

Εφαρμογές υπολογιστικής επιστήμης σε θέματα που άπτονται της ιατρικής

Ευθύμιος Καξίρας

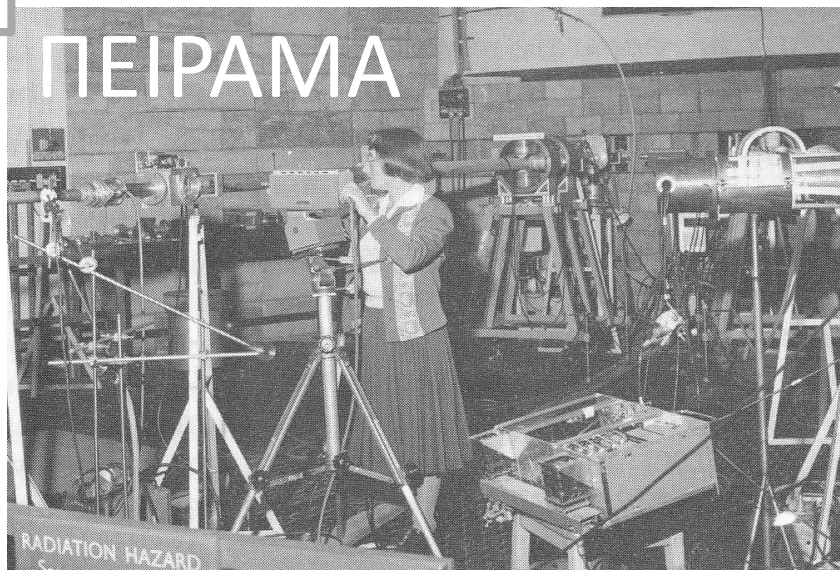
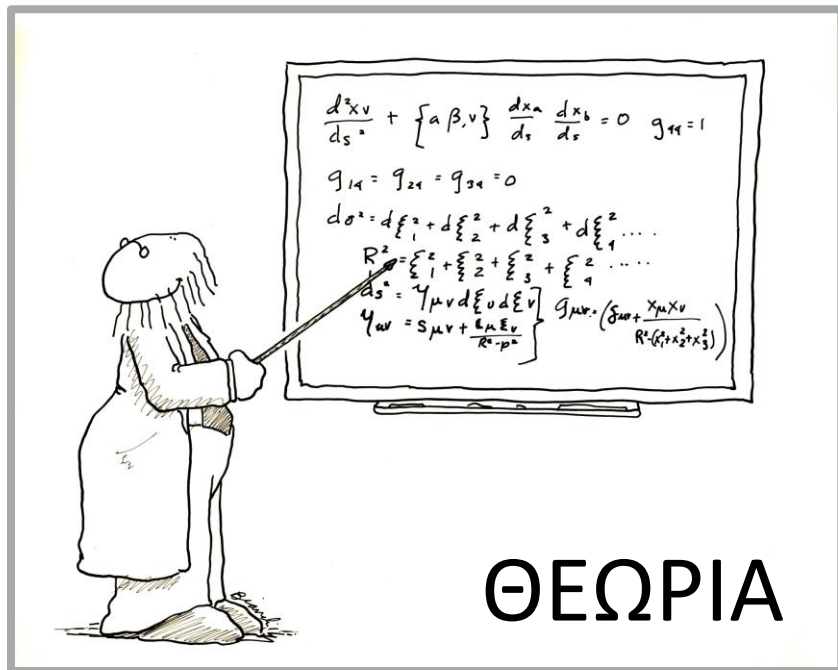
John Hasbrouck Van Vleck Professor of Pure and Applied Physics
Department of Physics and School of Engineering and Applied Science
Harvard University

The banner features the logo of the Hellenic Society of Nephrology on the left, which includes a stylized kidney and the text 'HELLENIC SOCIETY OF NEPHROLOGY' and 'ΕΛΛΗΝΙΚΗ ΝΕΦΡΟΛΟΓΙΚΗ ΕΤΑΙΡΕΙΑ'. To the right of the logo, the text 'HELLENIC SOCIETY OF NEPHROLOGY' and 'ΕΛΛΗΝΙΚΗ ΝΕΦΡΟΛΟΓΙΚΗ ΕΤΑΙΡΕΙΑ' is repeated. The main text of the banner reads '25th Hellenic Congress of NEPHROLOGY' in large, bold, teal letters. Below this, the dates 'JUNE, 19-21 2024' are displayed in teal. At the bottom, the venue information 'MEGARON ATHENS CONCERT HALL INTERNATIONAL CONFERENCE CENTRE - ATHENS, GREECE' is written in teal. The background of the banner is light blue and green, with a stylized illustration of a kidney and its associated blood vessels on the right side.

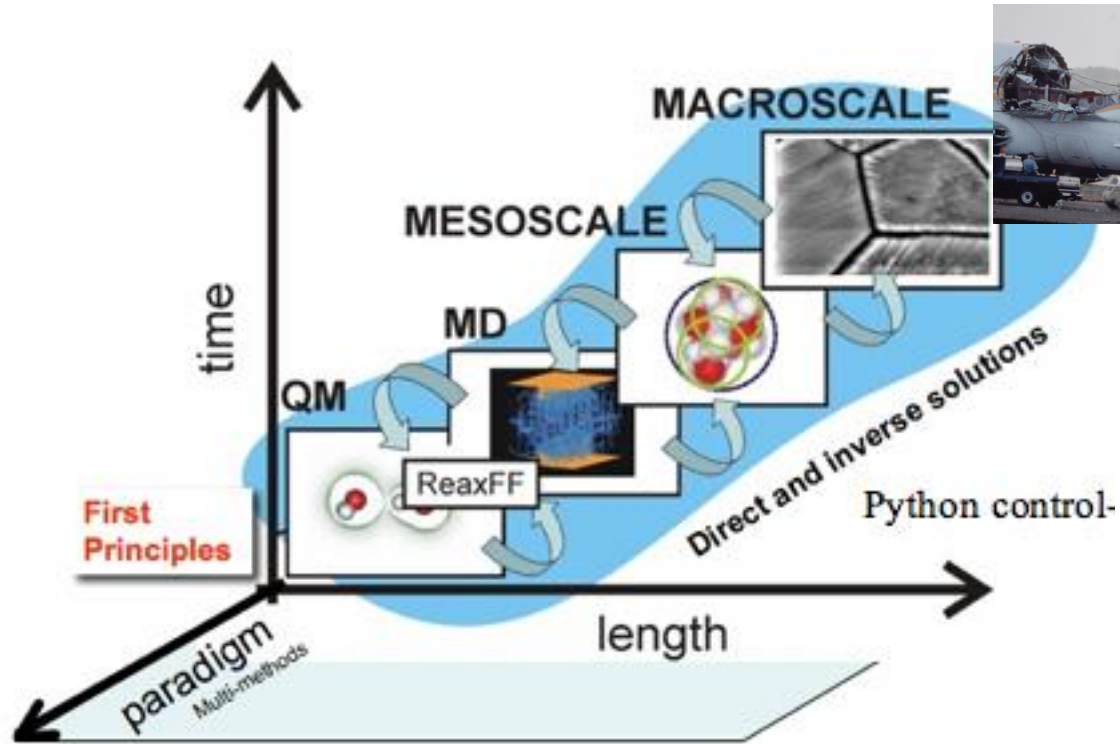
Το ‘‘τι;’’
... και το ‘‘γιατί;’’

Θεωρητική & υπολογιστική φυσική
πολύπλοκων συστημάτων

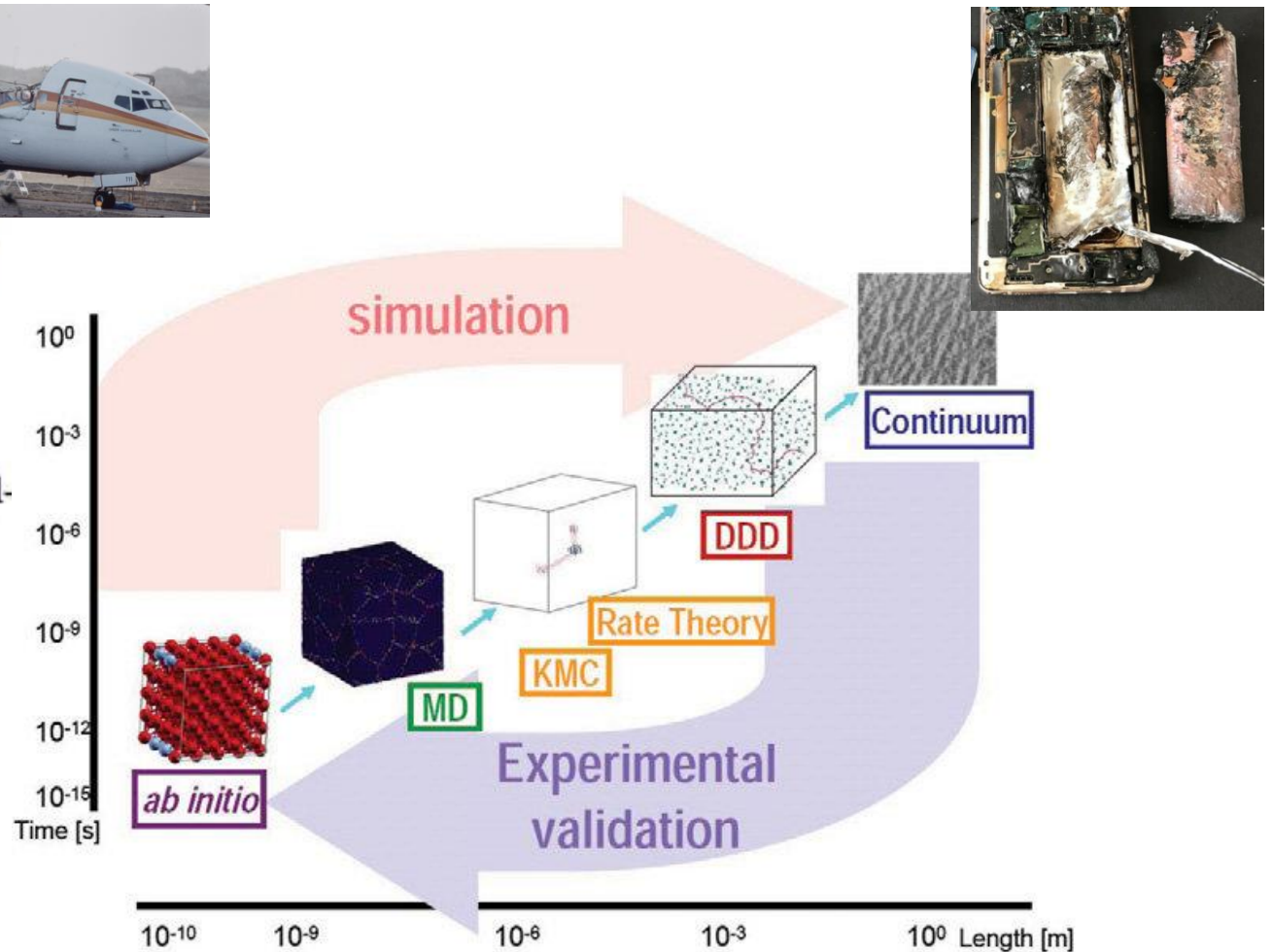
Παραδοσιακές μέθοδοι Φυσικής Επιστήμης



Προσομοιώσεις σε πολλαπλές κλίμακες για κατανόηση πολύπλοκων (σύνθετων) συστημάτων, στερεά & υγρά



W. A. Goddard III, et al. (Caltech)

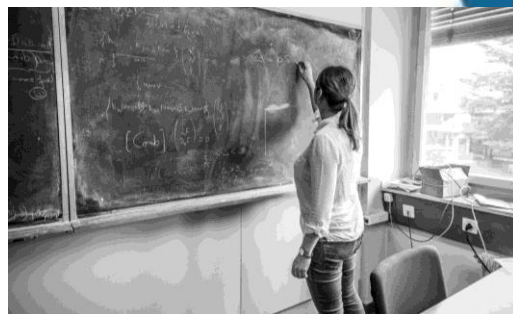


M. Samaras, M. Victoria (Materials Today, 2008)

Μοντελοποίηση από πρώτες “αρχές”

Σύγχρονη προσέγγιση της Φυσικής Επιστήμης

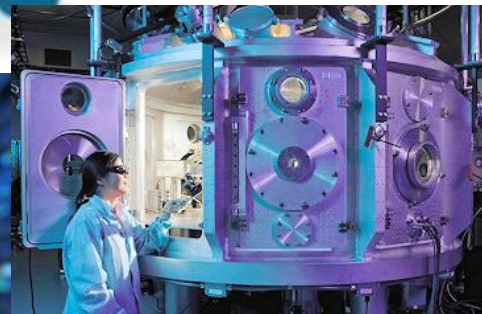
ΓΝΩΣΗ



ΘΕΩΡΙΑ

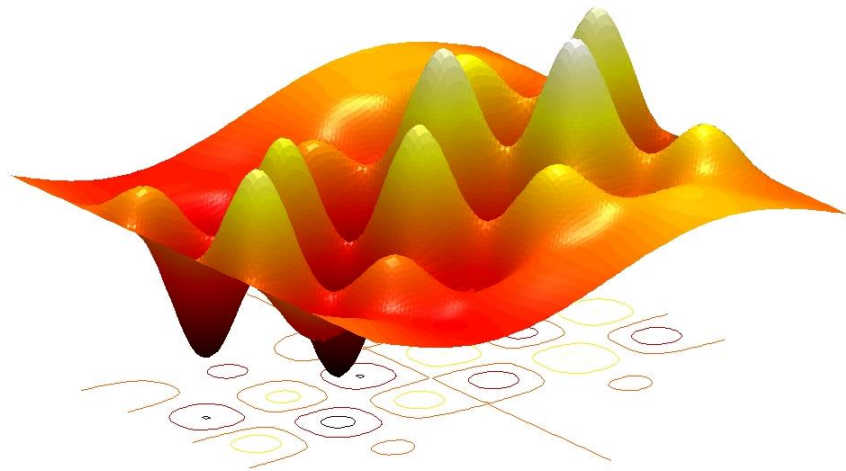


ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΙ



ΠΕΙΡΑΜΑ

Υπολογιστική Φυσική: ... ένα πετυχημένο “πάντρεμα”



+



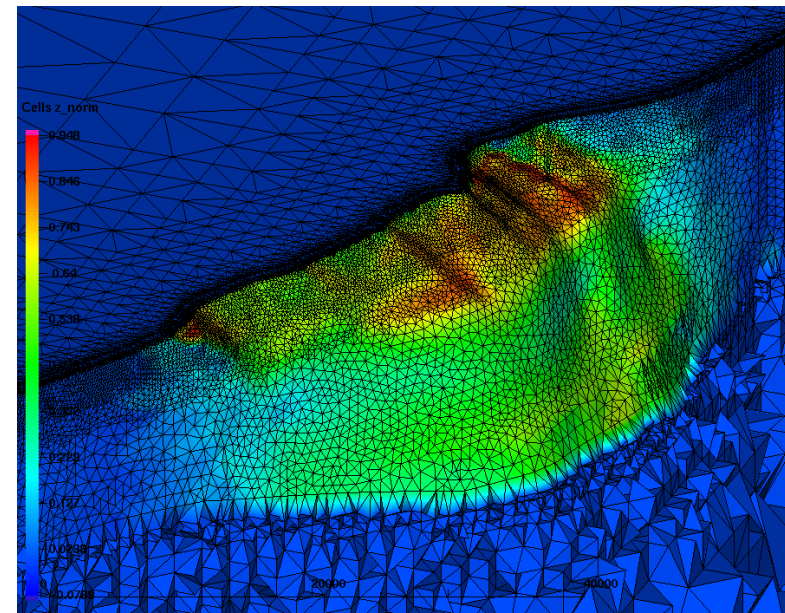
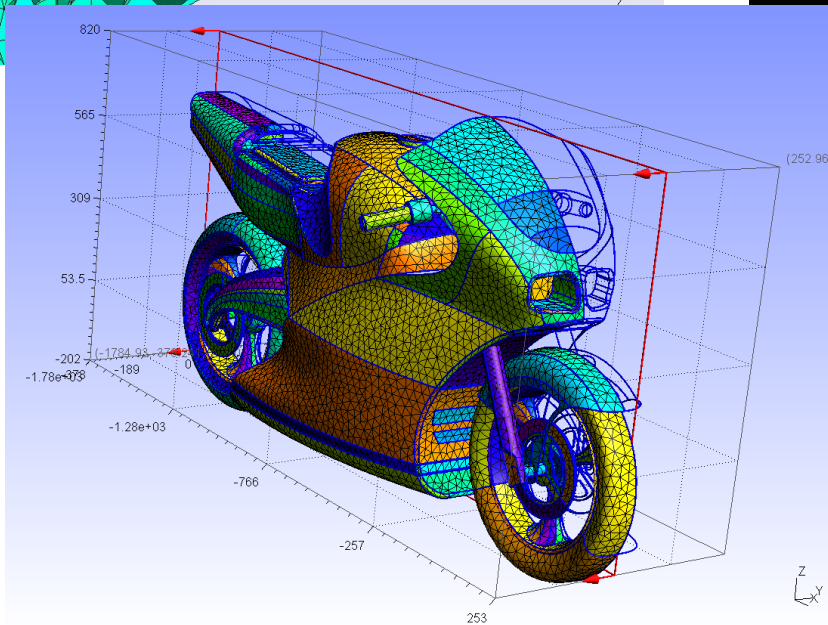
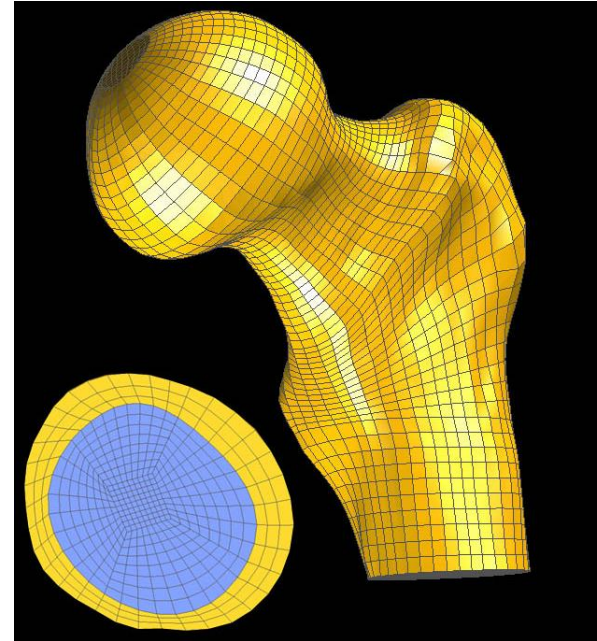
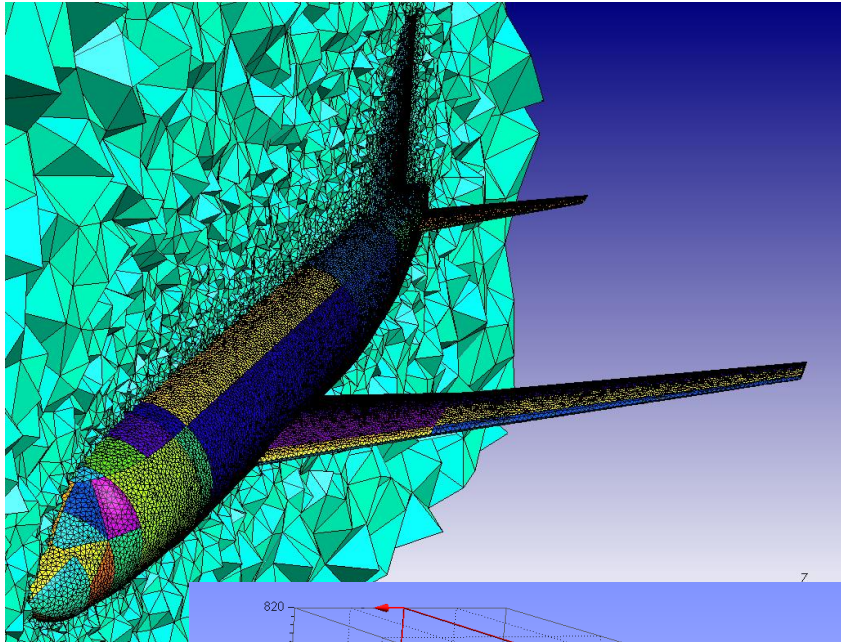
Εφαρμοσμένα μαθηματικά

Εξισώσεις, θεωρήματα,
αριθμητικές μέθοδοι, ...

Επιστήμη υπολογιστών

hardware, software, υπολογιστικοί
αλγόριθμοι, ...

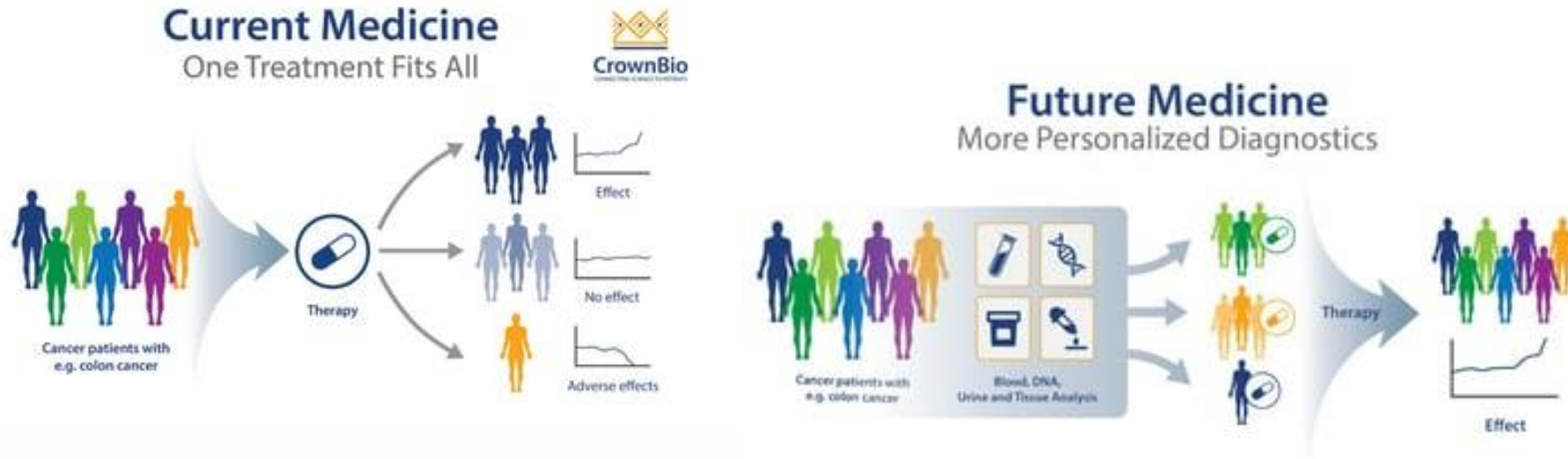
Υπολογιστικά μοντέλα: κυριαρχούν σε πολλές εφαρμογές



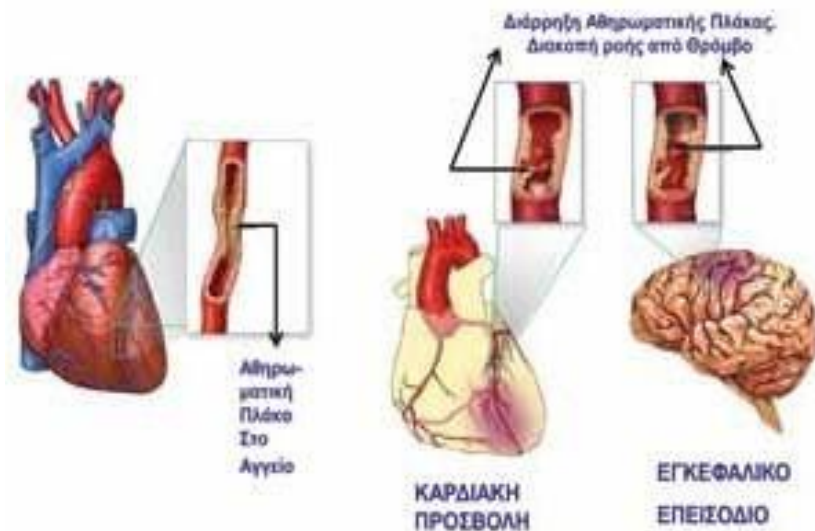
The country that
out-*computes*
will be the one that
out-*competes*.

Εθνικό Συμβούλιο Ανταγωνιστικότητας. ΗΠΑ, 2004

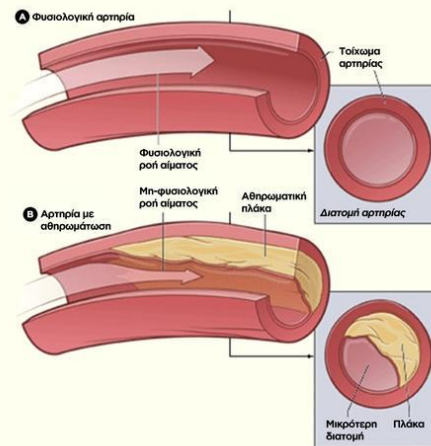
Εφαρμογές υπολογιστικής επιστήμης σε εξατομικευμένη ιατρική



ΑΡΤΗΡΙΟΣΚΛΗΡΩΣΗ ΚΑΙ ΚΑΡΔΙΟΑΓΓΕΙΑΚΕΣ ΑΣΘΕΝΕΙΕΣ



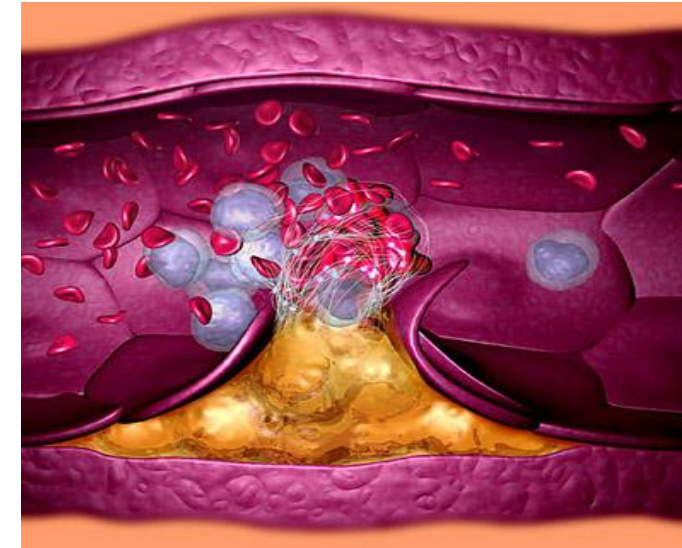
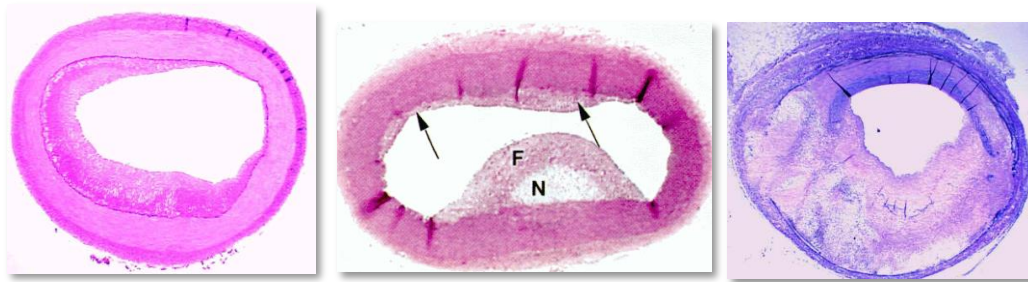
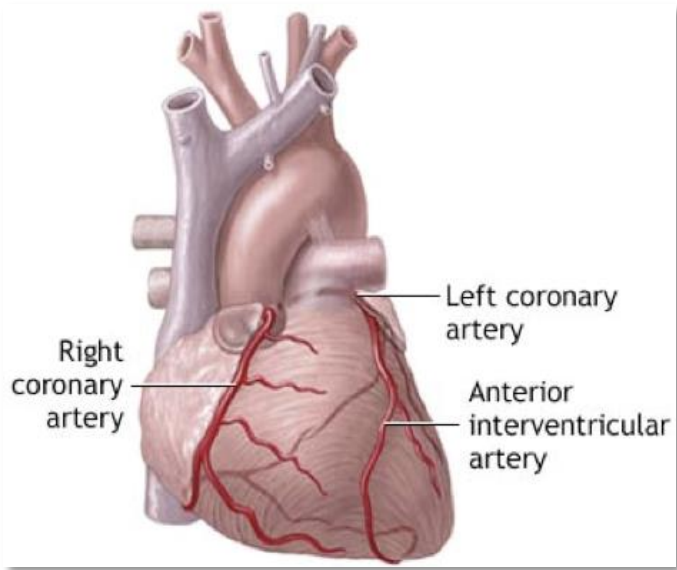
Φυσιολογικοί παράγοντες αθηρογένεσης και αθηροσκλήρωσης



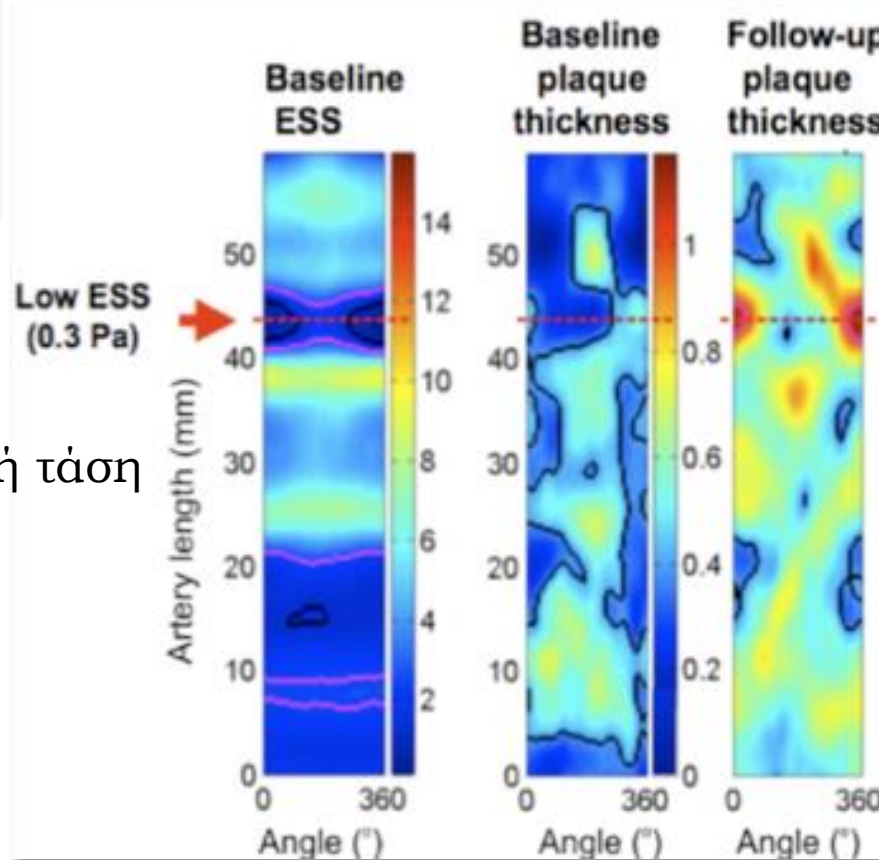
Πρόβλεψη καρδιακών παθήσεων (υπεύθυνες για το ~30% θανάτων ετησίως)

Γένεση και εξέλιξη των αθηρωματικών πλακών

αγγειακή αναδιαμόρφωση



ενδοθηλιακή διατμητική τάση

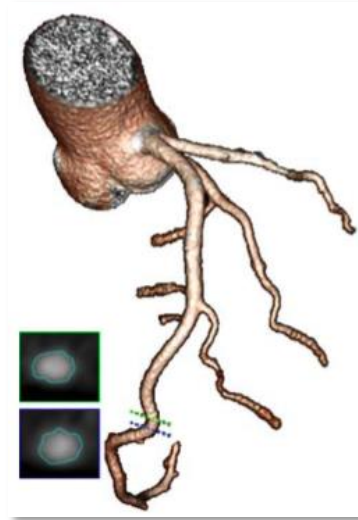


Μη ρεαλιστική αναπαράσταση! (γιατί;)

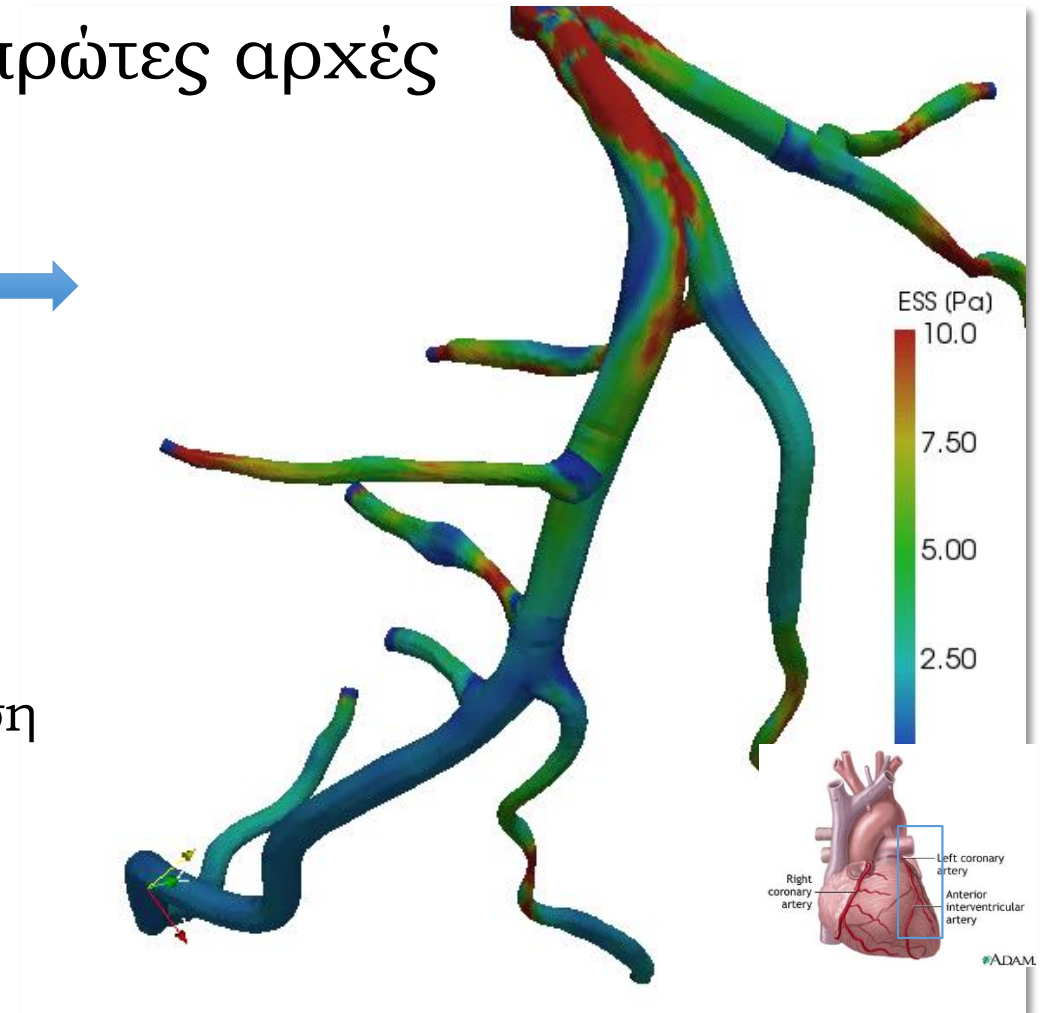
Μοντελοποίηση από πρώτες αρχές



Αξονική
τομογραφία



Λεπτομερής αναπαράσταση
γεωμετρίας των αγγείων



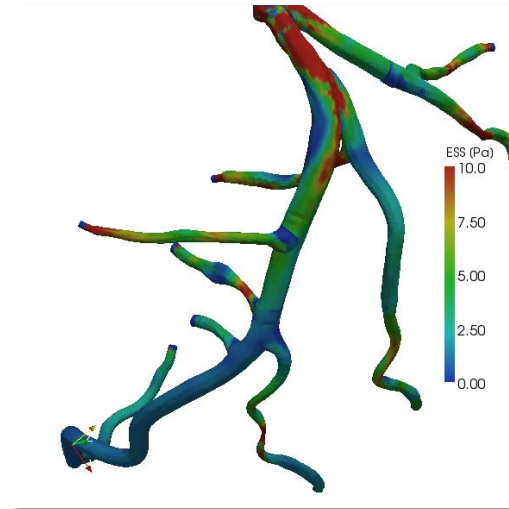
Μοντελοποίηση της ροής του
αίματος στο αρτηριακό δέντρο
→ Υπολογισμός διατμητικής τάσης
στα τοιχώματα αρτηριών

“Prediction of coronary artery plaque progression and potential rupture from 320-detector row prospectively ECG-gated single heartbeat CT angiography: Lattice Boltzmann evaluation of endothelial shear stress”

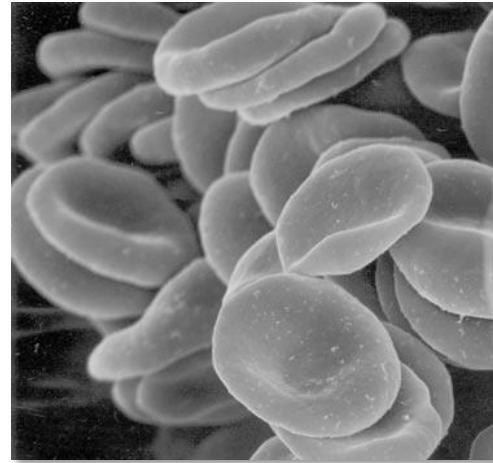
International Journal of Cardiovascular Imaging (2009)

[Frank J. Rybicki](#), [Simone Melchionna](#), [Dimitris Mitsouras](#), [Ahmet U. Coskun](#),
[Amanda G. Whitmore](#), [Michael Steigner](#), [Leelakrishna Nallamshetty](#), [Fredrick G. Welt](#),
[Massimo Bernaschi](#), [Michelle Borkin](#), [Joy Sircar](#), [Efthimios Kaxiras](#), [Sauro Succi](#),
[Peter H. Stone](#) & [Charles L. Feldman](#)

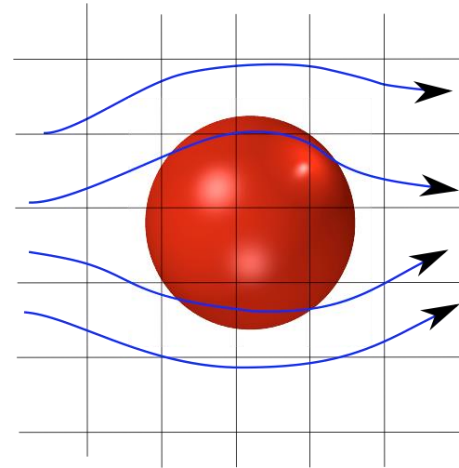
Μοντελοποίηση από πρώτες αρχές



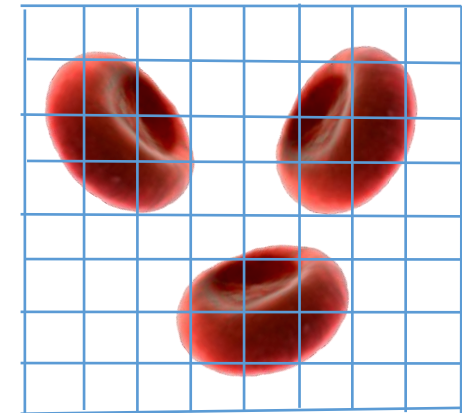
~10 cm



~10 μm



~1 μm



Κόμβοι τρισδιάστατου πλέγματος
(υπολογισμός της ροής υγρού)

Ρεαλιστική αναπαράσταση της ροής του αίματος:

→ Μη-νευτώνειο υγρό: ιξώδες εξαρτάται από διατμητική τάση

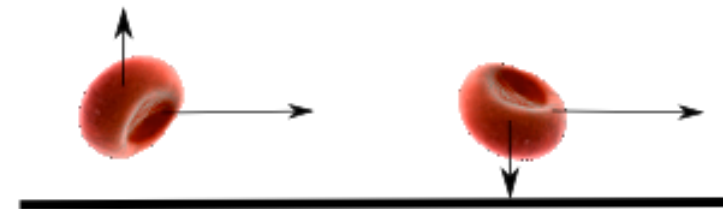
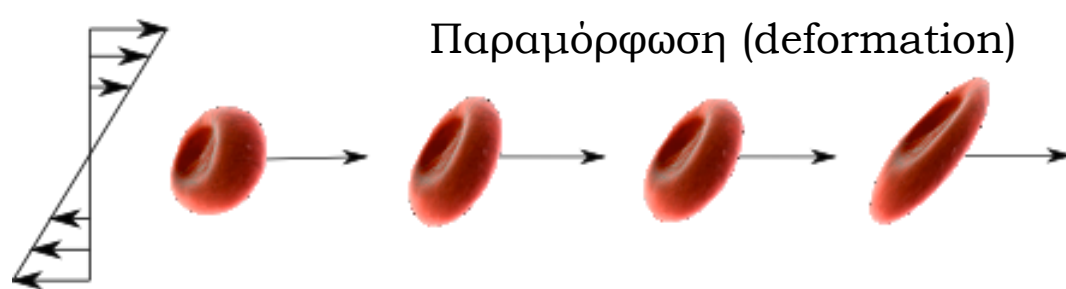
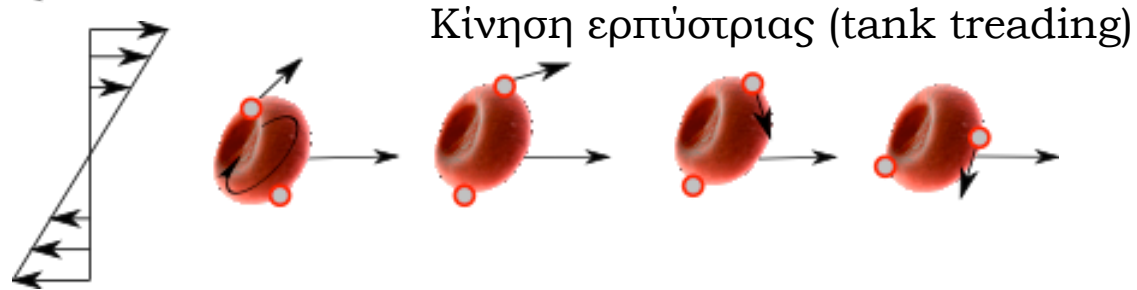
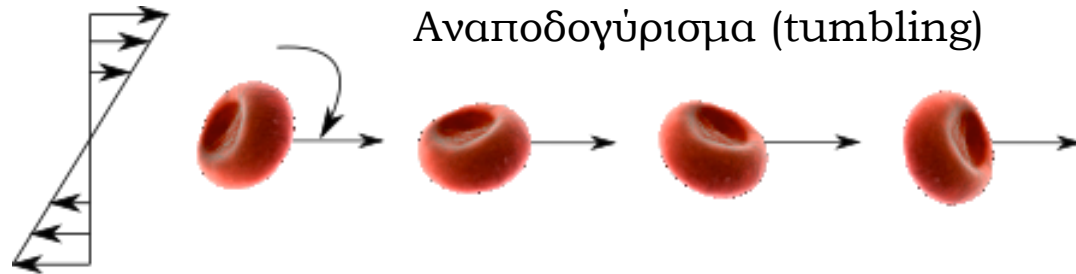
Πλάσμα: Νευτώνειο υγρό, σταθερό ιξώδες, δυναμική υγρών (εξισώσεις Navier-Stokes)

+

Ερυθρά αιμοσφαίρια: στερεά σώματα, κλασική μηχανική (εξισώσεις Νεύτωνα)

Μοντελοποίηση από πρώτες αρχές

Οι πολύπλοκοι τρόποι αλληλεπίδρασης αιμοσφαιρίων με το πλάσμα:



Απωση από το αρτηριακό τοίχωμα
(ποια κίνηση είναι η πιο σημαντική;)

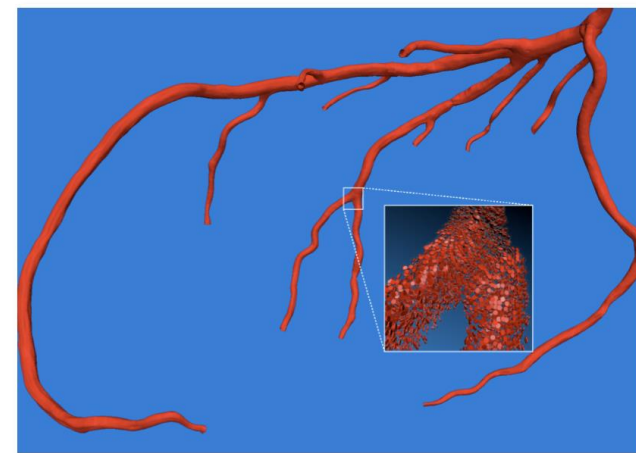
Επίλυση μοντέλου με χρήση υπερ-υπολογιστή



IBM BluGene 300,000 CPUs

Πλήρης καρδιακή αγγειογραφία
των στεφανιαίων αρτηριών

**1 μm μέχρι 10 cm
(5 τάξεις μεγέθους!)**



Amanda (Peters) Randles

- ✓ 1,000,000,000 κόμβοι υγρού
- ✓ 10,000,000 αιμοσφαίρια
- ✓ 5,000,000 δίαυλοι επικοινωνίας CPU's



Simone Melchionna



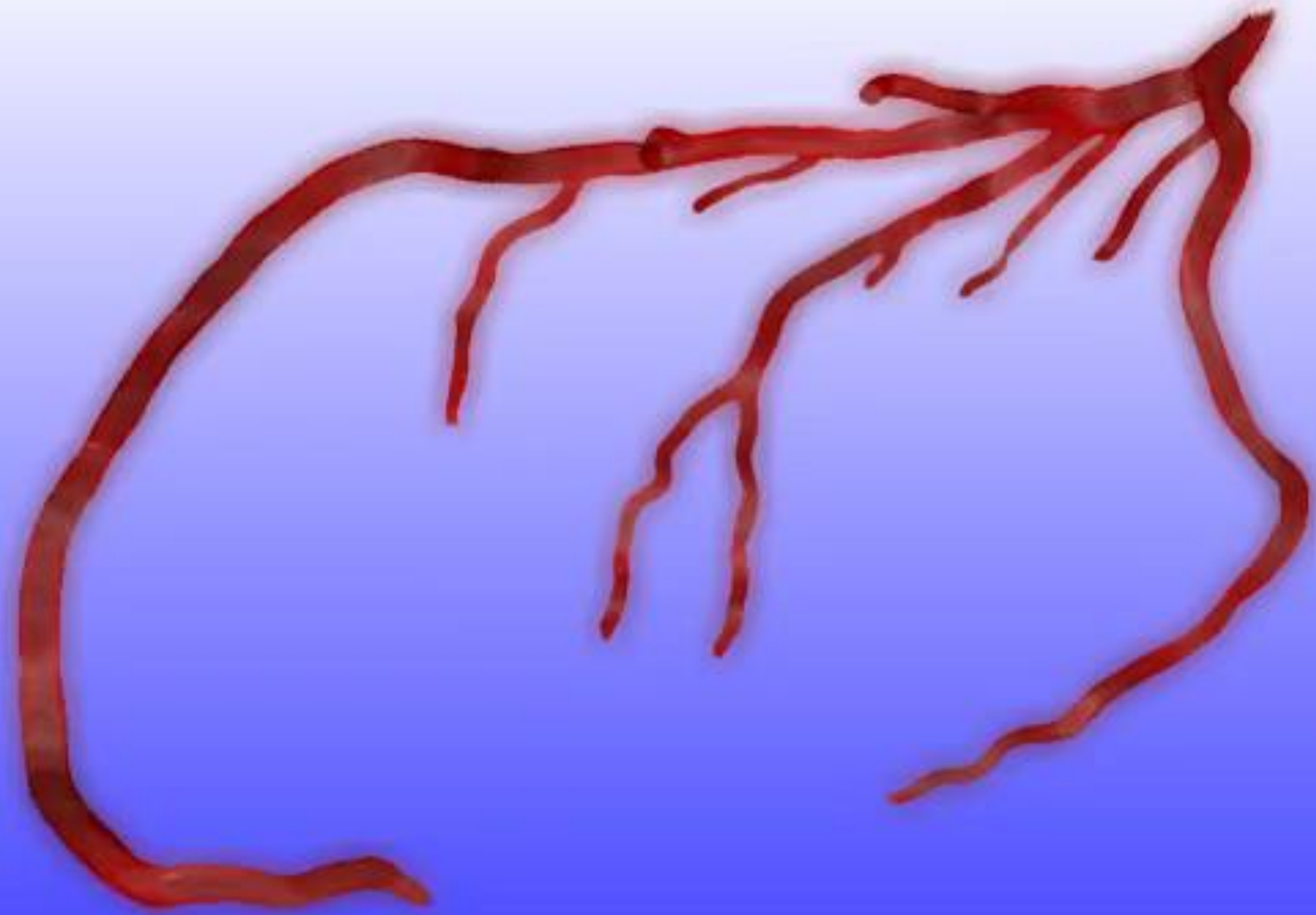
Sauro Succi

[Multiscale simulation of cardiovascular flows on the IBM Bluegene : full heart-circulation system at near red-blood cell resolution.](#)

2010 ACM/IEEE International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis. 2010;doi: 10.1109/SC.2010.33.

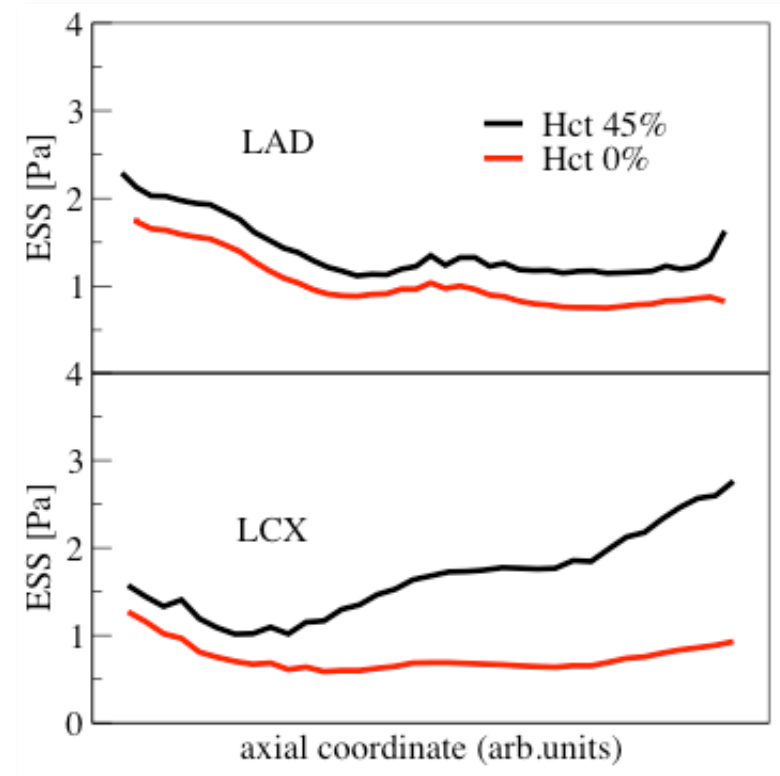
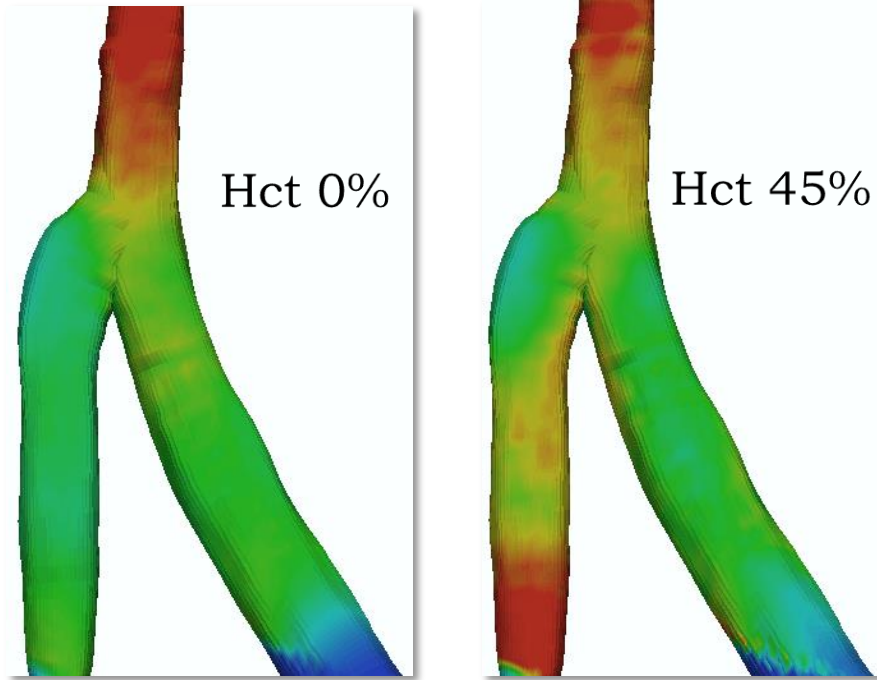
Peters A, Melchionna S, Kaxiras E, Latt J, Sircar J, Bernaschi M, Bisson M, Succi S.

MOVIES!

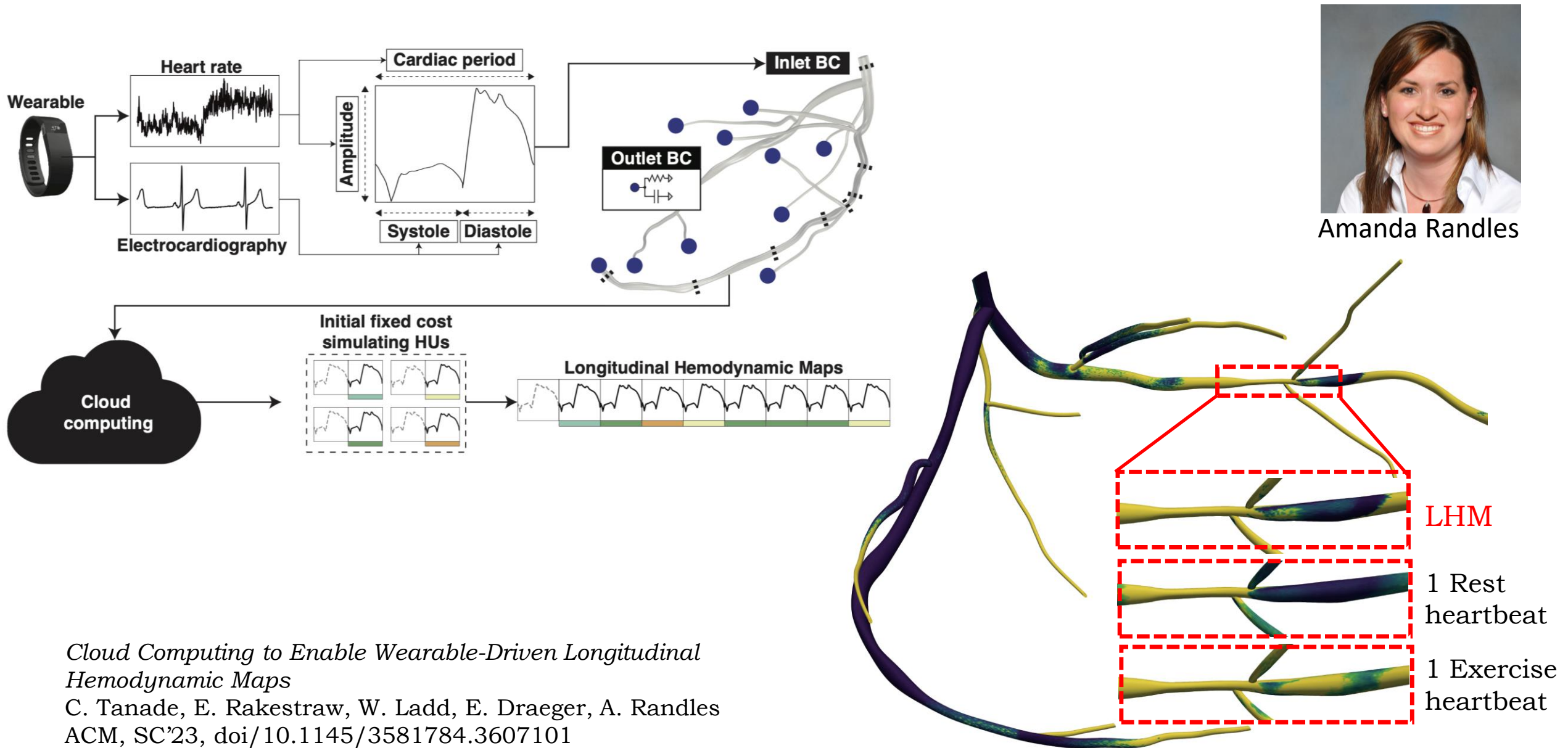




Μοντελοποίηση από πρώτες αρχές



Πρόσφατες εξελίξεις



Cloud Computing to Enable Wearable-Driven Longitudinal Hemodynamic Maps
C. Tanade, E. Rakestraw, W. Ladd, E. Draeger, A. Randles
ACM, SC'23, doi/10.1145/3581784.3607101