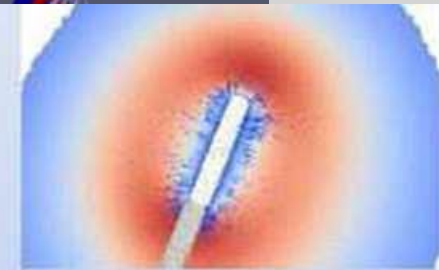
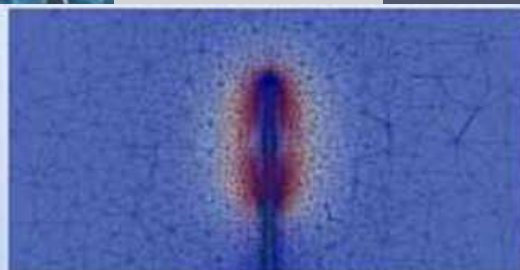
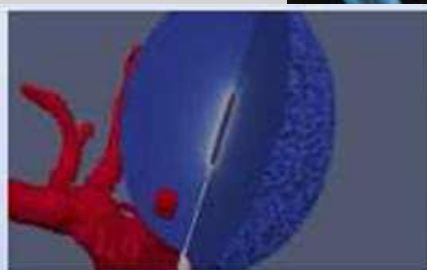
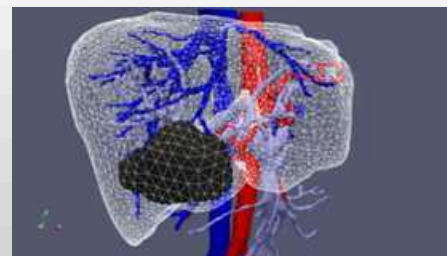


Суперкомпютърни приложения в биомедицинското инженерство

Добри практики за партньорство на ИИКТ-БАН с АМЕТ ООД
в приложения на НРС/HPDA/AI

- От основаването си през 1995 г. АМЕТ ООД разва модерно производство в областта на медицинската техника и електроника.
- Фирмата е надежден и желан партньор на световния пазар.
- Партньорството на ИИКТ-БАН с АМЕТ ООД е пряко свързано с разработването на компютърни модели и тяхната ефективна реализация върху висопроизводителни изчислителни комплекси.
- Продуктите, разработвани и/или развивани в рамките на съвмесни проекти включват:
 - Умни електрохирургични инструменти: Съвместно с техники за образна диагностика, активен електрод се въвежда в центъра на тумора и посредством контролирана енергия с висока честота и прилагането на физиологичен разтвор, се постига термична денатурализация на целевия обем.
 - Физиотерапия: Портативен апарат отстранява кърлежи и пиявици по хора или домашни любимци посредством високочестотни електрически импулси, без допир до тялото на паразита.
- АМЕТ ООД е асоцииран индустриален партньор в ЦВП по Информатика и ИКТ, финансиран по договор BG05M2OP001-1.001-0003 на ОП НОИР.
- АМЕТ ООД е партньор в организираната в началото на юни “13th International Conference on Large-Scale Scientific Computations”.

- Радиочестотната аблация унищожава нежеланата тъкан чрез нагряване в резултат на протичане на електрически ток подаван чрез сонда (игла).
- За създаване на модела, геометрията на областта и микроструктурата на съответните тъкани са извлечени от 3D изображение с висока резолюция.
- За дискретизация на системата от частни диференциални уравнения, описващи процесите на аблация се прилага метод на крайните елементи при неструктурирана тетраедрална мрежа и адаптивна стъпка по времето.
- Така полученият компютърен модел има до $O(10^9)$ неизвестни по пространствените променливи и $O(10^4)$ стъпки по времето. Задачи с такава изчислителна сложност изискват суперкомпютърна производителност.



Безконтактно отстраняване на кърлежи



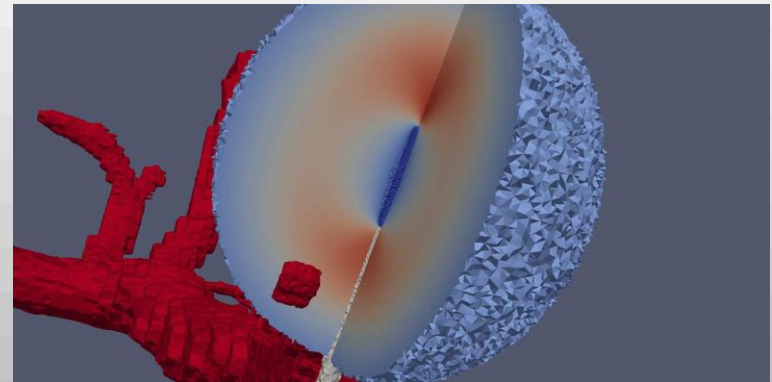
- Портативният апарат за отстранява кърлежи, пиявици и др. кръвосмучещи ектопаразити по хора или домашни любимци въздейства посредством високочестотни електрически импулси.
- Съществено е, че физиотерапевтичната процедура се реализира без допир до тялото на паразита, с което се избягва опасността от заразяване с изхвърлени от него течности.
- Предмет на компютърно моделиране е анализа на температурното поле в зоната на въздействие.
- Процесът се описва с помощта на система от частни диференциални уравнения.
- За дискретизация на диференциалните уравнения се прилага метод на крайните елементи при неструктурирана тетраедрална мрежа.

- Изчислителната област има сложна многослойна геометрия, която включва тънък филм на пожения гел и слоевете на кожата.
- Изчислителната сложност на задачата се определя от голямата мрежова и коефициентна анизотропия.



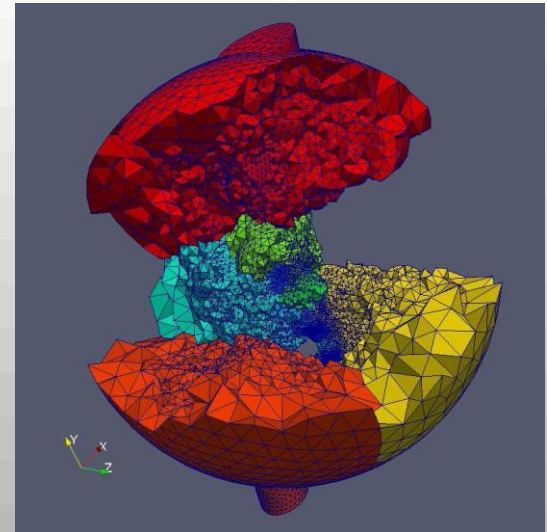
Математическият и компютърен модел включва:

- Дискретизация на частните диференциални уравнения по пространството. За целта се прилага метод на крайните елементи върху неструктурирани тетраедрални мрежи.
- Дискретизация на частните диференциални уравнения по времето. За целта са разработени специализирани алгоритми за адаптивна стъпка по времето.
- Генерация на тримерни тетраедрални мрежи с адаптивно съгъстяване в зоните на активни взаимодействия.
- Идентификация и верификация на параметрите на модела. За целта се прилага оптимизация по метода на най-малките квадрати.
- Итерационни методи с оптимална изчислителна сложност за решаване на много големи (до 10^8 - 10^9 неизвестни) системи от линеарни уравнения с разреждени матрици.
- Визуализация на резултатите, в т.ч. изолинии на електрически и температурни полета и извличане на интегрални резултати от големи масиви данни.



Паралелната реализация на разработените компютърни модели включва интегриране на паралелни софтуерни пакети със свободен достъп, в т.ч.:

- **Netgen:** Високопроизводителен софтуерен пакет за реализация на метода на крайните елементи. В разработените софтуерни решения е използван модул за генерация на тримерни мрежи. Паралелното ядро е написано на C++
- **ParMETIS:** Паралелно разделяне на графи и пренареждане на номерацията с цел минимизация на запълването на разрези матрици в процеса на последователно изключване. В разработените софтуерни решения пакетът се използва за разделяне на областта на подобласти.
- **Hypre:** Софтуерна библиотека за скалируема паралелна реализация на метода на спрегнатия градиент с преобуславяне. Разработен е и се поддържа от Националната лаборатория Лоранс Ливърмор.
- **BoomerAMG:** Част от Hypre, реализиращ оптимален алгебричен мултигрид преобусловител.
- **ParaView:** Паралелна платформа за анализ и визуализация на многомерни данни.



- Паралелната реализация използва изчислителен модел с разпределена памет. Така е възможно да бъдат решавани задачи с $O(10^9)$ степени на свобода.
- Съвременните суперкомпютри, в т.ч. суперкомпютър Авитохол, са с разпределена памет.
- Комуникациите се реализират с помощта на MPI.
- Реализираните компютърни модели са силно свързани, което определя ключовата роля на комуникациите.
- Показано е, че за разглеждания клас задачи 1D и 2D разделянето на областта води до силно ограничен паралелизъм. Така например при 1D разделяне, паралелната ефективност E_p може да падне под 1%.
- Тук е важно да отбележим, че за инженерни приложения, при които се решават системи с разреждени матрици, производителността на суперкомпютрите е съществено по-ниска от пиковата.

Това разбира се не означава, че такива задачи не трябва да се решават!

- Параметри на решаваните задачи:

- брой на неизвестните в свързаните системи: до 1 117 913 088
- брой на процесорите или CPU ядрата: до 1 024
- достигана максимална паралелна ефективност: над 100%

LINPACK: Тестът е традиционно средство за получаване на TOP500 - класация на първите 500 суперкомпютри в света. Подреждането се прави на базата на времето за решаване система от линейни уравнения с плътна матрица.

Това дава възможност за лесно съпоставима оценка на постигнатата за този тест производителност R_{max} , в сравнение с пиковата производителност R_{peak} .

За първите 10 суперкомпютъра от TOP500 получаваме следните усреднени ефективности:

юни 2019: $R_{max}/R_{peak} = 71\%$

юни 2020: $R_{max}/R_{peak} = 73\%$

Авитохол: $R_{max}/R_{peak} = 64\%$.

Можем да направим извода че LINPACK ефективностите са съпоставими.

HPCG: Тестът е алтернативен подход за оценка на производителността на базата на итерационно решаване на системи с разреждени матрици по метода на спрегнатия градиент. Така са получени производителностите HPCG и съответните нови усреднени ефективности:

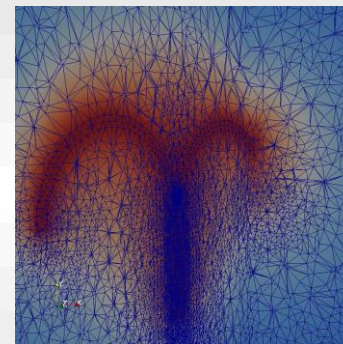
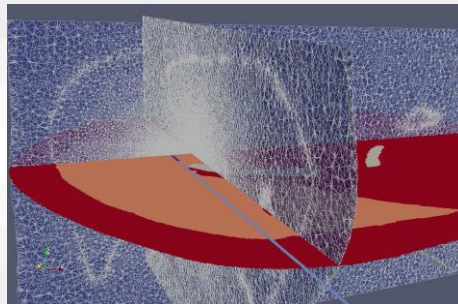
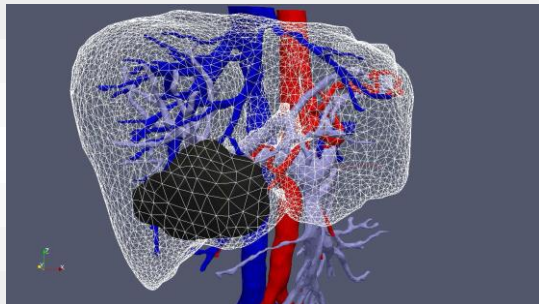
юни 2019: $HPCG/R_{peak} = 2.59\%$

юни 2020: $HPCG/R_{peak} = 2.23\%$

Не е изненадващо, че HPCG ефективността е съществено по-малка. В същото време, добре е да отбележим, че тя е по-представителна.

Как влияе сложността на модела на резултатите

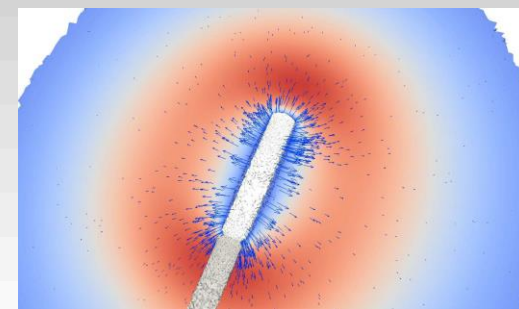
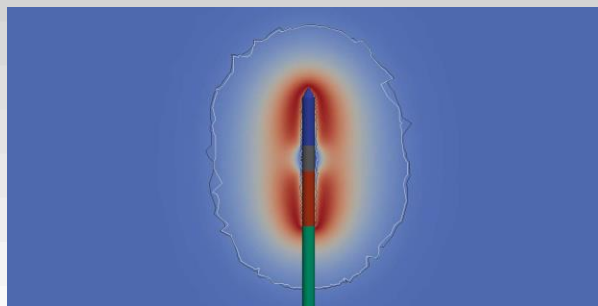
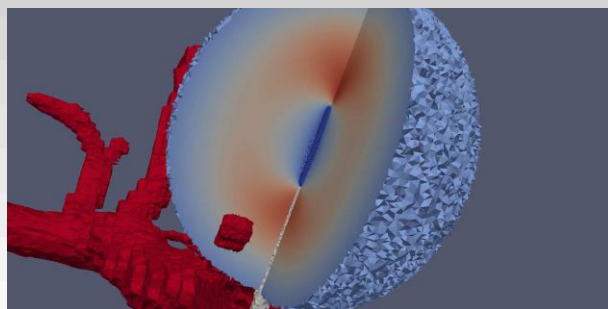
- Процесът на туморната аблация е съществено тримерен и нестационарен.
- Моделът включва електрическо поле, пренос на маса и топлина, течение в пореста среда, разрушаване на клетки и др.
- Изчислителната област е силно нееднородна, което налага използването на силно неструктурирана триангулация.



Модел	V_1 [cm ³]	Промяна	$V_{4.6}$ [cm ³]	Промяна
Не отчита циркулацията на кръвта	20.7		14.0	
Отчита циркулация в портална вена	10.8	191%	6.7	209%
Отчита портална вена и капилярна мрежа	7.8	265%	5.3	284%

- В таблицата с V_1 и $V_{4.6}$ са означени съответно обемите на ефективна аблация, в които клетките са разрушени с вероятност 66% и 99%.

Пълна паралелна скалируемост



N	p	$\Delta t[s]$	N_{it}	T[s]
2 183 424	128	5	642	1 723
17 467 392	1 024	1.25	1 610	6 170

- Симулиран е процес на 6 минутна радиочестотна аблация с биполярна сонда.
- За рафинирания модел са използвани 8 пъти повече процесори при 8 пъти повече степени на свобода N на всяка стъпка по времето.
- В същото време имаме 4 пъти повече стъпки по времето, като паралелното време е само 3.58 пъти по-голямо.
- Следователно за пълната паралелна ефективност получаваме $E_{total} = 111\%$.

- Новите възможности и предизвикателства се определят от развитието на суперкомпютърните технологии и всеобхватната тенденция за работа в среда на големи данни (Big Data).
- Това определя и приоритетната роля на синергията между суперкомпютърни симулации и изкуствен интелект в среда на големи данни.

Примери:

- В сондите (иглите) на съвременните апарати за радиочестотна чернодробна туморна аблация се интегрират все повече сензори, които подават непрекъсната информация за редица параметри на протичащите процеси, в т.ч. температура и електрическо съпротивление. В същото време апаратните средства за образна диагностика създават огромни архиви от медицински изображения. За обработка и анализ на тези големи данни са необходими специализирани алгоритми за HPDA/AI.
- Растящата производителност на суперкомпютърните системи правят възможно реализирането на концепцията за „Моделиране, симулация и оптимизация“ – математическа основа на технологията „цифров близък“.
- Начало на реализацията на тези възможности е поставено със съвместната работа по изграждане на интегрирана софтуерна платформа за оптимизация на параметрите на радиочестотната чернодробна туморна аблация. Предизвикателство е работата в реално време на базата на данни за конкретния пациент.