Schema SIMPLE berechnet. Als Konvergenzkriterium wurde 10^{-5} gewählt. Zuerst erfolgte die Untersuchung der Gitterunabhängigkeit der Lösung. Es wurden sechs verschiedene Gitter für das vereinfachte Modell mit dem pre-Prozessor GAMBIT (Fluent Inc., USA) hergestellt. Oberflächengitter aller sechs Gittermodelle wurden als unstrukturierte Gitter aus Dreiecken generiert. Die Oberflächengitter von drei Modellen wurden mit den folgenden Knotenabständen generiert:

- Gittermodell 1 – Knotenabstand von $1/20$ des Eingangsdurchmessers in allen Segmenten;
- Gittermodell 2 – Knotenabstand von $1/27$ des Eingangsdurchmessers in allen Segmenten;
- Gittermodell 3 – Knotenabstand von $1/20$ des Eingangsdurchmessers im Segment LMA, Knotenabstände von $1/27$ in beiden Zweigen und Knotenabstand von $1/40$ des Eingangsdurchmessers im Verzweigungsbereich.

Die inneren Gitter dieser drei Modelle wurden aus Tetraedern generiert. Weitere drei Modelle wurden mit Oberflächengittern mit Knotenabständen von $1/20$ des Eingangsdurchmessers in allen Segmenten generiert. Daraufhin wurden zuerst Gittergrenzschichten aus entsprechend 2, 3 und 4 Schichten aus Pyramiden aufgebaut. Die gesamte Grenzschichtdicke betrug in allen drei Gittermodellen $1/20$ des Eingangsdurchmessers. Die Dicke der einzelnen Schichten erhöhte sich um Faktor 1,2 von Schicht zur Schicht. Der restliche Teil des Innenvolumens wurde wieder mit Tetraedern ausgefüllt. Tabelle 1 gibt einen Überblick über die Anzahl der Knoten, Oberflächendreiecke, Zellen und den Abstand des zur Wand nächsten Punktes, wo die Geschwindigkeit berechnet wurde (Zellzentrum). Der letzte Parameter ist für die Ermittlung der Wandschubspannung sehr wichtig.

Tabelle 1: Gitterparameter der 6 Gittermodelle der vereinfachten linken Koronararterie. D ist der Eingangsdurchmesser.

Gittermodell	1	2	3	4	5	6
N - Knoten	87.456	204.877	209.530	114.261	131.201	148.102
N - Dreiecke	41.000	71.366	79.000	41.000	41.000	41.000
N - Zellen	466.000	1.126.000	1.150.000	480.000	509.500	538.000
dN - Abstand	$0,036 * D$	$0,027 * D$	$(0,018-0,036) * D$	$0,011 * D$	$0,007 * D$	$0,005 * D$

Für die Untersuchung der Gitterunabhängigkeit der Lösung im Modell des realen linken Koronargefäßes wurden 4 Gittermodelle generiert. Zwei davon mit Gittergrenzschichten, deren Dicke $1/27$ des Eingangsdurchmessers war.

Ergebnisse

Die Ergebnisse der Untersuchung zur Gitterunabhängigkeit der Lösung zeigten, dass die mittlere Differenz (Fehler) der Geschwindigkeitsberechnungen vom ersten bis zum fünften Gittermodell von 4,9% über 4,6%, 2,5% und 0,8% auf 0,6% sinkt. Gittermodell 6 ist das Modell mit der feinsten Gitterauflösung und wurde als Vergleichsmaßstab verwendet. Die mittleren Differenzen bei der Bestimmung der Wandschubspannung waren etwas höher und betragen entsprechend 12%, 9,6%, 8,5%, 1,7% und 1,3%. Die mittleren Differenzen bei der Bestimmung der Geschwindigkeiten ohne den jeweils ersten und die letzten zwei Punkte einer Geraden, an den die Geschwindigkeiten bestimmt wurden, waren mit 3,2%, 2,8%, 1,8%, 0,6% und 0,5% noch kleiner. Abbildung 3 zeigt den Vergleich zwischen zwei Geschwindigkeitskomponenten in 6 Geraden an 6 verschiedenen Querschnitten des vereinfachten Modells der linken Koronararterie. Die V-Komponente in den ersten 3 Querschnitten, die

zum LMA Segment gehören, ist fast Null und wurde deshalb nicht gezeigt. Die Geschwindigkeitsprofile zeigen die Ergebnisse, die zu erwarten sind: annähernd parabolisches Geschwindigkeitsprofil in unmittelbarer Nähe des Gefäßeingangs ($x=5$ mm). In zwei weiteren Profilen ist eine deutliche Verschiebung des Geschwindigkeitsmaximums vom Zentrum in Richtung der Außenwand zu sehen. Diese Verschiebung entspricht der Erwartung anhand der ermittelten Dean Zahl $De=20$ für dieses Modell. Der Vergleich zwischen den numerisch ermittelten Geschwindigkeiten und den mittels LDA gemessenen Werten zeigt eine relativ niedrige mittlere Differenz (Fehler) von 4,4% mit einer Standardabweichung von etwa 5%. Anzumerken ist, dass die mittleren RMS-Werte der Messung größer waren als die mittlere Differenz zwischen CFD und LDA-Messungen. Für die U-Komponente betragen die RMS-Werte 6,7% bzw. 4,8% für die V-Komponente. Deutlich höhere RMS-Werte wurden im wandnahen Bereiche mit höheren Geschwindigkeitsgradienten gemessen. Diese niedrige Differenz zwischen CFD-Berechnungen und LDA-Messungen wurde allerdings für Geschwindigkeiten ohne Berücksichtigung des wandnahen Bereichs ermittelt (ohne die ersten zwei und die letzten zwei Punkte der gemessenen Geraden). Unter Berücksichtigung der wandnahen Bereiche steigt der mittlere Fehler bei der Bestimmung der Geschwindigkeit auf 7,6%.

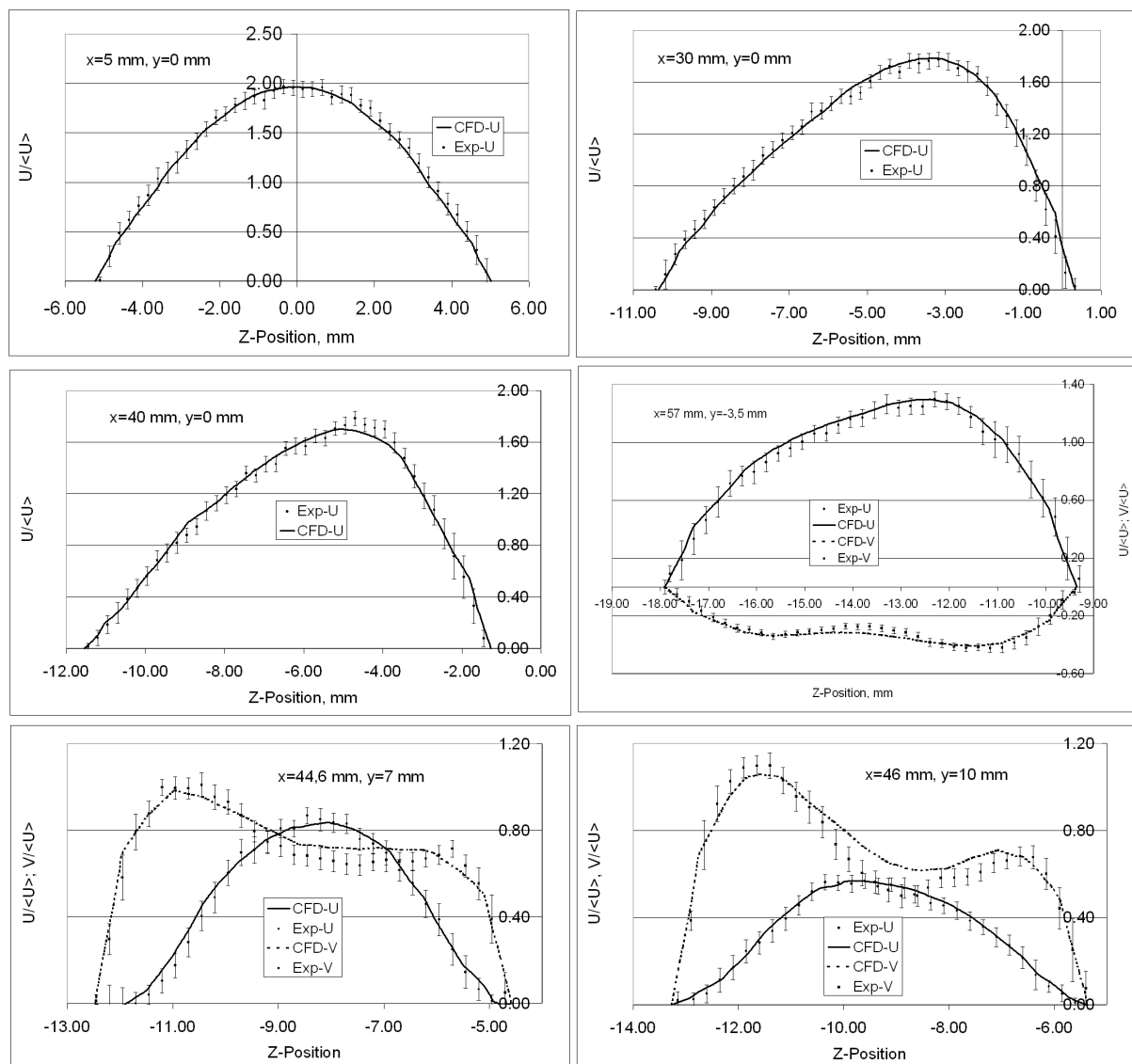


Abb. 3: Vergleich zwischen numerischen und experimentellen Messungen der normierten U- und V-Geschwindigkeitskomponenten an 6 Geraden aus 6 verschiedenen Querschnitten des vereinfachten

Modells der linken Koronararterie. Die Geschwindigkeiten wurden mit der mittleren Eingangsgeschwindigkeit $\langle U \rangle$ normiert. Balken zeigen normierte RMS Werte.

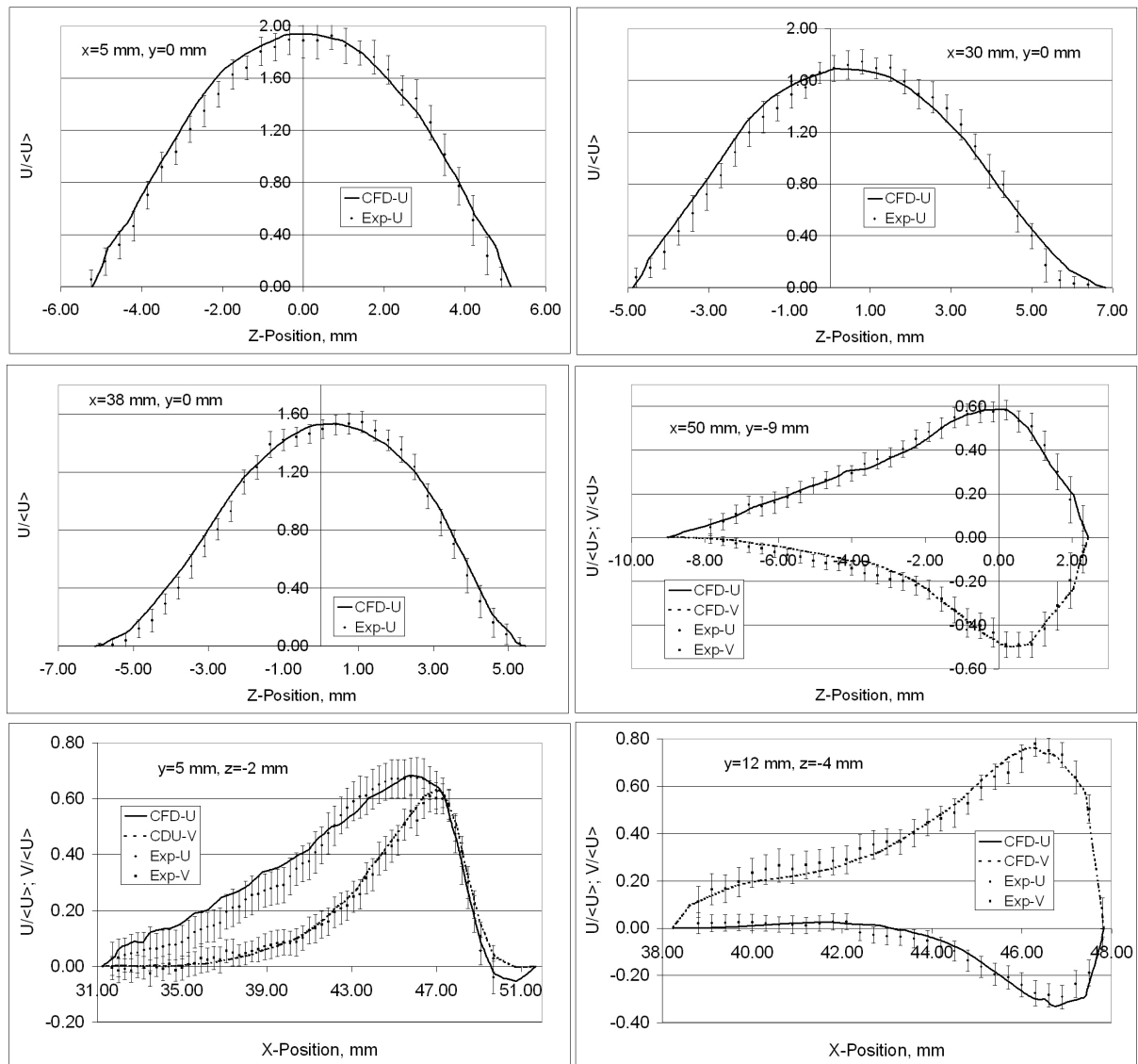


Abb. 4: Vergleich zwischen numerischen und experimentellen Messungen der normierten U- und V-Geschwindigkeitskomponenten an 6 Geraden aus 6 verschiedenen Querschnitten des realen Modells der linken Koronararterie. Die Geschwindigkeiten wurden mit der mittleren Eingangsgeschwindigkeit $\langle U \rangle$ normiert. Balken zeigen normierte RMS Werte.

Die Ergebnisse der Untersuchung zur Unabhängigkeit der numerischen Lösung im Modell des realen Koronargefäßes zeigten, dass die mittlere Differenz (Fehler) der Geschwindigkeitsberechnungen von erstem bis zum dritten Gittermodell von 10,2% über 8,7% auf 4,2% sinkt. Dies sind deutlich höhere Werte als im vereinfachten Modell. Gittermodell 4 ist das Modell mit der feinsten Gitterauflösung und wurde als Vergleichsmaßstab verwendet. Der Abstand des zur Wand nächsten Punktes, wo die Geschwindigkeit berechnet wurde, betrug in diesem Gittermodell nur 0,001 des Eingangsdurchmessers. Die mittleren Differenzen bei der Bestimmung der Wandschubspannung waren höher und betrugen entsprechend 22,8%, 13,4% und 5,1%. Die mittleren Differenzen bei der Bestimmung der Geschwindigkeiten ohne den ersten und die letzten zwei Punkte der Geraden, an denen die Geschwindigkeiten bestimmt wurden, waren mit 7,5%, 5,9% und 3,1% etwas kleiner. Abbildung 4 zeigt den Vergleich zwischen zwei Geschwindigkeitskomponenten in 6 Geraden an 6 verschiedenen

Querschnitten des realen Modells der linken Koronararterie. Die V-Komponente in den ersten 3 Querschnitten, die zum LMA Segment gehören, ist fast Null und wurde deshalb nicht gezeigt. In den ersten drei Querschnitten sind die Geschwindigkeitsprofile annähernd parabolisch. In weiteren drei sind deutliche Verschiebungen des Maximums, bedingt durch die Krümmung der Gefäßsegmente, zu sehen.

Der Vergleich zwischen den numerisch ermittelten Geschwindigkeiten und den mit LDA gemessenen Werten zeigt auch für das Modell des realen Gefäßes der linken Koronararterie eine gute Übereinstimmung (siehe Abb. 4).

Diskussion und Ausblick

Der Vergleich zwischen numerisch berechneten und mit LDA gemessenen Geschwindigkeitsprofilen zeigt eine sehr gute Übereinstimmung. Daraus folgt, dass die numerische Strömungssimulation geeignet ist, die Strömung in komplexen Geometrien der Koronararterien zu ermitteln. Der Vergleich zeigte auch die Problematik der Erfassung der wandnahen Strömung sowie der Wandschubspannungen mit einer Standard-LDA-Anlage. Das Messvolumen ist zu groß für die 2,5fach vergrößerten Modelle. Eine weitere Vergrößerung war nicht möglich aufgrund der Begrenzung des ThermoJet-Gerätes. Weiterhin ist es sehr problematisch, einen großen Silikonblock mit sehr guten optischen Eigenschaften (Transparenz) herzustellen. Selbst im 2,5fach vergrößerten Modell der realen Koronararterie (75 mm x 110 mm x 160 mm) gab es Probleme, die Messungen mit einer ausreichend hohen Messrate durchzuführen. Das Problem wurde gelöst durch die Erwärmung des Modells auf 29°C mit Hilfe von Infrarotlampen. Die Messrate erhöhte sich dadurch um den Faktor 10 bis 100.

Die Analyse der Ergebnisse zur Untersuchung der Gitterunabhängigkeit der numerischen Lösung zeigt, dass zur korrekten Erfassung der wandnahen Strömung und der Wandschubspannungen - insbesondere in realen Gefäßgeometrien - eine sehr feine wandnahe Gitterauflösung benötigt wird. Der Abstand zwischen dem ersten Punkt, wo die Geschwindigkeit berechnet wird, und der Wand soll mindestens 1/1000 des Gefäßdurchmessers sein. Dieser Wert ist deutlich kleiner als 1/20 des Durchmessers, was für die laminare Rohrströmung empfohlen wird, und stellt sehr hohe Anforderungen an die LDA-Anlage für die Erfassung der Wandschubspannungen. Dieser Ergebnisse korrelieren gut mit anderen Untersuchungen zur Gitterunabhängigkeit der CFD Berechnungen in Koronararterien (siehe Prakash et al 2001 und Berthier et al 2002).

Problematisch war die identische Positionierung der experimentellen Modelle im 3D-Raum, was eine wichtige Fehlerquelle beim Vergleich der numerisch und der experimentell erfassten Geschwindigkeiten darstellt. Um dieses Problem zu lösen, wurden an den Modellen Würfel generiert (siehe Abb. 2). Das Modell wurde auf einem Niveliertisch befestigt. Auf der oberen Fläche des Würfels, der außerhalb des Silikonmodells befand, wurden zwei Wasserlibellen (gekreuzt) angebracht, um die horizontale Ausrichtung des Modells zu erreichen. Danach wurden durch die Drehung des Modells die Kanten des Würfels parallel zu dem Strahl der LDA-Anlage ausgerichtet, der genau mit der Z-Achse korreliert. Zur Kontrolle wurden noch die Eckpunkte des Würfels angefahren. Trotzdem bleibt die Positionierung als Fehlerquelle der Vergleichsuntersuchung bestehen. Es ist empfehlenswert, bei weiteren derartigen Studien noch ein 3D-Gitter aus feinen Drähten, das an den Würfel am Eingangsbereich des Modells befestigt wird, im Silikonmodell einzubetten.

Anschließend wurden Geschwindigkeitsmessungen im Modell des realen Koronargefäßes unter pulsatilen Bedingungen durchgeführt. Diese Daten werden zurzeit ausgewertet.

Dankesworte

Die Autoren möchten an dieser Stelle der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) ihren Dank aussprechen für die Unterstützung dieser Arbeit im Rahmen des Projektes GO 1067/2-1.

Literatur

Changizi, M.A., Cherniak, Ch., 2000: Modeling the large-scale geometry of human coronary arteries, *Can. J. Physiol. Pharmacol.*, Vol. 78, pp. 603-611

Geigy Scientific Tables, 1990: Heart and Circulation, Ed. C. Lentner, Vol. 5

Affeld, K., Goubergrits, L., Fernandez-Britto, J., Falkon, L., 1998: Variability of the geometry of the human common carotid artery. A vessel cast study of 31 specimens. *Pathology Research and Practice*, Vol. 194, pp. 597-602

Prakash, S., Ethier, C.R., 2001: Requirements for mesh resolution in 3-D computational hemodynamics, *Journal of Biomedical Engineering*, Vol. 123, pp. 26-38

Berthier, B., Bouzerar, R., Legallais, C., 2002: Blood flow patterns in an anatomically realistic coronary vessel: influence of three different reconstruction methods, *Journal of Biomechanics*, Vol. 35, pp. 1347-1356