



La science pour la santé _____
_____ **From science to health**

OpenDose: un effort collaboratif pour produire des données dosimétriques de référence en médecine nucléaire

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

(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

PLAN A

- Problème scientifique
- Problème technique
- Solution envisagée
- Infrastructures
- Outils
- Premiers résultats
- Conclusion

PLAN B

- Start the talk
- See how it goes
- 😊

Pour commencer...



Radio



thérapie

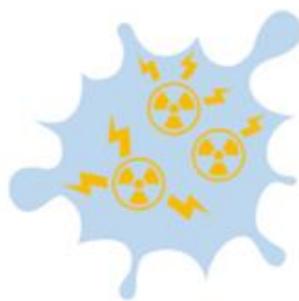


vs

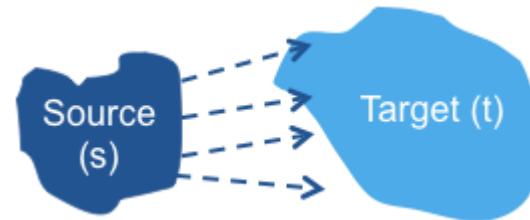


interne

Un peu de contexte : on veut faire quoi exactement ?



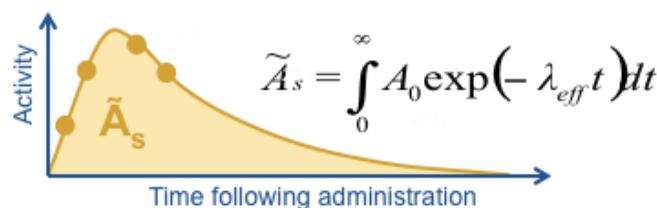
Cellule Tumorale



Organes

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

Cumulated activity



- Bio-kinetics and uptake distribution
- Patient-specific

S-value (dose factor)

$$S(r_t \leftarrow r_s) = \sum_i \frac{\Delta_i \Phi_i(r_t \leftarrow r_s)}{m_t}$$

- Nuclear decay data
- Source/target geometry

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

Et c'est quoi le problème ?

- **1 simulation = 1 appel Gate/Geant4**
 - Gate -a [Source_ID, 95] [particle, gamma] [energy, 1] [nb, 10^{e5}] main_AF.mac
- **31 304 simulations**
 - 172 organes sources, 2 types de particule, 91 niveaux d'énergie
- En local : **1 simulation = 24h environ**



~751 300 heures CPU

D'où on part, où on va

- Un modèle de calcul
 - Simulations paramétriques, indépendantes
 - 31 304 simulations = 31 304 jobs
 - Problème « Embarrassingly Parallel »

- Un cluster local
 - 240 CPU
 - 130 jours de calcul...



- Infrastructure Grille
 - Modèle adapté
 - Ressources ++
 - Outils disponibles

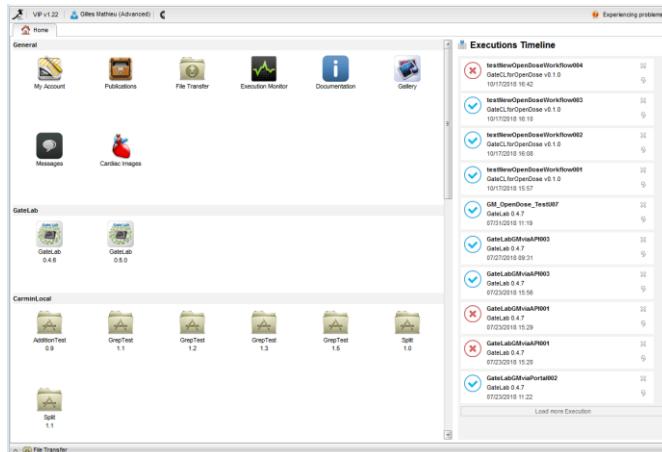
Solution

- Infrastructure



Y'a qu'ensemble qu'on sera plusieurs !

- Outils



*Gate/Geant4
sur la grille*

Web portal

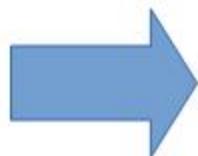
Application as a service
File transfer to/from grid

General

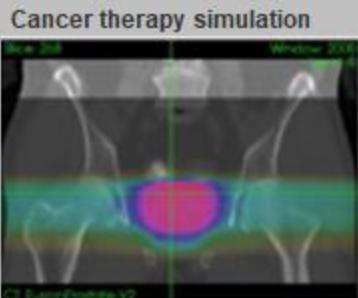
My Account Messages Documentation Gallery

Simulation

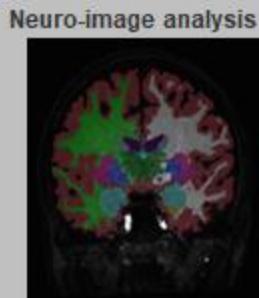
FIELD-II v0.4 PET-Sorteo v0.2.2 SMIPI object and c... SMIPI v0.3



Scientific applications



Prostate radiotherapy plan simulated with GATE(L. Grevillot and D. Sarrut)

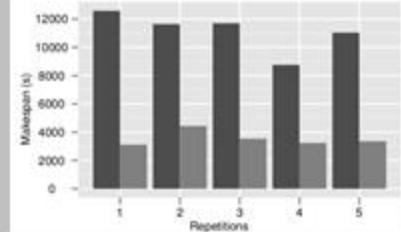


Brain tissue segmentation with Freesurfer



Echocardiography simulated with FIELD-II (O. Bernard et al)

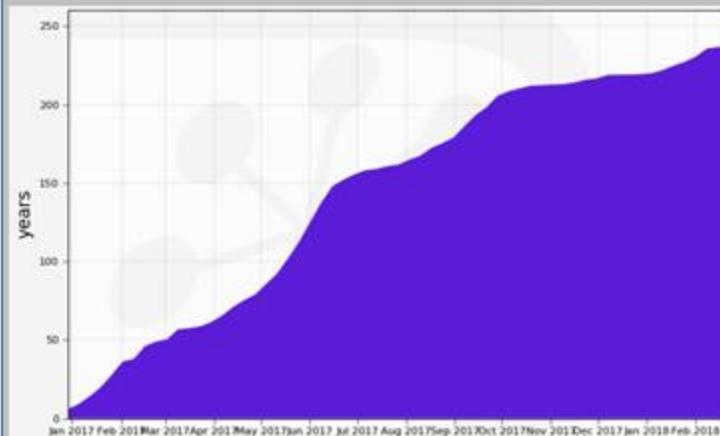
Modeling and optimization of distributed computing systems



Acceleration yielded by non-clairvoyant task replication (R. Ferreira da Silva et al)

Infrastructure

Supported by EGI Infrastructure
Uses biomed VO (~65 sites in Europe and beyond)
230 cumulated CPU years utilized by VIP applications in 1 year



France-Grilles



DIRAC

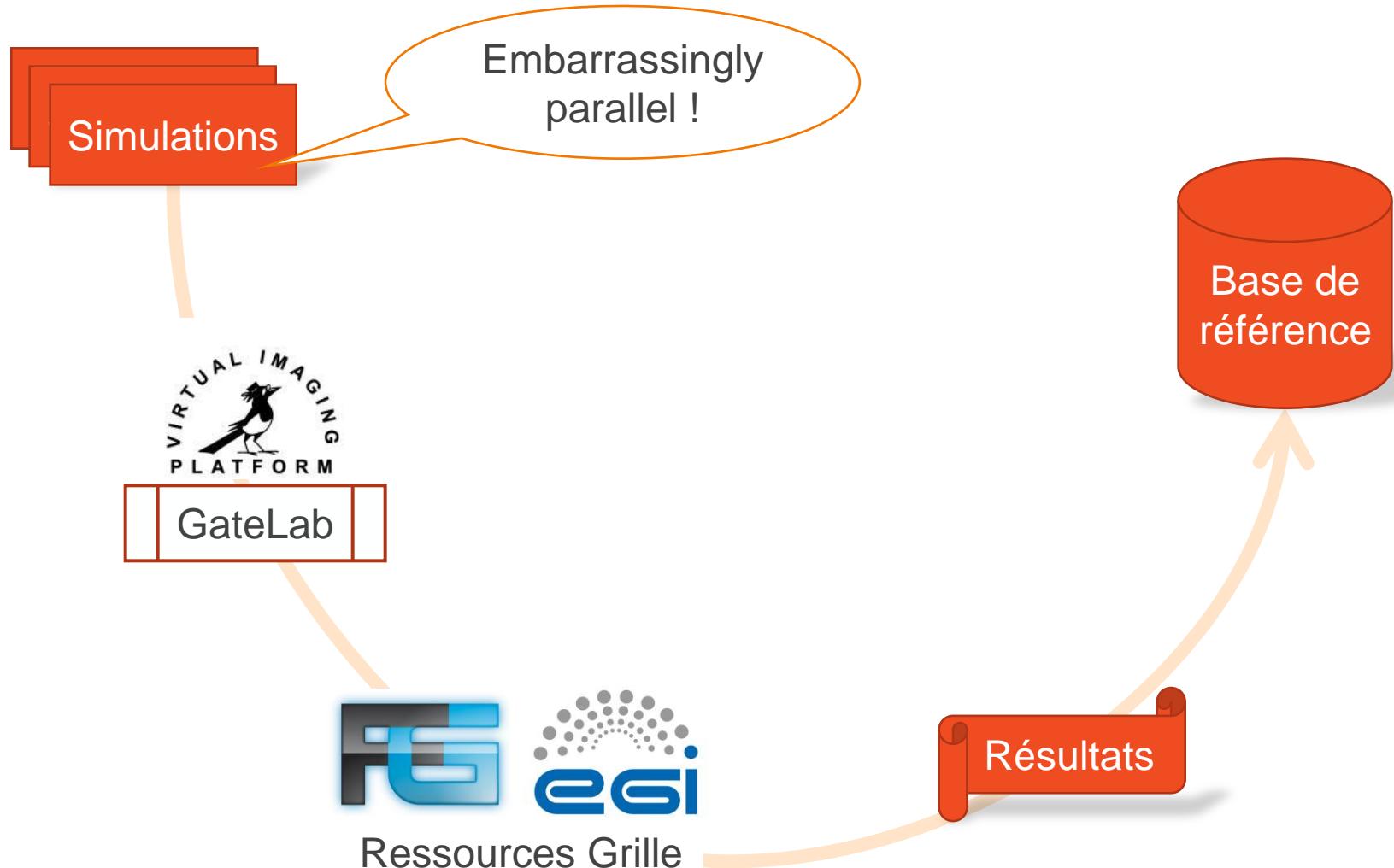
Users

1000+ registered users in January 2018

44 publications since 2011



Donc en résumé...



Oui, mais

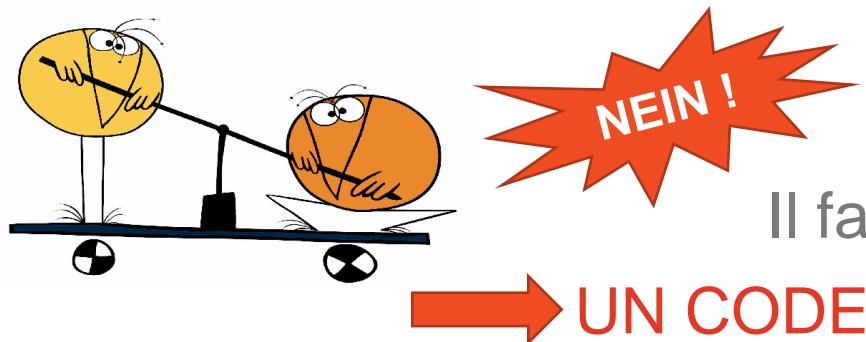


- Générer 31 304 fichiers de configuration ?



Il faut pouvoir paramétrer !

- Lancer à la main 31 304 simulations via le portail ?



Il faut pouvoir scripter !

Boutiques, c'est pratique !

Décrire Publier Intégrer Exécuter

des applications en ligne de commande inter-plateformes.

- Format JSON polyvalent
- Conteneurs Linux
- <https://github.com/boutiques>



Une nouvelle appli OpenDose en utilisant Boutiques

- Un fichier JSON décrivant :
 - La ligne de commande elle-même

```
"command-line": "tar -zxf [GATERELEASE]; unzip [INDATA];  
tar -zxvf gate_shared_libs.tar.gz; source ./init_env.sh;  
. /Gate -a [Source_ID, [ORGANID]] [particle, [PARTICLETYPE]] [energy, [ENERGY]]  
[nb, [NBPRIMARIES]] [MACFILE] > output.log;  
tar czf [RESULTS] ./output output.log",
```

- Les paramètres

```
"inputs": [  
{  
  "id": "gaterelease",  
  "name": "LFN of the Gate Release used by the application",  
  "optional": false,  
  "type": "File",  
  "value-key": "[GATERELEASE]"  
}, (...)]
```

Une nouvelle appli OpenDose en utilisant Boutiques

VIP v1.22 | Gilles Mathieu (Advanced) |

Home GateCLforOpenDose v0.1.0

GateCLforOpenDose v0.1.0

Documentation and Terms of Use

Execution Name*

Results directory*
Directory where the results will be stored.
List /vip/Home + 🔎

name of the output tar.gz file*
List + 🔎

LFN of the Gate Release used by the application*
List + 🔎

LFN of the archive containing all input data*
List + 🔎

Organ ID ref to the organs table*
List + 🔎

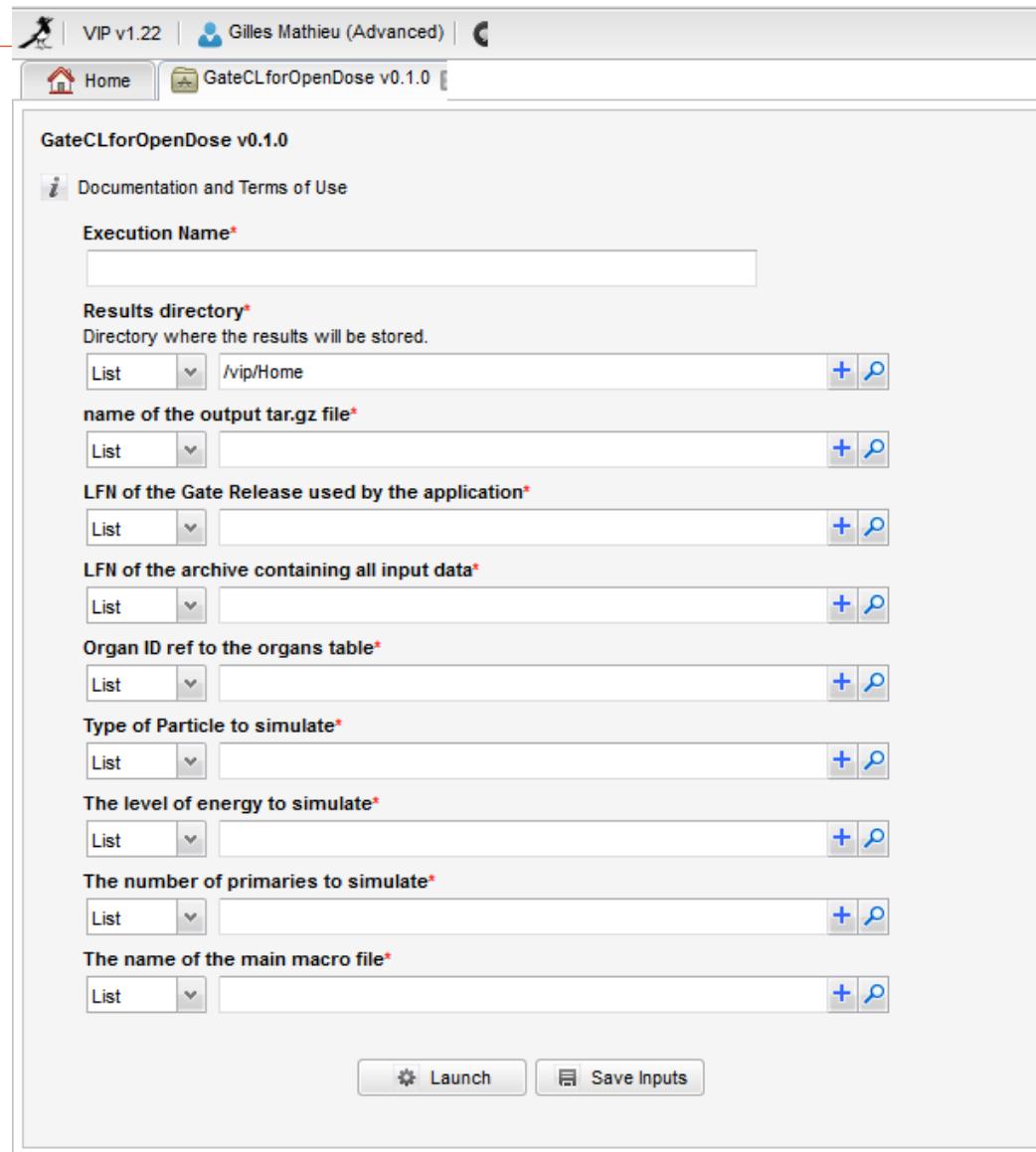
Type of Particle to simulate*
List + 🔎

The level of energy to simulate*
List + 🔎

The number of primaries to simulate*
List + 🔎

The name of the main macro file*
List + 🔎

Launch Save Inputs



CARMIN, c'est trop bien !

- <https://github.com/CARMIN-org>
- <https://app.swaggerhub.com/apis/CARMIN>

The screenshot shows a web browser window displaying the Swaggerhub interface for the CARMIN API. The URL in the address bar is https://app.swaggerhub.com/apis-docs/CARMIN/carmin-common_api_for_research_medical_imaging_n.... The page title is "CARMIN - Common API for Research Medical Imaging Network". Below the title, there are buttons for "0.3" and "OAS3". A brief description states: "REST API for exchanging data and remotely calling pipelines." Links for "CARMIN mailing list - Website" and "Send email to CARMIN mailing list" are provided, along with a link to the "MIT License". The main content area is titled "default" and lists three API endpoints:

- GET /platform** Returns information about the platform
- POST /authenticate** Returns the api key necessary to use the API.
- GET /executions** Lists some executions.

Un client OpenDose en utilisant CARMIN

```
public class OpenDoseClientClass {  
    public static void main(String[] args) throws ApiException {  
  
        //***** INIT API CLIENT *****/  
        ApiClient vipApiClient = new ApiClient();  
        vipApiClient.setApiKey("thisisadummykey");  
        vipApiClient.setBasePath("http://vip.creatis.insa-lyon.fr/rest");  
        DefaultApi vipApi = new DefaultApi(vipApiClient);  
  
        //***** SET PIPELINE AND LAUNCH EXECUTION *****/  
        Execution execution = new Execution();  
        execution.setPipelineIdentifier("GateCLforOpenDose/0.1.0");  
  
        Map<String, Object> inputValues = new HashMap<>();  
        inputValues.put("indata", gateInputLFN);  
        inputValues.put("gaterelease", gateReleaseLFN);  
        inputValues.put("nbprimaries", numberOfWorkingPrimaries);  
        inputValues.put("macfile", macFileName);  
  
        // loop over all organs found in input matrix  
        for (String organ : organsList) {  
            inputValues.put("organid", organ);  
            // loop over all particle types  
            for (String particle : particlesList) {  
                inputValues.put("particletype", particle);  
                // loop over all energy levels  
                for (String energy : energiesList) {  
                    inputValues.put("energy", energy);  
                    executionName = "OpenDose_" + organ + " " + particle + " " + energy;  
                    inputValues.put("outfilename", executionName + ".tar.gz");  
                    // setup and launch execution  
                    execution.setInputValues(inputValues);  
                    execution.setName(executionName);  
                    execution = vipApi.initExecution(execution);  
                }  
            }  
        }  
    }  
}
```

Initialisation

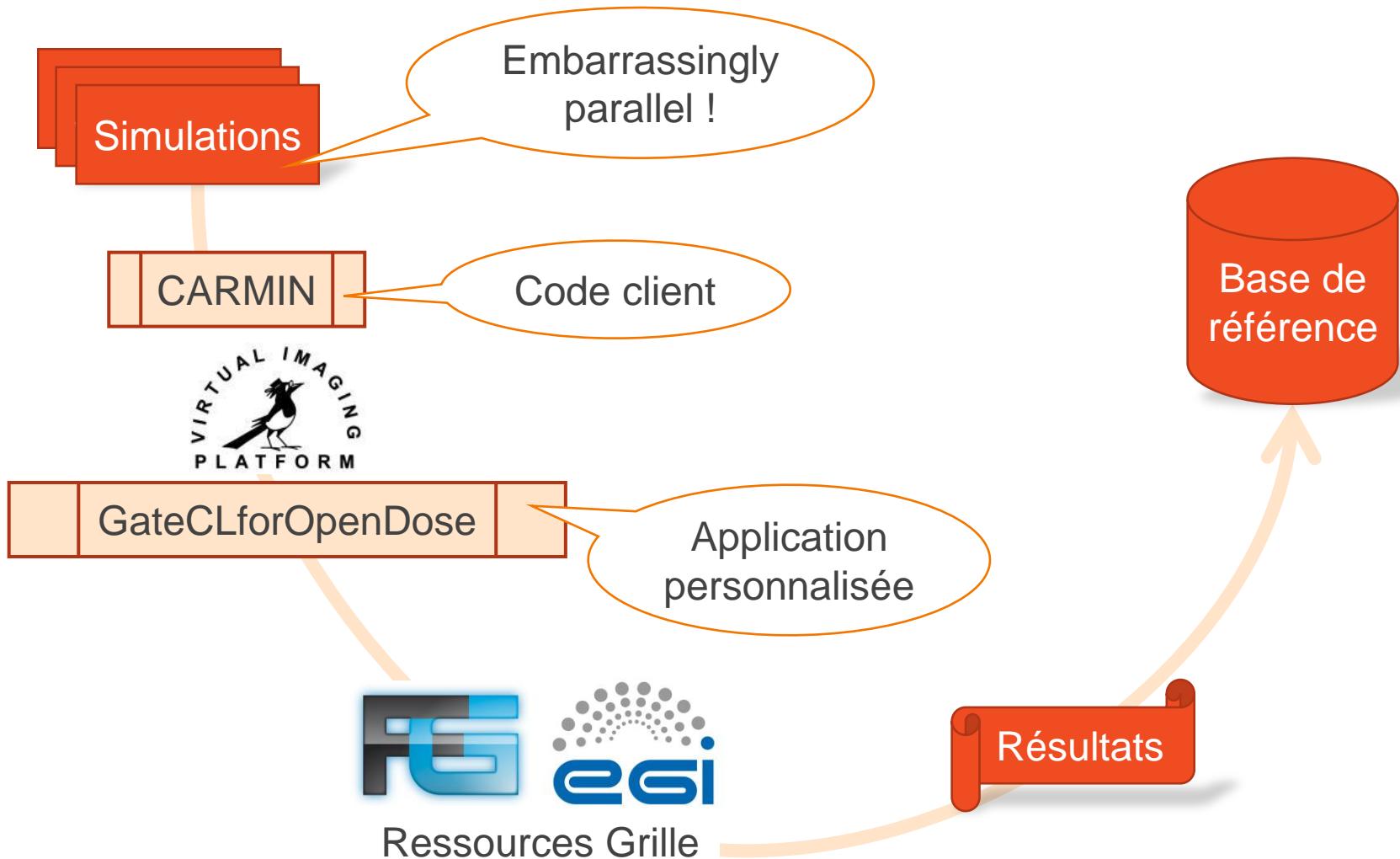
Définition de l'appli à utiliser

Passage des paramètres

Boucle imbriquées

1 organe
+ 1 particule
+ 1 niveau d'énergie
= 1 job soumis

Donc en résumé... (v2.0)



Et on en est où maintenant ?

- Analyse du workflow global
 - Premiers tests de soumission via GateLab
 - Code client utilisable
 - Application GateCLforOpenDose disponible
 - Tests en environnement « production »
 - Lancement des simulations
 - Exploitation des résultats
- **Objectif : lancement de la première vague de production d'ici fin 2018.**

Un premier retour d'expérience

Le bien

- Outils existants
- Collaborateurs efficaces
- Automatisation
- Optimisation

Le moins bien

- Besoin de tuning
- Stagnation initiale
- Développement spécifique = risque de perte des bénéfices de l'existant

To the future, and beyond

- **Industrialisation**

- Optimisation
- Plus de modèles
- Reproductibilité et traçabilité

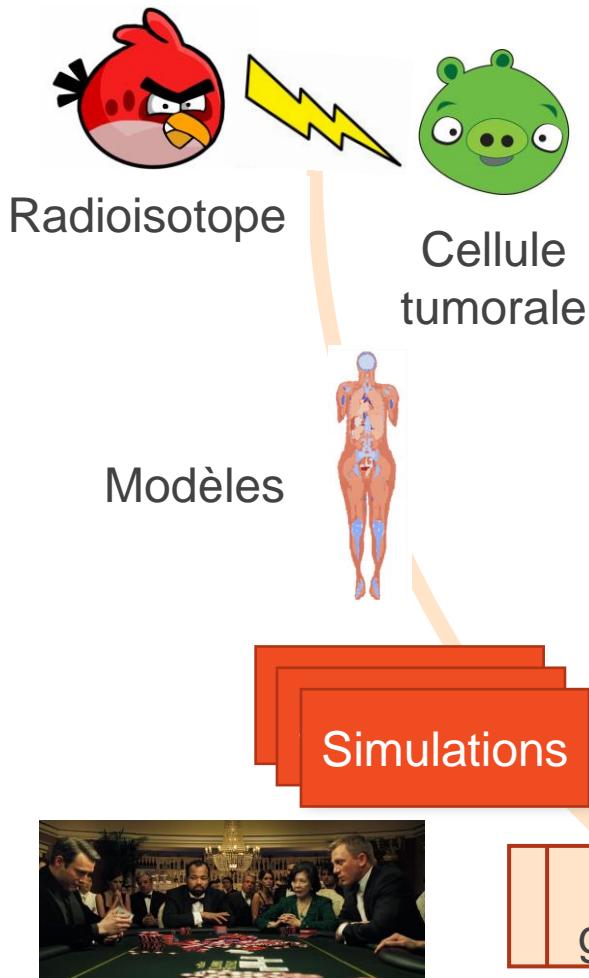
- **Exploration scientifique**

- Réutilisation du socle
- Autres logiciels ?

- **Exploration technique**

- Autres outils ?
- Autres infrastructures ?

Computing@OpenDose in a nutshell



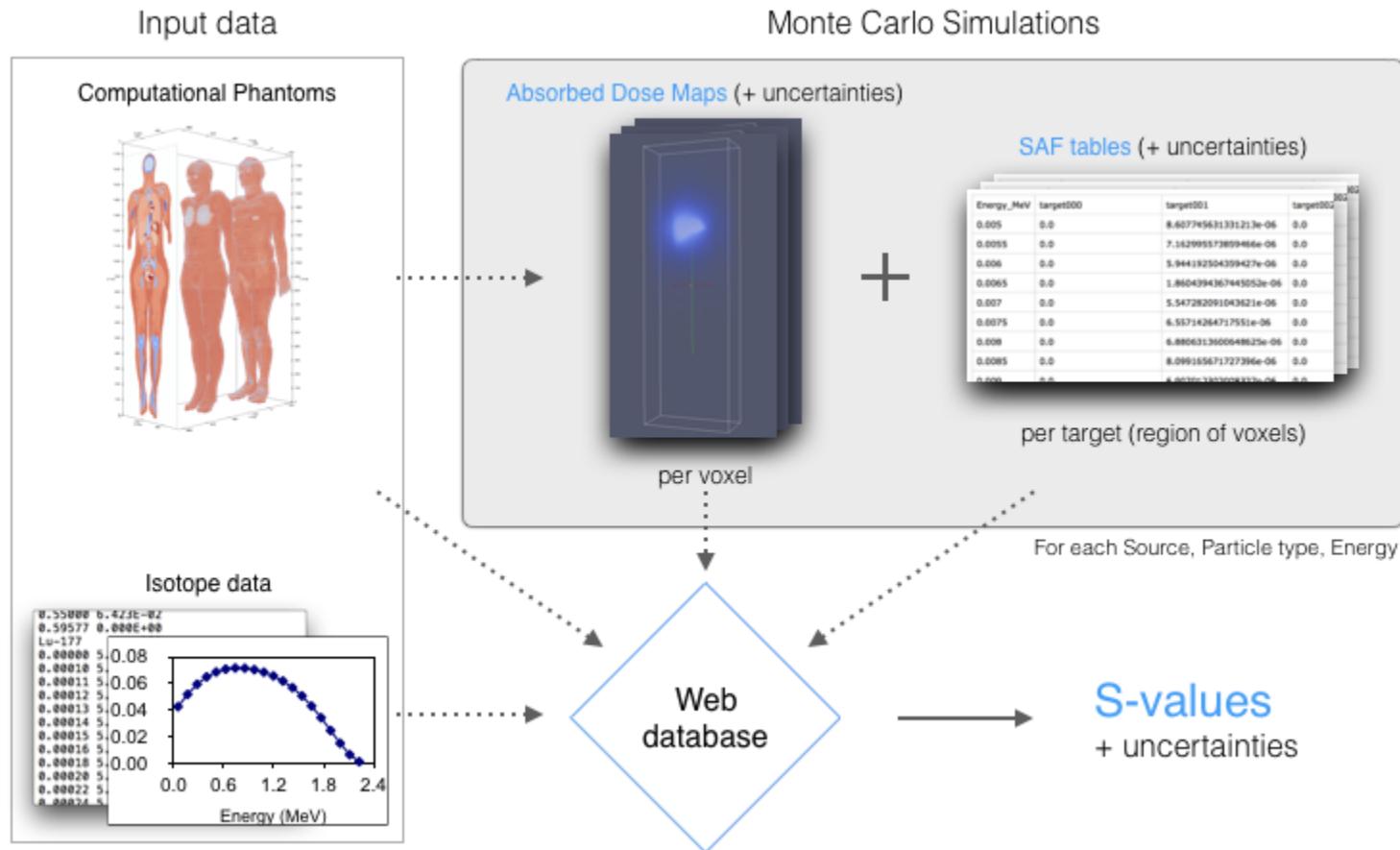


La science pour la santé _____
From science to health

Annexes

*Informations, liens et références
pour une lecture offline*

La collaboration OpenDose



http://people.na.infn.it/~mettivie/MCMA%20presentation/18%20Aula%20Magna/9_45_Chauvin.pdf

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_MRTdosimetryWorks hop_Chauvin.pdf

France Grilles



- Une offre de services sur une infrastructure informatique distribuée pour le calcul et le stockage de données scientifiques
- Une équipe d'animation au service de l'ensemble des acteurs qui coordonne les opérations de cette infrastructure basée sur les technologies de grille et de cloud informatiques
- Une communauté de plus d'un millier d'utilisateurs dynamiques, prêts à partager leurs connaissances et à s'entraider
- Le représentant de la France au niveau international au sein d'EGI
- Et surtout et avant tout un réseau résolument humain !
- www.france-grilles.fr

- Une présentation formidable aux JCAD2018
 - Mercredi 24/10 à 16h
- www.egi.eu



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 Bardès, Maxime Chauvin
- *CREATIS, CNRS, INSERM, Université Claude Bernard Lyon I, INSA, Lyon, France*
 - Axel Bonnet, Sorina Camarasu Pop
- *INSERM, DSI, Coordination de l'Informatique Scientifique, Paris, France*
 - Gilles Mathieu, Isabelle Perseil