

УДК 534.2

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЫСОКОИНТЕНСИВНЫХ ПОЛЕЙ СИЛЬНО ФОКУСИРУЮЩИХ УЛЬТРАЗВУКОВЫХ ИЗЛУЧАТЕЛЕЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ШИРОКОУГОЛЬНОГО ПАРАБОЛИЧЕСКОГО ПРИБЛИЖЕНИЯ

© 2018 г. П. В. Юлдашев*, И. С. Мездрохин, В. А. Хохлова

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, физический факультет
119991 ГСП-1 Москва, Ленинские горы 1

*e-mail: petr@acs366.phys.msu.ru

Поступила в редакцию 27.05.2017 г.

На основе широкоугольного параболического приближения построен новый численный алгоритм расчета линейных и нелинейных полей, создаваемых аксиально-симметричными ультразвуковыми излучателями. На примере одиночного сильно фокусирующего излучателя проведено сравнение результатов моделирования ультразвукового поля, полученных на основе уравнения Вестервельта, уравнения Хохлова–Заболотской–Кузнецова (ХЗК) с различными способами задания граничных условий и нелинейного широкоугольного параболического уравнения. Показано, что при сравнении с уравнением ХЗК скорости численных расчетов использование широкоугольного параболического приближения позволяет получать решения для сильно фокусированных линейных и нелинейных ультразвуковых пучков гораздо более близкие по точности к решениям уравнения Вестервельта.

Ключевые слова: фокусировка, дифракция, нелинейные волны, параболическое приближение, широкоугольное параболическое приближение, уравнение Вестервельта, медицинская акустика, ультразвуковая хирургия

DOI: 10.7868/S0320791918030164

ВВЕДЕНИЕ

В последнее десятилетие высокоинтенсивный фокусированный ультразвук (High Intensity Focused Ultrasound – HIFU) находит все более широкое применение в неинвазивной хирургии для теплового и механического воздействия на ткани различных органов [1, 2]. Отличительными особенностями HIFU-излучателей являются большие углы схождения и сильное проявление эффектов акустической нелинейности, особенно в новых приложениях, основанных на использовании ударно-волновых режимов облучения [2, 3]. Для обеспечения эффективности и безопасности использования устройств ультразвуковой хирургии в клинической практике необходимо качественное описание параметров полей, создаваемых излучателями в воде и в биологической ткани, по значениям которых можно оценить риски и эффективность лечения.

При создании новых медицинских устройств сначала определяются характеристики ультразвукового поля при фокусировке в воде [4]. Мощным метрологическим инструментом для этой

цели становится численное моделирование, использующее экспериментальные данные об излучателе конкретной установки. Недавно был предложен метод, который все более широко начинает применяться в различных лабораториях мира [5–7]. Метод основан на использовании измерений в линейном поле для постановки точного граничного условия волновой модели и серии численных расчетов нелинейного поля в диапазоне рабочих мощностей излучателя с контролем точности по измерениям акустического давления в фокусе. Важным частным случаем геометрии полей, создаваемых излучателями для ультразвуковой хирургии, являются поля, обладающие аксиальной симметрией. Во-первых, во многих приложениях используются излучатели в виде одиночного сегмента сферической поверхности [5, 7] либо в виде кольцевых решеток [8]. Кроме того, даже поля излучателей более сложной конструкции, в том числе многоэлементных решеток, могут быть с высокой точностью аппроксимированы полем эквивалентного одиночного излучателя [9]. Поэтому развитие удобных методов

численного моделирования нелинейных полей, обладающих аксиальной симметрией, является теоретической и практической задачей, важной для развития медицинских приложений ультразвука.

Используемые на сегодняшний день в медицинской акустике волновые модели различаются по точности описания нелинейных и дифракционных эффектов, области применимости и сложности необходимых вычислений. Одной из наиболее полных волновых моделей является уравнение Вестервельта, точно учитывающее дифракционные эффекты [6, 9, 10]. Однако для аксиально-симметричного поля использование данного уравнения оказывается невыгодным по вычислительным затратам. Широко используемой приближенной моделью для описания аксиально-симметричных пучков является нелинейное уравнение Хохлова–Заболотской–Кузнецова (ХЗК), учитывающее эффекты дифракции в параболическом приближении и поэтому справедливое лишь при малых углах фокусировки [11]. Расширить область применимости параболической модели для сильно фокусирующих излучателей ультразвуковой хирургии и получить более точные результаты в фокальной области пучка удалось при помощи модификации граничного условия, получившей название метода эквивалентного излучателя [9, 12].

Менее используемой, но потенциально более точной моделью для описания дифракционных эффектов в фокусированных аксиально-симметричных полях медицинских излучателей может служить метод аппроксимаций Паде [13–17]. Такой метод часто называют широкоугольным приближением, которое также может рассматриваться как обобщение стандартной параболической модели.

Широкоугольное приближение успешно используется при описании распространения низкочастотных линейных звуковых волн в моделях морской среды [15, 16]. В нелинейных задачах широкоугольное приближение применялось для моделирования слабо-нелинейных полей в воде [17] и воздухе [18]. При этом использовались различные способы аппроксимации точного пропагатора однонаправленного волнового уравнения. Так, в работе [17] пропагатор аппроксимировался рациональной функцией N -го порядка, а в работе [18] – суммой рациональных функций первого порядка. В результате при расчете дифракционного оператора согласно работе [18] поперечный лапласиан появляется только в левой части соответствующего уравнения, а в работе [17] – симметрично слева и справа. Это делает численную схему рабо-

ты [18] близкой к полностью неявной, со всеми ее недостатками, а схему работы [17] – близкой к схеме Кранка–Николсона. Для расчета нелинейного оператора в работах [17, 18] используется спектральный подход, позволяющий решать только слабо-нелинейные задачи.

В данной работе широкоугольное приближение использовалось при построении нового численного алгоритма описания линейных и сильно нелинейных ультразвуковых полей, создаваемых аксиально-симметричными фокусирующими излучателями ультразвуковой хирургии. Новизна алгоритма связана с использованием удароулавливающей численной схемы для расчета нелинейного оператора и возможностью описания разрывных полей [10], способ аппроксимации точного пропагатора соответствовал работе [17]. Другое важное отличие представленной работы состоит в постановке граничного условия. В работе [17] оно задавалось в виде источника круглой формы на плоскости с равномерно распределенным давлением и изменением фазы, обеспечивающим фокусировку. В нашей работе используется реалистичное граничное условие, получаемое с использованием интеграла Рэлея для переноса поля с излучающей поверхности произвольной формы на начальную плоскость. Это позволяет применять его для описания полей реальных излучателей медицинского ультразвука, имеющих, например, форму сферического сегмента.

Для проверки точности нового алгоритма было проведено сравнение результатов моделирования полей, полученных с использованием уравнения Вестервельта [9, 10], уравнения ХЗК [9] и разработанного широкоугольного параболического уравнения. Показано, что широкоугольное приближение позволяет моделировать поля сильно фокусирующих аксиально-симметричных источников с близкой по сравнению с уравнением Вестервельта точностью во всей пространственной области пучка; при этом вычислительная сложность алгоритма сопоставима со стандартными алгоритмами решения уравнения ХЗК.

ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ МЕТОД

А. Уравнения Вестервельта и Хохлова–Заболотской–Кузнецова (ХЗК)

Уравнение Вестервельта, описывающее распространение нелинейных акустических волн в произвольных направлениях, имеет вид

$$\Delta p' - \frac{1}{c_0^2} \frac{\partial^2 p'}{\partial t^2} = -\frac{\epsilon}{\rho_0 c_0^4} \frac{\partial^2}{\partial t^2} (p'^2) - \frac{\delta}{2c_0^3} \frac{\partial^3 p'}{\partial t^3}. \quad (1)$$

Здесь $p'(t, x, y, z)$ – акустическое давление, t – время, Δ – оператор Лапласа, $\Delta = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2$ в декартовой системе координат (x, y, z) ; ρ_0, c_0, ε и δ – плотность, скорость звука, коэффициент нелинейности и коэффициент термовязкого поглощения в среде соответственно. Физические параметры в уравнении (1), соответствующие распространению в воде при температуре 20°C, равны: $\rho_0 = 998 \text{ кг/м}^3$, $c_0 = 1486 \text{ м/с}$, $\varepsilon = 3.5$, $\delta = 4.33 \times 10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}$ [6, 9].

Для описания ультразвукового пучка, создаваемого аксиально-симметричным источником в однородной среде, т.е. в отсутствие отражений и эффектов обратного рассеяния, уравнение (1) удобно переписать в сопровождающей системе координат:

$$\frac{\partial^2 p}{\partial \tau \partial z} = \frac{\partial^2 p}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial p}{\partial r} \right) + \frac{\varepsilon}{2\rho_0 c_0^3} \frac{\partial^2 p^2}{\partial \tau^2} + \frac{\delta}{2c_0^3} \frac{\partial^3 p}{\partial \tau^3}, \quad (2)$$

где $p(\tau, r, z) = p'(t, x, y, z)$, $\tau = t - z/c_0$, $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ – радиальная координата в плоскости, перпендикулярной оси симметрии излучателя. В параболическом приближении уравнение (2) переходит в уравнение Хохлова–Заболотской–Кузнецова:

$$\frac{\partial^2 p}{\partial \tau \partial z} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial p}{\partial r} \right) + \frac{\varepsilon}{2\rho_0 c_0^3} \frac{\partial^2 p^2}{\partial \tau^2} + \frac{\delta}{2c_0^3} \frac{\partial^3 p}{\partial \tau^3}. \quad (3)$$

Оба уравнения, (2) и (3), являются уравнениями эволюционного типа по координате z , в которых давление $p(\tau, r, z)$ медленно меняется как функция z , а быстрые фазовые изменения учтены использованием в качестве временного аргумента времени τ в сопровождающей системе координат. Видно, что уравнение ХЗК (3) отличается от уравнения Вестервельта (2) только отсутствием в правой части второй частной производной давления по координате z . Это отличие связано с использованием в уравнении ХЗК упрощающего предположения о малости углов дифракции, в то время как дифракционная часть уравнения Вестервельта, (1) и (2), в точности соответствует линейному волновому уравнению. Полагая в уравнениях (2) и (3) равными нулю коэффициенты нелинейности и термовязкого поглощения, можно получить соответствующие линейные уравнения, описывающие только дифракционные эффекты.

Б. Широкоугольное параболическое приближение (ШПУ)

Широкоугольное параболическое приближение можно рассматривать, с одной стороны, как обобщение стандартного параболического дифракционного оператора уравнения (3), а с другой стороны, как один из способов построения приближенного решения дифракционной части уравнений (1) и (2). Рассмотрим вывод уравнения широкоугольного приближения для отдельных гармонических компонент разложения поля давления

$p'(t, r, z)$ в ряд Фурье $p'_\omega(\omega, r, z) = \int p' \exp(-i\omega t) dt$ в уравнении (1). В отсутствие нелинейных эффектов и поглощения, для комплексной амплитуды давления p'_ω уравнение (1) переходит в уравнение Гельмгольца:

$$\Delta p'_\omega + k^2 p'_\omega = 0, \quad (4)$$

где $k = \omega/c_0$ – волновое число. Если ввести дифференциальные операторы \hat{L} и \hat{Q} как

$$\hat{L} = \frac{1}{k^2} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right), \quad \hat{Q}^2 = 1 + \hat{L}, \quad (5)$$

то уравнение Гельмгольца можно представить в виде

$$\frac{\partial^2 p'_\omega}{\partial z^2} + k^2 \hat{Q}^2 p'_\omega = 0. \quad (6)$$

Учитывая, что в рассматриваемом случае однородной среды волновое число k не зависит от координат, уравнение Гельмгольца распадается на два независимых уравнения:

$$\frac{\partial p'_\omega}{\partial z} + ik \hat{Q} p'_\omega = 0, \quad (7a)$$

$$\frac{\partial p'_\omega}{\partial z} - ik \hat{Q} p'_\omega = 0, \quad (7b)$$

каждое из которых соответствует волнам, бегущим под острыми углами к отрицательному (7a) или положительному (7b) направлениям оси z [13].

Оператор $\hat{Q} = \sqrt{1 + \hat{L}}$ является псевдодифференциальным оператором, который понимается в терминах умножения фурье-образа $\bar{p}'_\omega(\omega, k_\perp, z)$ комплексной амплитуды давления $p'_\omega(\omega, r, z)$ по поперечным пространственным координатам на соответствующую передаточную функцию. Так, запись

$$\hat{Q} p'_\omega = \sqrt{1 + \hat{L}} p'_\omega, \quad (8)$$

означает, что для фурье-образов левой и правой частей равенства справедливо, что

$$F\{\hat{Q}p'_\omega\} = \sqrt{1 - \frac{k_\perp^2}{k^2}} p'_\omega, \quad k_\perp < k, \quad (9)$$

где оператор $F\{\cdot\}$ означает нахождение фурье-образа функции, являющейся аргументом оператора, по поперечным пространственным координатам. Вклад компонент пространственного фурье-спектра поля при $k_\perp > k$ можно не учитывать, так как они соответствуют быстро затухающим неоднородным волнам.

Для получения широкоугольного приближения перейдем в сопровождающую систему координат, в которой вместо амплитуды давления $p'_\omega(\omega, r, z)$ используется медленно меняющаяся комплексная амплитуда p :

$$p'_\omega(r, z) = p_\omega(r, z)e^{ikz}. \quad (10)$$

В этом случае уравнение (7б) однонаправленного распространения вдоль положительного направления оси z преобразуется к виду

$$\frac{\partial p_\omega}{\partial z} - ik(\sqrt{1 + \hat{L}} - 1)p_\omega = 0. \quad (11)$$

Оператор $\hat{Q} = \sqrt{1 + \hat{L}}$ можно представить в виде ряда Тейлора по степеням оператора \hat{L} :

$$\hat{Q} = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} q_n \hat{L}^n. \quad (12)$$

Удерживая в (11) конечное число слагаемых ряда (12), получим различные приближенные уравнения. Так, если ограничиться только линейным слагаемым, то $\hat{Q} = 1 + \hat{L}/2$, и уравнение (11) преобразуется к стандартному параболическому уравнению дифракции для частотных составляющих $p_\omega = \int p \exp(-i\omega\tau) d\tau$ в линеаризованном уравнении ХЗК (3) в отсутствие поглощения:

$$\frac{\partial p_\omega}{\partial z} = \frac{i}{2k} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial p_\omega}{\partial r} \right). \quad (13)$$

Удерживая в разложении (12) слагаемые более высокого порядка, получим более точные уравнения широкоугольного параболического приближения. С точки зрения построения численных схем и их решений, напрямую использование таких разложений невыгодно, так как тогда в уравнение входят пространственные производные высокого порядка, соответствующие целочисленным степеням оператора \hat{L} . Поэтому на практике построение приближенного уравнения осуществляется иначе [15].

Если на расстоянии z известно распределение амплитуды давления p_ω вдоль поперечной координаты r , то решение уравнения (11) на шаге $z + \Delta z$ можно представить в виде [13]

$$p_\omega(r, z + \Delta z) = \exp\left[ik\Delta z (\sqrt{1 + \hat{L}} - 1) \right] p_\omega(r, z), \quad (14)$$

где оператор

$$\hat{A} = \exp\left[ik\Delta z (\sqrt{1 + \hat{L}} - 1) \right] \quad (15)$$

называется пропагатором. Так же, как и оператор \hat{Q} , пропагатор \hat{A} может быть аппроксимирован несколькими первыми членами ряда Тейлора по оператору \hat{L} . Однако, как уже было сказано выше, такое представление на практике оказывается неудобным. Поэтому пропагатор чаще всего представляют в виде рациональной функции – отношения двух полиномов степени N , которая также называется аппроксимацией Паде или “Split-step Padé” [13]:

$$\hat{A}_p = \frac{a_0 + a_1 \hat{L} + \dots + a_N \hat{L}^N}{b_0 + b_1 \hat{L} + \dots + b_N \hat{L}^N}. \quad (16)$$

Коэффициенты аппроксимации Паде могут быть найдены, если известны коэффициенты разложения пропагатора в ряд Тейлора до номера $2N$ включительно. Коэффициенты a_0 и b_0 в (16) равны единице. Чем больше номер N , тем лучше формула (16) аппроксимирует исходный пропагатор (15). В данной работе использовалось значение $N = 4$. Далее каждый из полиномов раскладывается на множители, в результате чего пропагатор (16) можно записать в виде

$$\hat{A}_p = \frac{a_0 \prod_{n=1}^N (1 + \mu_n \hat{L})}{b_0 \prod_{n=1}^N (1 + \nu_n \hat{L})}, \quad (17)$$

где $\mu_n = -1/\alpha_n$, $\nu_n = -1/\beta_n$, а α_n и β_n – корни соответствующих полиномов, стоящих в числителе и знаменателе аппроксимации Паде. Для вычисления корней использовался алгоритм, основанный на методе Аберта–Эрлиха [19]. Представление (17) для пропагатора допускает на каждом шаге Δz итеративную процедуру решения вида

$$\begin{aligned} (1 + \nu_n \hat{L}) p_\omega^{(n+1)}(z + \Delta z, r) = \\ = (1 + \mu_n \hat{L}) p_\omega^{(n)}(z, r), \quad n = 1 \dots N. \end{aligned} \quad (18)$$

Итеративная процедура (18) реализовывалась в четыре этапа, последовательно для каждой из $N = 4$ пар значений коэффициентов ν_n и μ_n . Фазо-

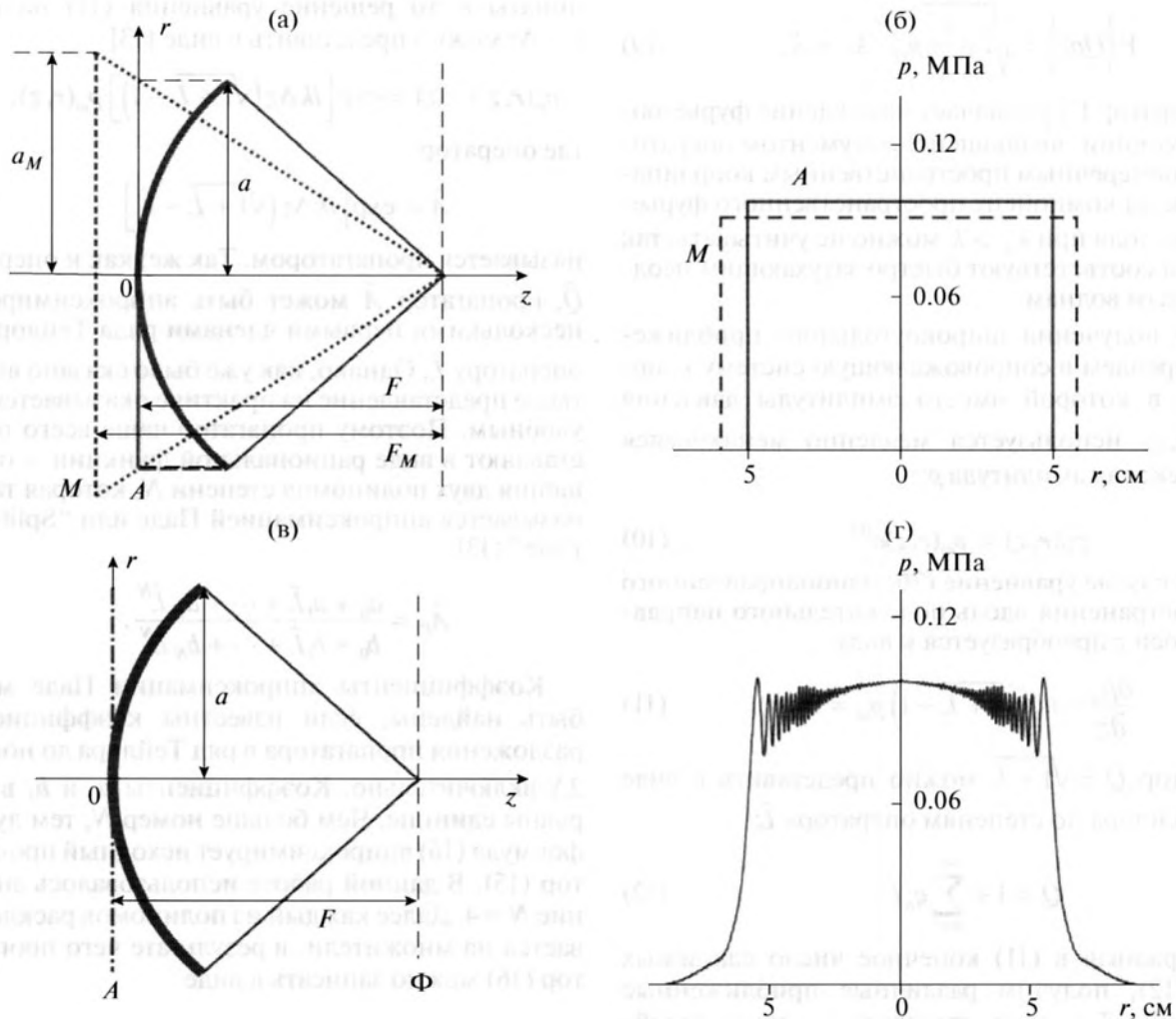


Рис. 1. Иллюстрация способов постановки граничных условий в различных моделях описания ультразвукового пучка, создаваемого фокусирующим излучателем в виде сферического сегмента с частотой 1 МГц, радиусом 5 см и фокусным расстоянием 9 см. Для параболического уравнения (а, б): равномерное распределение амплитуды давления на плоскости "А", проходящей через центр излучателя, и на плоскости "М" для эквивалентного источника. Для широкоугольного параболического уравнения (в, г): перенесение поля с поверхности излучателя на плоскость "Ф" с использованием интеграла Рэлея, затем на плоскость "А", используя метод углового спектра.

вая ошибка (в радианах) между точным пропагатором (15) и его приближенным представлением (18) для первой гармоники составила 2.7×10^{-5} на одном шаге Δz и 0.15 суммарно на всей области расчета для волн, распространяющихся под углом 65° к оси излучателя. Каждое из уравнений (18) содержит только первую степень дифференциального оператора \hat{L} второго порядка, что позволяет использовать простые конечно-разностные схемы для построения численного решения. Таким образом, широкоугольное параболическое уравнение можно представить в виде Паде-ап-

проксимации (16) точного пропагатора (15) однонаправленного волнового уравнения (11).

В. Граничные условия в плоскости источника

Для решения уравнений эволюционного типа (2, 3, 11) требуется задание граничного условия в виде распределения поля давления в некоторой начальной плоскости, перпендикулярной оси излучателя. В качестве примера рассмотрим поле, создаваемое одиночным сильно фокусирующим излучателем в виде сферического сегмента с радиусом $a = 5$ см, фокусным расстоянием $F = 9$ см

и частотой $f = 1$ МГц (рис. 1) [9, 20]. Половинный угол фокусировки такого излучателя составляет $\theta = 33.7^\circ$, а коэффициент линейного усиления давления в фокусе по сравнению с давлением на поверхности излучателя равен 64 [9]. Если поверхность излучателя колеблется в поршневой моде с амплитудой колебательной скорости u_0 , то характерная амплитуда давления на поверхности излучателя может быть определена в соответствии с формулой для плоской волны: $p_0 = \rho_0 c_0 u_0$.

Граничное условие для стандартного параболического уравнения (3) обычно задается в плоскости $z = 0$ в виде распределения амплитуды давления на рабочей частоте излучателя и описывается выражением

$$\begin{aligned} p_{\omega_0}(r, z = 0) &= p_0 \exp(-ik_0 r^2 / 2F), \quad r \leq a, \\ p_{\omega_0}(r, z = 0) &= 0, \quad r > a. \end{aligned} \quad (19)$$

Здесь $\omega_0 = 2\pi f$ – круговая частота, $k_0 = \omega_0 / c_0$ – волновой вектор, a – радиус излучателя на плоскости, совпадающий с радиусом реального излучателя (сплошные линии на рис. 1а, 1б). Однако известно, что при увеличении угла схождения излучателя решение стандартной параболической модели начинает заметно отличаться от точного решения дифракционной задачи в виде интеграла Рэлея [21]. Для расширения области применимости параболического приближения было предложено использовать модифицированные граничные условия в виде эквивалентного источника [9, 12]. Параметры эквивалентного источника в граничном условии (19) подбирались из условия совпадения амплитуд давления в фокусе и положений первых дифракционных нулей главного фокального максимума на оси пучка для решений, полученных в параболической модели и на основе интеграла Рэлея. Были получены аналитические выражения для радиуса a_M , фокусного расстояния F_M и начальной амплитуды давления p_M эквивалентного источника как функций a , F , и p_0 фокусирующего излучателя для различных значений безразмерного параметра $k_0 a$. При этом было показано, что величины F_M и a_M (штриховые линии на рис. 1а, 1б) всегда превышают соответствующие значения F и a , и различие между ними растет с увеличением угла схождения излучателя. Далее в работе будут использоваться граничные условия как в стандартной формулировке (19), так и в виде эквивалентного источника.

Для уравнения Вестервельта (2) и широкоугольной параболической модели (11) граничное

условие рассчитывалось в два этапа. Сначала с помощью интеграла Рэлея [20]

$$p'(\mathbf{r}) = -i\rho_0 c_0 \frac{k}{2\pi} \int_S \frac{u(\mathbf{r}') e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} dS \quad (20)$$

рассчитывалось распределение акустического давления в фокальной плоскости (см. рис. 1в). Здесь $p'(\mathbf{r})$ – комплексная амплитуда давления в точке наблюдения с радиус-вектором \mathbf{r} , \mathbf{r}' – радиус-вектор элемента поверхности dS , лежащего на поверхности излучателя. Величина нормальной компоненты колебательной скорости $u(\mathbf{r}')$ на поверхности излучателя предполагалась одинаковой. Интегрирование в (20) ведется вдоль поверхности S , представляющей собой сегмент сферы, ограниченный полярным углом θ (рис. 1). Затем полученное распределение амплитуды давления переносилось на начальную плоскость $z = 0$, используя метод углового спектра [10]. Как показано на рис. 1г, получаемое итоговое распределение амплитуды давления при $z = 0$ имеет неравномерную структуру вдоль радиальной координаты и заметно отличается от распределений параболических моделей прямоугольной формы рис. 1б.

Г. Граничные условия по радиальной координате

Для уменьшения влияния границы области расчета по радиальной координате в стандартном и широкоугольном параболических уравнениях на краю пространственного окна по r использовались неотражающие граничные условия идеально согласованного слоя (PML – perfectly matched layer) [22]. Для этого в небольшом приграничном слое толщиной $W = r_{\max} - r_{\text{PML}}$ радиальная координата r преобразовывается в комплексную величину \tilde{r} :

$$\tilde{r} = r + \int_{r_{\text{PML}}}^r \frac{i\sigma(r')}{\omega} dr', \quad (21)$$

где $\sigma(r)$ – функция координат, определяющая затухание в PML-слое, r_{PML} – координата начала PML, r_{\max} – координата границы расчетной области, которая выбиралась равной $1.4a$. В результате дифференциальный оператор \hat{L} внутри слоя преобразуется к виду

$$\begin{aligned} \hat{L} &= \frac{1}{k^2} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) \rightarrow \frac{1}{k^2} \frac{1}{\tilde{r}} \frac{\partial}{\partial \tilde{r}} \left(\tilde{r} \frac{\partial}{\partial \tilde{r}} \right) = \\ &= \frac{1}{S^2 k^2} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\bar{S}S - S\bar{S}}{S\bar{S}} \frac{\partial}{\partial r} \right), \end{aligned} \quad (22)$$

где введены две функции,

$$S(r) = 1 + \frac{i\sigma(r)}{\omega} \quad \text{и} \quad \bar{S}(r) = 1 + \frac{1}{r} \int_{r_{\text{PML}}}^r \frac{i\sigma(r')}{\omega} dr', \quad (23)$$

а $S(r)$ и $\bar{S}(r)$ означают их производные по координате r . Эти функции отличаются от единицы только внутри PML, а вне согласующего слоя дифференциальный оператор \hat{L} имеет свой исходный вид (5).

Функция затухания $\sigma(r)$ выбиралась в виде степенной зависимости вида

$$\sigma(r) = \sigma_0 \left(\frac{r - r_{\text{PML}}}{r_{\text{max}} - r_{\text{PML}}} \right)^3. \quad (24)$$

Значение коэффициента σ_0 и толщина PML обычно подбираются экспериментально путем минимизации амплитуды отраженных волн. В данной работе σ_0 была выбрана в десять раз превышающей круговую частоту ω_0 основной гармоники, а толщина слоя W равной 5 мм. Амплитуда отраженных волн при этом составляла менее -80 дБ от амплитуды падающей волны.

Д. Численные алгоритмы

Для моделирования уравнений (2) и (3) использовался численный алгоритм, основанный на методе расщепления по физическим факторам второго порядка точности по z [23] и комбинированном частотно-временном подходе для описания различных физических эффектов на каждом шаге сетки вдоль оси пучка от z к $z + \Delta z$ [6, 10]. Акустическое давление $p(\tau, r, z)$ в каждой пространственной точке по r на расстоянии z представлялось либо в виде временных профилей давления, либо в виде набора гармоник ряда Фурье. При этом использовался адаптивный алгоритм изменения числа гармоник, используемых в расчете на каждом текущем шаге по z . Число гармоник увеличивалось по мере искажения профиля волны и расширения ее спектра. Так, если амплитуда последней используемой гармоники начинала превышать 10^{-6} от амплитуды на источнике, то в расчет добавлялись еще \sqrt{n} гармоник. Максимальное число гармоник составляло 800.

Поскольку в трех рассматриваемых уравнениях (2), (3) и (11) операторы нелинейности и поглощения не отличаются друг от друга, то для их вычисления использовались одинаковые методы. Для расчета нелинейного оператора на малых расстояниях от излучателя решалась система уравнений для амплитуд гармоник методом Рун-

ге–Кутта четвертого порядка точности. При превышении амплитуды десятой гармоники 1% от амплитуды основной, применялась консервативная схема типа Годунова [10]. Поглощение рассчитывалось с использованием точного аналитического решения для каждой из гармоник.

Дифракционный оператор рассчитывался в частотном представлении независимо для каждой из гармоник. Ввиду особенностей дифракционных операторов каждой из моделей для их вычисления применялись разные численные методы. Для уравнения Вестервелта использовалось аналитическое решение для углового спектра, при этом амплитуды гармоник пространственного спектра вычислялись с использованием двумерного быстрого преобразования Фурье [10]. Шаги пространственной сетки в плоскости xu составляли $dx = du = 0.02$ мм, шаг дифракционного оператора по оси z , $dz = 0.1$ мм, был равен шагу расщепления по физическим факторам.

Для расчета дифракционного оператора стандартного параболического приближения на расстояниях до 5% от фокусного расстояния использовалась абсолютно неявная схема, а затем, на больших расстояниях – схема Кранка–Николсона [5]. Дифракционный оператор широкоугольного приближения (18) рассчитывался с использованием схемы, по структуре похожей на схему Кранка–Николсона:

$$\begin{aligned} p_{\omega, j}^{n+1} + \frac{v_n}{k^2 \Delta r^2} \left(p_{\omega, j+1}^{n+1} - 2p_{\omega, j}^{n+1} + p_{\omega, j-1}^{n+1} + \right. \\ \left. + \frac{p_{\omega, j+1}^{n+1} - p_{\omega, j-1}^{n+1}}{2(j-1)} \right) = p_{\omega, j}^n + \frac{\mu_n}{k^2 \Delta r^2} \times \\ \times \left(p_{\omega, j+1}^n - 2p_{\omega, j}^n + p_{\omega, j-1}^n + \frac{p_{\omega, j+1}^n - p_{\omega, j-1}^n}{2(j-1)} \right), \quad (25) \\ n = 1 \dots N, \quad j > 1, \\ p_{\omega, j}^{n+1} + \frac{4v_n}{k^2 \Delta r^2} (p_{\omega, j+1}^{n+1} - p_{\omega, j}^{n+1}) = p_{\omega, j}^n + \\ + \frac{4\mu_n}{k^2 \Delta r^2} (p_{\omega, j+1}^n - p_{\omega, j}^n), \quad n = 1 \dots N, \quad j = 1, \end{aligned}$$

где j – индекс узла пространственной сетки в радиальном направлении. Данная система линейных уравнений для значений давления в узлах сетки $p_{\omega, j}^n$ имеет трехдиагональную матрицу и решалась стандартным методом прогонки.

Внутри PML представленные конечно-разностные схемы модифицировались в соответствии с преобразованием оператора \hat{L} (22), в результате чего менялись коэффициенты трехдиаго-

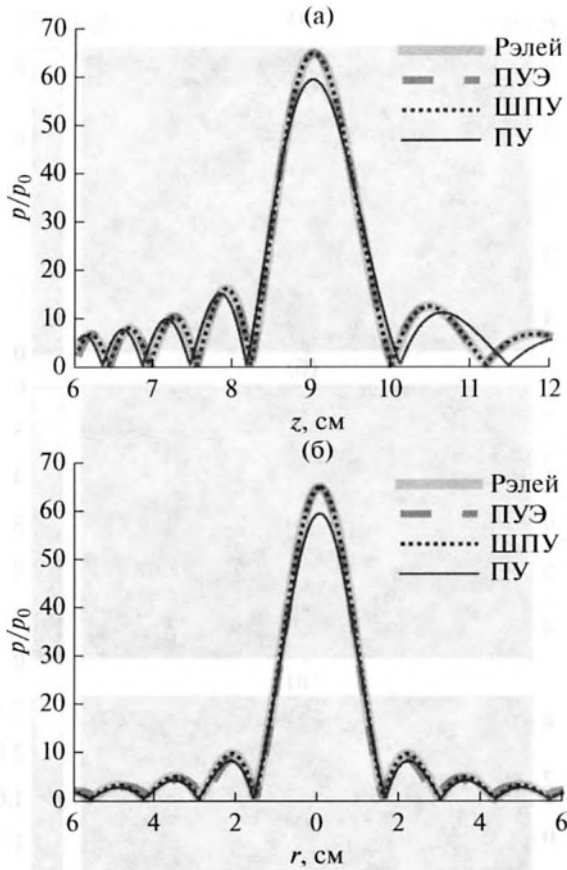


Рис. 2. Распределения амплитуды давления на оси рассматриваемого излучателя (а) и в фокальной плоскости (б), отнесенные к амплитуде давления на его поверхности. Обозначения: “Рэлей” – эталонное решение дифракционной задачи в виде интеграла Рэля; ПУЭ – решение параболического уравнения с модификацией граничных условий в виде эквивалентного источника; ШПУ – решение широкоугольного параболического уравнения; ПУ – решение параболического уравнения со стандартными граничными условиями.

нальной матрицы. Шаг по радиальной координате в численных расчетах по конечно-разностным схемам составлял 0.0025 мм, по координате z вдоль оси пучка 0.025 мм. Для указанного шага по координате z и волнового числа $k = 4230 \text{ м}^{-1}$, соответствующего основной частоте волны, $n = 1$, значения коэффициентов ν_n и μ_n составили: $\mu_1 = 0.0295 + 0.0113i$, $\mu_2 = 0.2488 + 0.0089i$, $\mu_3 = 0.5861 + 0.0049i$, $\mu_4 = 0.8828 + 0.0014i$, $\nu_1 = 0.0295 + 0.0113i$, $\nu_2 = 0.2488 + 0.0089i$, $\nu_3 = 0.5861 + 0.0049i$, $\nu_4 = 0.8828 + 0.0014i$.

Все алгоритмы были адаптированы для параллельных вычислений с помощью технологии OpenMP, что позволило сократить время расчетов в соответствии с числом ядер процессора, на котором производился расчет (обычно 4–8 ядер). Отметим, что в разностных алгоритмах расчета дифракци-

онного оператора параболических уравнений необходимо было использовать более частую пространственную сетку (5400 точек в продольном и 40000 точек в радиальном направлении), чем при решении уравнения Вестервельта, где использовалось аналитическое выражение для углового спектра (720 точек в продольном и 12800 точек в радиальном направлении). В зависимости от степени проявления нелинейных эффектов, в алгоритм включались от 10 до 800 гармоник, при этом расчет трехмерного уравнения Вестервельта занимал от нескольких часов до нескольких дней, а уравнений ХЗК и ШПУ – от десятков минут до нескольких часов.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

А. Сравнение результатов моделирования линейного пучка

На первом этапе моделирование уравнений (2), (3) и (11) проводилось при отключенных операторах нелинейности и поглощения. Таким образом тестировались различия решений рассматриваемых моделей, обусловленные различиями соответствующих дифракционных операторов. Решение (11) в виде интеграла Рэля (20) принималось за эталонное.

На рис. 2 представлены распределения амплитуды давления, полученные на оси пучка z и вдоль поперечной координаты r в фокальной плоскости с помощью интеграла Рэля, параболического уравнения со стандартным граничным условием (ПУ) и модифицированным граничным условием в виде эквивалентного источника (ПУЭ), а также широкоугольного параболического уравнения (ШПУ) с граничным условием, рассчитанным на начальной плоскости $z = 0$ с использованием фокальной плоскости в качестве промежуточной (рис. 1). Видно, что в области нескольких дифракционных максимумов вокруг фокуса решения параболической модели с модификацией граничного условия и широкоугольного приближения практически не отличаются от эталонного. Решение стандартного параболического уравнения при этом заметно отличается от эталонного как по величине амплитуды давления в фокусе, так и по структуре ближайших к фокусу дифракционных пиков, что иллюстрирует ограниченность его применимости для описания полей сильно фокусирующих излучателей.

Более подробно отличия между решениями различных моделей показаны на рис. 3, где в плоскости оси пучка zr представлены двумерные распределения модуля разности амплитуд давления в эталонном решении и в решениях, рассчи-

танных указанными выше методами. Распределения нормированы на значение амплитуды давления в фокусе в эталонном решении. Видно, что ошибка в определении амплитуды давления при расчетах с использованием стандартной параболической модели достигает в отдельных точках около 8%, причем не только в фокусе, но и в некоторых других точках на оси пучка. Эти различия в основном связаны с неточностью положения максимумов и минимумов поля относительно эталонного решения. Модификация граничных условий позволяет добиться совпадения решений внутри фокального максимума и хорошего соответствия эталонному решению в нескольких дифракционных максимумах вокруг фокуса [6, 12]. Тем не менее, наблюдаются области вдоль оси пучка ближе к излучателю и на краях пучка, где ошибка может достигать 6%. Эти отличия также связаны, в основном, с отличием в положениях максимумов и минимумов дифракционного поля. Наиболее точное соответствие эталонному решению наблюдается для широкоугольного приближения: ошибка составляет в фокусе меньше 0.07%, в области вокруг фокуса — не более 0.5%, максимальная ошибка не превышает 2.5% и наблюдается на оси пучка в ближней зоне излучателя. Из рисунка видно, что величина амплитуды давления, а также положения максимумов и минимумов поля в решениях ШПУ и интеграла Рэлея хорошо соответствуют друг другу уже на расстояниях $z > 0.5F$.

Б. Сравнение результатов моделирования нелинейных пучков

На следующем этапе была проведена оценка точности решений уравнения ХЗК с модифицированным граничным условием и нелинейного широкоугольного параболического уравнения при моделировании нелинейных пучков с учетом слабого термовязкого поглощения. Полученные решения сравнивались с эталонным численным решением уравнения Вестервельта. Решение ХЗК со стандартным граничным условием не рассматривалось, поскольку уже при моделировании линейного пучка точность расчетов не представлялась удовлетворительной.

На рис. 4 представлены распределения положительного и отрицательного пиковых давлений в профиле волны вдоль оси излучателя и в его фокальной плоскости, а также профили волны в фокусе излучателя, полученные указанными выше тремя разными методами для трех разных амплитуд давления на излучателе. Видно, что величины пиковых отрицательных давлений, рассчитанных с использованием всех трех моделей, практиче-

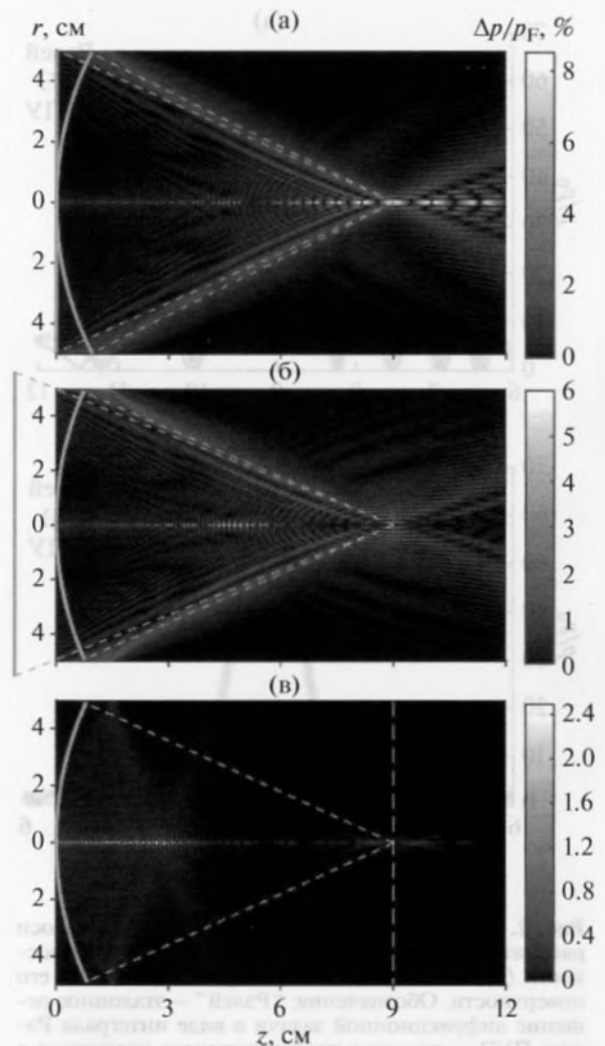


Рис. 3. Двумерные распределения разности амплитуд давлений в плоскости оси пучка между эталонным и приближенными решениями, отнесенные к амплитуде давления в фокусе в эталонном решении. (а) Параболическое уравнение со стандартным граничным условием, (б) параболическое уравнение с модифицированным граничным условием, (в) широкоугольное параболическое уравнение.

ски не различаются. Для пикового положительного давления, при квазилинейном режиме фокусировки, $p_0 = 0.025$ МПа (рис. 4а), когда нелинейные искажения профиля и различия в величинах пиковых давлений малы, все три метода также дают практически неразличимые результаты. При увеличении начальной амплитуды давления, начиная с $p_0 = 0.15$ МПа, появляется некоторое отличие в решении параболического уравнения с модификацией граничных условий, которое достигает максимума (18%) при начальной амплитуде $p_0 = 0.25$ МПа (рис. 4б), когда в фокусе начинает образовываться ударный фронт.

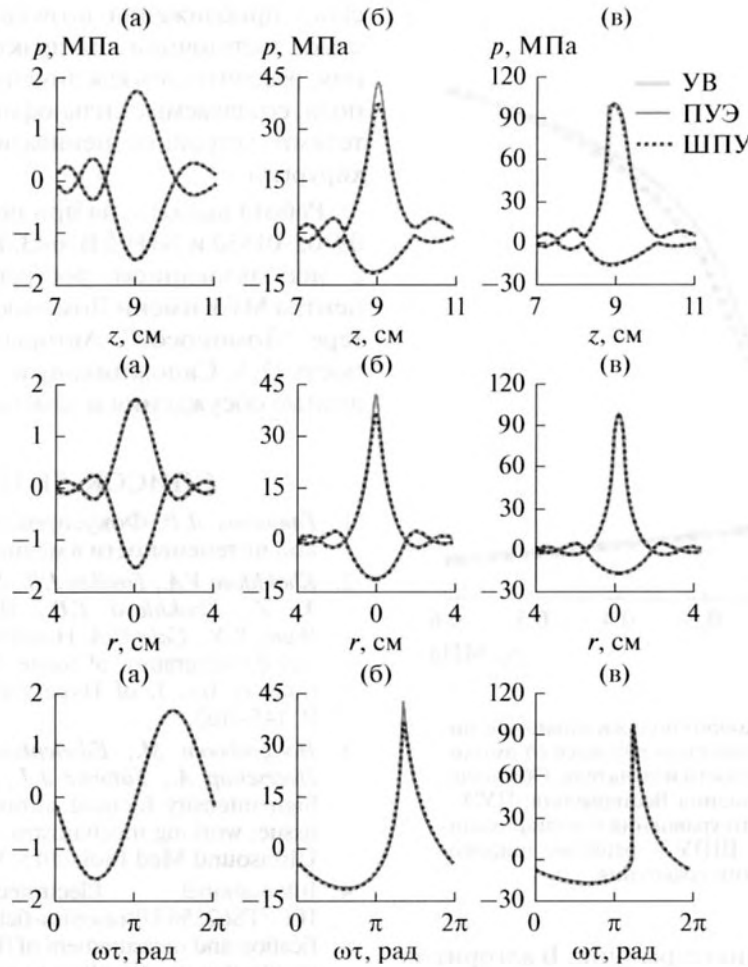


Рис. 4. Распределения пикового положительного и пикового отрицательного давлений на оси излучателя (верхний ряд), в его фокальной плоскости (средний ряд) и профили волны в фокусе (нижний ряд) для различных значений амплитуды давления на излучателе: (а) 0.025 МПа, (б) 0.25 МПа, (в) 0.45 МПа. Обозначения: УВ – решение уравнения Вестервельта; ПУЭ – решение параболического уравнения с модификацией граничных условий; ШПУ – решение широкоугольного параболического уравнения.

При амплитуде $p_0 = 0.45$ МПа (рис. 4в) в фокальном профиле волны формируется развитый разрыв, когда отношение амплитуды разрыва на фронте к начальному давлению на излучателе максимально [9]. На этом этапе получаемые решения для пикового положительного давления также практически неотличимы друг от друга.

Превышение пикового положительного давления в решении уравнения ХЗК с модифицированными граничными условиями по сравнению с эталонным решением уравнения Вестервельта и нелинейного ШПУ также иллюстрирует рис. 5, где показаны зависимости пиковых давлений в геометрическом фокусе ($z = F$) от амплитуды давления на излучателе. Видно, что кривая роста пикового положительного давления в решении уравнения ХЗК идет выше других. Это отличие можно объяснить особенностями используемых в

работе численных алгоритмов. Так, конфигурации линейного поля пучков в различных моделях устроены таким образом, что вблизи фокального максимума они достаточно близки, тогда как вне его есть некоторые отличия (рис. 3). В параболическом приближении с модифицированными граничными условиями фокусное расстояние несколько больше, чем у исходного излучателя, т.е. нелинейные эффекты накапливаются на большем расстоянии. Кроме того, при решении нелинейного широкоугольного уравнения и уравнения Вестервельта на малых расстояниях, $0 \leq z \leq D$, где $D = F - \sqrt{F^2 - R^2}$ – глубина сферической чаши, нелинейные эффекты включались только внутри области, ограниченной сферической поверхностью излучателя. Таким способом учитывался тот факт, что поле за излучателем отсутствует и не

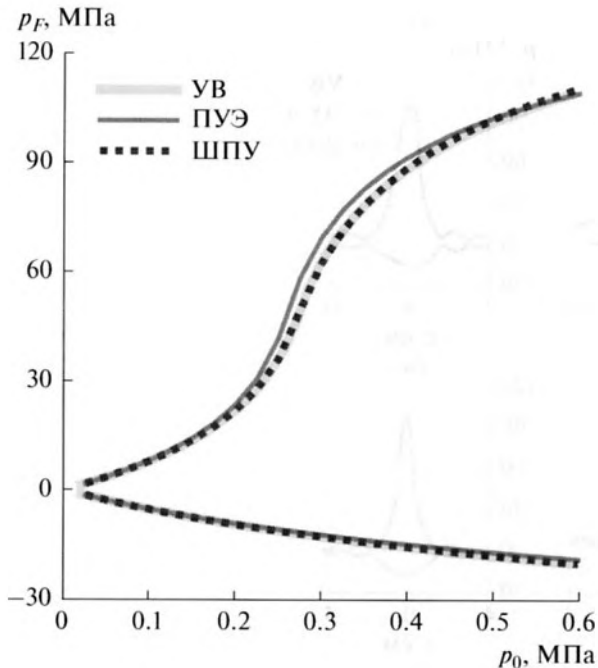


Рис. 5. Зависимости пикового положительного и пикового отрицательного давления в фокусе от амплитуды давления на поверхности излучателя. Обозначения: УВ – решение уравнения Вестервелта; ПУЭ – решение параболического уравнения с модификацией граничных условий; ШПУ – решение широкоугольного параболического уравнения.

вносит вклад в генерацию гармоник. В алгоритме моделирования уравнения ХЗК нелинейные эффекты были включены во всей области значений z . Таким образом, имелись небольшие отличия при расчете предфокальной области пучка в решении ХЗК, усиливающие проявление нелинейных эффектов. Быстрый рост зависимости пикового положительного давления от амплитуды на источнике в случае, когда ударный фронт в фокусе только начинает формироваться, может являться причиной того, что резкое увеличение пикового положительного давления в фокусе в модели ХЗК наступает при несколько меньших уровнях давления на излучателе.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе представлен новый численный алгоритм, позволяющий рассчитывать нелинейные ультразвуковые поля аксиально-симметричных фокусирующих излучателей, используя широкоугольное параболическое приближение для учета дифракционных эффектов. На примере одиночного излучателя в виде сферического сегмента с половинным углом схождения 33.7° показано, что использование широкоугольного параболического

приближения позволяет с высокой точностью, достаточной для практического использования, рассчитывать как линейные, так и нелинейные поля, создаваемые сильнофокусирующими излучателями устройств неинвазивной ультразвуковой хирургии.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ 09-02-01530 и НИИ ЕВ7643. Расчеты выполнялись с использованием ресурсов Вычислительного центра МГУ имени Ломоносова на суперкомпьютере “Ломоносов”. Авторы выражают благодарность О.А. Сапожникову и Л.Р. Гаврилову за полезные обсуждения и замечания по работе.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гаврилов Л.Р. Фокусированный ультразвук высокой интенсивности в медицине. М.: “Фазис”, 2013.
2. Khokhlova V.A., Fowlkes J.B., Roberts W.W., Schade G.R., Xu Z., Khokhlova T.D., Hall T.L., Maxwell A.D., Wang Y.N., Cain C.A. Histotripsy methods in mechanical disintegration of tissue: Towards clinical applications // *Int. J. of Hyperthermia*. 2015. V. 31. № 2. P. 145–162.
3. Hoogenboom M., Eikelenboom D., den Brok M.H., Heerschap A., Fütterer J.J., Adema G.J. Mechanical high-intensity focused ultrasound destruction of soft tissue: working mechanisms and physiologic effects // *Ultrasound Med Biol*. 2015. V. 41. № 6. P. 1500–1517.
4. International Electrotechnical Commission IEC/TS62556 Ultrasonics-field characterization – specification and measurement of field parameters for high intensity therapeutic ultrasound (HITU) transducers and systems // Switzerland, Geneva, 2014. Ed. 1.0.
5. Canney M.S., Bailey M.R., Crum L.A., Khokhlova V.A., Sapozhnikov O.A. Acoustic characterization of high intensity focused ultrasound fields: a combined measurement and modeling approach // *J. Acoust. Soc. Am*. 2008. V. 124. № 4. P. 2406–2420.
6. Kreider W., Yuldashev P.V., Sapozhnikov O.A., Farr N., Partanen A., Bailey M.R., Khokhlova V.A. Characterization of a multi-element clinical HIFU system using acoustic holography and nonlinear modeling // *IEEE Trans. Ultrason. Ferroelect. Freq. Contr.* 2013. V. 60. № 8. P. 1683–1698.
7. Bessonova O.V., Wilkens V. Membrane hydrophone measurement and numerical simulation of HIFU fields up to developed shock regimes // *IEEE Trans. Ultrason. Ferroelect. Freq. Contr.* 2013. V. 60. № 2. P. 290–300.
8. Hoogenboom M., van Amerongen M.J., Eikelenboom D.C., Wassink M., den Brok M.H., Hulsbergen-van de Kaa C., Dumont E., Adema G.D., Heerschap A., Fütterer J.J. Development of a high-field MR-guided HIFU setup for thermal and mechanical ablation methods in small animals // *Journal of Therapeutic Ultrasound*. 2015. P. 3–14.
9. Rosnitskiy P.B., Yuldashev P.V., Sapozhnikov O.A., Maxwell A., Kreider W., Bailey M.R., Khokhlova V.A. Design of HIFU transducers for generating specified nonlinear ultrasound fields // *IEEE Trans. Ultrason. Ferroelect. Freq. Contr.* 2017. V. 64. № 2. P. 374–390.

10. Юлдашев П.В., Хохлова В.А. Моделирование трехмерных нелинейных полей ультразвуковых терапевтических решеток // Акуст. журн. 2011. Т. 57. № 3. С. 337–347.
11. Tjøtta J., Tjøtta S., Vefring E. Effects of focusing on the nonlinear interaction between two collinear finite amplitude sound beams // J. Acoust. Soc. Am. 1991. V. 89. № 3. P. 1017–1027.
12. Росницкий П.Б., Юлдашев П.В., Высоканов Б.А., Хохлова В.А. Граничное условие для расчета полей сильно фокусирующих излучателей на основе уравнения Хохлова–Заболотской // Акуст. журн. 2016. Т. 62. № 2. С. 153–162.
13. Collins M.D. A split-step Padé solution for the parabolic equation method // J. Acoust. Soc. Am. 1993. V. 93. № 6. Pt. 1. P. 1736–1741.
14. Yevick D., Thomson D.J. Complex Padé approximants for wide-angle acoustic propagators // J. Acoust. Soc. Am. 2000. V. 108. № 6. P. 2784–2789.
15. Авилов К.В. Псевдодифференциальные параболические уравнения распространения звука в океане, плавно неоднородном по горизонтали, и их численное решение // Акуст. журн. 1995. Т. 41. № 1. С. 5–12.
16. Авилов К.В., Куличков С.Н., Попов О.Е. К вычислению звуковых полей в моделях морской среды, включающих атмосферу, водную толщу и дно // Труды II Всероссийской акустической конференции (6–9 июня 2017, Нижний Новгород). Секция “Акустика океана”. С. 1155–1162 (на CD).
17. Soneson J.E. Extending the utility of the parabolic approximation in medical ultrasound using wide-angle diffraction modeling // IEEE Trans. Ultrason. Ferroelect. Freq. Contr. 2017. V. 64. № 4. P. 679–687.
18. Kamakura T., Nomura H., Clement G.T. Application of the split-step Padé approach to nonlinear field predictions // Ultrasonics. 2013. V. 53. P. 432–438.
19. Bini D.A. Numerical computation of polynomial zeros by means of Aberth’s method // Numerical Algorithms. 1996. V. 13. № 2. P. 179–200.
20. Bader K.B., Holland C.K. Predicting the growth of nanoscale nuclei by histotripsy pulses // Phys. Med. Biol. 2016. V. 61. № 7. P. 2947–2966.
21. O’Neil H.T. Theory of focusing radiators // J. Acoust. Soc. Am. 1949. V. 21. № 5. P. 516–526.
22. Berenger J.P. A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves // J. Comput. Phys. 1994. V. 114. P. 185–200.
23. Zemp R.J., Tavakkoli J., Cobbold R.S. Modeling of nonlinear ultrasound propagation in tissue from array transducers // J. Acoust. Soc. Am. 2003. V. 113. № 1. P. 139–152.