



# 大規模並列計算に適した <u> 流体構造連成手法(ZZ-EFSI)</u> <u> 杉山和靖(東大・エ,理研)</u>,伊井仁志(阪大・基礎工),

高木 周 (東大・工, 理研), 松本 洋一郎 (東大・工)





# 背景 (究極的な狙いと方策) 生体内の流体・構造連成解析



Whole body voxel model model



医療画像(CT/MRI)と相性の良い解析 → 個人毎の診断に即した 治療支援を実現したい

多数の赤血球・血小板を含む血流
 に適した解析
 → 血小板血栓に至る機構
 を明らかにしたい
 (有限差分・固定矩形格子)
 Euler法に基づくシミュレーション



## 目的

### 生体内の連続体レベルの流体構造連成解析 に適した流体構造連成手法 ZZ-EFSI (Zouki Zenshin-Eulerian Fluid Structure Interaction) の開発

# Euler型有限差分法

# 固定メッシュ上で、流体力学、構造力の式を離散化

動的パラメータを持つ擬似圧縮性法

・数値的に安定で完全陽的な時間積分.



Sugiyama, Ii et al. (2011) J. Comput. Phys., 230, 596.



$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad \rho_m \left( \partial_t \mathbf{v} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \mathbf{\sigma}'_m,$$
  
Cauchy応力 (混合形式)  
$$\mathbf{\sigma}'_m = (1 - \phi_s)\mathbf{\sigma}'_f + \phi_s\mathbf{\sigma}'_s,$$
  
首体体積率

流体 (Newtonian):

 $\boldsymbol{\sigma}_{f}^{\prime}=2\boldsymbol{\mu}_{f}\mathbf{D}^{\prime},$ 

# 固体 (visco-hyperelasto):

Mooney-Rivlin model:

$$\boldsymbol{\sigma}_{s}' = 2c_{1}\mathbf{B}' + 2c_{2}(\operatorname{tr}(\mathbf{B})\mathbf{B} - \mathbf{B} \cdot \mathbf{B})' + 2\mu_{s}\mathbf{D}'.$$

左Cauchy-Green変形テンソル B=F·F<sup>T</sup>,  $F_{ij} = \frac{\partial x_i}{\partial X_i}$ ,

## 固体の運動学に対する構成式

Sugiyama, Ii et al. (2011) J. Comput. Phys., 230, 596.



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

左Cauchy-Green変形テンソル

$$\partial_t \tilde{\mathbf{B}} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \tilde{\mathbf{B}} = \mathbf{L} \cdot \tilde{\mathbf{B}} + \tilde{\mathbf{B}} \cdot \mathbf{L}^T,$$

$$\tilde{\mathbf{B}} = \begin{cases} \phi_s^{1/2} \tilde{\mathbf{B}} & \text{for } \phi_s \ge \phi_{\min} \\ 0 & \text{for } \phi_s < \phi_{\min} \end{cases} \qquad \mathbf{L} = \nabla \mathbf{v}^T \\ \tilde{\mathbf{B}} = \phi_s^{1/2} \mathbf{I} \quad \text{at } t = 0, \end{cases}$$



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



計算の妥当性 せん断流中の2粒子の相互作用



Gao & Hu (2009, J. Comput. Phys. 228) ALE
Present (full Eulerian)

+分に検証された計算結果を良く再現 Sugiyama, Ii *et al.* (2011) J. Comput. Phys., 230, 596.



in-plane stress (Evans-Skalak model)

bending stress

$$\boldsymbol{\tau}_{s} = \frac{C_{s}}{\left(\Lambda_{1}+1\right)^{2}} \mathbf{B}_{s} + \left(E_{s}\Lambda_{1}-C_{s}\frac{\Lambda_{2}+1}{\Lambda_{1}+1}\right) \mathbf{P} \qquad \mathbf{q}_{s}\mathbf{n} = \mathbf{m}$$
$$\mathbf{m} = \mathbf{h}$$
$$\mathbf{h}_{1} = J_{s}-1, \ \Lambda_{2} = \frac{\operatorname{tr}(\mathbf{B}_{s})}{2J_{s}}-1$$

 $\mathbf{q}_{s}\mathbf{n} = \{(\nabla_{s} \cdot \mathbf{m}) \cdot \mathbf{P}\}\mathbf{n}$  $\mathbf{m} = E_{b} (\mathbf{\kappa} - \kappa_{R} \mathbf{P})$ 

• Gong, Sugiyama et al. (2009) J. Biomech. Eng., 131, 074504.

- Ii, Sugiyama et al. (2012) J. Comput. Phys., 231, 2328.
- Ii, Gong et al. (2011) Comm. Comput. Phys. (accepted).



## 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. (2011) J. Biomech. Sci. Eng. (submitted).



計算アルゴリズムの見直し(時間積分の計算を速くしたい)

擬似圧縮性法 (Artificial Compressibility Method; ACM) 本当は非圧縮性の条件を満たしたいが, 微圧縮性流体と見立てて,低Mach数の流れを想定して, 圧力発展式を陽的に解く. Ohwada & Asinari (2010) J. Comput. Phys. 229

## 対処すべき点

ACMでは、質量保存が破綻するのでは?
 ・低Mach数の流れが、非圧縮性流れに近いのは当然では?

# やったこと

アルゴリズムの開発

- ・誤差の最小化
- ・数値安定性の確保



# 計算の妥当性 (チャネル流れ内biconcave neo-Hooke体粒子)



# 並列性能 (計算速度と並列台数) MPC-RICC at RIKEN チャネル流れ内biconcave neo-Hooke体粒子

#### weak scalability tests

strong scalability tests



高い線形拡張性





2ノードでの通信時間の割合は1.4%, 12,288ノードでの割合は5.1%. 8万ノードでの信時間の割合は, 大きめに評価して8%.

※性能値については、整備中のシステムによる暫定的な数値である

## <u>血栓とは</u> 血管の中にできる血の塊

血栓シミュレータ



→ 止血に対して重要な役割

http://www.hit-1.net/mimizu2/kesen.htm

だが,機能の異常/低下により血栓が拡大すると →血管の閉塞(血栓症,血栓塞栓症)

脳梗塞,心筋梗塞,肺塞栓症...

まず第一に, 血小板血栓 に至る過程を数値予測できるようにしたい

## 解析方法の概要 マルチスケール・マルチフィジックス





後藤 (2000, 日経メディカル)を元に作図

# Ligand-Receptor結合のモデル

Stochastic model with energetic elasticity



Luo et al. (2007) Blood, 109, 603.

forward reaction rate結合 $k_f(l) = k_{f0} \exp\left(-\sigma_{ts} \frac{(l-l_0)^2}{2k_bT}\right)$ reverse reaction rate切断 $k_r(l) = k_{r0} \exp\left((\sigma_p - \sigma_{ts}) \frac{(l-l_0)^2}{2k_bT}\right)$ 

Eyring (1935) *J. Chem. Phys.*, **3**, 107. Bell (1978) *Science*, **200**, 618. Dembo (1988) *Proc. R. Soc. Lond. B*, **234**, 55. Hammer & Apte (1992) *Biophys. J.*, **63**, 35.

$$\begin{split} P_f &= 1 - \exp(-k_f \Delta t) \geq R_f \rightarrow \text{formation} \\ P_r &= 1 - \exp(-k_r \Delta t) \geq R_r \rightarrow \text{breakage} \\ & (R_f, R_r \in [0, 1] : \text{Random numbers}) \\ & f &= \sigma_p (l - l_0) \end{split}$$

モデルの記述に必要な定数  

$$\sigma_p = 10^{-4}$$
 [N/m],  $\sigma_{ts} = 0.9\sigma_p$  [N/m]  
 $l_0 = 60$  [nm],  $k_{r0} = 3$  [s<sup>-1</sup>]

Fox *et al.* (1988) *J. Biol. Chem.*, **263**, 4882. Arya *et al.* (2005) *Biophys. J.*, **88**, 4391. Kim *et al.* (2010) *Nature*, **466**, 992.

# 血小板のモデル

•回転楕円 (1 [µm]: 1[µm]: 0.6[µm])

#### • 超弹性膜

(Barthés-Biesel *et al.* (1981) *J. Fluid Mech.*, **113**, 251. Pozrikidis (2001) *J. Fluid. Mech.*, **440**, 269.)

膜弾性係数: 1[dyn/cm] 曲げ係数: 2 x 10<sup>-11</sup> [dym•cm]

GPIbaの局在を考慮数:15000~20000
 局在箇所:3~5
 局在部の密度:2~10

#### Fluorescent observation



後藤 (2010) *血栓止血学会誌*, 21, 334





• Takagi, Ii et al. (2011) J. Comput. Phys. (to be submitted).

# <u>まとめ (ZZ-EFSI)</u>

## 新たな方法論の確立

### Euler型流体•構造/膜連成解析法

- ・十分に検証された計算結果,実験観測の様子を再現.
- ・複雑な境界形状/多数の分散体を含む系の解析を容易に.

動的パラメータを持つ擬似圧縮性法

- Ma  $\leq 2\sqrt{3} \times (CFL \text{ number}).$
- ・完全陽的な時間積分を実現.

・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応用・拡張

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.

「京」の利用 ↓ 多数の赤血球が存在する条件で, 血小板の付着から血栓の初期過程を解析

直径約100µmの細動脈

## 謝辞

(Tokai University) S. Goto, Y. Nanazawa, N. Tamura
(Osaka University) S. Takeuchi
(RIKEN) S. Shiozaki, R. Himeno, S. Noda, H. Yokota, Y. Sunaga, H. Koyama, Y. Ohno, G. Masumoto
(The University of Tokyo) K. Ono, K. Ishikawa, N. Shimamoto
(Nihon University) K. Okita
(Fujitsu Nagano Systems Engineering Ltd.) Y. Kawashima
(Shanghai Jiaotong University) X. Gong
(York University) H. Huang
(Peking University) J. Wu

文部科学省「次世代計算科学研究開発プログラム」 PCクラスタでの性能計測に関しては理化学研究所情報基盤センターのRICCを使用した. 京での計算に関しては京速コンピュータ京の試験利用での結果である.