



La science pour la santé
From science to health

Simulations de dosimétrie sur la grille via VIP/CARMIN : retour d'expérience

Gilles Mathieu (1), Maxime Chauvin (2), Axel Bonnet (3), Sorina Camarasu Pop (3), Isabelle Perseil (1),
Manuel Bardiès (2)

(1) Inserm, DSI, Coordination de l'Informatique Scientifique, Paris, France

(2) CRCT, UMR 1037, INSERM, Université Toulouse III Paul Sabatier, Toulouse, France

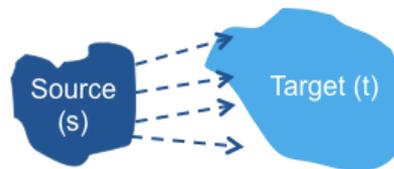
(3) CREATIS, CNRS, INSERM, Université Claude Bernard Lyon I, INSA, Lyon, France

VIP workshop, Creatis, Villeurbanne, 3 juin 2019

Radiothérapie interne et dosimétrie

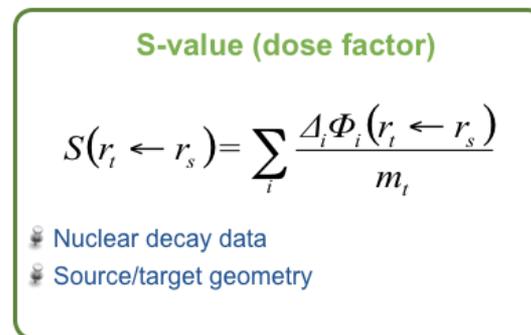
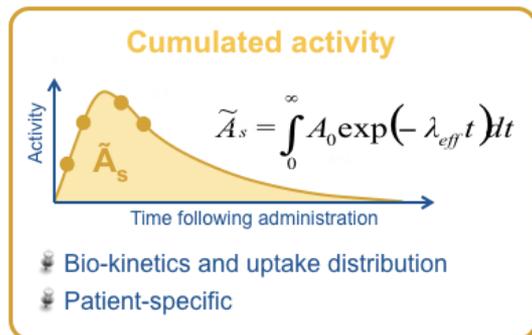


Tumoral cell



Organs

$$D_{t \leftarrow s} = \tilde{A}_s \times S_{t \leftarrow s}$$



La collaboration OpenDose

Challenges

- 2 ICRP 110 reference adult phantoms (male and female) and more to come (pediatric and next generation mesh-based phantoms)
- 140 organs (19600 target/source combinations!)
- ICRP 107: ~1200 radionuclides
- MIRD RADTABS source of decay data: ~300 radionuclides

Too big for a single institution!!!



Proposal

- Collaborative work, everyone is welcome!
- Generate data with different Monte Carlo codes to cross-verify data
- Generate Specific Absorbed Fractions with associated uncertainties
- Traceable and reproducible data
- Create a free database
- Create an easily accessible website
- Compute S-values with uncertainties from SAFs

Challenge technique de al production de données

- **1 simulation = 1 job GATE**

- Gate -a [Source_ID,95] [particle,gamma] [energy,1] [nb,10^e5]
main_AF.mac

- **50 960 simulations**

- 140 organes source, 2 particules, 91 niveaux d'énergie, 2 modèles

- **Sur un cluster local**

- 1 organe x 2 particules x 91 énergies x 1 modèle = 1 jour



More than 1 million CPU hours

Idée géniale #1

- Calcul « embarrassingly parallel » ?
- Problème de ressources ?
- GATE ?
- Pas envie de réinventer la roue (ni l'eau chaude) ?

✓ **VIP, bien sûr !!**

Oui, mais...



- Générer 50 960 fichiers de configuration ?



Thou shalt use parameters



Un nouveau workflow

- Lancer manuellement 50,960 jobs via le portail ?



Thou shalt script



Un code client

Idée géniale #2: le workflow GateCLforOpenDose

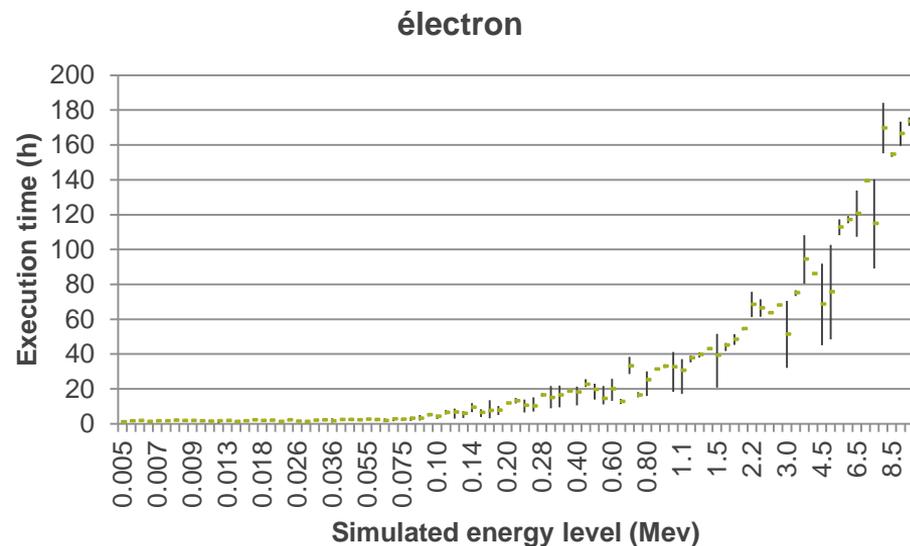
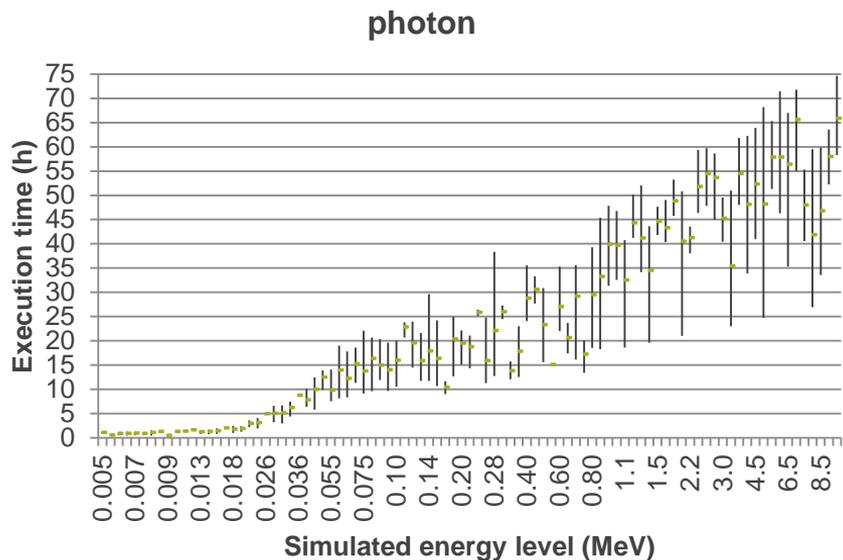
- Côté VIP
 - Encapsulation de l'exécution de Gate dans un descripteur JSON
 - Déploiement via Boutiques
- Côté client
 - Un code avec boucles imbriquées
 - Appel à CARMIN pour lancer les jobs sur VIP
 - Une exécution VIP = n simulations Gate

Re-oui, re-mais...

NON MAIS
ILS FONT
EXPRES



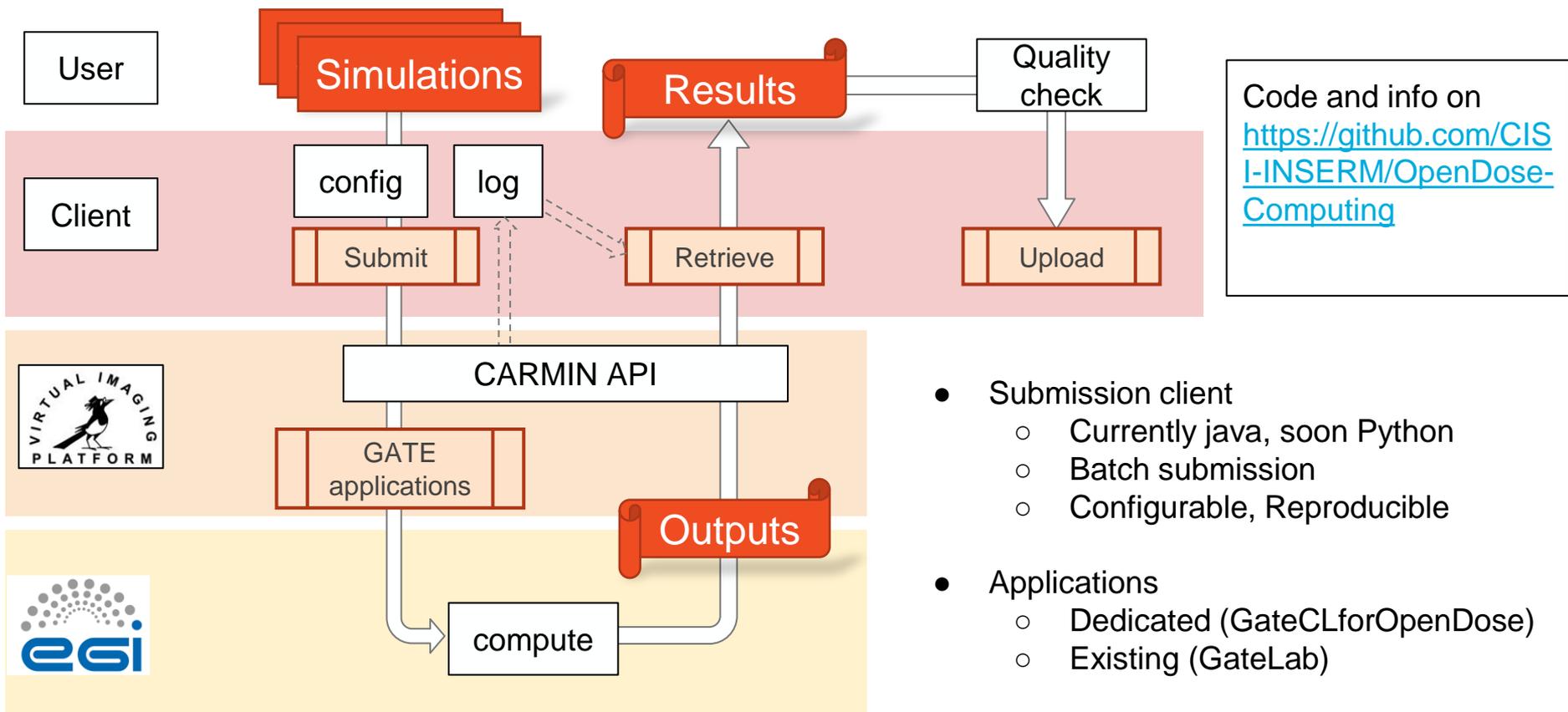
- Marche très bien pour les simus courtes, pose problème pour les longues. Or...



Idée géniale #3: Adapter GateLab

- Côté VIP
 - GateLab permet de faire du split/merge: idéal pour les longues simulations
 - Extension de GateLab pour accepter les aliases
- Côté client
 - Modification du code pour soumettre via GateLab
 - Appel à CARMIN pour lancer les jobs sur VIP
 - Une exécution VIP = 1 simulation Gate

En résumé: le workflow global



Premiers résultats

- 20 600 simulations via GateCLforOpenDose
 - 33% des simus, mais seulement 4% du temps de calcul
- 750 simulations via GateLab
 - Beaucoup plus lent, mais nécessaire car les jobs individuels seraient trop longs

- Travail en cours
 - Finaliser le code pour récupérer automatiquement les outputs
 - Automatiser la soumission GateLab
 - Réfléchir au stockage long terme

Retours, avis, critiques, louanges

- Le moins bien...
 - Avec GateLab, limitation sur le nombre de simulations lancées en parallèle
 - Temps d'attente parfois trrrrèèèèès...
loooooongs...
- Le plus bien...
 - Outils qui fonctionnent et sont faciles à manipuler
 - Equipe de choc, avenante et réactive !!