



Tokyo Tech

スーパーコンピュータ「富岳」
成果創出加速プログラム

「富岳」で実現するヒト脳循環デジタルツイン
(東京工業大学, 伊井仁志, FY2023~2025)

データ同化による脳動脈瘤内血流場の定量化

第11回オンラインサロン「スパコンコロキウム」、2024年9月19日、オンライン

東京工業大学工学院機械系

伊井 仁志

簡単な自己紹介

東京工業大学工学院 伊井仁志



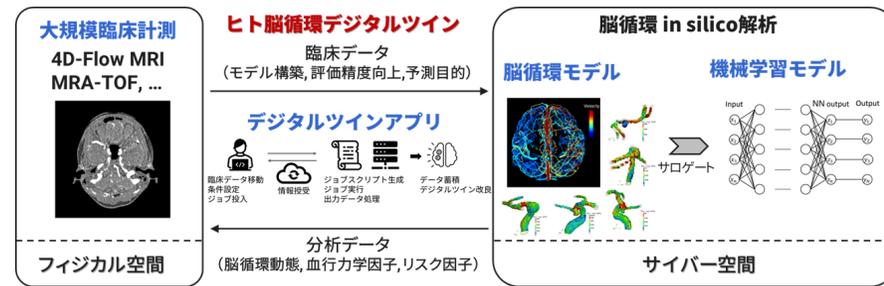
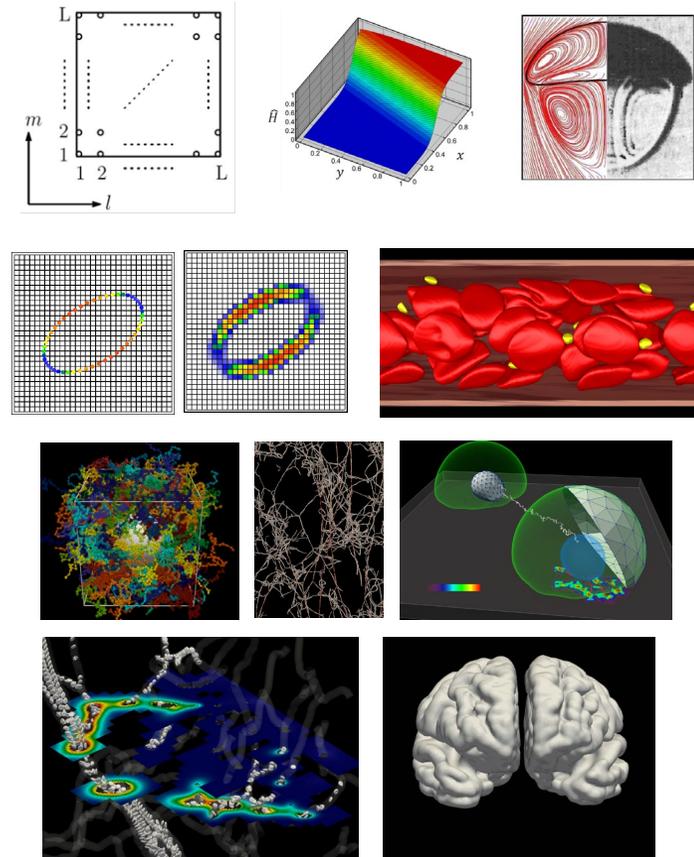
2004年～2008年 東京工業大学大学院総合理工学研究科 修士/博士課程学生（博士（理学））
・ マルチモーメントに基づく新規離散化手法を用いた高精度数値流体力学手法に関する研究

2008年～2012年 東京大学大学院工学系研究科 特任研究員
(スーパーコンピュータ「京」開発の研究プロジェクト)
・ オイラー型運動記述に基づく高性能並列計算向けの流体構造連成解析手法の新規提案
・ 血液中を流れる多数の赤血球・血小板の大規模流動シミュレーション

2012年～2016年/2016年～2018年 大阪大学大学院基礎工学研究科 助教/特任准教授
・ 生体现象を幅広く対象として数理モデリングと計算技法の新規提案
・ 力学規範に基づいた生体现象の物理機構の解明
(スーパーコンピュータ「富岳」開発の研究プロジェクト)
・ 全脳血流シミュレータの研究開発
・ 医用計測と数値シミュレーションによるデータ同化解析

2018年～2024年 東京都立大学（旧称 首都大学東京）システムデザイン学部 准教授
・ 実験・数値解析の双方向アプローチ創成の研究
・ 粒子法と格子法を組み合わせた高効率な数値流体解析手法の開発
・ 深層学習（DNNによるサロゲートモデル、PINN）のバイオメカニクス問題への展開
・ 慣性マイクロ流体装置中の血中循環腫瘍細胞の数値動態予測

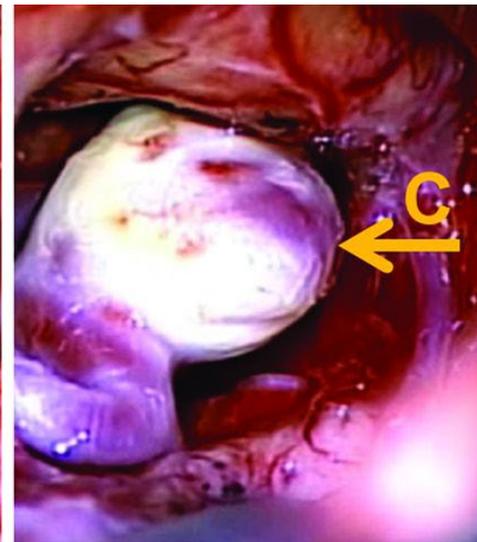
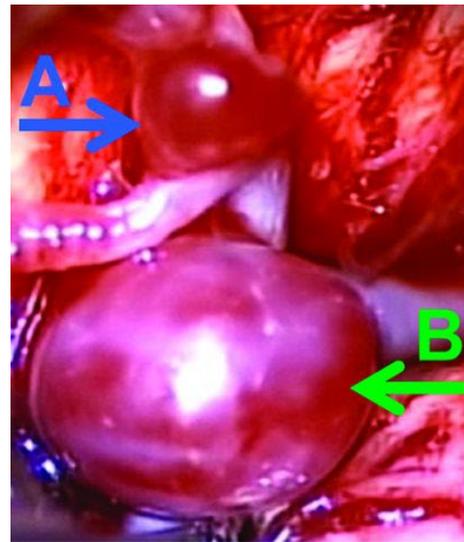
2024年～ 東京工業大学工学院 教授
・ 脳内水輸送の数理モデル解析
・ 分子・細胞・組織の階層性を考慮したマルチスケール流動解析
・ 計算力学とデータ科学に基づく大規模数値流体解析
(スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム)
・ ヒト脳循環デジタルツインの構築



- 血管壁の病理的な膨出
- 内弾性板の喪失, 中膜の菲薄化, エラスチン線維等の劣化など
- 破裂は非外傷性のクモ膜下出血の主な原因
- 破裂後の死亡率は35%^[1]と比較的高いが多くは生涯で非破裂 (年間2%程度^[2])
- 血管内治療や顕微手術治療には関連疾病の罹患や死亡のリスクが存在
 - 臨床において破裂リスクの評価が望まれる



Suarez, et al., 2006, N Engl J Med



Meng, et al., 2014, AJNR

動脈瘤内の血流評価



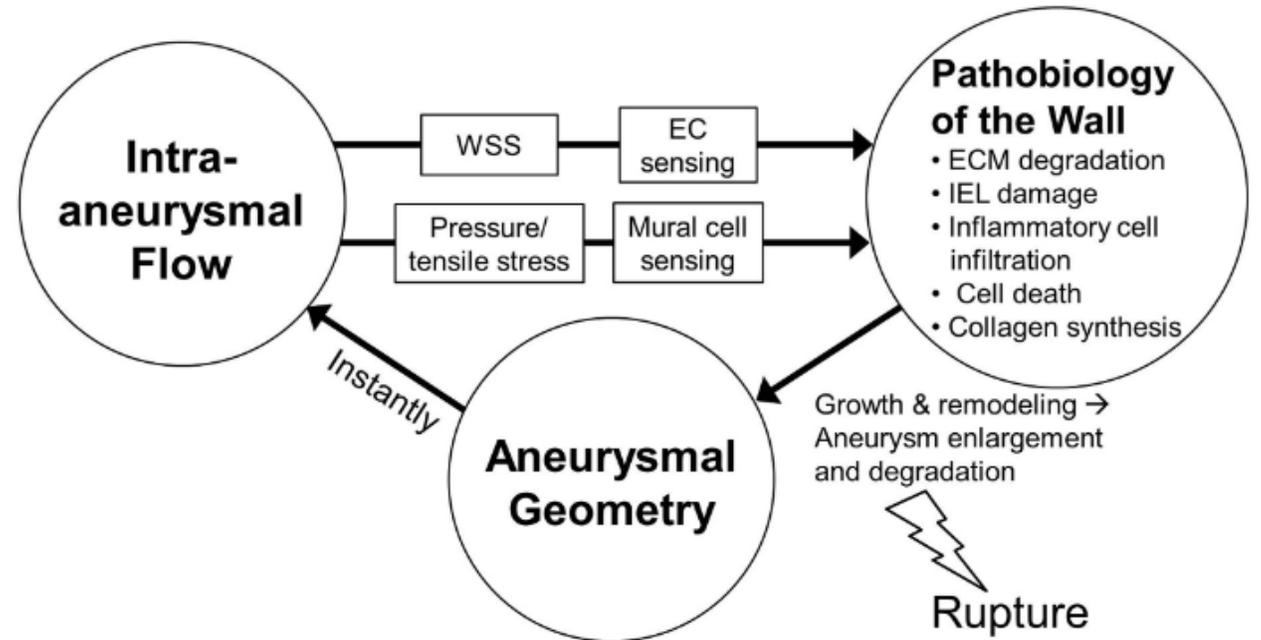
動脈瘤の成長・破裂要因

- 血管壁の病理生物学
- 瘤形状
- **瘤内部の流れ**



動脈瘤内血流（および血行力学因子） の高いレベルでの個別定量化

- ✓ 医用計測（Phase Contrast-MRI / 4D flow MRI）
 - 時空間解像度やS/N比の限界
- ✓ 数値流体力学(Computational Fluid Dynamics: CFD)
 - 妥当な境界条件の設定が困難

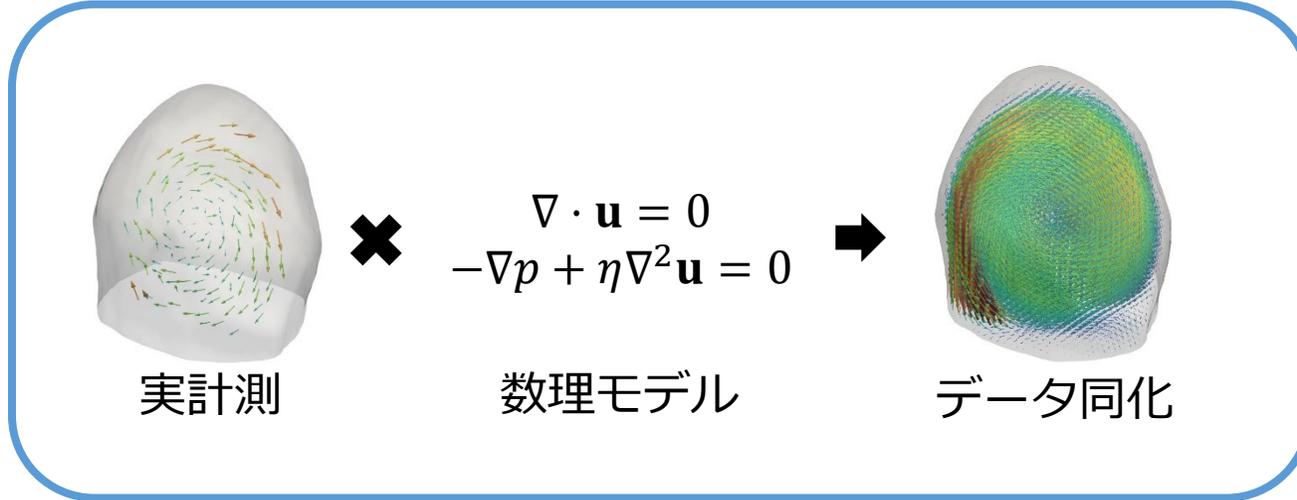


Meng et al., 2014, AJNR

データ同化 (Data assimilation: DA)

異なる二つのデータ*を統計的手法により組み合わせること/方法

*一般的に数理モデルと実計測



- ✓ 高い演算コスト
- ✓ 血管抽出精度の影響
- ✓ 計測ノイズ

➤ 動脈瘤内血流を対象とした実用的な数値解析技術（データ同化アプローチ）の提案



Tokyo Tech

脳動脈瘤のみを対象としたデータ同化血流解析

市村翼¹, 山田茂樹², 渡邊嘉之³, 河野浩人⁴, 伊井仁志^{5,1}

¹東京都立大学, システムデザイン研究科機械システム工学域

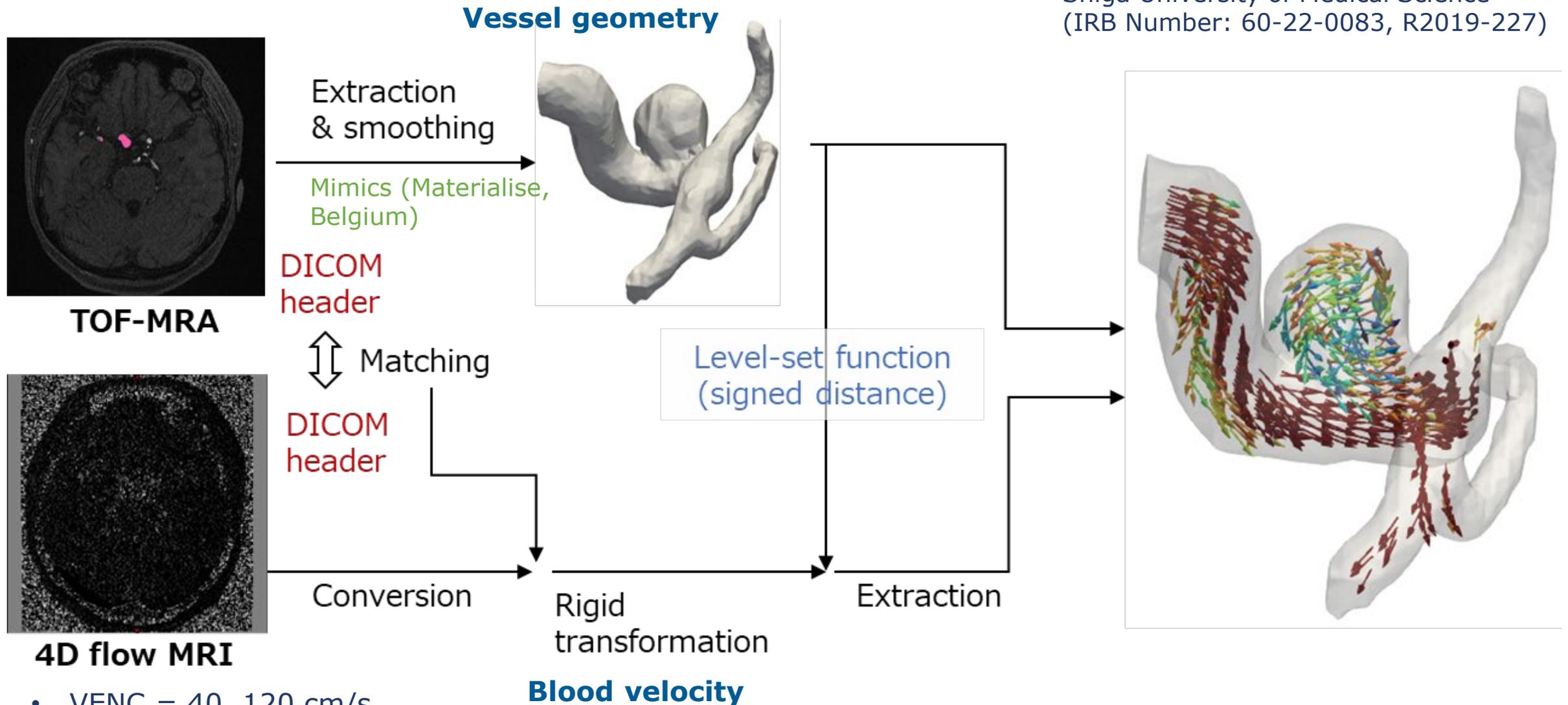
²名古屋市立大学, 医学研究科脳神経外科学分野

³滋賀医科大学, 放射線医学講座

⁴滋賀医科大学, 脳神経外科学講座

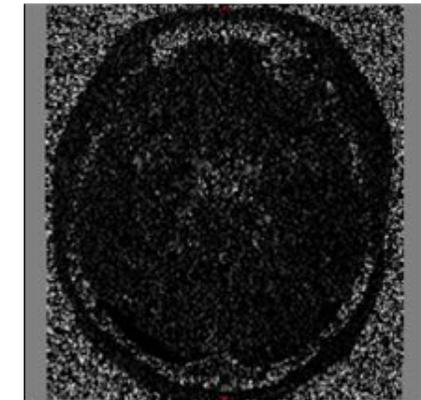
⁵東京工業大学, 工学院機械系

Reconstructions of geometry & velocity



TOF-MRA

Vessel geometry



4D flow MRI

Blood velocity

- VENC = 40, 120 cm/s
- 12 frames / pulse

最小化問題

$$\operatorname{argmin}_{\mathbf{g}} J(\mathbf{u}, \mathbf{g}) = \frac{1}{2} \int_0^T \int_{\Omega} D(Q\mathbf{u} - \mathbf{U}_{\text{obs}})^2 d\mathbf{x}dt + \frac{\varepsilon}{2} \int_0^T \int_{\Gamma_{bc}} \mathbf{g}^2 d\mathbf{x}dt$$

拘束条件（非圧縮性Navier-Stokes方程式）

$$\text{s. t.} \begin{cases} \rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \eta \nabla^2 \mathbf{u} & \text{in } \Omega \\ \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 & \text{in } \Omega \\ \mathbf{u} = 0 & \text{on } \Gamma_{\text{wall}} \\ \mathbf{u} = \mathbf{g} & \text{on } \Gamma_{bc} \\ \mathbf{u}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{u}(\mathbf{x}, T) & \text{in } \Omega \end{cases}$$

$$\int_{\Gamma_{bc}} \mathbf{g} d\mathbf{x} = 0$$

\mathbf{u} : 速度

p : 圧力

ρ : 密度

η : 粘度

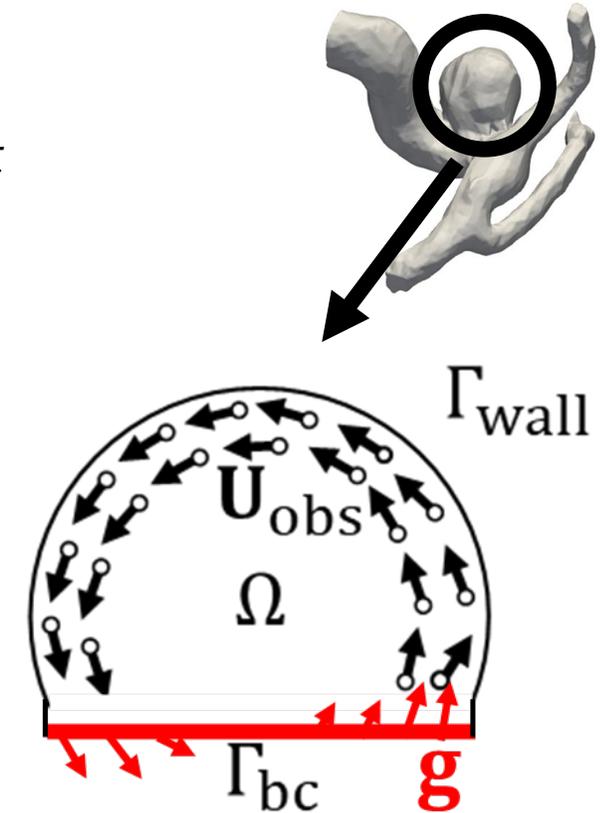
\mathbf{U}_{obs} : 観測速度

\mathbf{g} : 境界速度(制御変数)

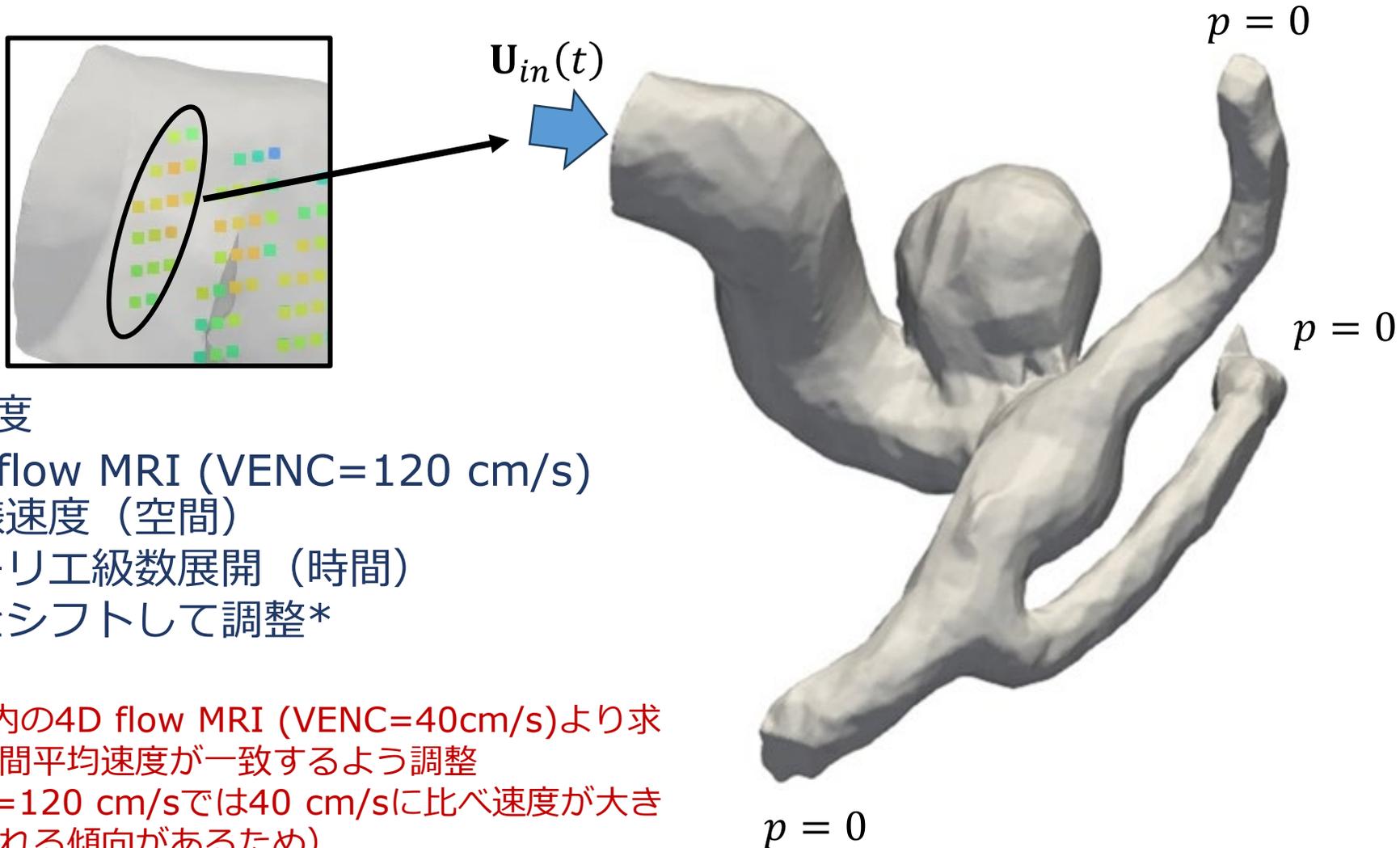
ε : 正規化パラメータ

Q : モデル空間から観測空間への写像

D : 観測空間からモデル空間への写像



周囲血管を含めたCFD解析（順解析）



入口速度

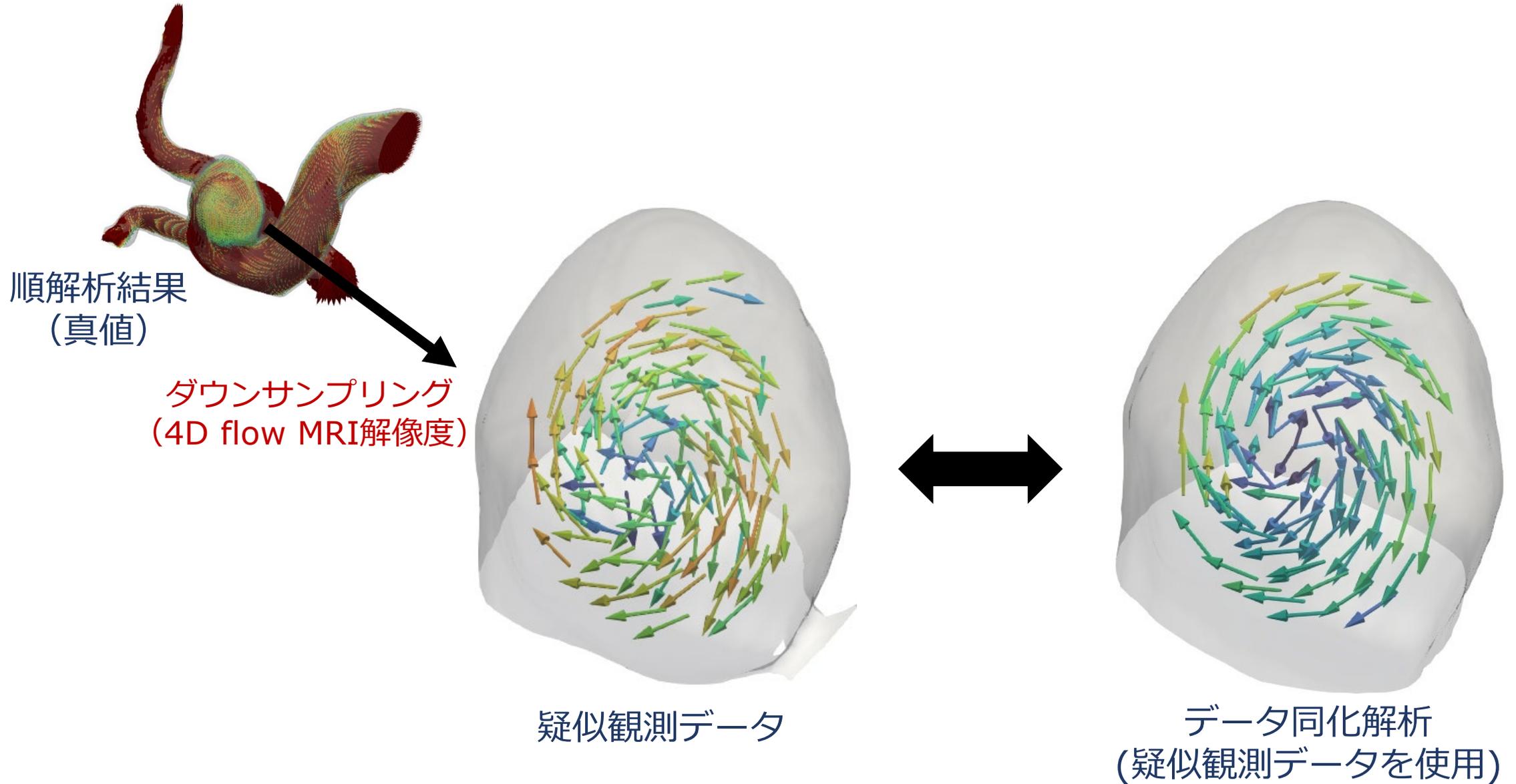
- 4D flow MRI (VENC=120 cm/s)
- 一様速度（空間）
- フーリエ級数展開（時間）
- 値をシフトして調整*

*動脈瘤内の4D flow MRI (VENC=40cm/s)より求めた時空間平均速度が一致するよう調整
(VENC=120 cm/sでは40 cm/sに比べ速度が大きく計測される傾向があるため)

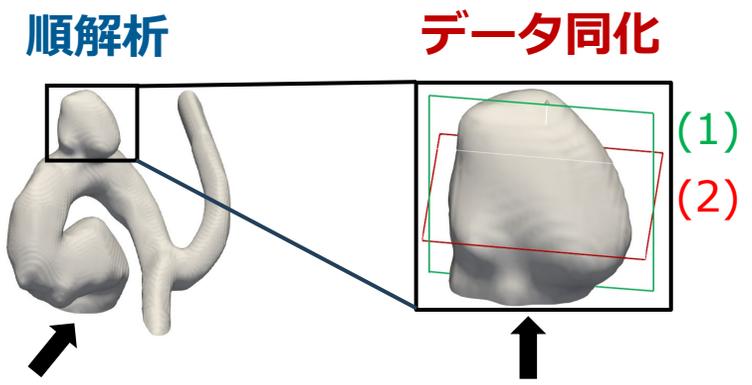
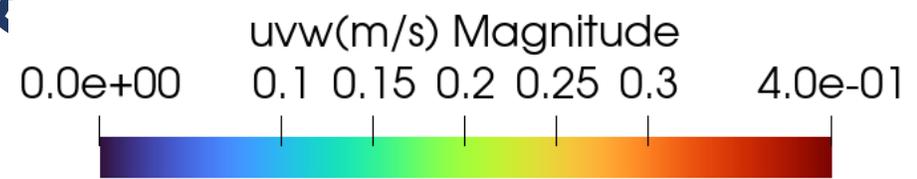
疑似観測データを用いた妥当性検証



Tokyo Tech

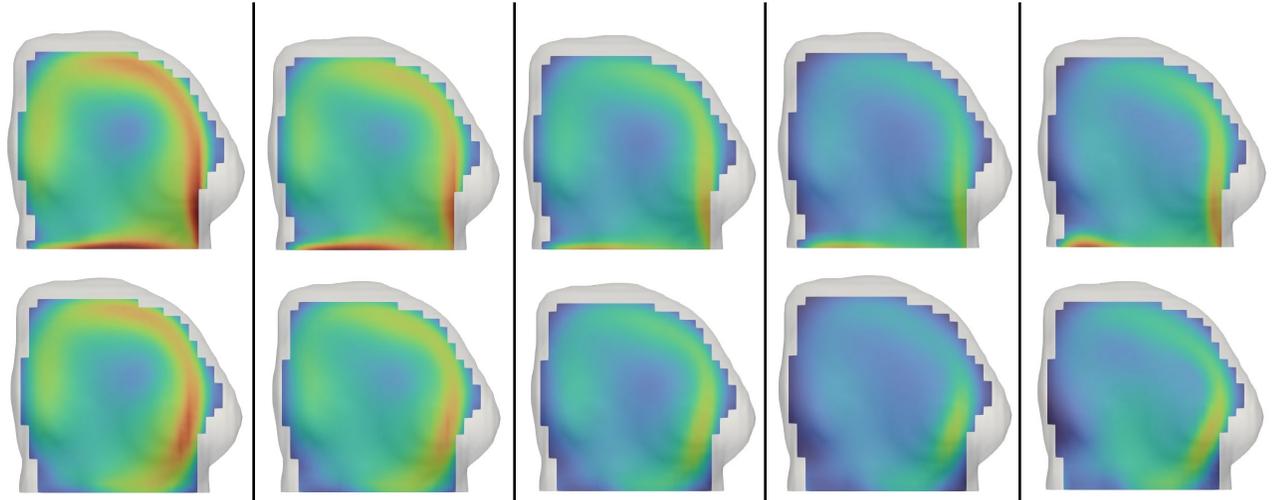


瘤断面における速度分布の比較



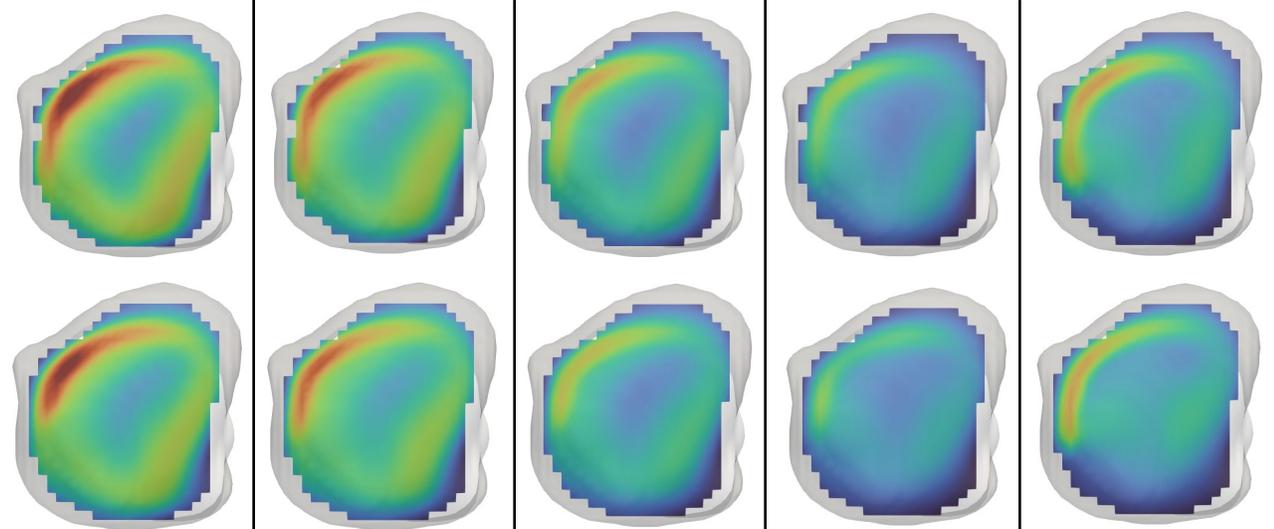
順解析
(真値)

データ同化



順解析
(真値)

データ同化



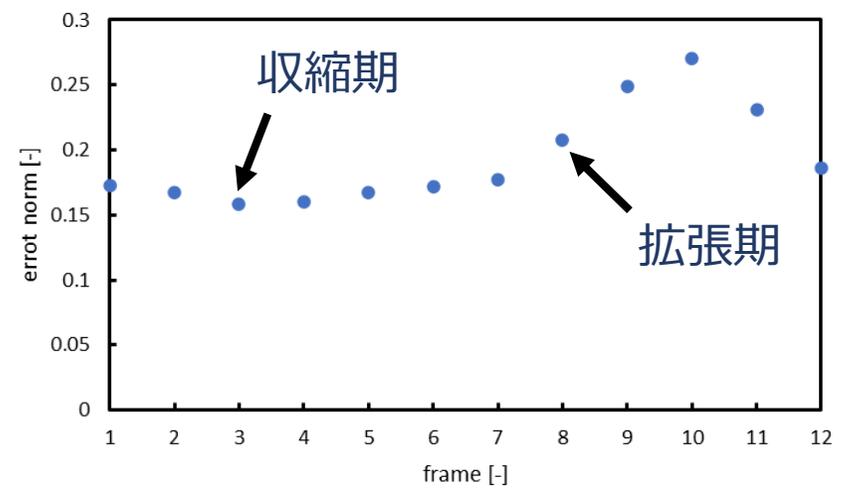
#2

#4

#6

#8

#10



他の妥当性検証例



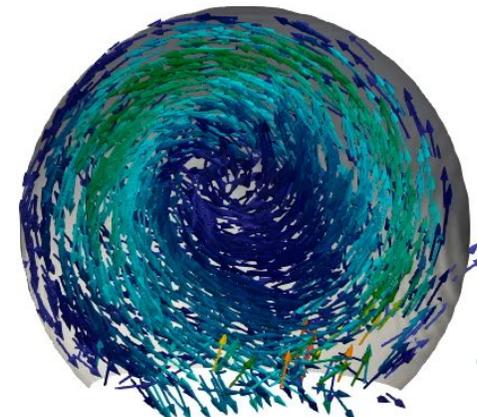
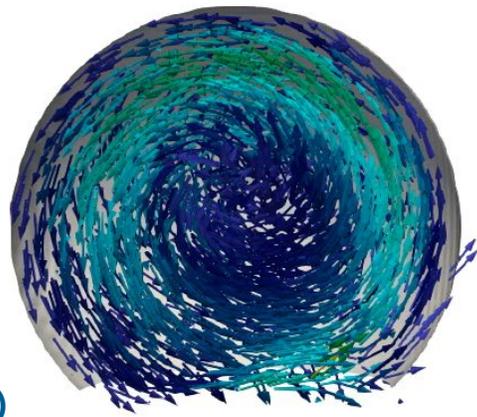
Tokyo Tech

疑似計測データ



真値 (順解析)

データ同化
(計測ノイズなし)



データ同化
(計測ノイズを考慮、SNR=10)

0.0e+00 0.05 0.1 0.15 2.0e-01

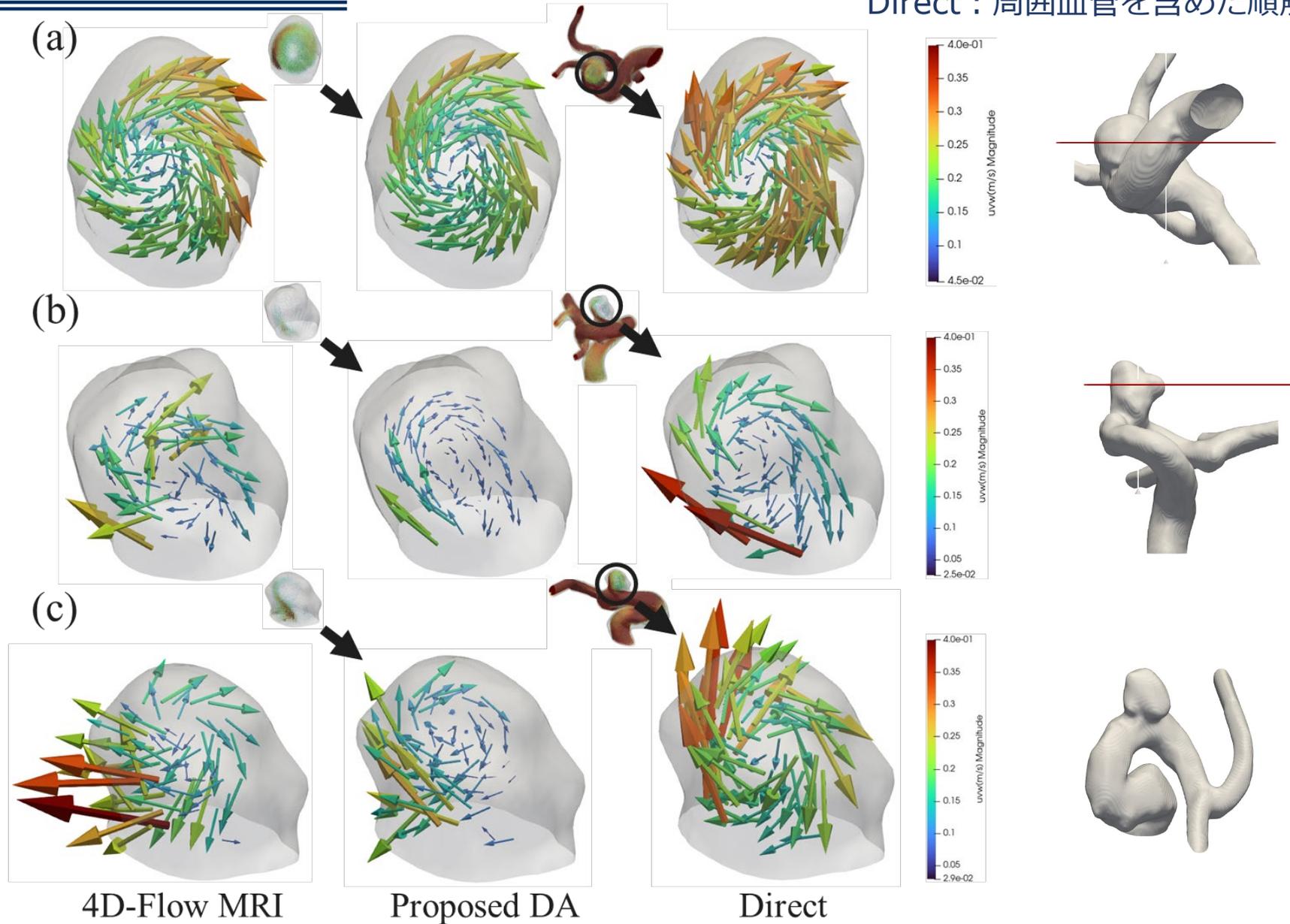


uvw(m/s)

実データを用いた血流推定

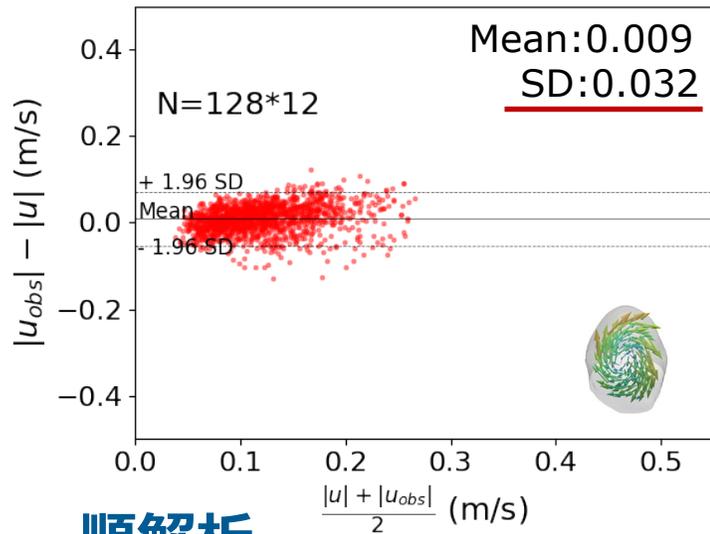
4D flow MRI : VENC=40 cm/s
Proposed DA : データ同化解析
Direct : 周囲血管を含めた順解析

収縮期

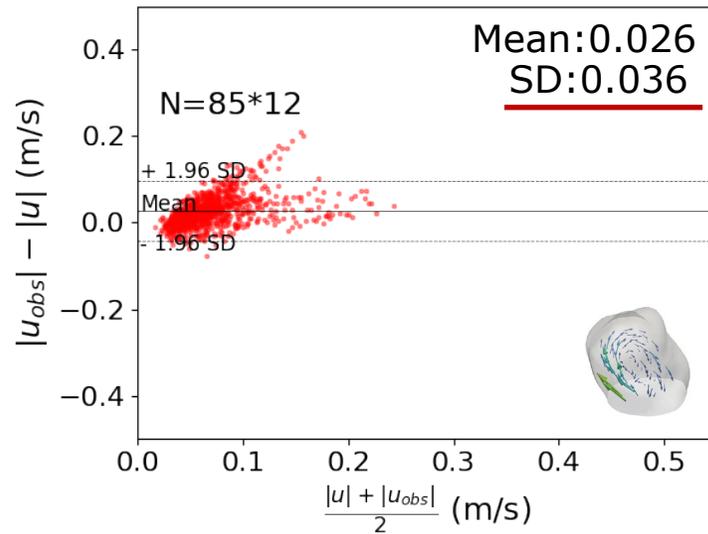


実データを用いた血流推定

(a) データ同化

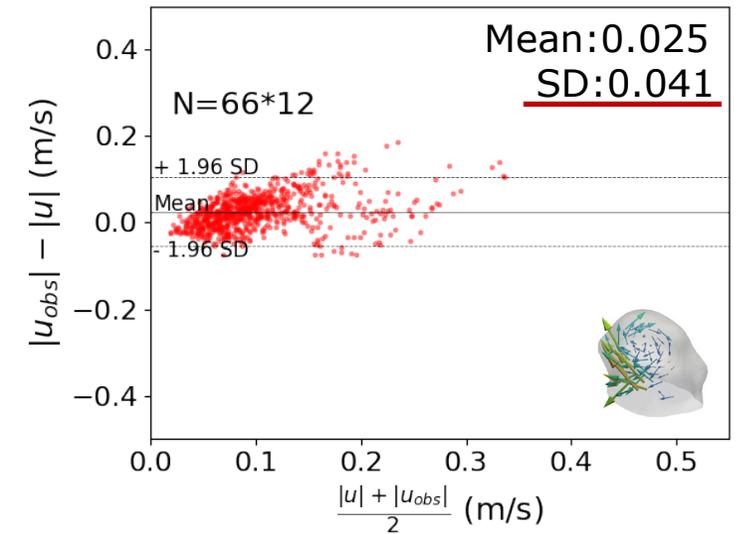


(b)

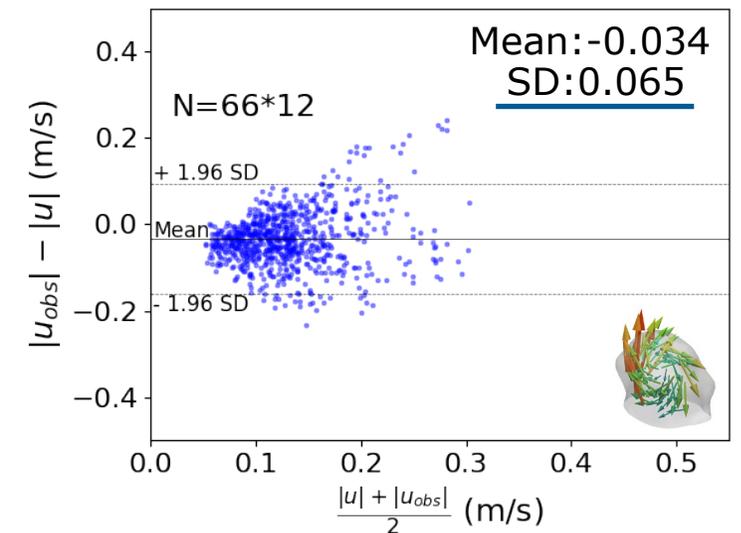
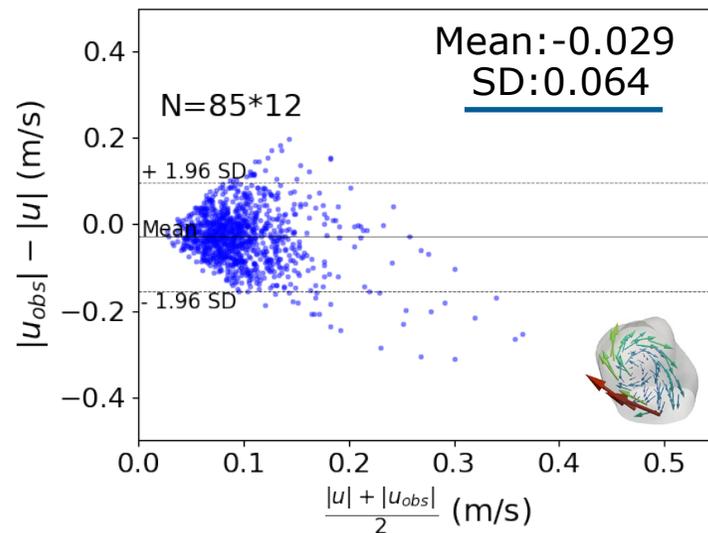
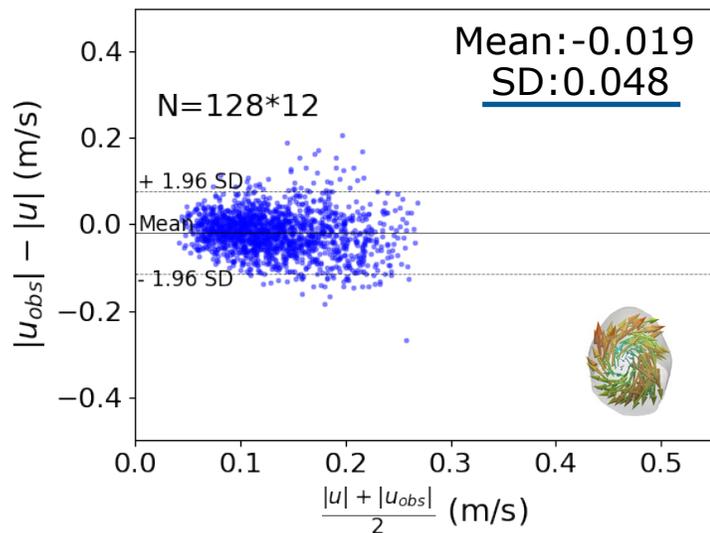


(c)

N=計測点×全フレーム

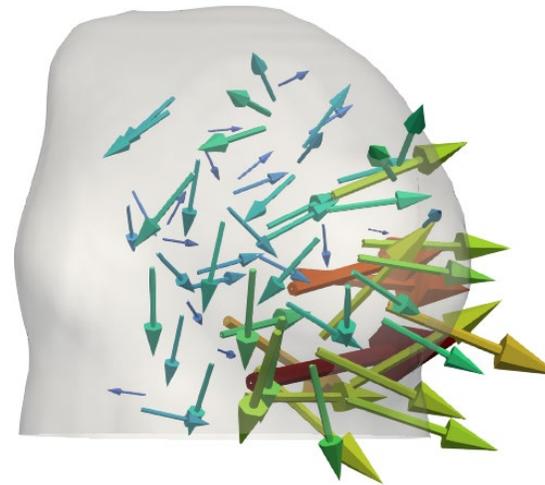
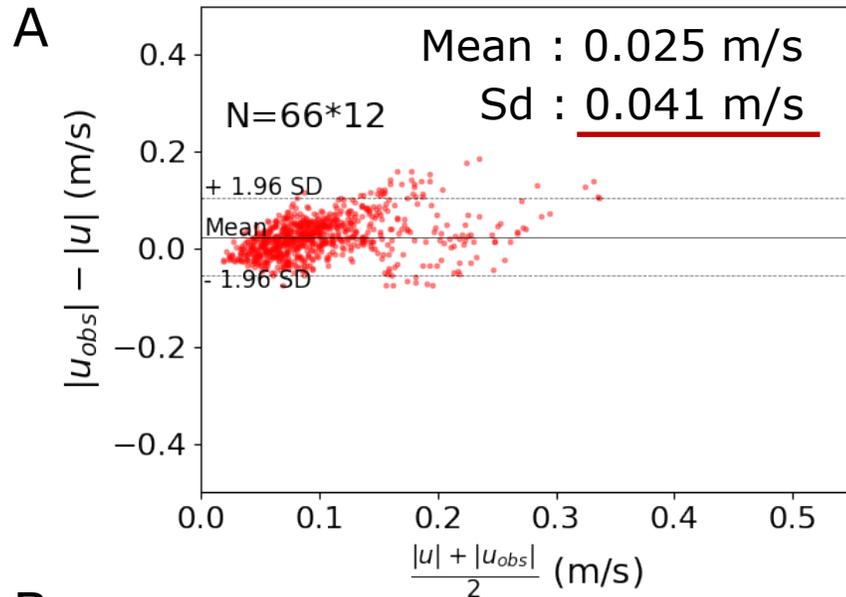


順解析

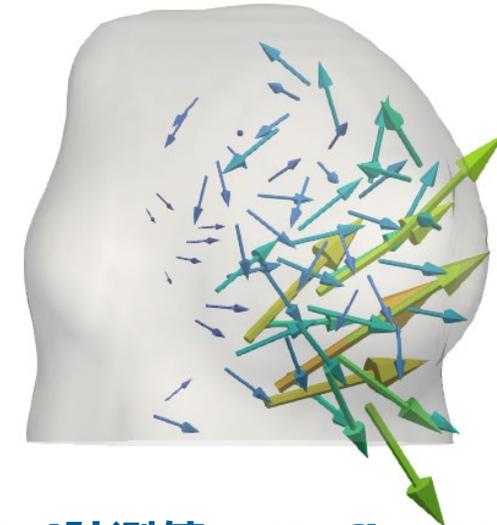


推定精度の検証

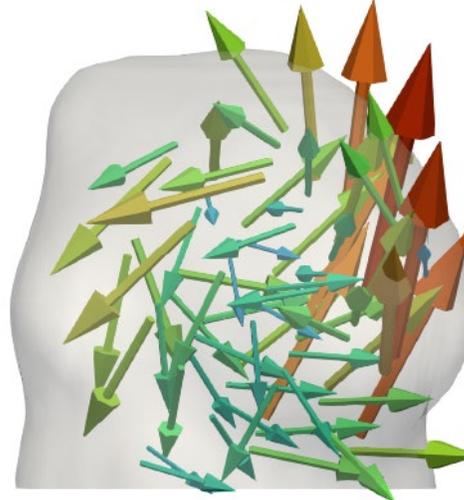
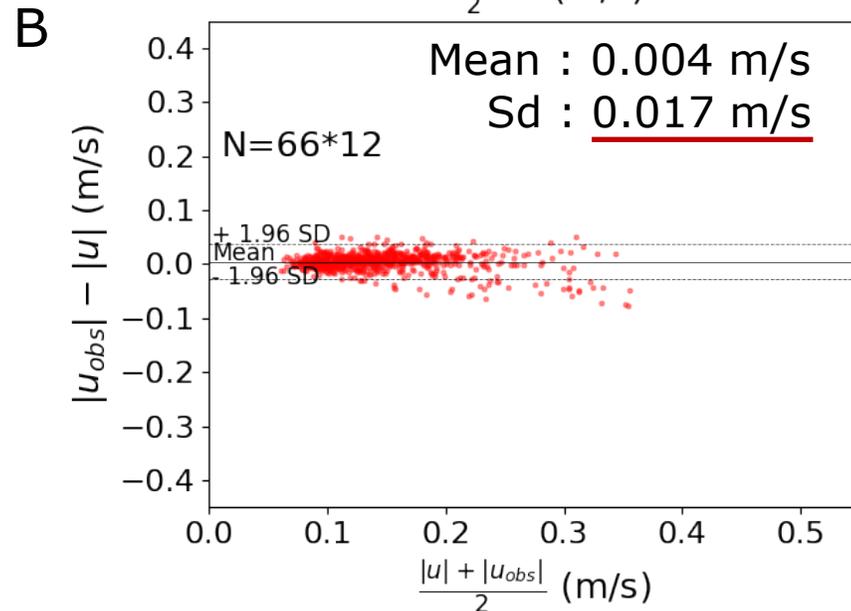
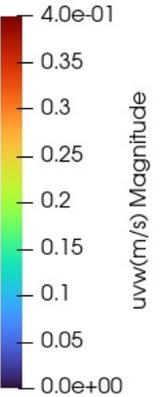
サンプルC



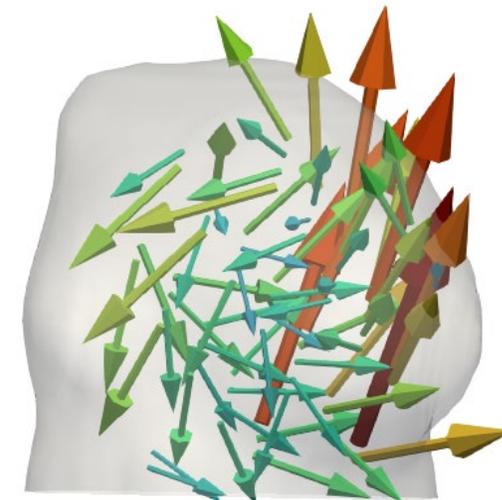
4D-Flow MRI



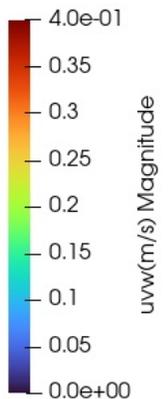
DA (計測値 : 4D flow MRI)



順解析(真値)



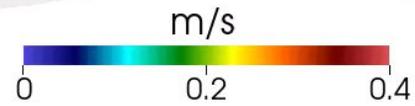
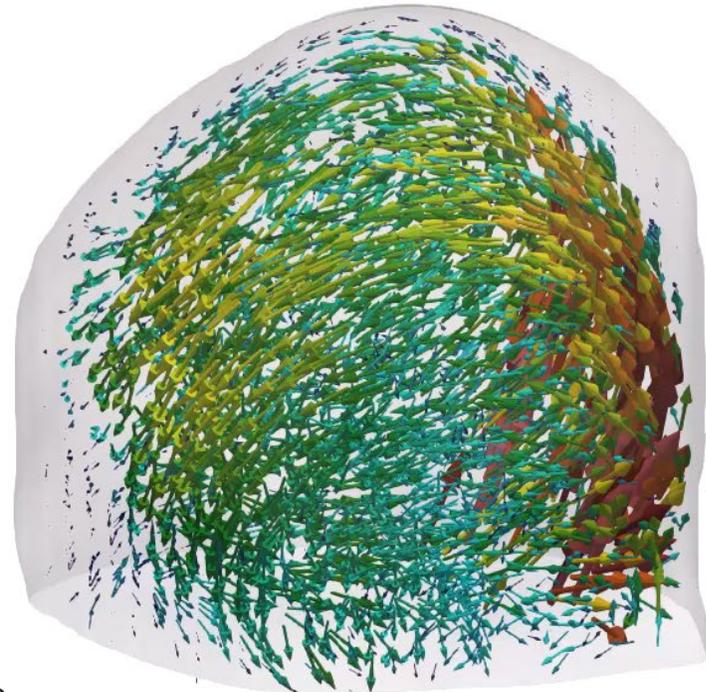
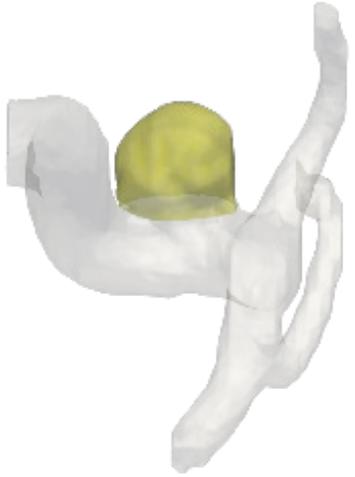
DA (計測値 : 順解析)



高解像度な血流場の評価



Tokyo Tech



4D-Flow MRI

シミュレーション速度
(データ同化)

脳動脈瘤を対象としたデータ同化血流解析

- 真値を用いた数値検証より提案アプローチの妥当性を示した
- 周囲血管を含む順解析に比べデータ同化解析は観測データの流れ場を良く再現
- サンプルによっては推定精度が低下（したように見える）
 - 4D flow MRIが有する計測ノイズがDAとの差異を生じさせた可能性

Ichimura, et al., "A practical approach for estimation of patient-specific intra-aneurysmal flows using variational data assimilation", *medRxiv*, 2024, <https://doi.org/10.1101/2024.05.24.24307838>



Tokyo Tech

脳動脈瘤内流れの迅速評価を目指した Physics-Informed Neural Networks(PINNs)の検討

高尾龍太¹, 伊井仁志^{2,1}

¹東京都立大学, システムデザイン研究科機械システム工学域

²東京工業大学, 工学院機械系

目的

深層学習アプローチは転移学習（学習済みモデルの利用）が可能

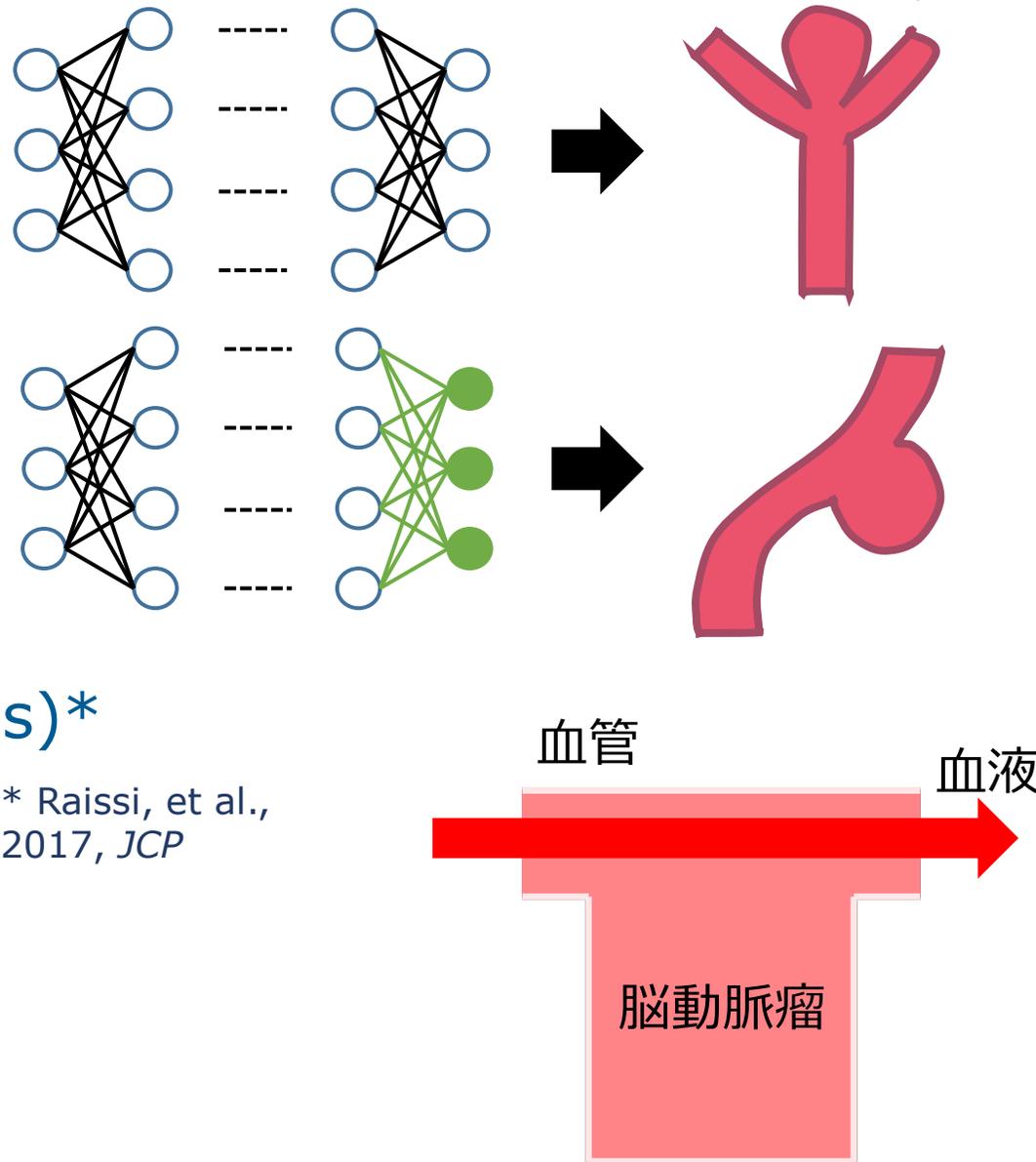


患者個別脳動脈瘤における学習および流れ推定の時間を短縮できる可能性



Physics-Informed Neural Networks (PINNs)*
に基づく脳動脈瘤内流れの迅速評価の確立

キャビティ流れ問題を対象とした
PINNsによる流れ推定の基礎検討



* Raissi, et al.,
2017, *JCP*

二次元キャビティ流れの順解析

OpenFOAM v9 (OpenCFD, UK)



支配方程式

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla p + \frac{1}{\text{Re}} \nabla^2 \mathbf{u}$$
$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

計算条件

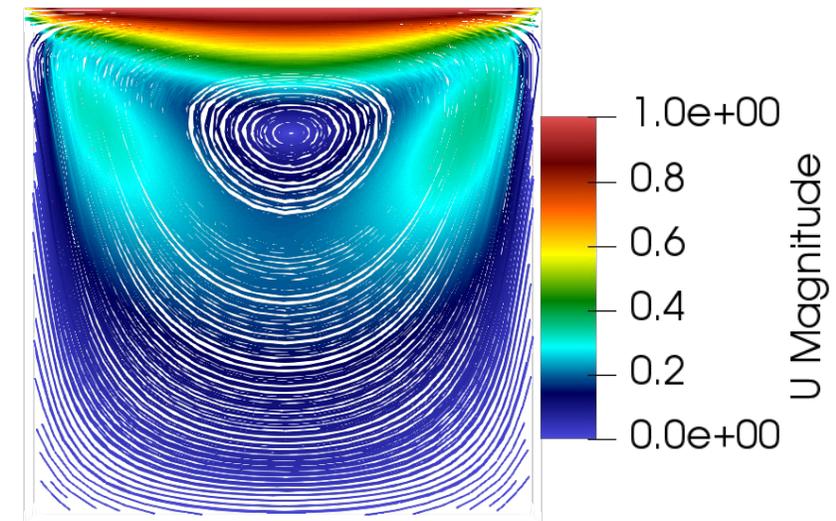
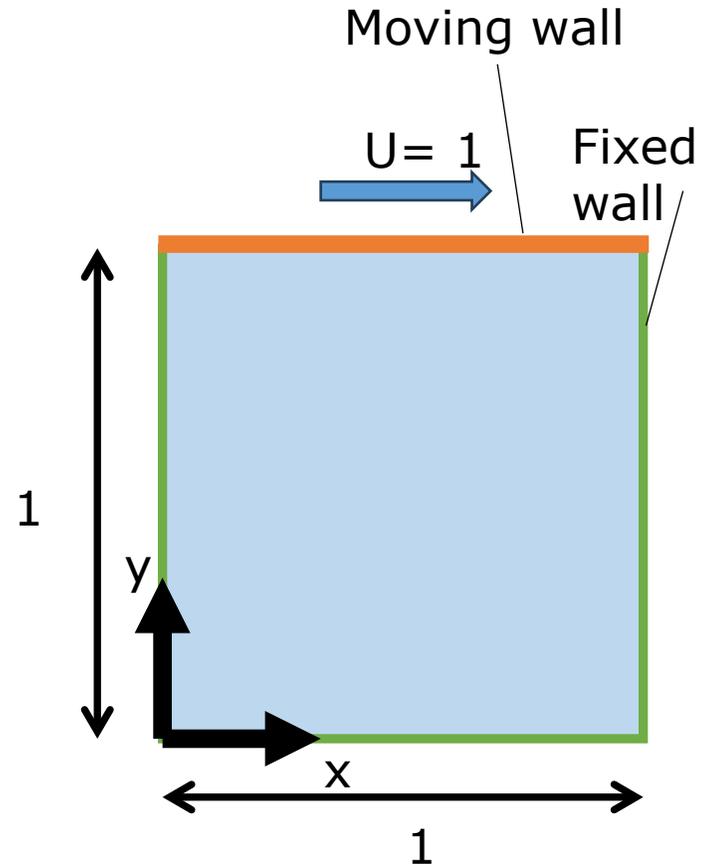
Re = 20, 50, 100

時間刻み : 0.005

格子幅 h = 1/20

圧力・速度連成手法 : PISO法

時間積分法 : 陽的オイラー法



⇒定常状態まで解析

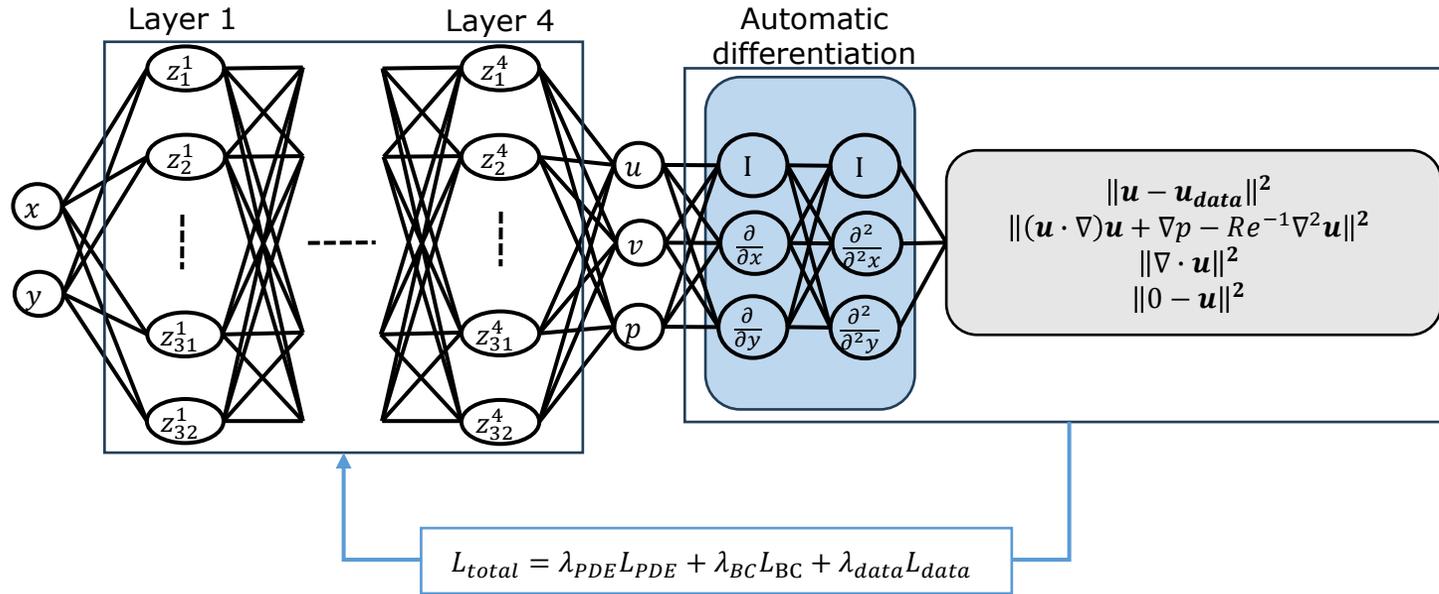
PINNsによるモデル構築

*Physics-informed neural networks (Raissi, et al., 2017, *JCP*)

*DeepXDE (Lu, et al., 2021, *SIAM review*)



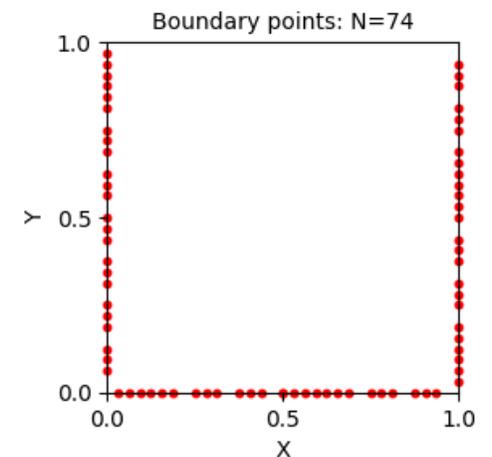
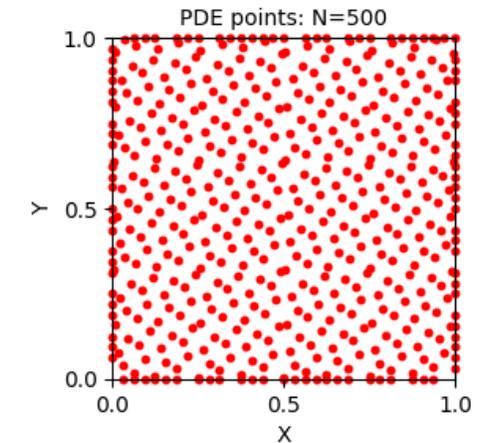
Tokyo Tech



使用した評価点

PDE評価点数 : 500

BC評価点数 : 74



ネットワーク

全結合ニューラルネットワーク

入力層 : 1 (幅2)

隠れ層 : 4 (幅32)

出力層 : 1 (幅3)

初期化 : Glorot uniform

活性化関数 : $\tanh x$

最適化関数 : adam

学習率 : 10^{-3} (10000 iteration)

→ 10^{-4} (200000 iteration)

損失関数

$$L_{data} = \|\mathbf{u} - \mathbf{u}_{data}\|^2$$

$$L_{NS} = \|(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} + \nabla p - Re^{-1}\nabla^2\mathbf{u}\|^2$$

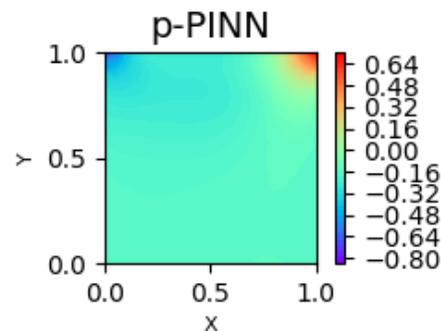
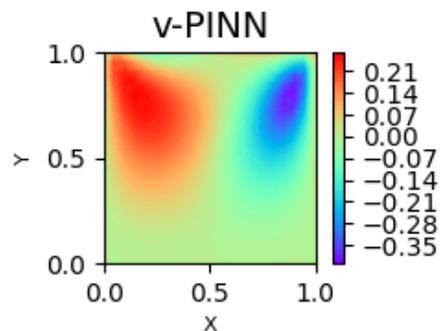
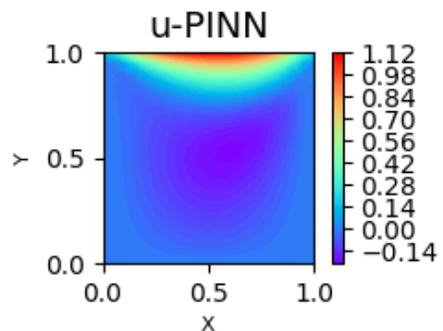
$$L_{continuity} = \|\nabla \cdot \mathbf{u}\|^2$$

$$L_{BC} = \|0 - \mathbf{u}\|^2 \text{ (fixed wall のみ)}$$

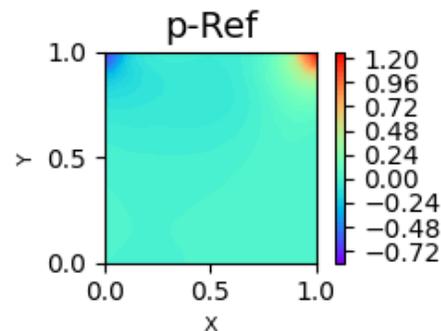
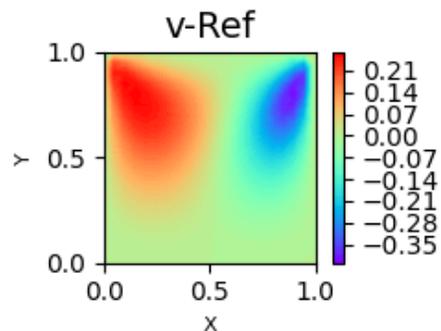
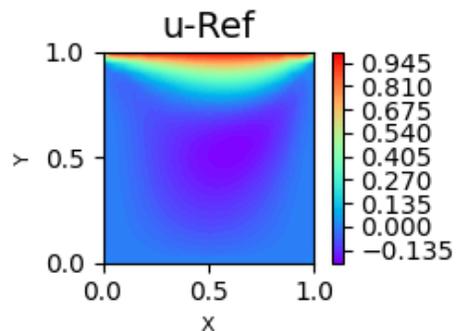
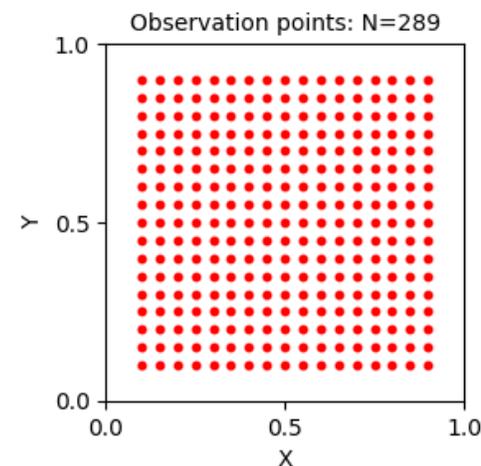
$$L_{PDE} = L_{NS} + L_{continuity}$$

$$L_{total} = L_{PDE} + 100L_{BC} + 10L_{data}$$

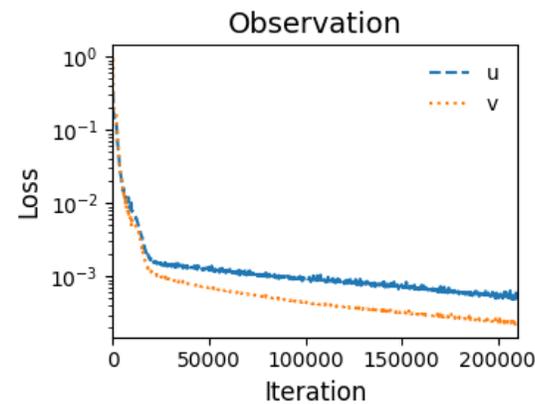
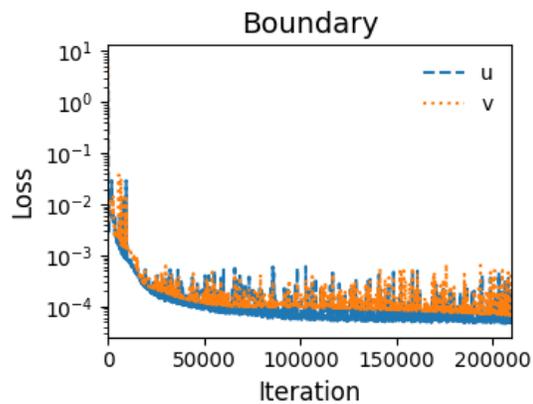
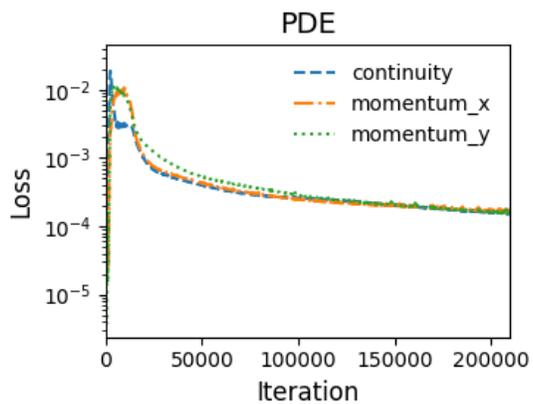
PINNsによる2Dキャビティ流れの推定



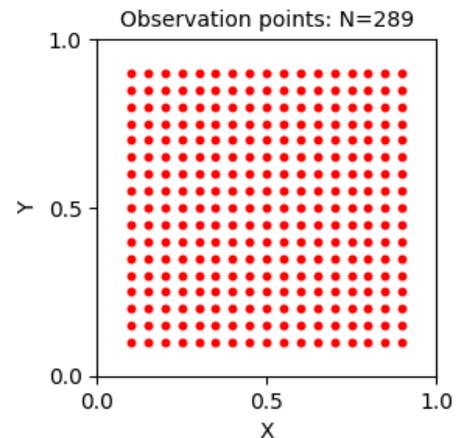
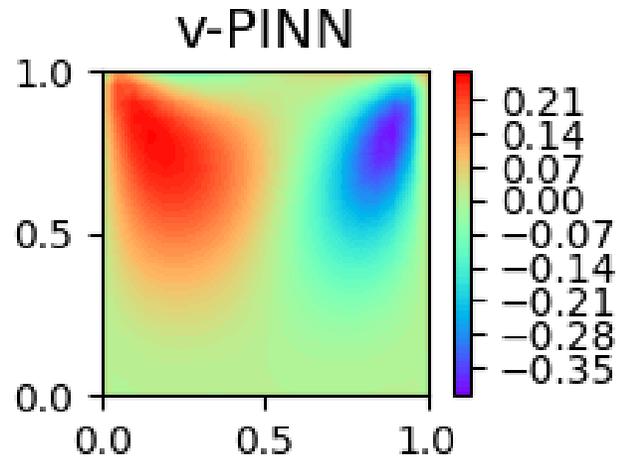
使用した学習データ
(速度のみ)



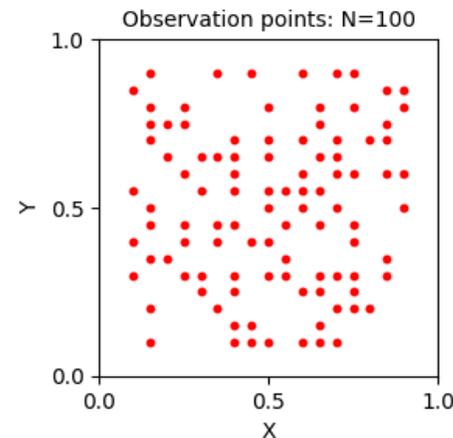
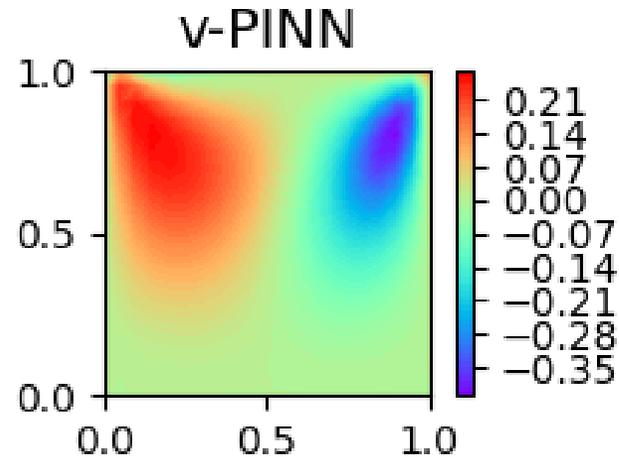
学習に対する誤差の推移



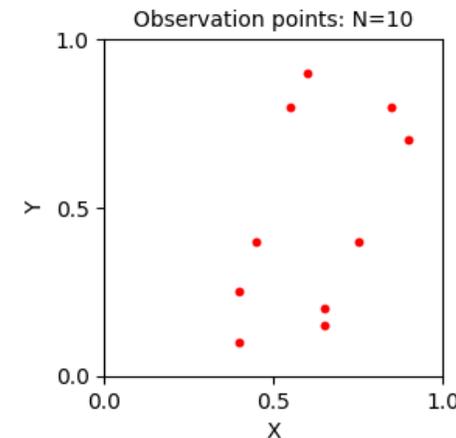
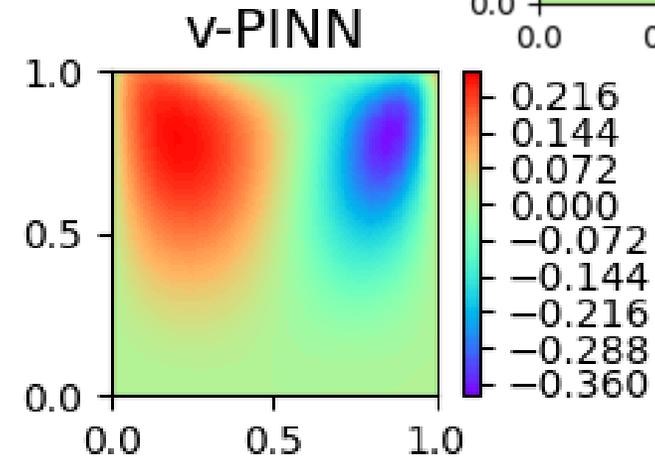
学習データ数による推定精度の影響



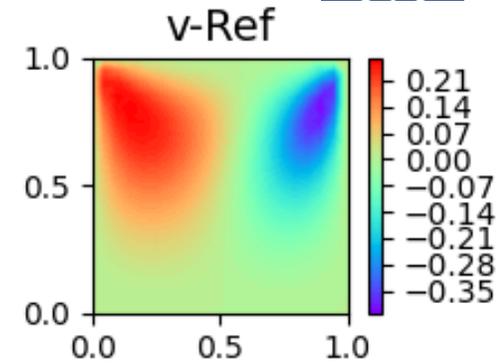
$N_{\text{obs}} = 289$
 $T_{\text{train}} = 964 \text{ s}$



$N_{\text{obs}} = 100$
 $T_{\text{train}} = 777 \text{ s}$

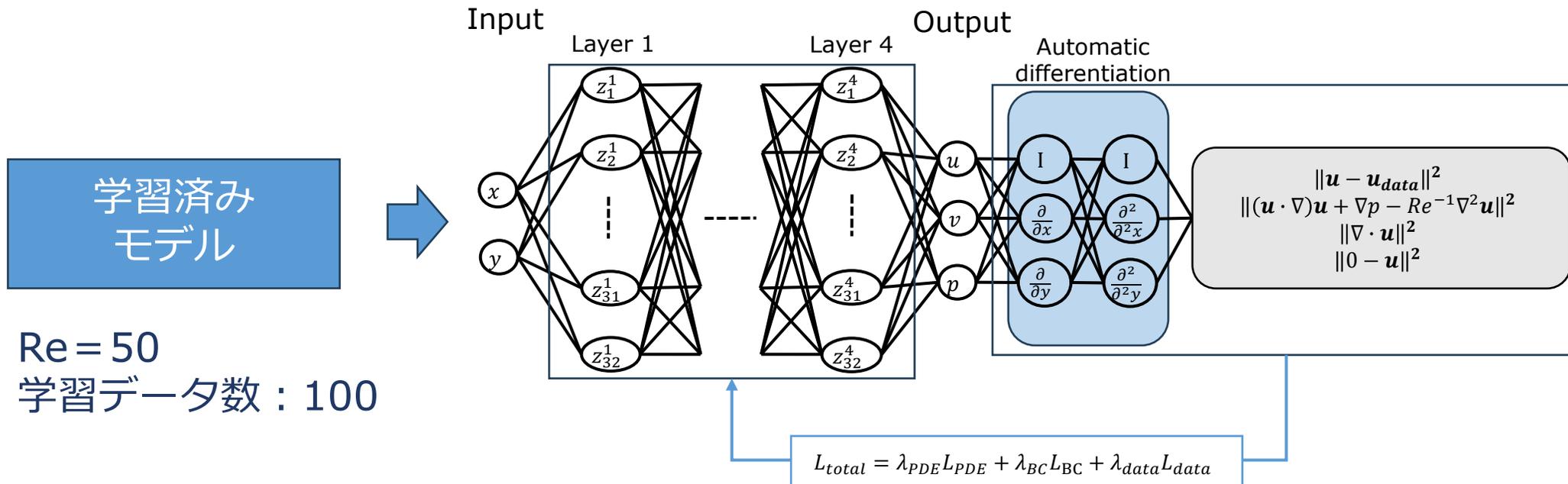


$N_{\text{obs}} = 10$
 $T_{\text{train}} = 640 \text{ s}$



T_{train} : 学習時間
 N_{obs} : 学習データ数

学習済みモデルを使用した学習



ネットワーク

- 全結合ニューラルネットワーク
- 入力層 : 1 (幅2)
- 隠れ層 : 4 (幅32)
- 出力層 : 1 (幅3)
- 初期化 : Glorot uniform
- 活性化関数 : $\tanh x$
- 最適化関数 : adam
- 学習率 : 10^{-4}

使用した評価点

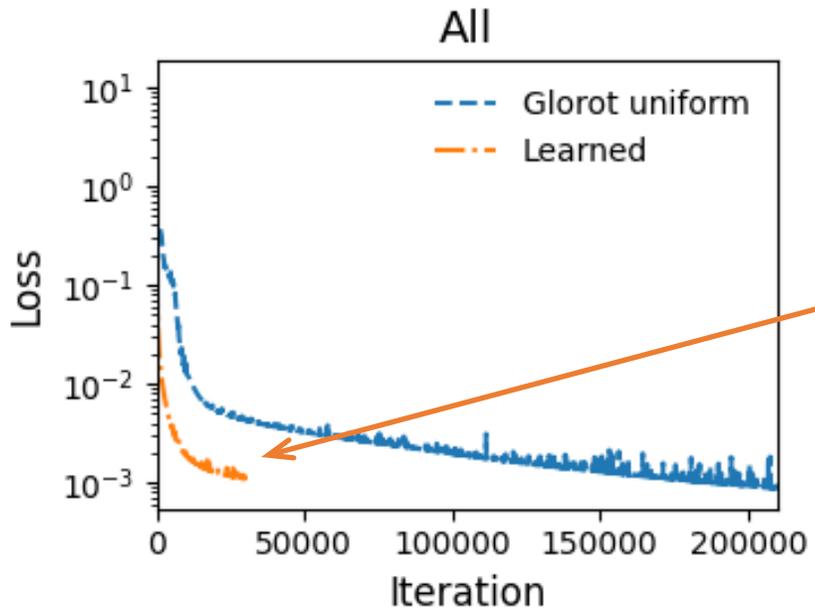
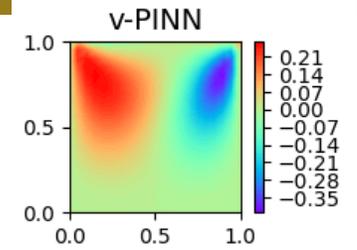
- PDE評価点数 : 500
- BC評価点数 : 74

学習データ

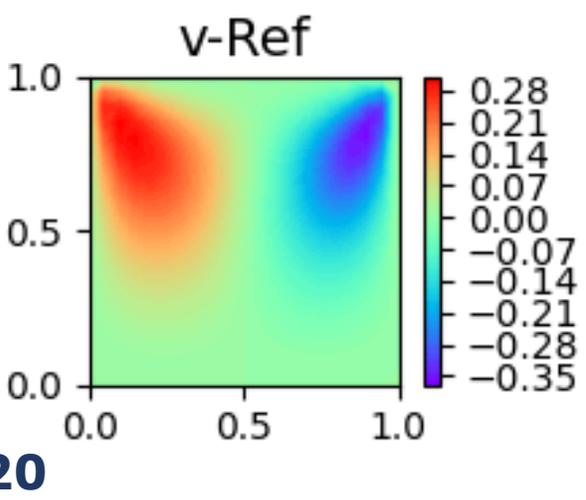
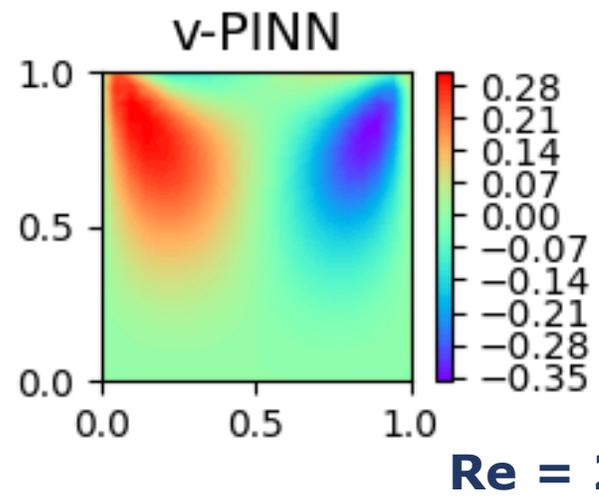
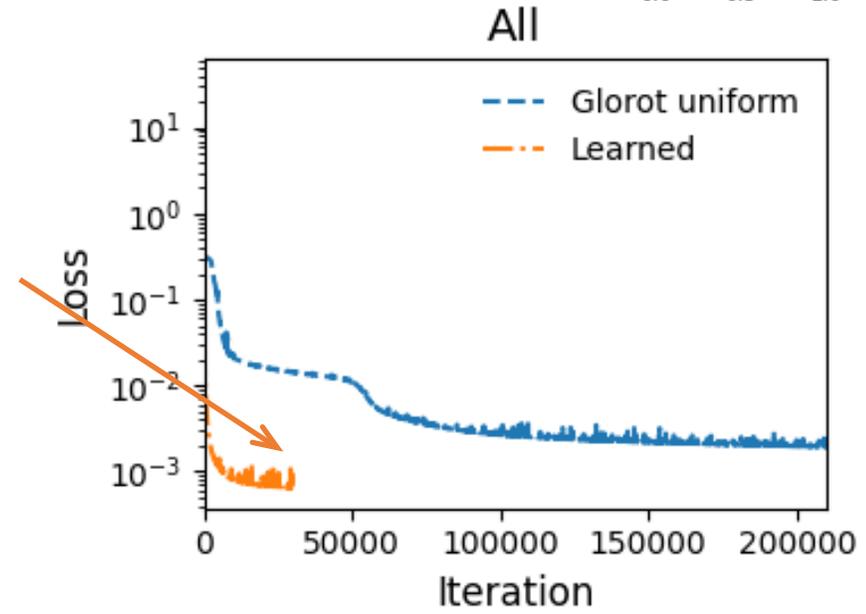
- Re = 20, 100
- 学習点数 : 100
- 学習済みモデルの初期値を利用

学習済みモデルの利用による結果

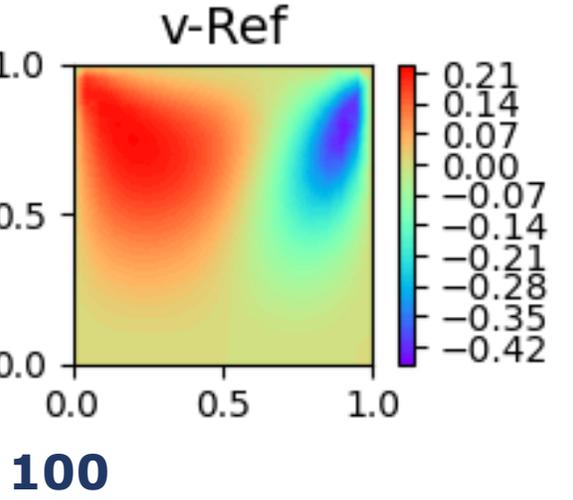
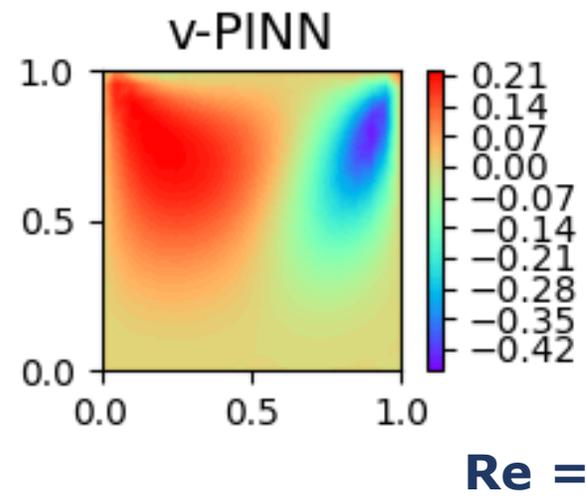
学習済みネットワーク
Re = 50, $N_{\text{obs}} = 100$



学習済みNNを他の学習の初期NNとして用いることで収束性が大幅向上

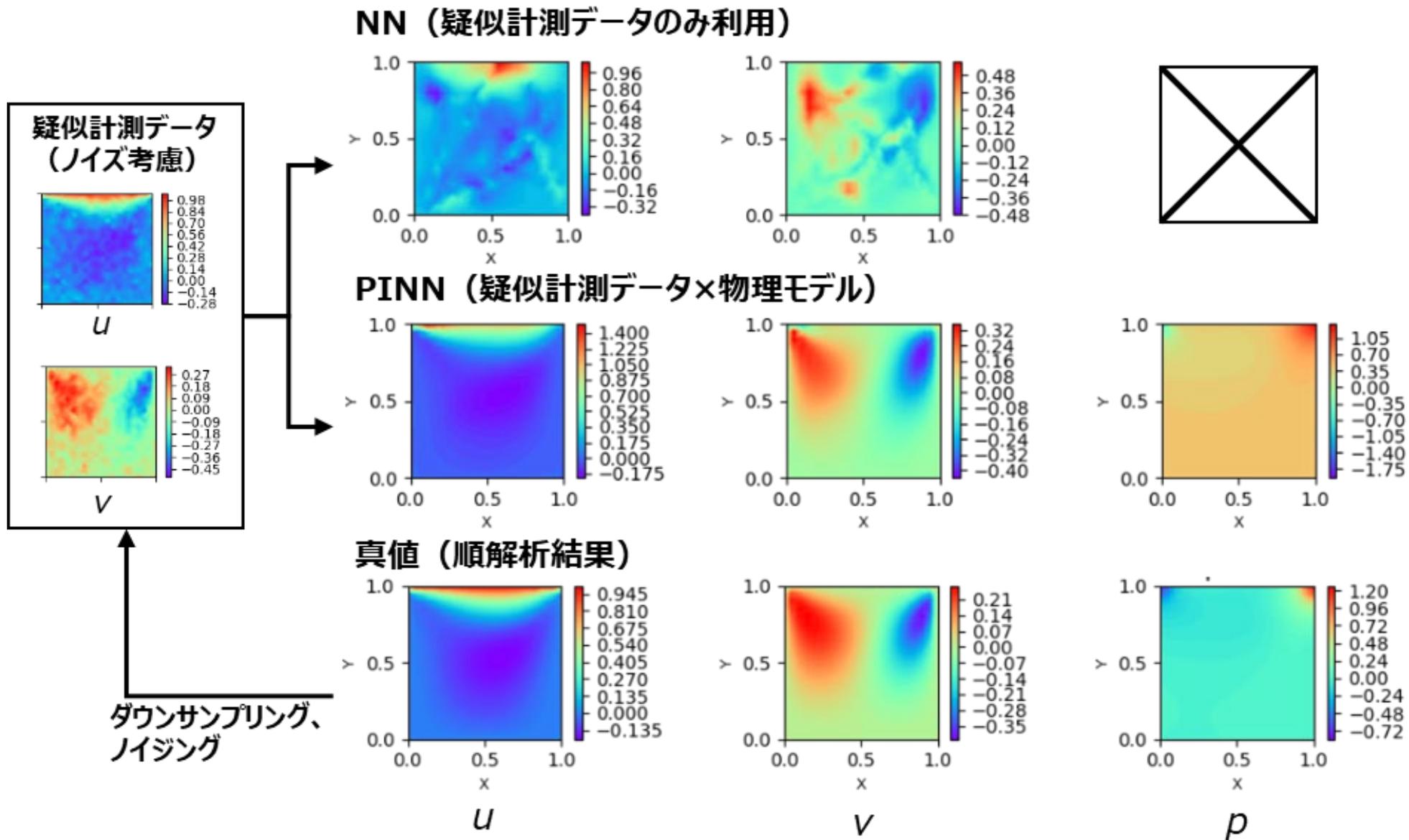


Re = 20



Re = 100

データノイズに対するロバスト性



キャビティ流れ問題を対象としたPINNsによる流れ推定

- PINNsによる高精度な推定
- 現実的な学習データ数（計測解像度）での推定
- 学習済みモデルを利用した収束性能の大幅向上
- 計測ノイズに対するロバスト性

⇒患者個別の脳動脈瘤内流れの迅速評価への展開