バイオスーパーコンピューティング研究会2014年講演会
平成26年10月15日
理化学研究所 鈴木梅太郎ホール，和光市

流体・構造連成手法の開発と「京」による血栓シミュレーション

杉山 和靖
(大阪大学 大学院基礎工学研究科)

・文部科学省「次世代計算科学研究開発プログラム」
・科研費　若手B No. 21760120
・理化学研究所 情報基盤センター RICC 簡易利用
・「京」戦略分野1 課題番号 hp120306
・「京」一般利用 課題番号 hp120238

共同研究者

伊井 仁志,竹内 伸太郎 (阪大)
島本 憲夫, 高木 周, 松本 洋一郎 (東大)
塩崎 聖治, 後藤 信哉 (東海大･医)
Xiaobo Gong (上海交通大)
Huaxiong Huang (York University)
Jinbiao Wu (北京大)
川島 康弘 (富士通システムズ･イースト)
野田 茂穂, 姫野 龍太郎(理研)

謝辞

田村 典子,七澤 洋平 (東海大･医)
沖田 浩平 (日本大)
山村 直人, 石川 顕一(東大)
小山田耕二, 坂本尚久, 大和田 拓 (京大)
小野 謙二, 大野洋介, 舛本 現, 小山 洋 (理研)

医療画像と相性の良い流体構造連成解析を実現したい

生体：機械部品とは異なり，元々，設計図が存在せず

医療画像 (CT/MRI)

Voxel data (VOF; Volume Of Fluid)

→ 多媒質幾何・材質

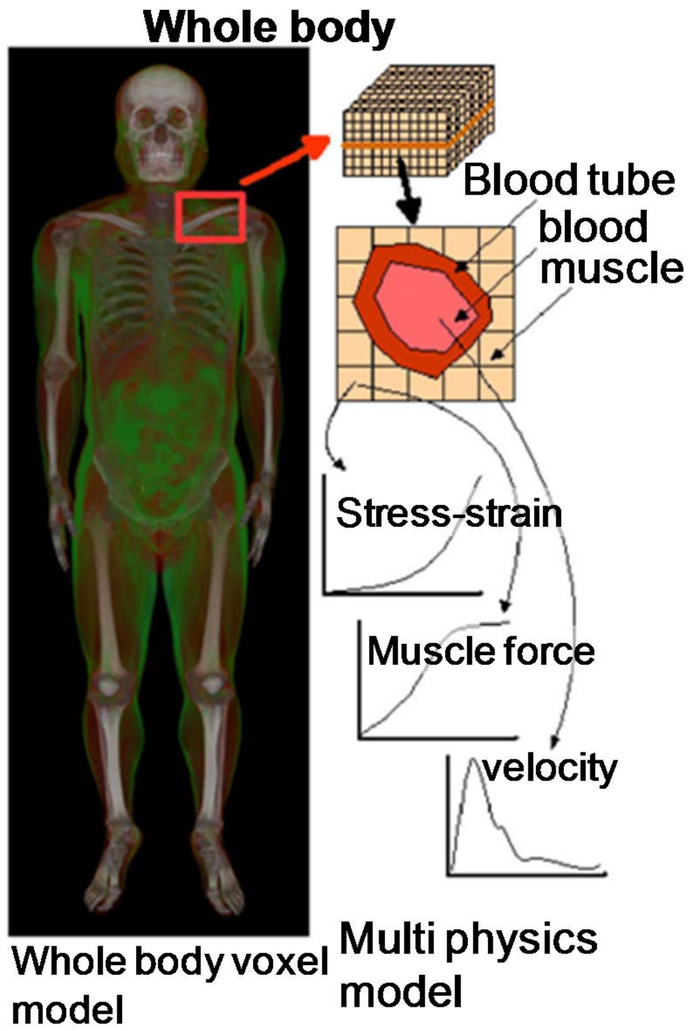
方法論を確立したい

(有限差分・固定格子)

Euler法に基づくシミュレーション

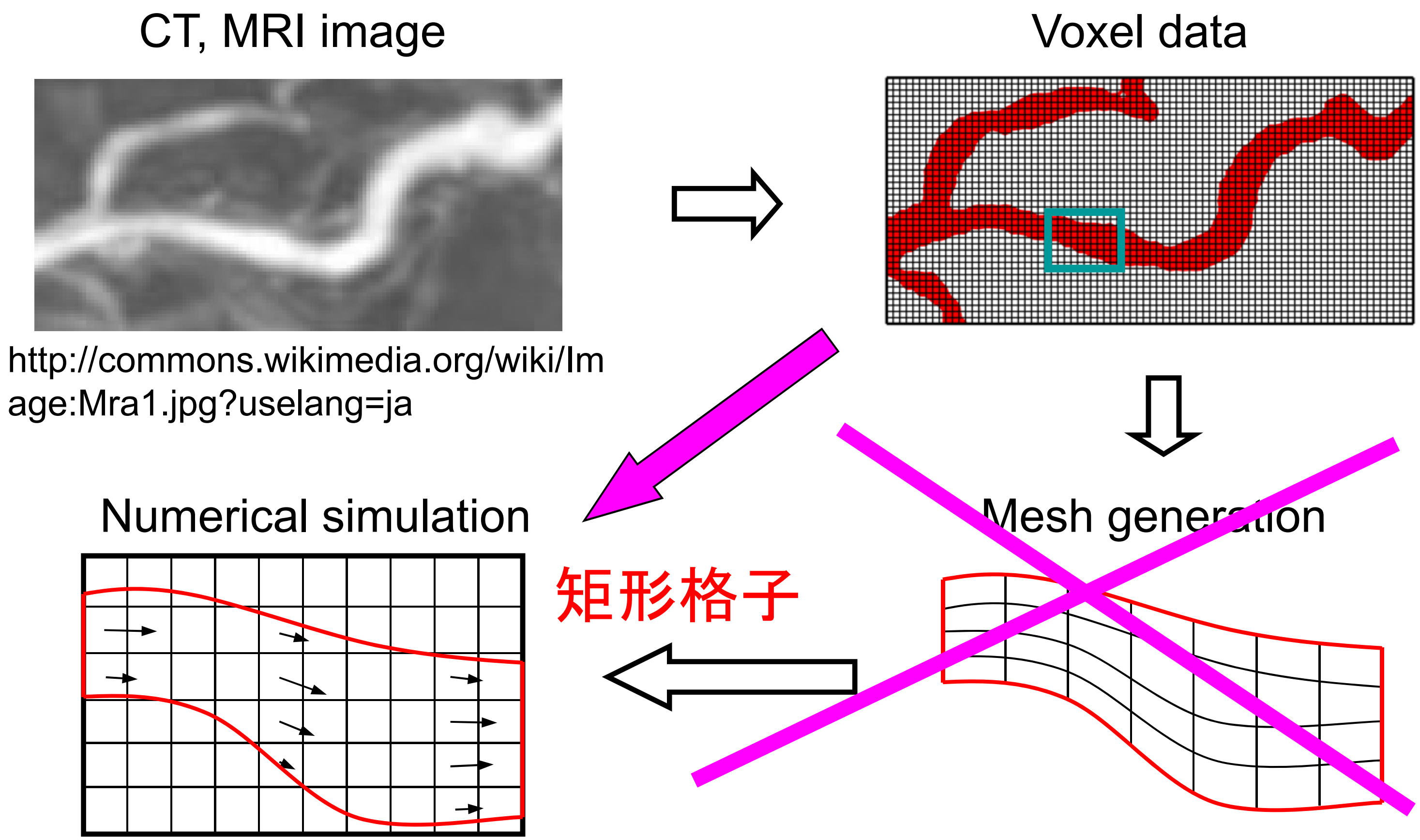
・voxelデータとの高い親和性

・既存の流体解析法にならう



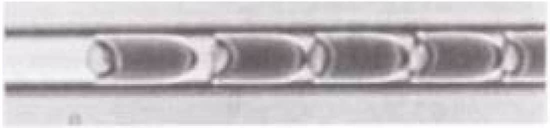
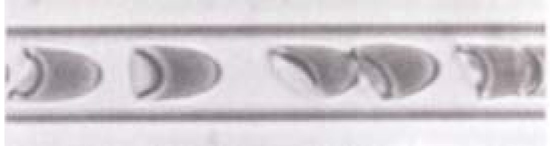
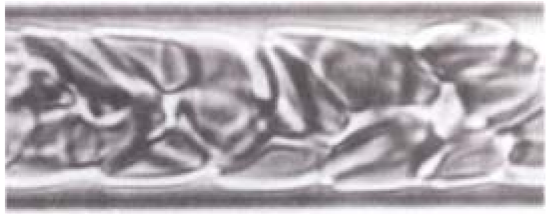
具体的にどういうことか？ シミュレーションまでの手順

本Euler法



メッシュの生成・再構築をせずに，
voxel dataを直接利用

血流解析の実現性 (寸法と自由度)

・多粒子系流れ
・幾何学的非線形

*Gaehtgens *et al*. (1980) *Blood Cells*, **6**, 799.

予測したい現象

血球の動態，血液のレオロジー

寸法

・細動脈: 径 ～100μm
・赤血球: 径8μm, 厚さ2μm
・血小板: 径2μm
・空間解像度: O(0.1μm)

x $O(10^3)$

→ 3Dで$O(10^9)$-$O(10^{10})$ 自由度

課題

流体・構造/膜連成法の設計 (高自由度 & 柔軟な分散体)

アプローチ (Lagrange法 vs. Euler法)

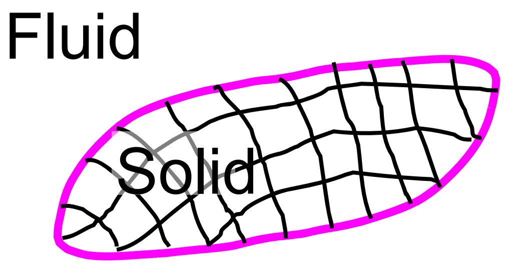
Lagrange法

(物質点にのって方程式を記述)

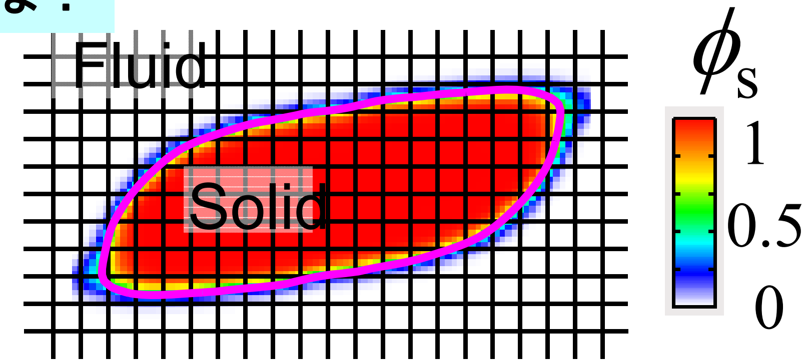
Euler法

(空間的に固定した点で方程式を記述)

二相の区別は？



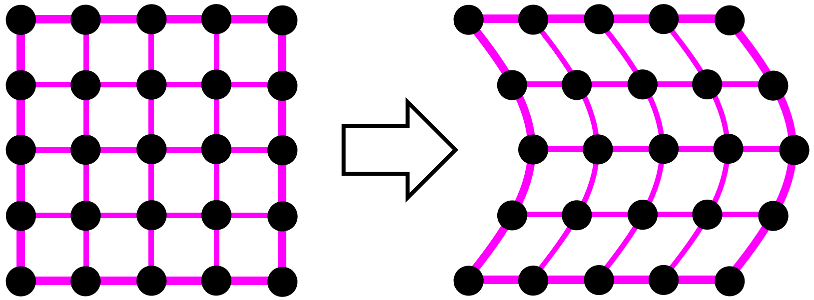
境界適合メッシュ



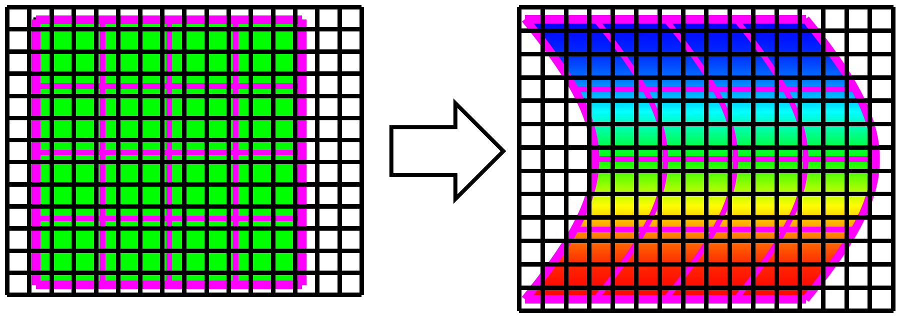
固体体積率

c.f. 混相流のVOF法

固体の変形の記述は？



物質点の相対位置の変化



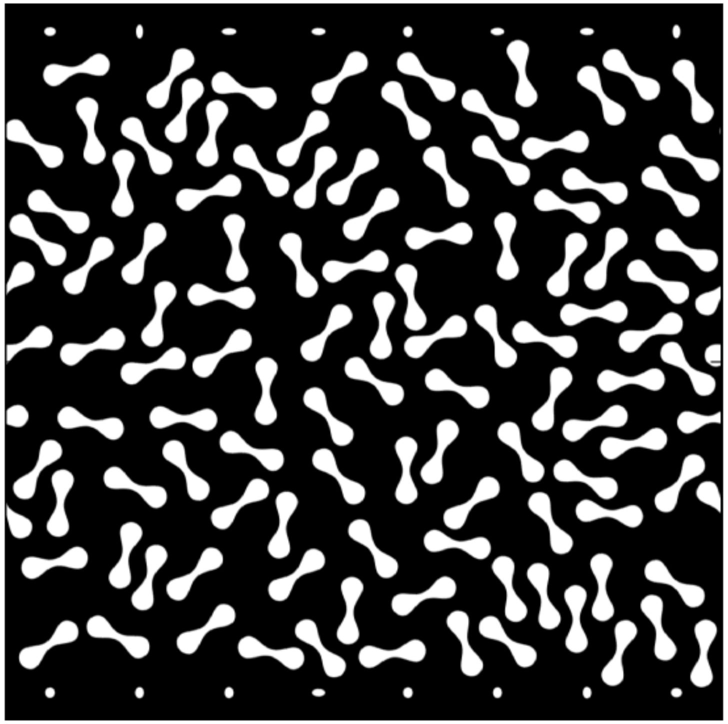
左Cauchy-Green変形テンソル

- Sugiyama, Ii *et al*. (2011) *J. Comput . Phys.*, **230**, 596.
- Ii, Sugiyama *et al*. (2011) *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, **65**, 150.

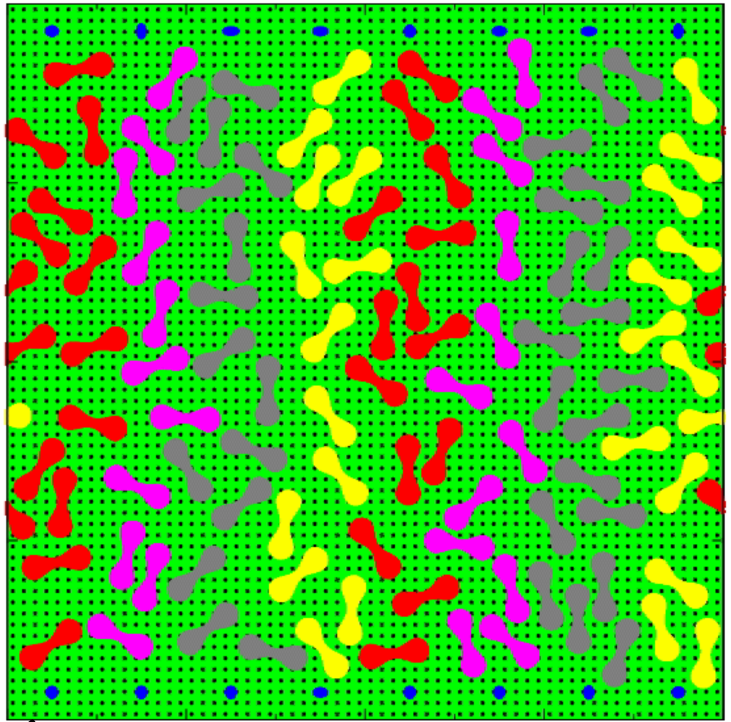
新たな計算方法　（生体の問題に限らず）

複雑な境界形状を持つ/多数の分散体を含む
流体・構造連成問題の数値シミュレーションを容易に

初期voxelデータ



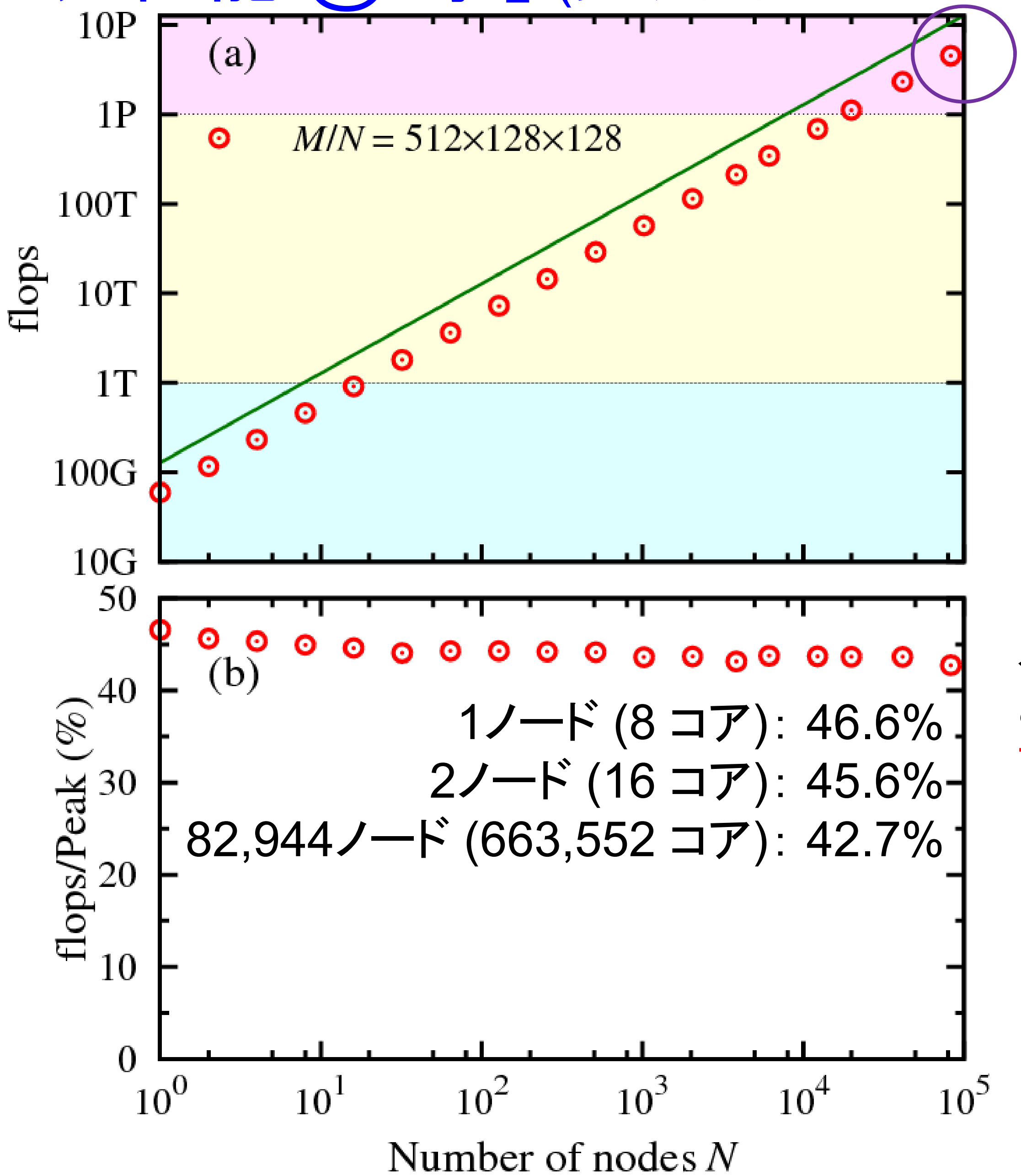
連成シミュレーション



固定メッシュ上で，全ての物理量を更新
境界適合メッシュの生成・再構成が不要

- Sugiyama, Ii *et al*. (2010) *Comput . Mech.*, **46**, 147.
- Nagano, Sugiyama *et al*. (2010) *J. Fluid Sci. Tech.*, **5**, 475.
- Takagi, Sugiyama *et al*. (2012) *J. Appl. Mech.*, **79**, 010911.

並列性能 @「京」(実効性能と並列台数. weak scaling)



スカラー機上の連続体計算として,
高い実効性能 & 線形拡張性

- Sugiyama, Kawashima *et al.* (2013) *Symp. High Performance Comput. Comput. Sci*, IPSJ-HPCS2013005.

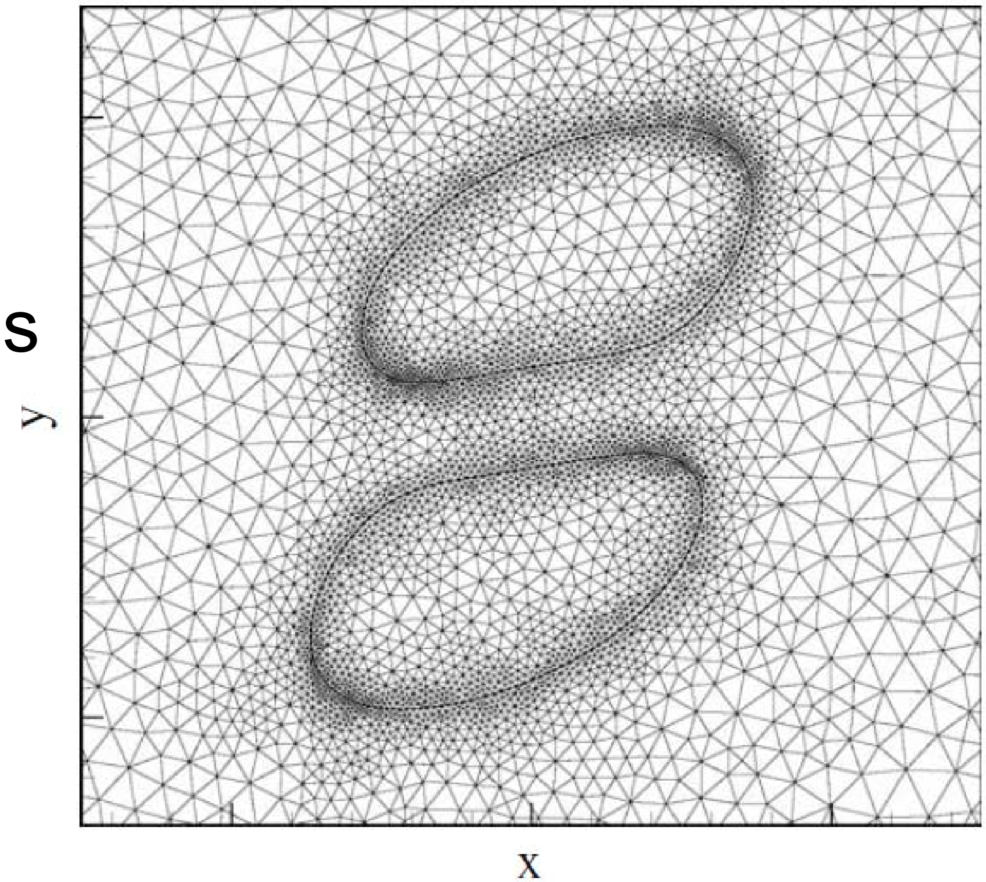
検証

Comparison with available numerical data

Gao & Hu (2009)
J. Comput. Phys. **228,** 2132.

particle-particle interactions in a shear flow

Arbitrary Lagrangian -Eulerian (ALE) method

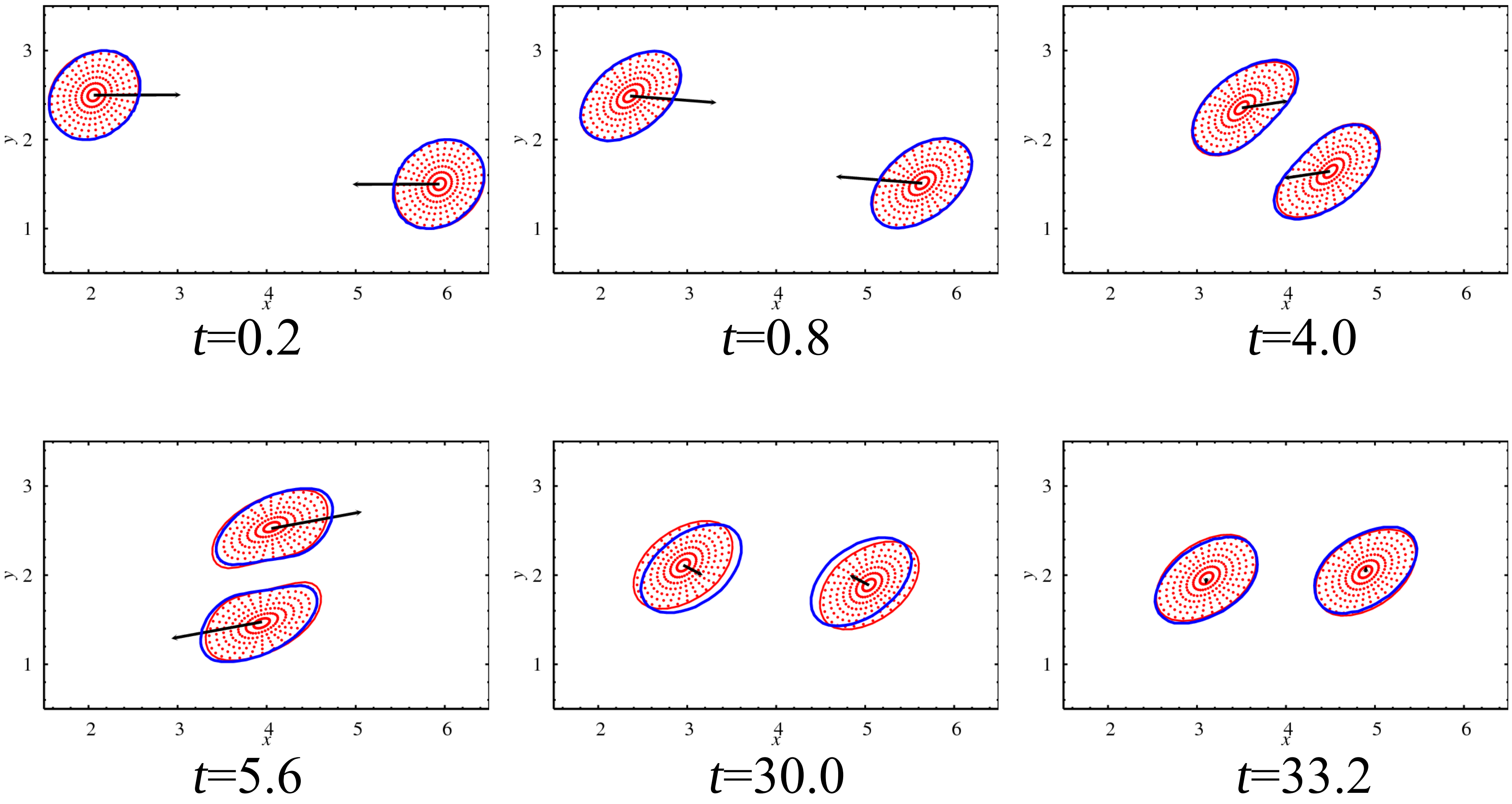


Comparison with Gao & Hu's results

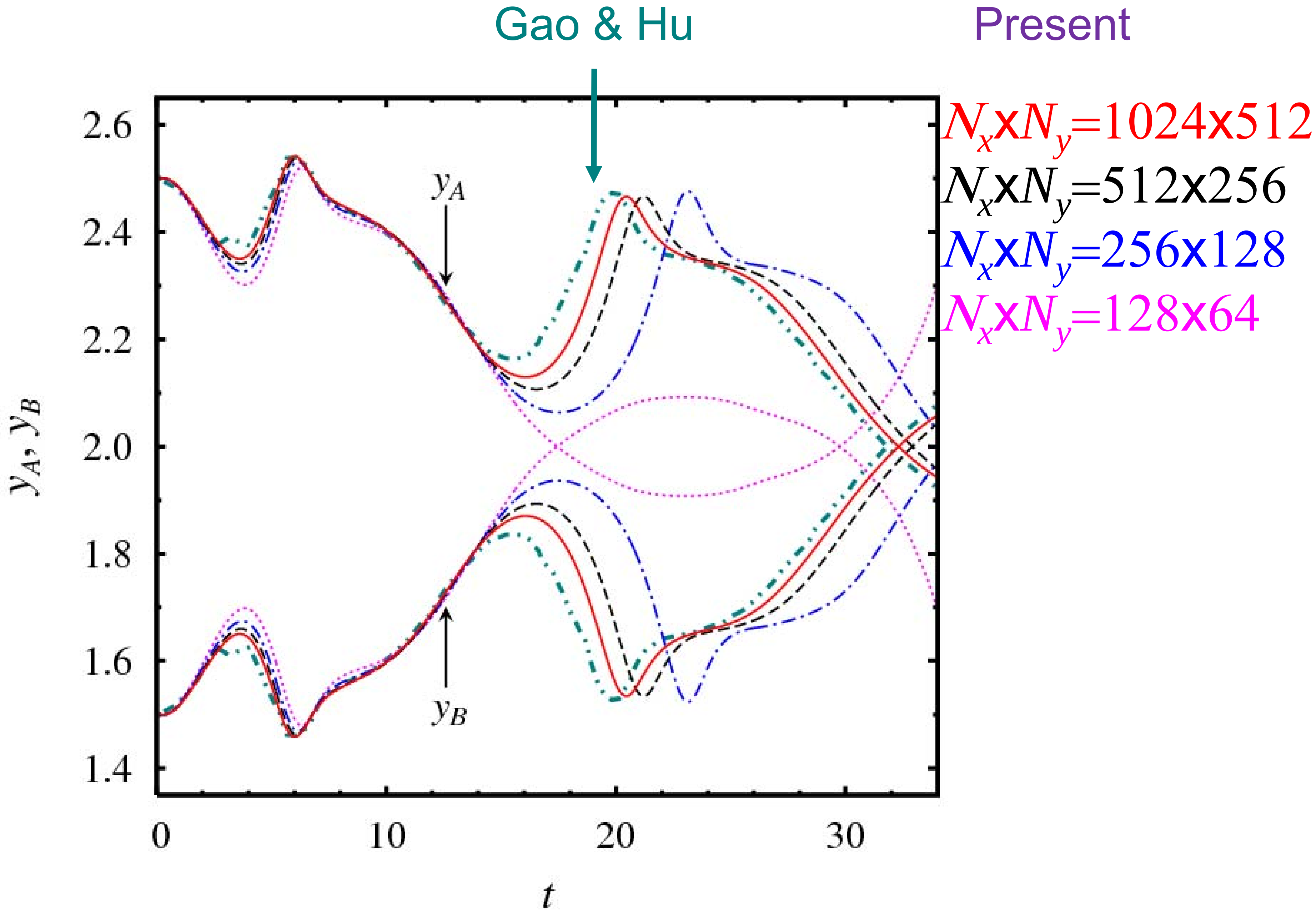
N_xxN_y=1024x512

– Gao & Hu (ALE)

– Present (full Eulerian)



Particle's y-position in time v.s. Number of grid point



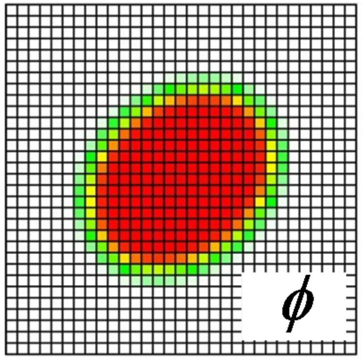
流体・膜連成

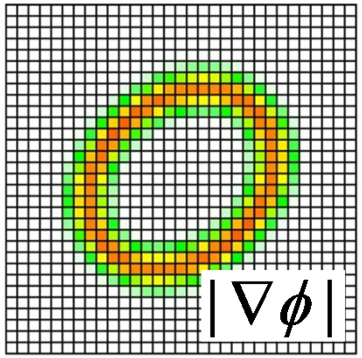
$$\nabla\cdot\mathbf{v}=0,\quad \rho_m\left(\partial_t\mathbf{v}+(\mathbf{v}\cdot\nabla)\mathbf{v}\right)=-\nabla p+\nabla\cdot(2\mu\mathbf{D})+\underline{|\nabla\phi|(\mathbf{P}\cdot\nabla)\cdot(\boldsymbol{\tau}_s+\mathbf{q}_s\mathbf{n})},$$

面応力

ひずみエネルギ関数

$$\boldsymbol{\tau}_s=\frac{2}{\sqrt{\mathrm{II}_s+1}}\left(\frac{\partial W_s}{\partial \mathrm{I}_s}\mathbf{B}_s+(\mathrm{II}_s+1)\frac{\partial W_s}{\partial \mathrm{II}_s}\mathbf{P}\right),$$





$$\mathrm{I}_s=\mathrm{tr}(\mathbf{B}_s)-2,\ \mathrm{II}_s=\tfrac{1}{2}\{(\mathrm{tr}(\mathbf{B}_s)^2-\mathrm{tr}(\mathbf{B}_s\cdot\mathbf{B}_s)\}-1.$$

左Cauchy-Green表面変形テンソル

$$\mathbf{B}_s=\mathbf{P}\cdot\mathbf{G}_s\cdot\mathbf{P},\ \mathbf{G}_s=\mathbf{F}\cdot\mathbf{P}_R\cdot\mathbf{F}^T,$$

surface projection

$$\mathbf{P}=\mathbf{I}-\mathbf{nn},$$

曲げ応力

$$\mathbf{q}_s=E_b\{(\mathbf{P}\cdot\nabla)\cdot(\boldsymbol{\kappa}-\kappa_R\mathbf{P})\}\cdot\mathbf{P},$$

$$\boldsymbol{\kappa}=-\nabla\mathbf{n},\ \kappa_R=-\tfrac{1}{2}\nabla\cdot\mathbf{n}_R.$$

- Gong, Sugiyama *et al.* (2009) *J. Biomech. Eng.*, **131**, 074504.
- Ii, Gong *et al.* (2012) *Comm. Comput. Phys.*, **12**, 544.

膜の運動学に対する構成式

VOF

$$\partial_t \phi + (\mathbf{v}\cdot\nabla)\phi = 0,$$

面ひずみ

$$\partial_t \mathbf{G}_s + (\mathbf{v}\cdot\nabla)\mathbf{G}_s = \mathbf{L}\cdot\mathbf{G}_s + \mathbf{G}_s\cdot\mathbf{L}^T, \quad \mathbf{L} = \nabla\mathbf{v}^T$$

参照配置曲率

$$\partial_t \tilde{\kappa}_R + (\mathbf{v}\cdot\nabla)\tilde{\kappa}_R = 0,$$

$$\Downarrow$$

$$\mathbf{B}_s = \mathbf{P}\cdot\mathbf{G}_s\cdot\mathbf{P},\ \mathbf{n} = \frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|},\ \boldsymbol{\kappa} = -\nabla\left(\frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|}\right).$$

・Ii, Gong *et al*. (2012) *Comm. Comput. Phys.*, **12**, 544.
・Ii, Sugiyama *et al*. (2012) *J. Comput. Phys.*, **231**, 2328.

単純せん断流中の膜カプセルの変形

Spherical membrane
(neo-Hookean model)

density: $\rho = 1$

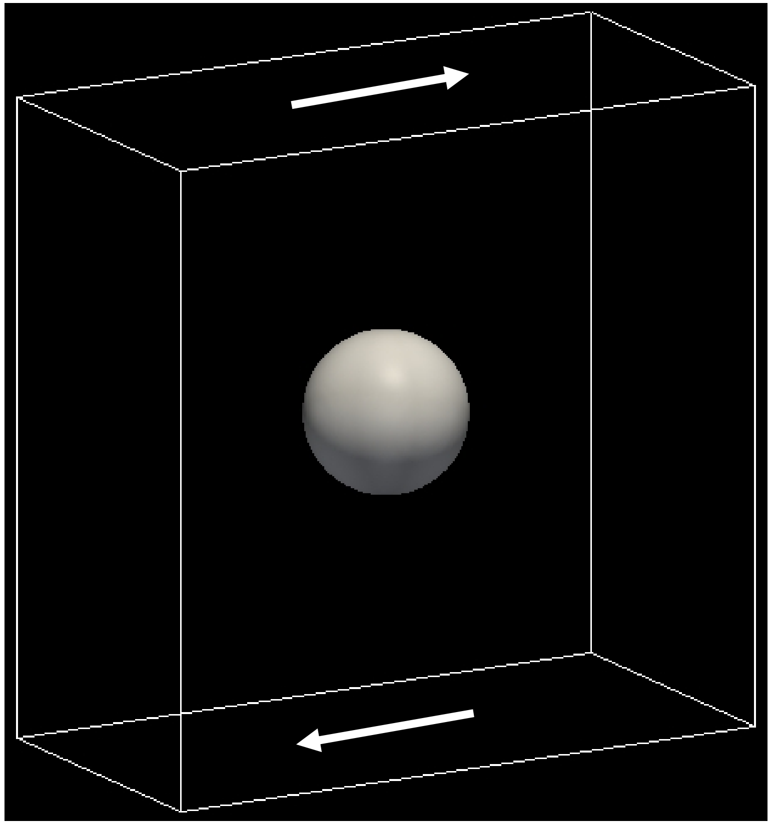
radius: $a = 1$

shear rate: $\dot{\gamma} = 1$

$$[-4a, 4a] \times [-2a, 2a] \times [-4a, 4a]$$

$$\text{Reynolds number: } \mathrm{Re} = \frac{\rho a^2 \dot{\gamma}}{\mu} = 0.001$$

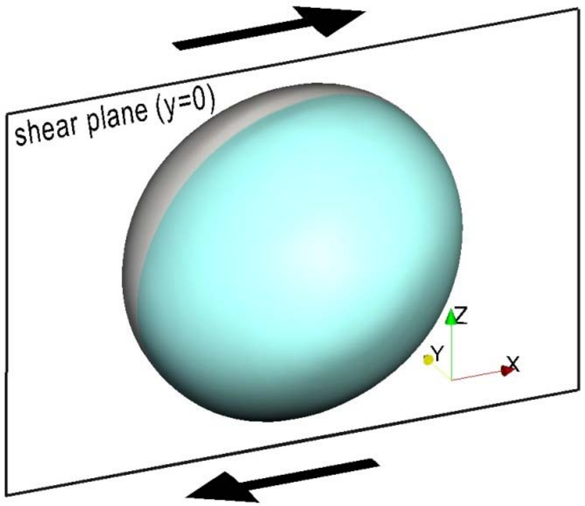
$$\text{Capillary number: } \mathrm{Ca} = \frac{\mu a \dot{\gamma}}{E_s}$$



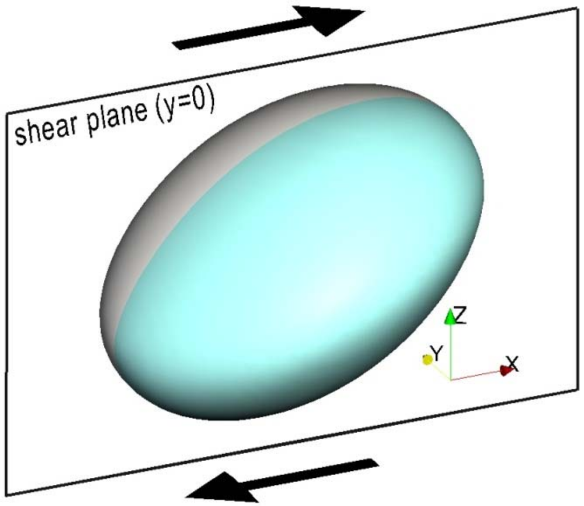
カプセル形状 vs. Capillary number

$$\mathrm{Ca} = \frac{\mu a \dot{\gamma}}{E_s}$$

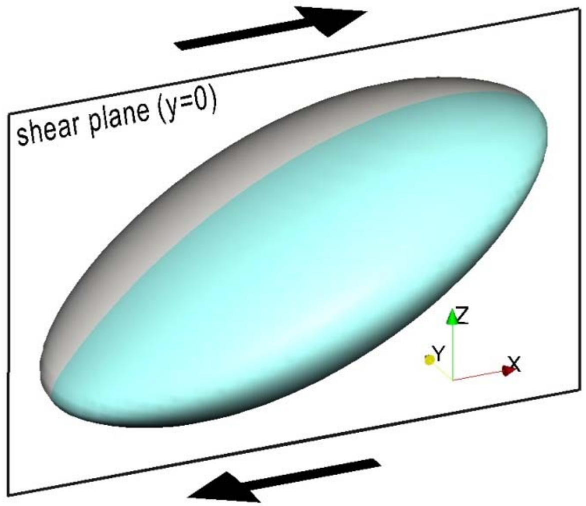
$$\Delta x = a / 16$$



Ca=0.0125



Ca=0.05

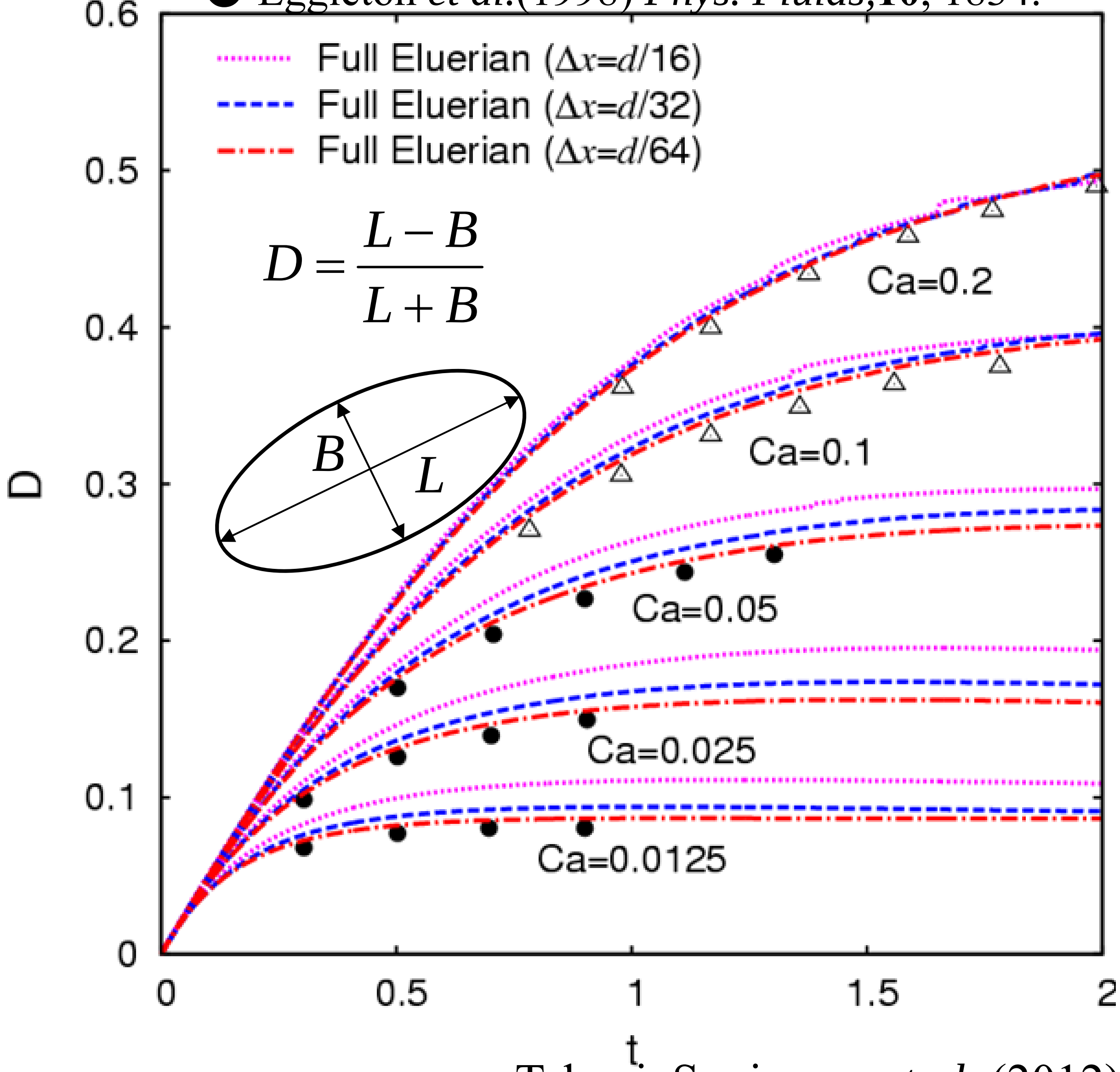


Ca=0.2

変形パラメータDの時間変化

△ Pozrikidis (1995) *J. Fluid Mech.*,**297**, 123.

● Eggleton *et al.*(1998) *Phys. Fluids*,**10**, 1834.



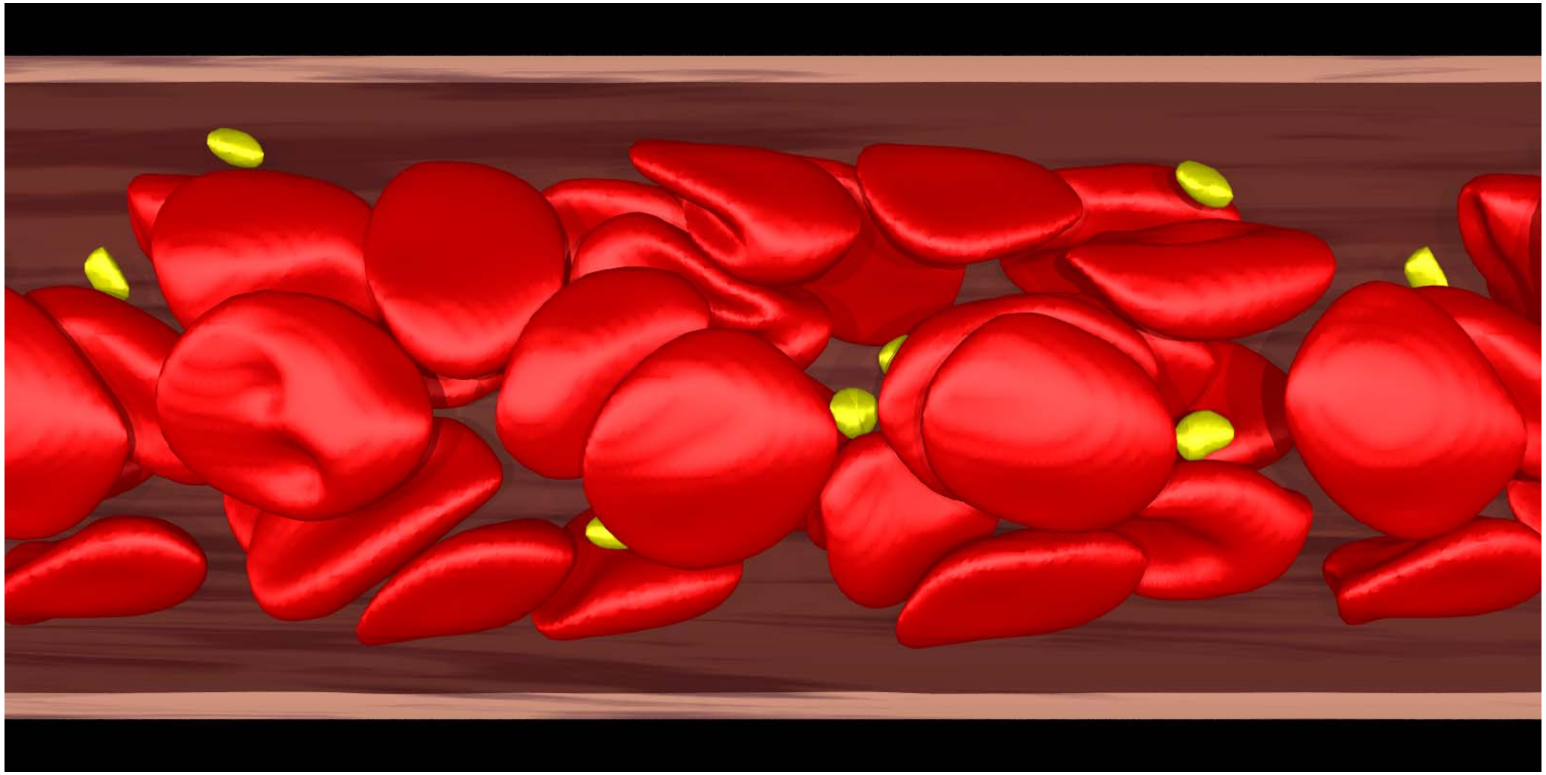
十分に検証された
計算結果を良く再現

・Takagi, Sugiyama *et al*. (2012) *J. Appl. Mech.*, **79**, 010911.

計算の妥当性 (赤血球「群」の振る舞い. 実験観測との比較)

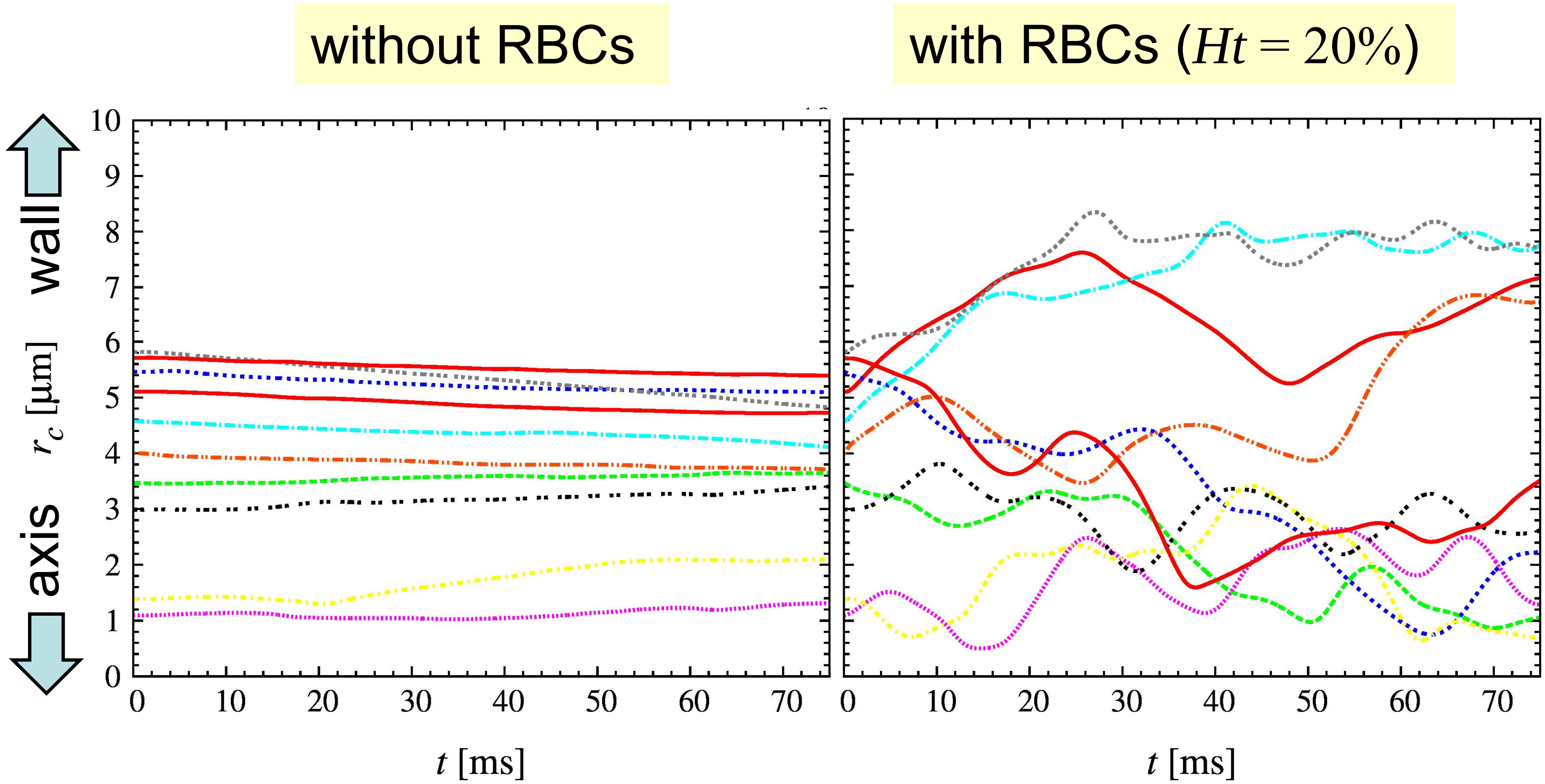
Gaehtgens *et al*.(1980) *Blood Cells*., **6**, 799.

- 管壁付近のcell free layer
- スリッパ形状の赤血球



・Ii, Sugiyama *et al*. (2012) *J. Biomech. Sci. Eng*.,**7**, 72.

血小板の軌跡 (半径座標 vs. 時間)

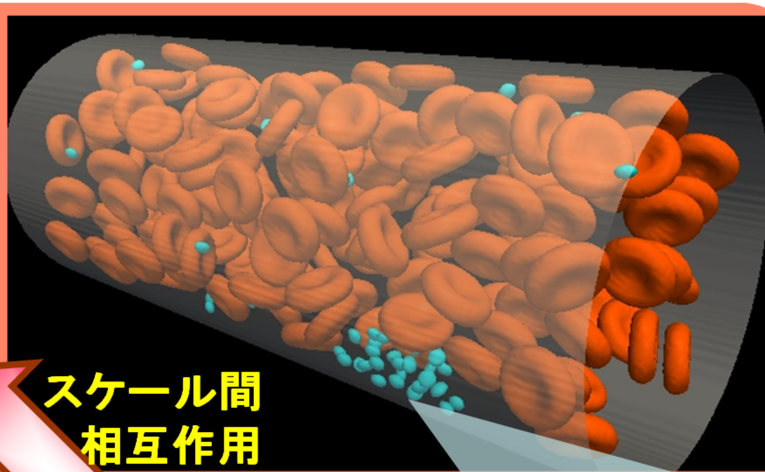


・Ii, Sugiyama *et al*. (2012) *J. Biomech. Sci. Eng.*,**7**, 72.

血栓シミュレータの開発血小板血栓に至る過程を数値予測したい

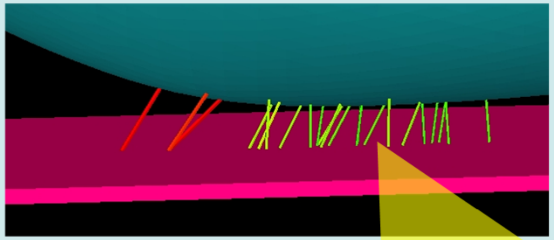
マルチスケール・マルチフィジックス

血流（連続体力学）

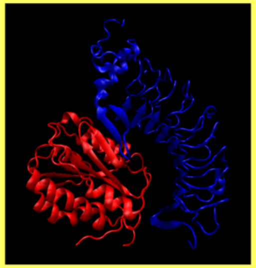


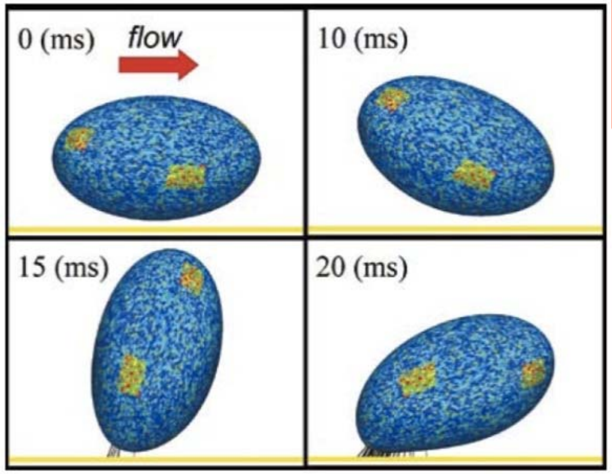
スケール間
相互作用

Ligand-Receptor結合
(確率論的)



分子的相互作用用
(分子動力学)





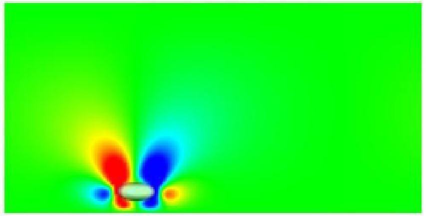
GPIbα-vWF
・結合・切断 (反応速度, 確率)
・伸縮力

Shiozaki, Ishikawa & Takagi (2012)
J. Biomech. Sci. Eng.,**7**, 275.

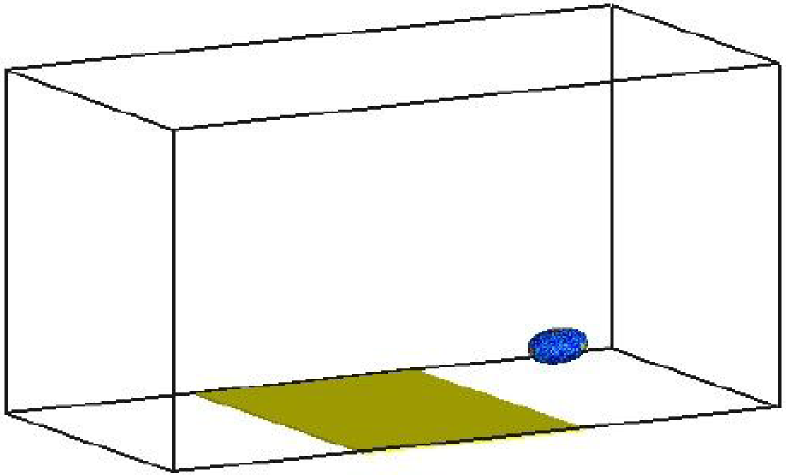
血小板付着の様子，赤血球の影響

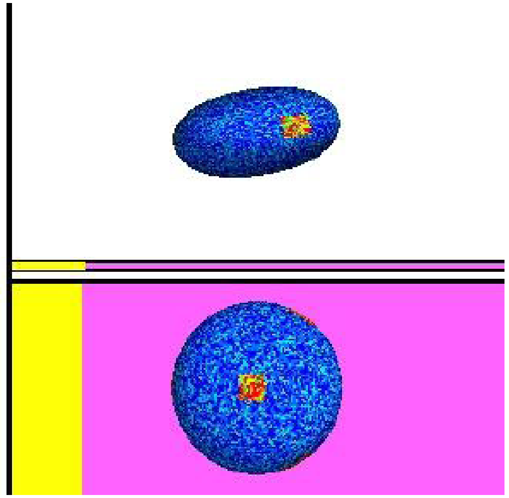
チャネル流れ

赤血球なし



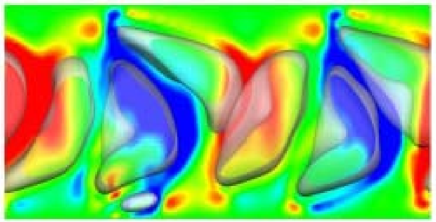
Vertical velocity
at t = 16 [ms]



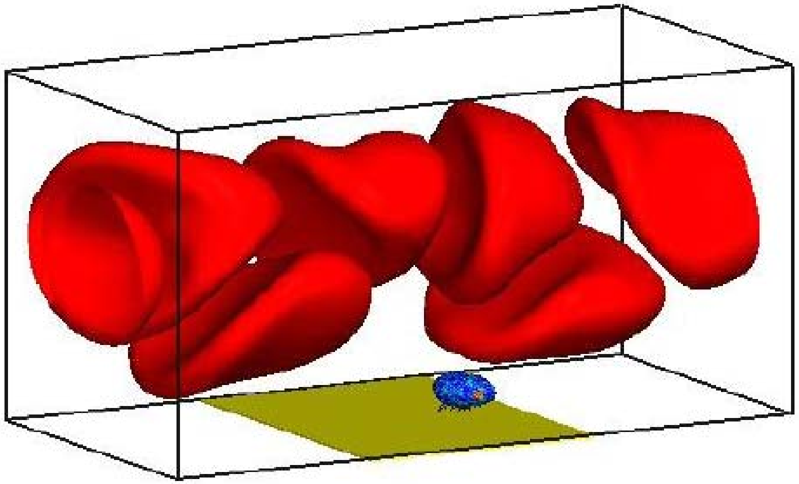


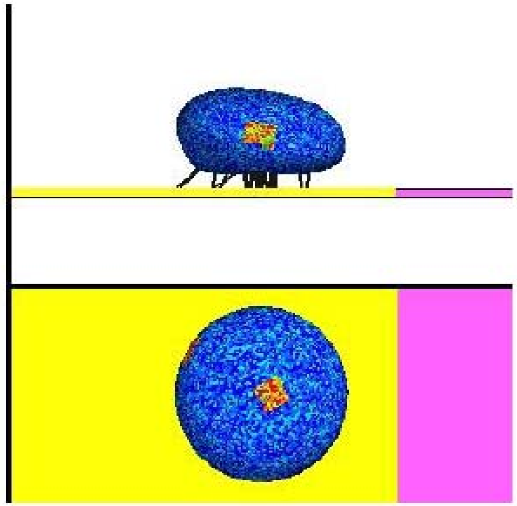
血小板: 揚力により壁面から離れる方向に移動．付着しにくい．

赤血球あり



Vertical velocity
at t = 16 [ms]





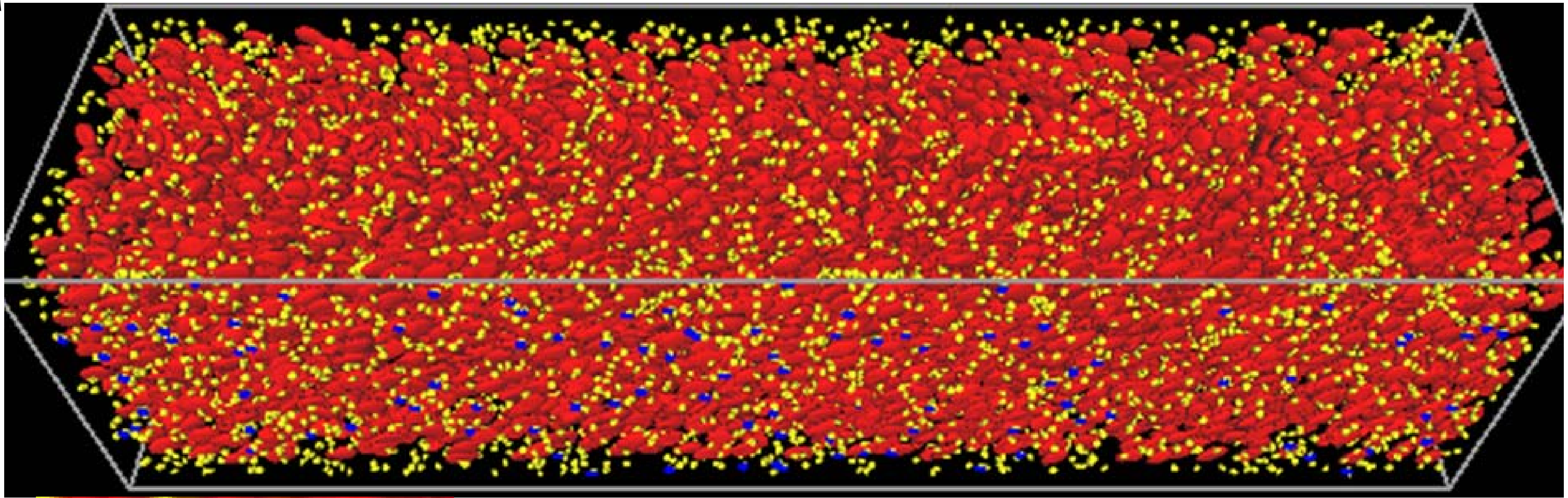
赤血球：壁面垂直方向の速度成分の変動を誘起．
血小板：壁面に接近する機会が増え，付着しやすくなる．

on the relevance of RBCs to platelet adhesion

$Ht = 20\%$

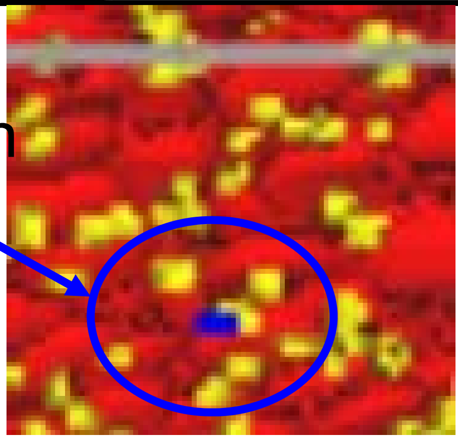
Comp. extent: 400μmx100μmx100μm
Num. grid points: 2,048x512x512
2,048 nodes (16,384 cores) on the K computer

wall-normal



injured wall

platelet adhesion



まとめ

超大規模並列計算に適した流体・構造/膜連成解析手法の開発

新たな 方法論の確立

- 複雑な境界形状/多数の分散体の扱いを容易に.
- 実効性能・線形拡張性の高い超大規模並列計算を可能に.

血栓シミュレータへの拡張・応用

（血流とLigand-Receptor結合のマルチスケール/フィジックス解析）

- 血栓形成の第一段階における，赤血球の存在の重要性を示唆.