

Strömende Bits und Bytes

Zusammenspiel von Höchstleistungsrechnern und Medizin

Respiration is an essential physiological functionality of the human organism and is responsible for supplying the body with oxygen. The nasal cavity takes care of olfaction and degustation, filters fine dust from the air as well as moisturizes and tempers the air. Therefore, it is indispensable in respiration, and a degradation of only one or a few functionalities leads to discomfort or further pathologies. In the profile area Computational Science & Engineering (CompSE), human respiration is analyzed by means of highly-resolved numerical simulations that, due to the large problem sizes, can only be executed on supercomputers. Complaints in nasal respiration, the development of chronic airway diseases, a reduction of olfaction and degustation, particle deposition behavior and filtering mechanisms of the nasal cavity, air conditioning capability, and a fundamental understanding of the physics of human respiration are at the core of the research. The following article gives an overview of the methodologies employed by the group, current results, and the challenges engineers, computer scientists, and medical specialists have to face in the future to reach the goal of personalized medical treatment.

Wie wird heutzutage an der RWTH Aachen das Zusammenspiel von Höchstleistungsrechnern, der Strömungsmechanik und der Informatik zur Beantwortung biofluidmechanischer Fragestellungen aus der Medizin genutzt? Im Fokus stehen die Arbeiten der Sektion Computing des Profilbereichs „Computational Science & Engineering“ (CompSE), die sich mit der Simulation der Luftströmungen in den menschlichen Atemwegen beschäftigen. Die Forschung konzentriert sich hierbei auf Untersuchungen zu Atembeschwerden durch die Nase, auf die Herkunft chronischer Atemwegserkrankungen, das Herrühren verminderten Riech- und Geschmacksvermögens, auf das Ablagerungsverhalten von Feinstaubpartikeln und die Filterfunktion der Nase, Lufterwärmung und -befeuchtung sowie auf die fundamentale Physik der Atmung. Ziel ist es, ein besseres Verständnis der menschlichen Atmung zu bekommen, um mögliche Erkrankungen patientenindividuell zu untersuchen und die Operationsplanung zu verbessern. Zur Simulation wird ein Strömungslöser verwendet, der zusammen mit dem Aerodynamischen Institut entwickelt wird. Er ist hochskalierbar und effizient auf Höchstleistungsrechnern lauffähig. Als Eingabe dient dem

Verfahren ein medizinischer Computertomographie-Datensatz (CT) eines Patienten, der dreidimensionale Informationen über Luft, Gewebe und Knochen direkt aus dem Inneren des Patienten enthält. Die verschiedenen Materialien lassen sich über ihren Hounsfield-Wert (HU), welcher prinzipiell das Röntgenabschwächungsverhältnis von Gewebe zu Wasser beschreibt, identifizieren. Aus solch einem Datensatz wird mittels Algorithmen das Luftvolumen extrahiert und ein Oberflächennetz erzeugt. Die betrachteten Geometrien reichen hinunter bis zur zwölften Lungengeneration, an der sich die terminalen Bronchiolen befinden und dienen als Grundlage zur Erzeugung von Rechengittern. Entwickelt wurde eine effiziente Methode, die eine sehr hohe räumliche Auflösung erlaubt und Gitter innerhalb kurzer Zeit parallel auf sehr vielen Prozessen erzeugen kann. Die einzelnen Elemente des Gitters bestehen aus Würfeln und haben eine Kantenlänge im Submillimeterbereich, um möglichst alle Strömungsphänomene aufzulösen. In der Regel sind etwa eine Milliarde Gitterelemente nötig, um zum Beispiel einen Datensatz bestehend aus dem gesamten Atemtrakt zu vernetzen.

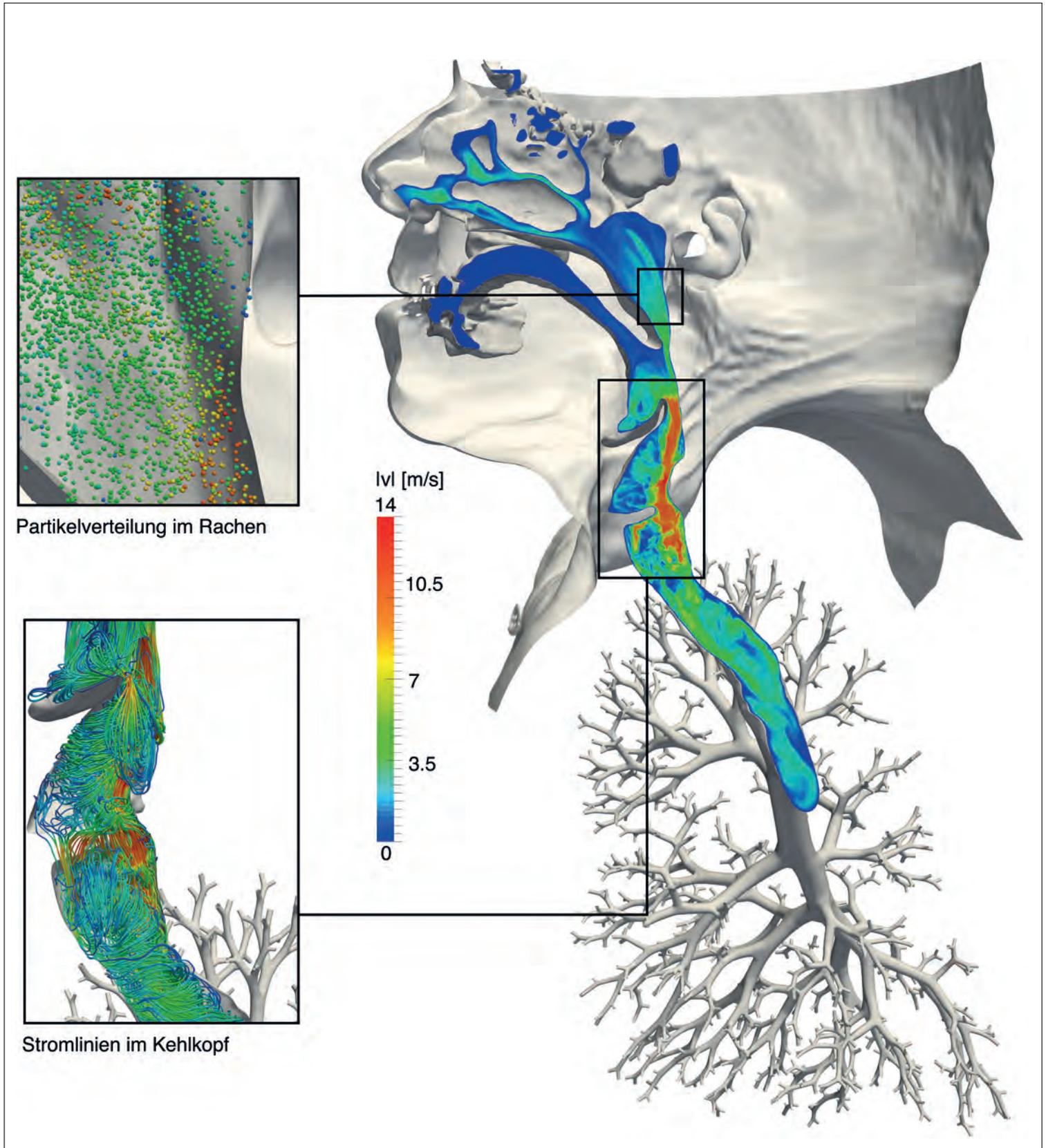


Bild 1: Luft- und Partikelströmung in den menschlichen Atemwegen. Farblich dargestellt ist der Geschwindigkeitsbetrag.



Bild 2: Von hohem Interesse ist das Verhalten von Feinstaubpartikeln in den menschlichen Atemwegen bei der Inspiration. Insbesondere lässt sich mittels Simulationen der Filtermechanismus der Nase sowie das Depositionsverhalten unterschiedlicher Partikel in der Luftröhre und der Lunge charakterisieren.

Foto: Peter Winandy



LBM velocity mag.

0.194

0.146

0.0970

0.0485

Um eine Strömung einzuleiten, muss bei der Einatmung an den Enden der Lungenäste der Druck abgesenkt werden. Darüber hinaus ist die Haftbedingung an festen Wänden zu erfüllen. Sind diese Voraussetzungen gegeben, kann das Problem auf die Anzahl der zur Verfügung stehenden Prozessoren verteilt werden und die Simulation beginnen. Zur Auswertung der Simulationsdaten werden entweder in bestimmten Zeitintervallen die Lösungen auf die Festplatte geschrieben oder direkt während der Laufzeit Analysen betrieben. Ersteres wird durch die stetig steigenden Simulationsanforderungen zunehmend unpraktikabel, da immense Datenmengen von der Größenordnung von mehreren hundert Terabyte (1.024 GB) bis zu Petabyte (1.048.576 GB) geschrieben werden müssen. Daher geht der Trend immer mehr zur so genannten „in-situ“-Analyse der Strömungsdaten zur Laufzeit der Simulation. Auch Visualisierungen lassen sich so durch Kopplung des Strömungslösers an einer am Jülicher Supercomputing Centre entwickelten „in-situ“-Bibliothek direkt während der Simulation realisieren.

Ein wichtiges Kriterium für die Analyse der Nasenatmung ist der Druckverlust von den

Nasenlöchern bis hin zum Rachen. Er ist ein Maß für die Energie, die nötig ist, um einzuatmen. Mit Hilfe von Simulationen lässt sich so patientenindividuell die Effektivität einer Nase aus strömungsmechanischer Sicht beurteilen, um Problemstellen und mögliche Orte für eine Operation zu lokalisieren. Zusätzlich lassen sich solche Aussagen durch die Analyse lokal erhöht auftretender Schubspannungen an der Schleimhautoberfläche erhärten. Sie können je nach Stärke zu Irritationen oder Entzündungen führen. Die Temperatur im Rachenbereich sollte im gesunden Menschen bereits Körpertemperatur erreicht haben. Ist dies nicht der Fall, ist der Wärmetransport vom Gewebe in die Luft, zum Beispiel durch eine geringere Oberfläche in der Nase, vermindert. Mehrfache Operationen der Nasenmuschel führen nicht selten zum so genannten Empty-Nose-Syndrom, welches eine Reduktion der Oberfläche zur Folge hat und schlussendlich das Erwärmungsverhalten und die damit gekoppelte Befeuchtung der Luft reduziert. Ein verminderter Riech- beziehungsweise Geschmackssinn rührt derweil von einer falschen Luftführung innerhalb der Nase. Die Luft wird dann schlichtweg nicht am im

oberen Bereich der Nase nahe des Gehirns befindlichen Riechepithel vorbeigeleitet. Zur Analyse der Verteilung der Strömung in der Nase verwenden die Forscher Stromlinienvisualisierungen. So lassen sich auch lokale Beschleunigungen und verengte Strömungskanäle identifizieren.

Wichtig ist darüber hinaus, ob eine Strömung laminar oder turbulent ist, also einen gleichmäßigen oder chaotischen Charakter entwickelt. Turbulente Strömungen tendieren einerseits dazu, die Vermischung von Fluiden zu verbessern, andererseits, infolge von erhöhter Schubspannung an der Geweboberfläche, das Einatmen zu erschweren. Ein Übergang von laminarer zu turbulenter Strömung findet sich auch im Bereich des Kehlkopfs, der bei der Einatmung einen Strömungsstrahl in Richtung Luftröhre erzeugt, welcher sich, abhängig von der Atemintensität, hinunter zur primären Lungenbifurkation wieder laminarisiert.

Betrachtet man zusätzlich Feinstaubpartikel, welche in der Regel eine Größe von 2,5 bis 10 Mikrometer haben, werden diese auf Grund ihrer Größe und ihres geringen Gewichtes im einfachsten Fall mit der Strömung transportiert. Abhängig von lokalen Strö-

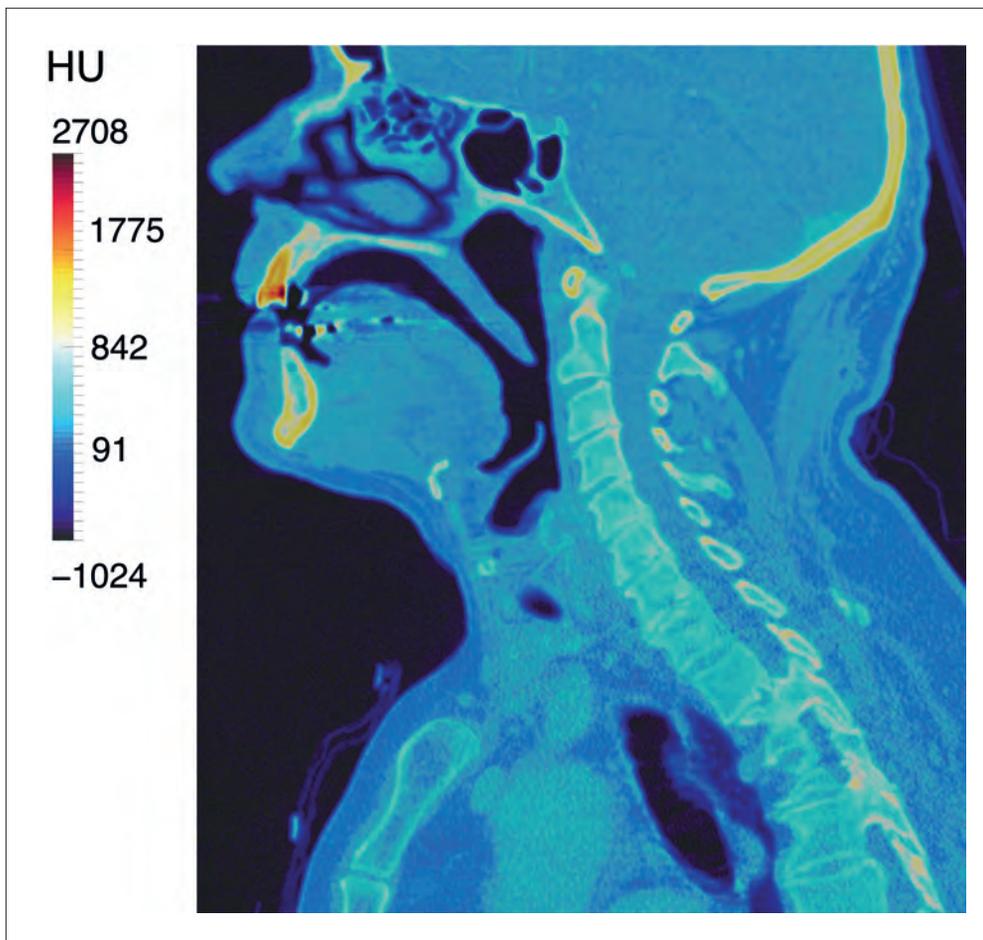


Bild 3: Koronaler Querschnitt einer Computertomographieaufnahme. Farblich dargestellt ist das Verhältnis der Röntgenabschwächungskoeffizienten von Gewebe zu Wasser in Hounsfield-Einheiten.

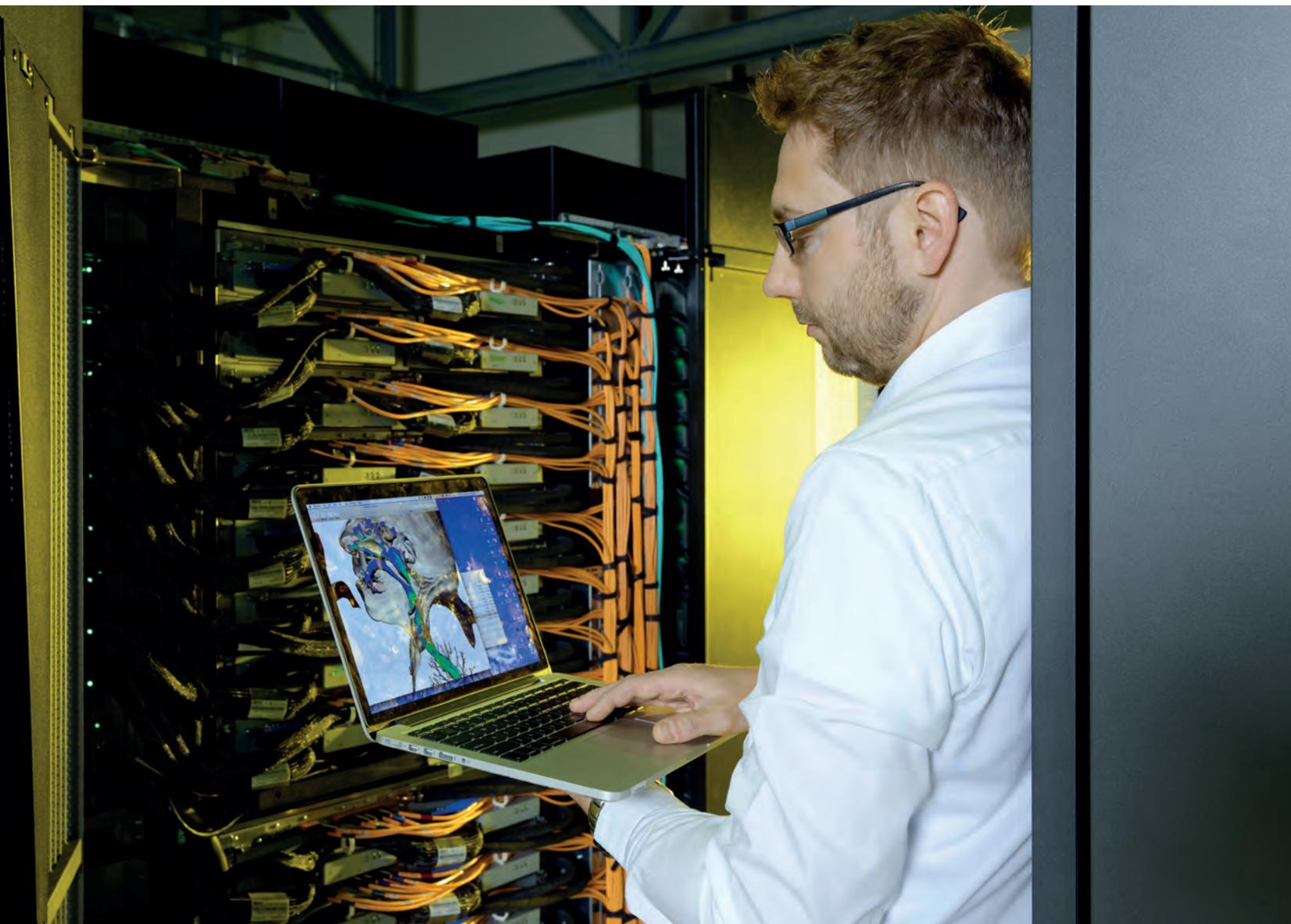


Bild 4: Die vielen Rechenknoten der JUQUEEN sind über ein großes Netzwerk miteinander verbunden, welches es der parallelen Simulation erlaubt, höchst effizient Daten zwischen den einzelnen Recheneinheiten auszutauschen.

Foto: Peter Winandy

mungsphänomenen, wie beispielsweise dem Strömungsstrahl im Kehlkopf oder beschleunigter Strömung in der menschlichen Nase, können sie durch ihre Trägheit gegen das Gewebe transportiert werden und sich dort ablagern. In der Nase ist ein solcher Effekt gewünscht und erfüllt eine Filterfunktion. In der Lunge lagern sich solche Partikel hauptsächlich an Bifurkationen ab, also in Regionen, wo sich die Lungenäste teilen. Sie können dort je nach gelöstem Toxid Erkrankungen wie Husten, Bronchitis oder – wenn man Diesel- und Kohleaerosole betrachtet – sogar Krebs erzeugen. Eine große Anzahl solcher Partikel passiert die Nase und dringt in tiefere Lungengenerationen vor. Eine typische Anzahl an Prozessoren für solche Simulationen beläuft sich auf 16.000 bis 64.000. Das Jülicher Supercomputing

Centre am Forschungszentrum Jülich betreibt zu Forschungszwecken das IBM BlueGene/Q System JUQUEEN. Es besteht aus 28.672 Prozessoren mit jeweils 16 Kernen. Die Gesamtzahl der Recheneinheiten beläuft sich somit auf 458.752. Die Simulation des Atemvorgangs auf 16.000 solcher Kerne dauert je nach Gitterauflösung und zu betrachtender physikalischer Zeit etwa 24 Stunden. Die Berücksichtigung zusätzlicher physikalischer Vorgänge in solchen Simulationen und die Anforderungen an immer höhere zeitliche und räumliche Genauigkeit bedingt immer größere Rechenkapazitäten. Die Lösung hierzu bieten aktuelle Entwicklungen im Bereich des High Performance Computing (HPC). Heutige HPC-Systeme haben die Rechenleistung hunderttausender einzelner Computer und ermöglichen theoretisch das Lösen großer

Strömungsprobleme. Hierzu müssen die Algorithmen zur Lösung der Erhaltungsgleichungen der Strömungsmechanik neu formuliert werden, so dass viele Prozessoren gleichzeitig das Problem parallel bearbeiten können.

Eine Parallelisierung unterteilt das Gesamtproblem in die Anzahl der zur Verfügung stehenden Prozesse, sodass jede Einheit ein Teilproblem löst. Allerdings besteht eine Informationsabhängigkeit zwischen diesen Prozessen, die einen Austausch über das Netzwerk des HPC-Systems bedingen. Zusätzlich muss die Einzelprozessperformanz ebenfalls sehr hoch sein und die Unterteilung des Strömungsgebietes so gewählt werden, dass teure Kommunikation reduziert wird. Je mehr Prozesse man verwendet, desto kleiner werden zwar die Teilprobleme, allerdings



Bild 5: Nur mit Hilfe des Höchstleistungsrechners JUQUEEN des Forschungszentrums Jülich und ihrer 458.752 Rechenkerne kann Dr. Andreas Lintermann die komplexen Strömungsvorgänge in den menschlichen Atemwegen simulieren. Die dabei entstehenden enormen Datenmengen lassen sich nur mit solch spezialisierten Systemen auswerten.
Foto: Peter Winandy



Blue Gene supercomputer



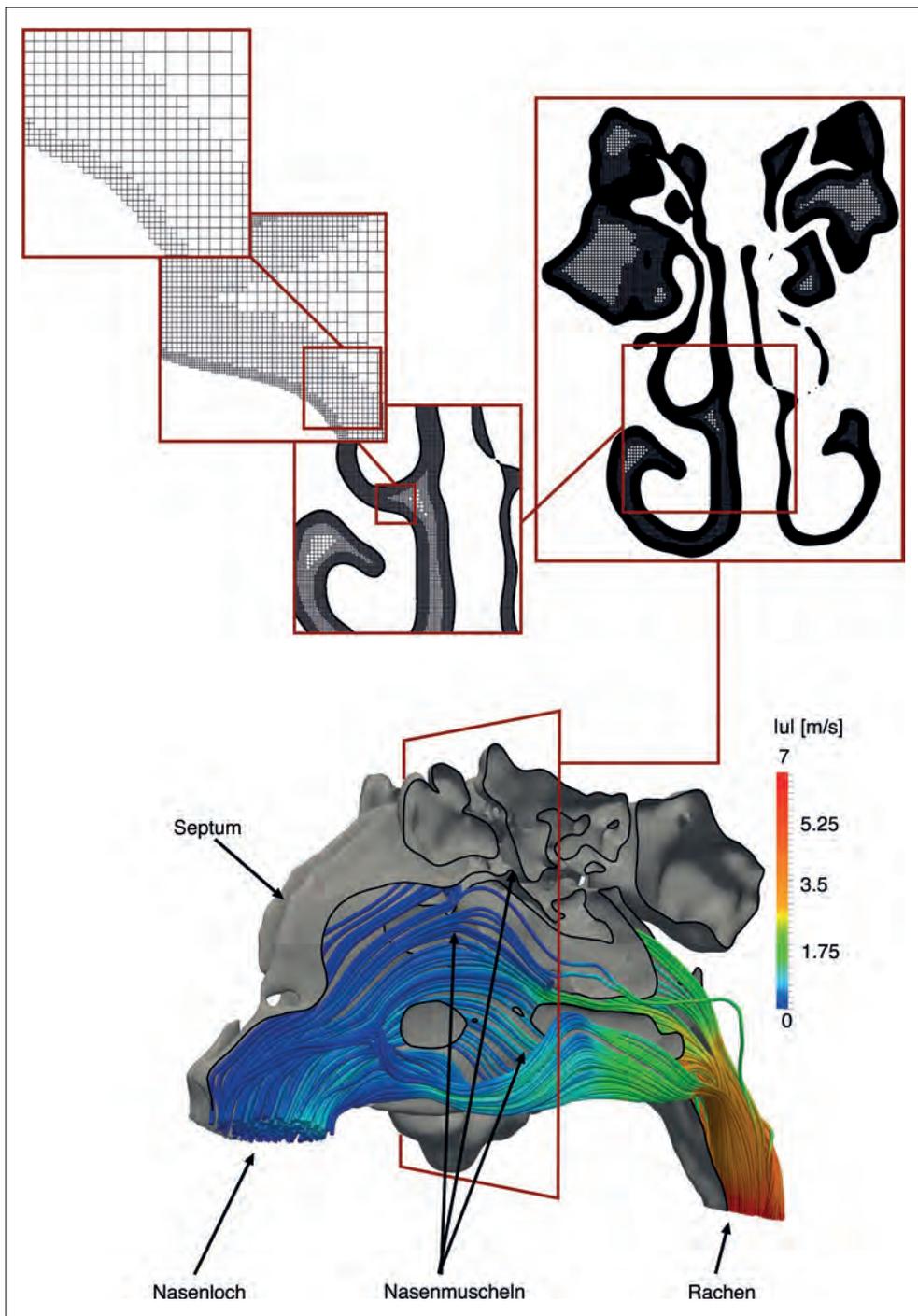


Bild 6: Randverfeinertes Rechengitter (oben) einer menschlichen Nasenhöhlengeometrie (unten) bestehend aus $1,8 \cdot 10^9$ Rechenzellen. Dargestellt ist jeweils nur jede zweite Gitterlinie. Des Weiteren sind in der unteren Darstellung Stromlinien farblich mit dem Geschwindigkeitsbetrag unterlegt.

wächst auch die Kommunikation zwischen den Recheneinheiten immens und nimmt bei immer weiter steigenden Prozessorzahlen überhand. Dieser Flaschenhals ist nur durch Überlappung von Kommunikation und Rechnen überwindbar, was im optimalen Fall zu einem hochskalierenden Code führt, welcher kontinuierlich bei Verdopplung der Prozessorzahlen seine Laufzeit halbiert.

Der Trend im HPC geht zu immer inhomogeneren Systemen, die nicht nur aus einzelnen Prozessoren mit mehreren Recheneinheiten bestehen, sondern auch um Beschleunigerkarten – das können Grafikkarten oder spezielle, für HPC-Anwendungen entwickelte Beschleuniger sein – erweitert werden. Dies bedingt die Entwicklung neuer algorithmischer Konzepte, um solche neuen Rechenressourcen auszunutzen. Eine Parallelisierung erstreckt sich demnach nicht mehr nur über die Prozessorebene, sondern bezieht die einzelnen Kerne eines Prozessors und eine Auslagerung auf Beschleunigerkarten – immer mit Blick auf Reduzierung von Kommunikation und effizienter Ausführung – mit ein.

Die Berechnung der dreidimensionalen, zeitabhängigen Strömungsfelder ist erst durch numerische Simulationen ermöglicht worden und der Wissenshorizont und die Möglichkeiten, die sich durch diese ergeben, sind bei Weitem noch nicht ausgeschöpft. In Zukunft wird nicht nur die Strömung, sondern auch die Interaktion mit dem Gewebe mittels Simulationen modellierbar sein. Operationsplanungen werden durch Formoptimierungsalgorithmen unterstützt, die patientenindividuell dem Operateur eine Gewebeform vorschlagen, die die Eigenschaft der Atmung im Hinblick auf die wichtigen Funktionen optimiert. Neue Rechnerarchitekturen und erhöhte Rechenleistung, neue optimierte Simulationswerkzeuge und verbesserte Analysemethoden werden ein eingehendes Verständnis der menschlichen Atmung liefern können und das Gesundheitssystem individualisieren.

Autor

Dr.-Ing. Andreas Lintermann ist Gruppenleiter der Sektion Computing im Profilbereich Computational Science Engineering (CompSE) und des Simulation Laboratory Highly Scalable Fluids & Solids Engineering, JARA-HPC.