

Суперкомпютърни приложения за разработване на био медицински изделия

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

HPC Forum, NCC Bulgaria (EuroCC 2)

16 ноември 2023г. , Sofia Tech Park

- В ИИКТ-БАН се изпълняват около 90 проекта годишно, от които
 - около 20 договора годишно са директни договори на ИИКТ-БАН с индустриални партньори (финансирани от български фирми)
 - 3 проекта са финансирани по ОП НОИР (Оперативна програма „Иновации и конкурентоспособност)
 - 4 проекта по НПКНИ (Национална пътна карта за научна инфраструктура), в 2 от които ИИКТ-БАН е водеща организация
 - 7 проекта са финансирани от ННП (Национални научни програми).

Около 50% от договорите с индустриални партньори са в областта на НРС/HPDA/AI

Основа – хетерогенен хардуер



- Суперкомпютър Авитохол (система от top500)
- Big Data сървъри с 3TB RAM, свързани с над 5 PB пространство за съхранение на данни
- Сървъри с мощни GPU NVIDIA V100
- Софтуер – комерсиален и с отворен код и
- Екип с многогодишен опит, участвал в европейски и национални проекти
- Утвърдени политики за достъп

Подход към индустриални партньорства

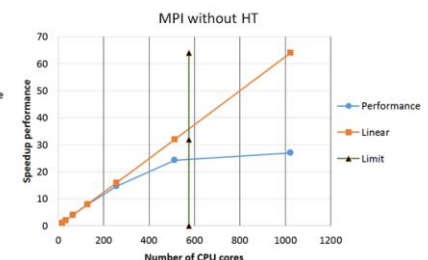
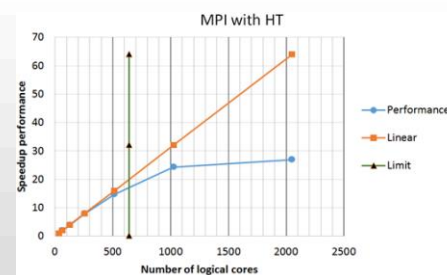
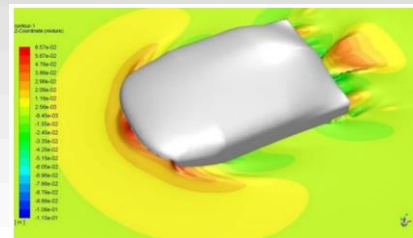


- Активни контакти с представители на МСП, представяне на научни постижения с потенциал, схеми за финансиране
- Опит в договаряне в съответствие с изисквания на различни програми и проекти или директно финансиране
- В повечето случаи договорите включват съществена част, изискваща научна експертиза, освен достъп до хардуер

6. Technical competences		Level	Value	Persons
15		National		
16	Cluster administration	International		
17	Parallel programming	International		
18	MPI/OpenMP	International		
19	CUDA	International		
20	OpenCL	International		
21	Performance optimisation for in-house software	International		
22	Cloud services	National		
23	Software deployment	International		
24	Performance optimisation for open-source software	International		
25	Quantum computing	International		
26	NoSQL databases	National		
27	SQL databases	National		
28	AI for Computer Vision	International		
29	AI for Natural Language Processing	International	3-5	
30	AI for Predictive analytics	International	3-5	
31	Linear algebra and statistics in AI	International	3-5	
32	Neural network architectures	International	3-5	
7. HPC/HPDA/AI Technology Assessment and Proof of concept (PoC)				
Assessment of the applicability of technologies		Level:	Value:	Persons:
Proof of concept (PoC) design and management (from the idea to practice)		National/International	min 1- max 3	1-5, 5-20, 20+
33	Technology watch			
34		HPC	International	3-5
35		HPDA	International	3-5
36		AI	International	3-5
37	Proof of concept (PoC)			



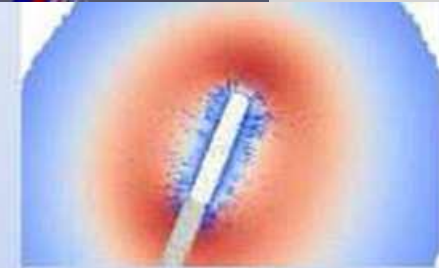
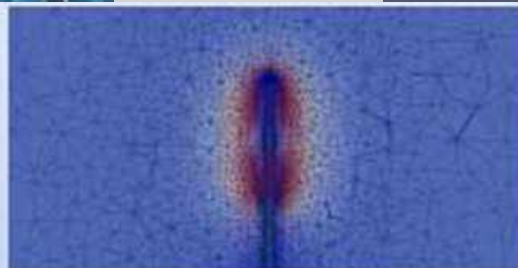
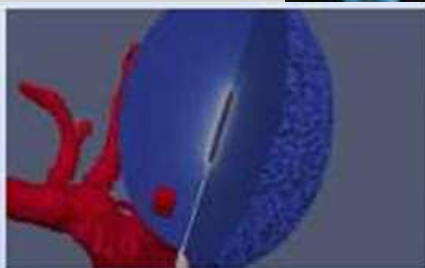
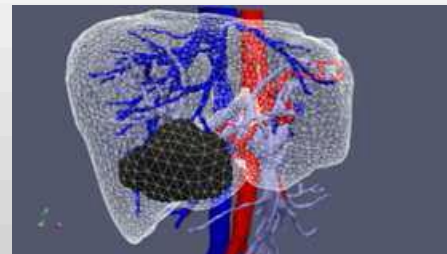
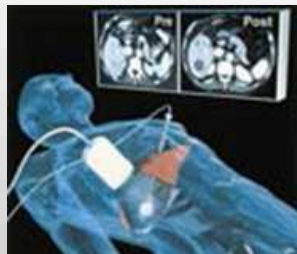
- Научните изследвания, разработката на методи и алгоритми, реализация върху моделни задачи, изследвания за ефективност и скалируемост поставят основата на последващите партньорства с малки и средни предприятия.



- 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 високопроизводителни 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 2021 г. “13th International Conference on Large-Scale Scientific Computations”.

Радиочестотна туморна аблация

- 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

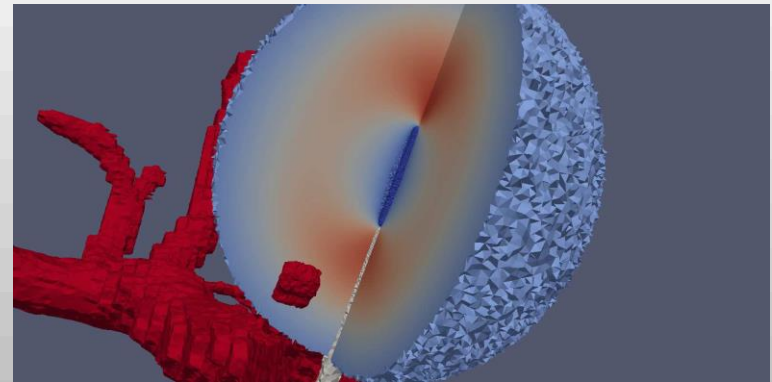


- Портативният апарат за отстранява кърлежи, пиявици и др. кръвосмучещи ектопаразити по хора или домашни любимци въздейства посредством високочестотни електрически импулси.
- Съществено е, че физиотерапевтичната процедура се реализира без допир до тялото на паразита, с което се избягва опасността от 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 положения гел и слоевете на кожата.
- Изчислителната сложност на задачата се определя от голямата мрежова и коефициентна анизотропия.



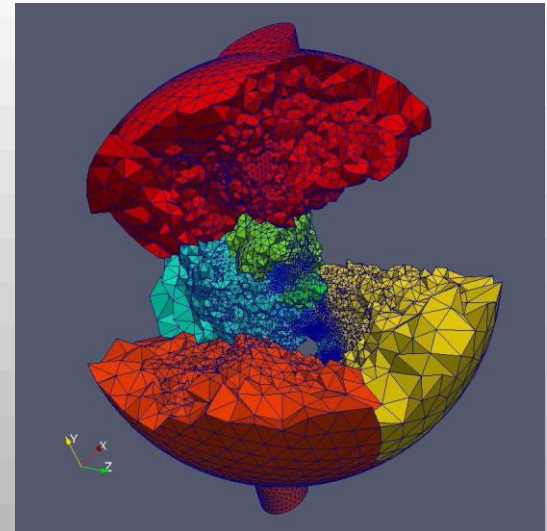
Математическият и компютърен модел включва:

- 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 сгъстяване 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 отимална изчислителна сложност за решаване на много големи (до 10^8 - 10^9 неизвестни) системи от линейни 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.

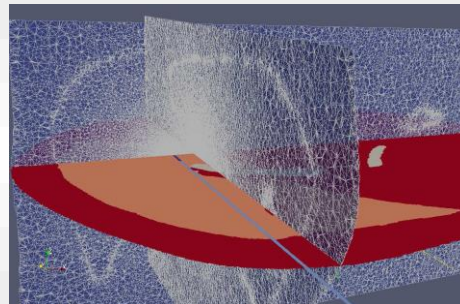
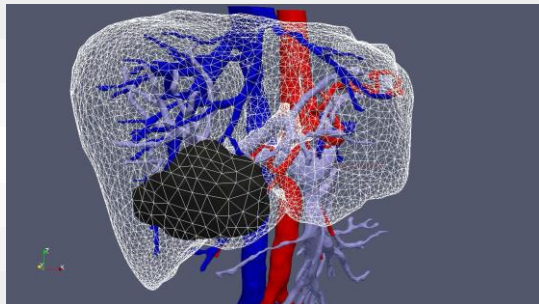
Това разбира се не означава, че такива задачи не трябва да се решават!

- 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%

Как влияе сложността на модела на резултатите

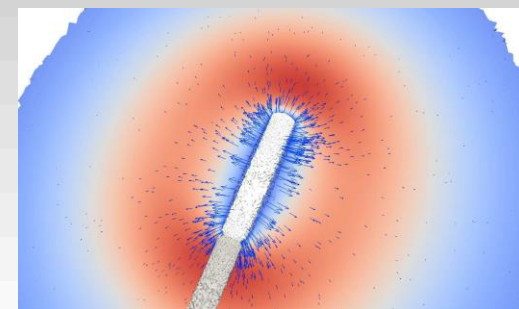
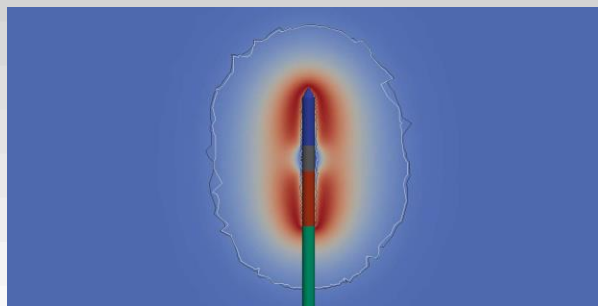
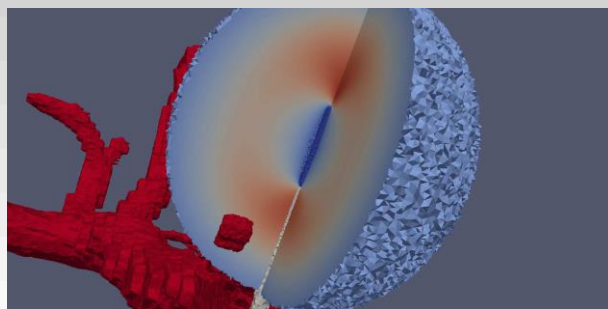
- Процесът на туморната аблация е съществено тримерен и нестационарен.
- Моделът включва електрическо поле, пренос на маса и топлина, течение в пореста среда, разрушаване на клетки и др.
- Изчислителната област е силно нееднородна, което налага използването на силно неструктурирана триангулация.



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.