

Vers une modélisation à grande échelle de la microcirculation cérébrale humaine : approche hybride et calcul haute performance

M. Peyrounette^a, Y. Davit^a, M. Quintard^a, S. Lorthois^a

^aInstitut de Mécanique des Fluides de Toulouse (IMFT) - Université de Toulouse, CNRS-INPT-UPS, Toulouse FRANCE

Keywords: microcirculation cérébrale humaine, calcul haute performance, approche hybride

1. Introduction

La microcirculation cérébrale humaine possède une architecture multi-échelle [1] (voir fig.1). À l'échelle mésoscopique, les artères et veines (diamètre : 10 à 100 μm) sont respectivement chargées de l'apport et du drainage sanguin du cortex cérébral. À l'échelle microscopique, les vaisseaux capillaires (diamètre : 4 à 10 μm) relient les vaisseaux artérioveineux entre eux et contrôlent le transfert d'oxygène et de nutriments, indispensables à l'activité neuronale, vers le tissu cérébral.

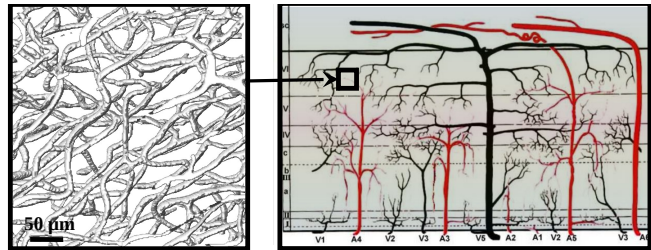


Figure 1: Architecture multi-échelle : à droite, le lit capillaire ; à gauche, le réseau artérioveineux.

L'approche classique de modélisation de l'écoulement sanguin dans la vascularisation cérébrale est une approche réseau 1D [2, 3]. Elle a permis d'obtenir des éléments de compréhension quant au comportement de l'écoulement sanguin cérébral et aux mécanismes de régulation de son débit [5]. Néanmoins, la densité du lit capillaire et son architecture complexe représentent un obstacle numérique à l'étude de réseaux de taille importante, en particulier dans la perspective de l'étude des transferts de masse (nutriments et oxygène) [2].

Dans le cadre de l'E.R.C Consolidator BrainMicroFlow #615102, nous développons une approche hybride réseau/milieu continu afin de pallier les difficultés d'ordre numérique. Cette approche est implémentée dans un code basé sur des concepts de programmation modernes (e.g. procédures de tests quotidiens) et conçu dans une optique de calcul haute performance. Un des enjeux majeurs de notre projet est, à terme, de simuler les transports de masse et de quantité de mouvement à l'échelle du cortex humain.

2. Méthode

2.1. Approche hybride

En adéquation avec sa fonction, le lit capillaire possède une structure lui permettant une couverture dense et homogène du tissu cérébral, et ce à partir d'une longueur caractéristique d'environ $\sim 50\mu\text{m}$ [6]. Celui-ci peut donc être assimilé à un milieu poreux dont les caractéristiques effectives sont calculées par un travail d'homogénéisation [7, 8] à partir de données connues ou statistiques.

Les artères et veines possèdent une structure quasi-fractale [6] qui ne respecte pas les contraintes d'échelle liées à la procédure d'homogénéisation et qui reste modélisée par une approche de type réseau. Un modèle de couplage, inspiré du modèle de puits de Peaceman [9], est développé à l'interface entre les deux composantes de modélisation. L'avantage de ce modèle est qu'il constitue un couplage linéaire pouvant être traité par des méthodes classiques d'algèbre linéaire.

2.2. Calcul haute performance

À long terme, des simulations sont envisagées sur un volume correspondant à un cortex humain, soit 700cm^3 environ. Il s'agira alors de travailler avec un réseau artérioveineux composé de ~ 420 millions de nœuds couplé à un milieu continu discrétisé en ~ 88 millions de mailles.

Afin d'atteindre une telle performance, un code C++ est développé dans une optique de calcul haute performance. La librairie PETSc, spécialisée dans la résolution de systèmes linéaires et non linéaires en parallèle, est largement exploitée dans le code que nous développons. Basée sur la norme MPI, elle propose une gestion optimisée des objets vectoriels et matriciels, une série de préconditionneurs et de solveurs de Krylov, ainsi que des outils adaptés à la fois au partitionnement d'une géométrie régulière 3D (milieu continu) et au partitionnement de graphe (réseau).

3. Résultats

3.1. Validation du modèle hybride

Sur un même réseau vasculaire donné (vaisseaux artérioveineux et capillaires), le code que nous avons développé permet de résoudre à la fois le problème direct, pour lequel l'ensemble du système est traité par une approche réseau, et le modèle hybride. Si la version non homogénéisée devient rapidement coûteuse en mémoire et temps de calcul, elle reste utile en tant que référence pour une première validation de l'approche hybride. Nous présentons une comparaison des versions homogénéisée et non-homogénéisée sur un réseau de l'ordre de 1cm^3 , soit environ 600 000 nœuds artérioveineux et 5.4 millions de nœuds capillaires "homogénéisables" en 125 000 mailles de discrétisation volumes fins du milieu continu équivalent.

3.2. Performance de calcul

La parallélisation complète du code, alliée aux capacités de calcul offertes par le supercalculateur EOS du mésocentre de calcul CALMIP (région Midi-Pyrénées), nous permettent successivement de :

- valider notre approche hybride sur des quantités de données synthétiques et/ou anatomiques correspondant à un volume de 1cm^3 ;
- faire des études de "profiling" et de "scaling" afin d'optimiser le code (voir fig.2);
- lancer des simulations sur des quantités de données visant les dizaines voire les centaines de cm^3 et tester les limites de performance du code.

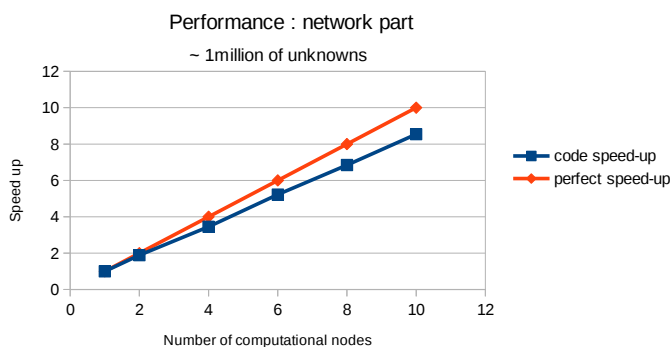


Figure 2: Scaling préliminaire de la partie "réseau de pores".

References

- [1] P. Perdikaris *et al.*, Multiscale modeling and simulation of brain blood flow, *Physics of Fluids (1994-present)*, 28, 021304 (2016).
- [2] J. Reichold *et al.*, Vascular graph model to simulate the cerebral blood flow in realistic vascular networks, *Journal of Cerebral Blood Flow and Metabolism*, 1429-1443 (2009).
- [3] S. Lorthois *et al.*, Simulation study of brain blood flow regulation by intra-cortical arterioles in an anatomically accurate large human vascular network: Part I: Methodology and baseline flow, *NeuroImage*, 54, 1031-1042 (2011).
- [4] S. Lorthois *et al.*, Simulation study of brain blood flow regulation by intra-cortical arterioles in an anatomically accurate large human vascular network: Part II: Flow variations induced by global or localized modifications of arteriolar diameters, *NeuroImage*, 54, 2840-2853 (2011).
- [5] S. Lorthois *et al.*, Simulation study of brain blood flow regulation by intra-cortical arterioles in an anatomically accurate large human vascular network: Part II: Flow variations induced by global or localized modifications of arteriolar diameters, *NeuroImage*, 54, 2840-2853 (2011).
- [6] S. Lorthois and F. Cassot, Fractal analysis ar networks : Insights from morphogenesis, *Journal of Theoretical Biology*, 262, 614-633 (2010).
- [7] M. Quintard and S. Whitaker, *Handbook of Heat Transfer in Porous Media*, 1-52. M.Decker Inc., New York (2000).
- [8] Y. Davit *et al.*, Homogenization via formal multiscale asymptotics and volume averaging: how do the two techniques compare?, *Advances in Water Resources* (2013).
- [9] D. W. Peaceman, Interpretation of Well-Block Pressures in Numerical Reservoir Simulation, *Exxon Production Research Co.* (1978).