



Inserm

La science pour la santé
From science to health

OpenDose Calcul : un an après

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

(1) Inserm, DSI, 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

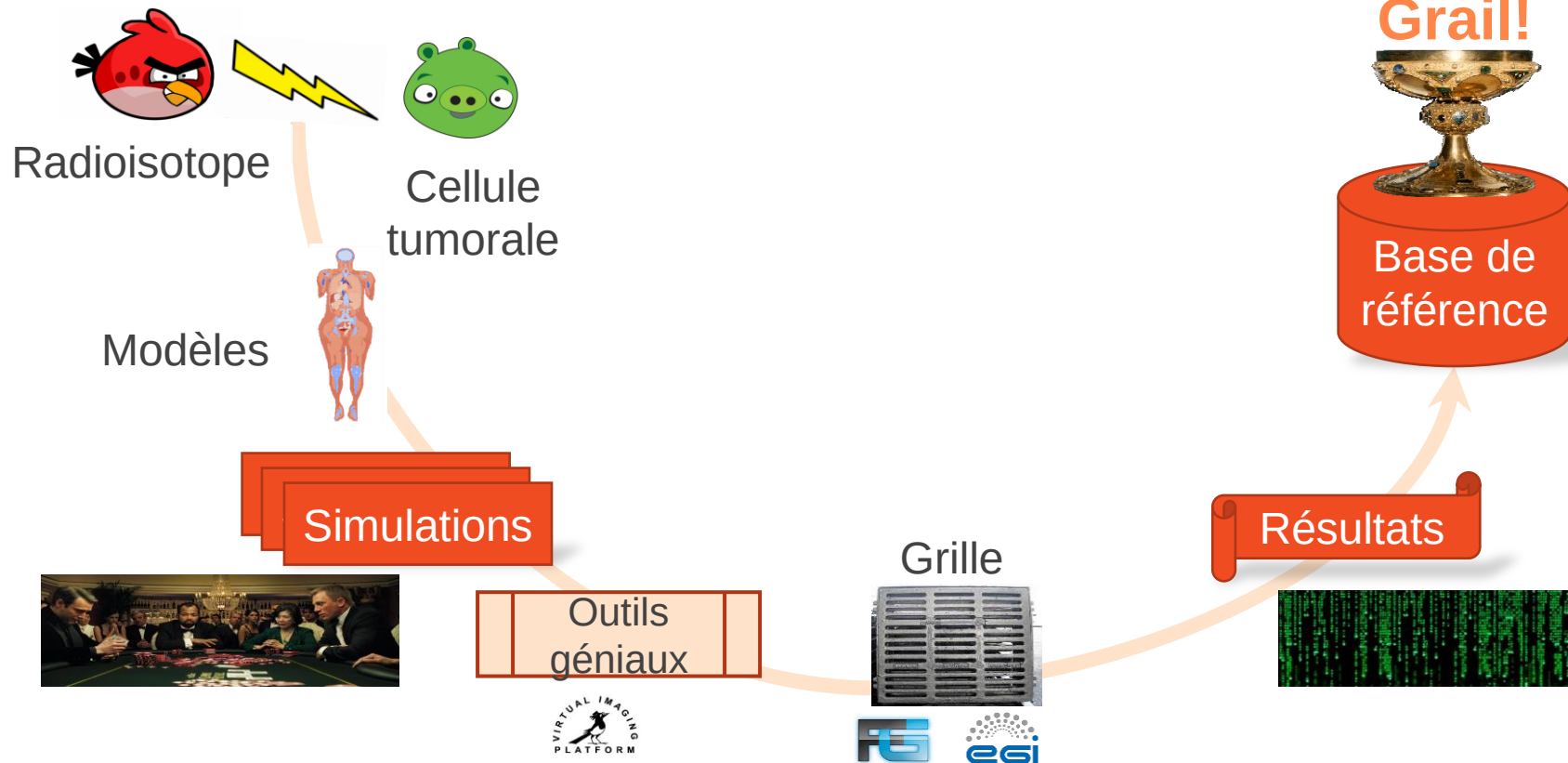
Plan



Éléments d'historique et de contexte

- Le projet OpenDose :
 - génération d'une base de données open-access pour la dosimétrie en médecine nucléaire
 - 16 équipes de recherche pour produire ces données avec des codes Monte Carlo
 - 2 modèles (femme et homme), 141 régions, 2 types de particule (photons et électrons), 91 énergies = 51324 jobs, 1.2 million d'heures CPU
- JCAD2018 : « OpenDose: un effort collaboratif pour produire des données dosimétriques de référence en médecine nucléaire »
 - https://jcad2018.sciencesconf.org/data/9_OpenDose_JCAD.pdf
 - <https://webcast.in2p3.fr/video/opendose-un-effort-collaboratif-pour-produire-des-donnees-dosimetriques-de-reference-en-medecine-nucleaire>

Computing@OpenDose : the grand vision



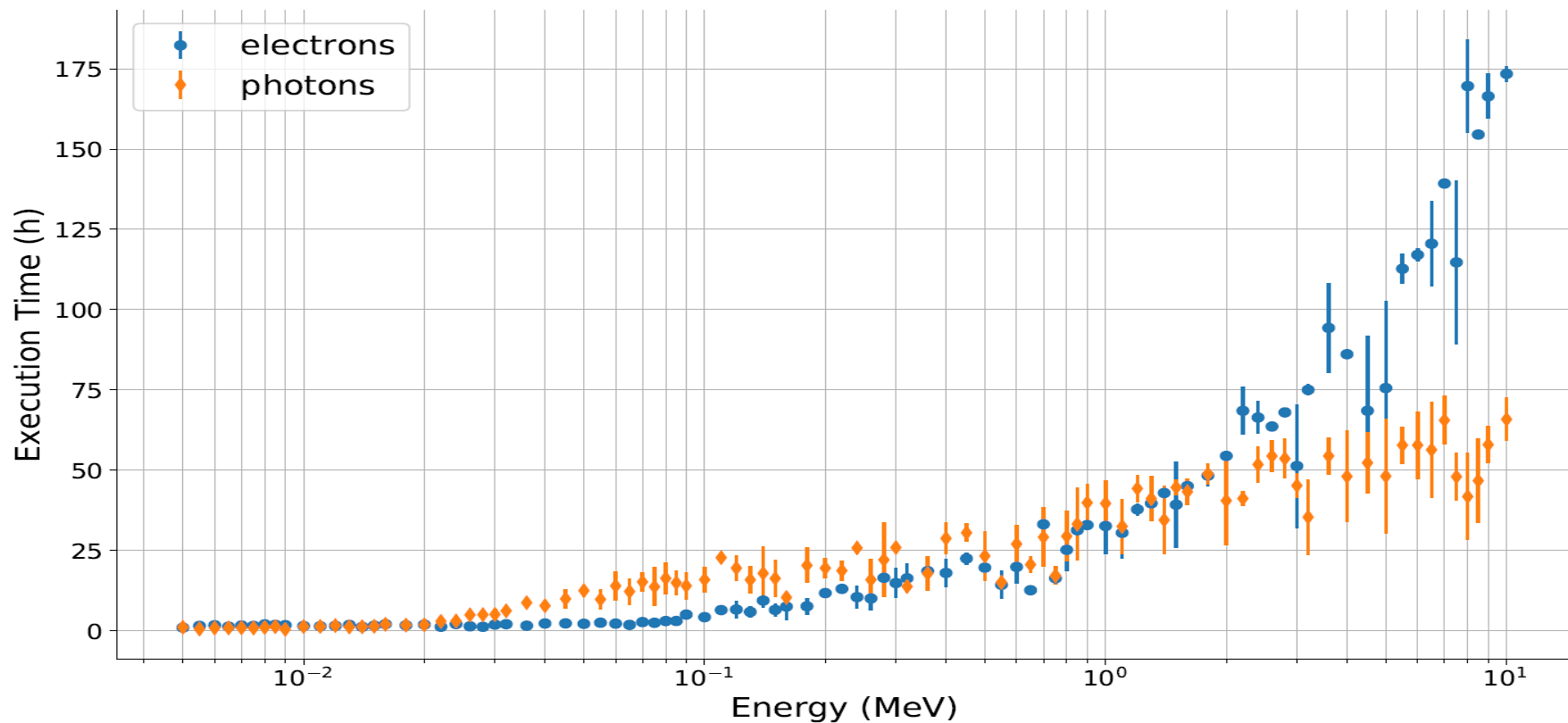
Situation il y a un an (octobre 2018)

- Utilisation des ressources EGI via le portail VIP
- Une application spécifique pour utiliser Gate
 - Car besoin de paramétrer
- Un code client utilisant l'API CARMIN
 - Car besoin d'automatiser
- Et c'est parti comme en 14

Allez les gars,
à Noël on aura
fini !



Mesure/estimation des temps d'exécution



Retour à la réalité

- Problèmes avec les simulations longues
 - La grille n'est pas idéale pour les jobs > 24h
 - L'application d'origine (GateLab) permet de scinder les jobs. Pas notre application spécifique
- C'est un peu le bazar pour récupérer les outputs
 - Les fichiers peuvent être très gros
 - Il faut les récupérer à la main depuis VIP

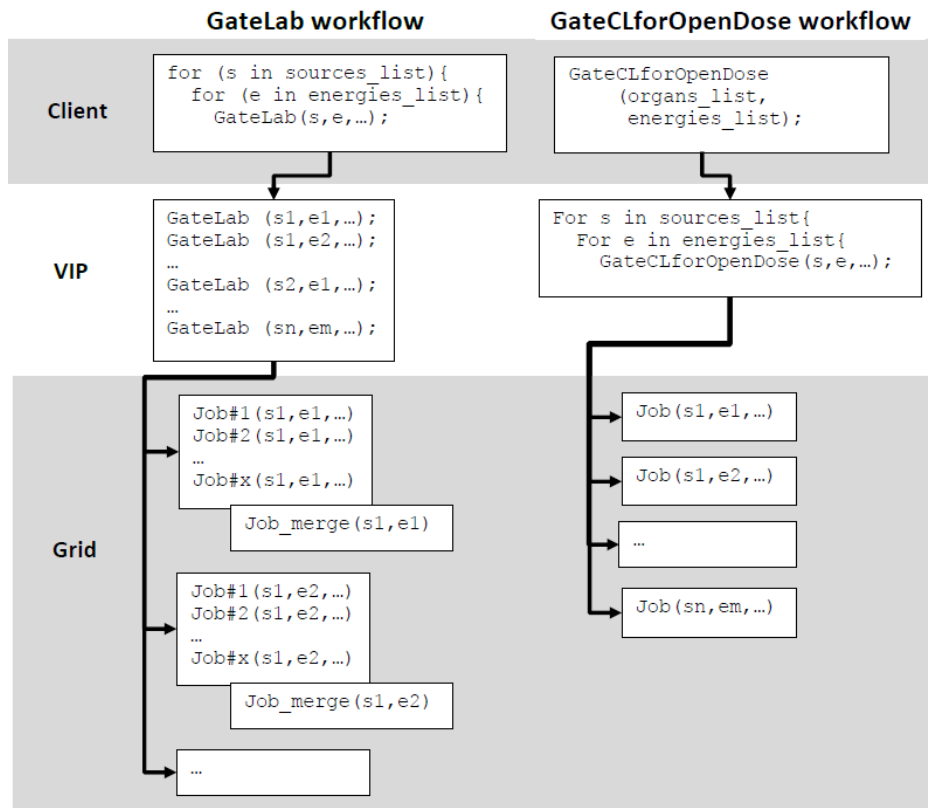
Modification de GateLab

- Ajout de paramètres optionnels
 - Pour utiliser l'appli dans notre contexte sans modifier son fonctionnement "standard"
- Modification du fonctionnement statistique
 - Eviter le *birthday problem*
 - Assurer la reproductibilité des calculs

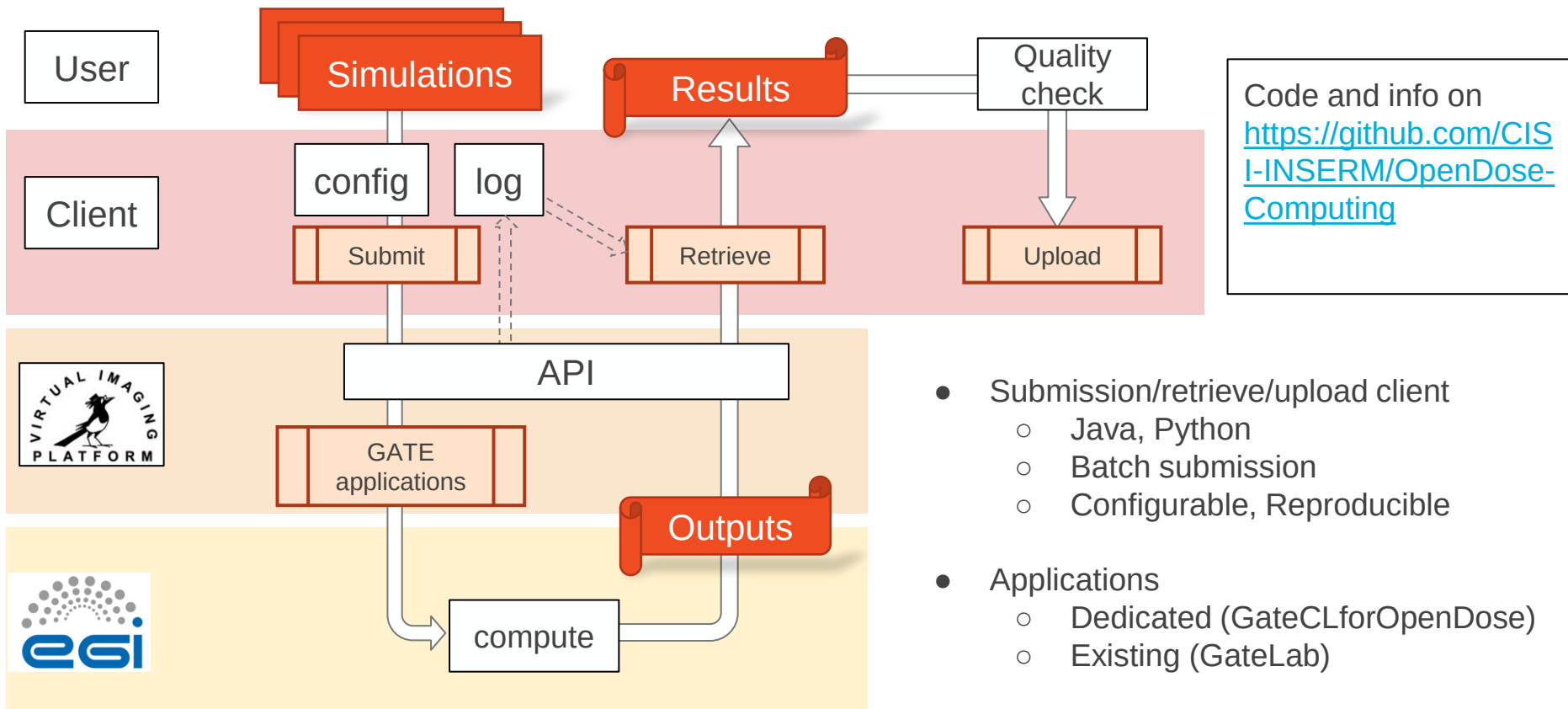
Extension du code client

- Permet d'utiliser les 2 workflows
 - GateCLforOpenDose pour les petites simulations
 - GateLab pour les simulations longues
- Client initial en Java, réécriture en python
- Implémentation du client pour récupérer les outputs

Comparaison des workflows



Aperçu de la solution actuelle



- Submission/retrieve/upload client
 - Java, Python
 - Batch submission
 - Configurable, Reproducible
- Applications
 - Dedicated (GateCLforOpenDose)
 - Existing (GateLab)

Première vague de production : 12/2018 – 01/2019

- Utilisation de l'application dédiée
- Soumission en batches de 360 jobs
- 20 640 simulations
 - 2 particules (électron/photons)
 - 2 modèles (H/F), 140 organes
 - 30 niveaux d'énergie entre 5 et 60 keV
- 57 804 heures.CPU
 - Facteur d'accélération : ~120

Deuxième vague de production : 04/2019 – 05/2019

- Utilisation de GateLab
- Soumission en jobs unitaires par pools de 25
- ~1 200 simulations
 - 2 particules (électron/photons)
 - 2 modèles (H/F), 20 organes
 - 30 niveaux d'énergie entre 0,065 et 0,75 MeV

Améliorations et prochaines étapes

- Consolider le code
- Mieux automatiser la soumission
- Interfacer avec un système de stockage plus pérenne
- Idées pour le futur
 - Utilisation d'autres infrastructures (CALMIP ?)
 - Utilisation d'autres outils de simulation MC



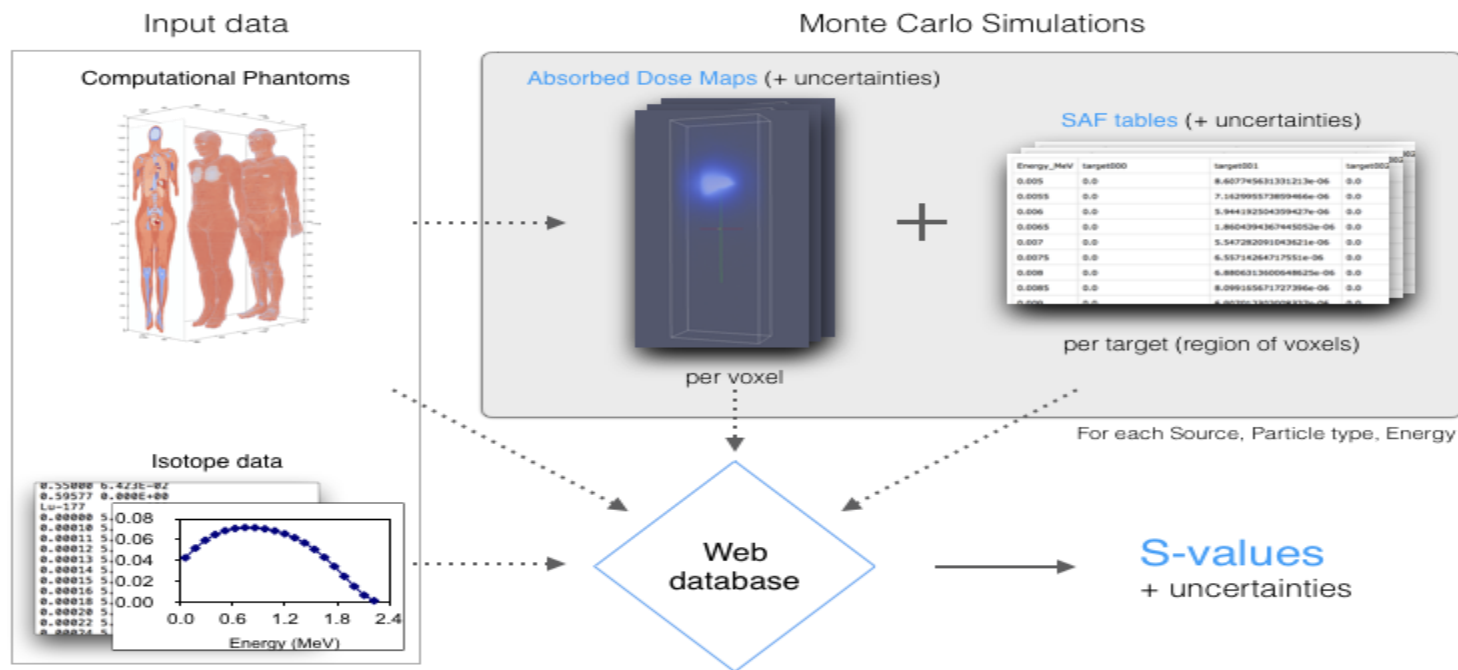
Inserm

La science pour la santé
From science to health

Annexes

*Informations, liens et références pour
une lecture offline*

Le projet OpenDose



www.opendose.org

Plus d'infos sur OpenDose

- Présentation à MCMA2017
 - http://people.na.infn.it/~mettivie/MCMA%20presentation/18%20Aula%20Magna/9_45_Chauvin.pdf
- Présentation à MRTDosimetry2018
 - http://mrtdosimetry-empir.eu/wp-content/uploads/2018/10/13_MRTdosimetryWorkshop_Chauvin.pdf

Boutiques

- Décrire, publier, intégrer et exécuter des applications en ligne de commande inter-plateformes.
 - faciliter le portage d'applications
 - import et échange d'applications
 - science ouverte et reproductible



- Format JSON polyvalent pour décrire la ligne de commande, les entrées et les sorties
- Utilisation de conteneurs Linux pour faciliter l'installation et le partage d'applications
- <https://github.com/boutiques>

Portage des jobs OpenDose sur la grille

- Code client pour utiliser VIP via CARMIN
 - <https://github.com/CISI-INSERM/OpenDose-Computing/tree/master/VIPclient>
- Descripteur JSON pour portage de la ligne de commande OpenDose dans VIP via Boutiques
 - <https://github.com/CISI-INSERM/OpenDose-Computing/tree/master/Boutiques>

Crédits

- *CRCT, UMR 1037, INSERM, Université Toulouse III Paul Sabatier, Toulouse, France*
 - Manuel Bardiès, Maxime Chauvin
- *CREATIS, CNRS, INSERM, Université Claude Bernard Lyon I, INSA, Lyon, France*
 - Axel Bonnet, Sorina Camarasu Pop
- *INSERM, DSI, Informatique Scientifique, Paris, France*
 - Gilles Mathieu, Isabelle Perseil