КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В ЗАДАЧАХ ОПТИЧЕСКОЙ ДИФФУЗИОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ НА ВЫЧИСЛИТЕЛЯХ С ПАРАЛЛЕЛЬНОЙ АРХИТЕКТУРОЙ

А.В. Горшков[1,2], М.Ю. Кириллин[2], В.П. Гергель[1]

[1]Нижегородский госуниверситет им. Н.И. Лобачевского
[2]Институт прикладной физики РАН

Кратко описан алгоритм моделирования распространения зондирующего излучения методом Монте-Карло, адаптированный для решения задач оптической диффузионной спектроскопии. Дана оценка эффективности и масштабируемости параллельной версии алгоритма для систем с общей и распределенной памятью. Описаны результаты переноса и подходы к оптимизации алгоритма на графические процессоры и ускорители Intel Xeon Phi. Выполнено сравнение версий алгоритма для различных архитектур с точки зрения времени его работы.

Введение

В настоящее время в медицинских исследованиях существует потребность в развитии новых, безопасных для человека и доступных методов диагностики, поскольку используемые традиционные методы (МРТ, КТ, ПЭТ) имеют ряд ограничений, связанных с их небезопасностью, высокой стоимостью оборудования и значительными требованиями к инфраструктуре. Классом наиболее перспективных методов диагностики, которые могут применяться как в сочетании с существующими методами, так и, в некоторых случаях, вместо них, являются оптические методы.

Одним из таких методов является оптическая диффузионная спектроскопия (ОДС), основанная на регистрации многократно рассеянного объектом зондирующего излучения на нескольких длинах волн. Нужные длины волн определяются в соответствии со спектрами поглощения исследуемых компонент организма. В частности, применение ОДС для функциональной диагностики мозга основано на облучении мозга человека источниками излучения различных длин волн, выбирающихся в соответствии с различиями спектров поглощения окси- и дезоксигемоглобина, концентрации которых в коре головного мозга изменяются при умственной активности. Взаимное расположение источников и детекторов определяет измерительный объем, в то время как информация о потерях излучения в среде позволяет определить соотношение окси- и дезоксигемоглобина в этом объеме [1].

Получение количественной диагностической информации на основании данных ОДС требует учета особенностей процессов распространения излучения в биологических объектах. Из-за сложной и неоднородной структуры таких объектов использование аналитических подходов к описанию этих процессов затруднительно. В этой связи эффективным выглядит применение компьютерного моделирования распространения зондирующего излучения в объектах со сложной геометрией.

Наиболее подходящими методами решения задач оптической диффузионной спектроскопии являются алгоритмы на базе метода Монте-Карло [2, 3]. Такие алгоритмы позволяют решать достаточно общие задачи моделирования распространения излучения в различных средах, включая биологические ткани, с учетом сложной геометрии исследуемых объектов. Основной недостаток таких методов – большая вычислительная

трудоемкость. Для повышения их эффективности исследователи работают как над оптимизацией алгоритмов моделирования [4-6], так и над использованием вычислителей с параллельной архитектурой [7-9].

1. Моделирование распространения излучения методом Монте-Карло

Идея алгоритма моделирования распространения излучения методом Монте-Карло состоит в трассировке набора фотонов в среде. Для улучшения качества метода рассматриваются не отдельные фотоны, а так называемые пакеты фотонов. Каждому пакету ставится в соответствие определенный начальный вес. Обычно, для упрощения расчетов, начальный вес принимают за единицу. Далее понятия фотона и пакета фотонов будут отождествляться.

Среда описывается набором слоев, каждый слой обладает рядом оптических характеристик и определенной геометрией границ.

Начальное положение и направление фотона определяется соответствующими параметрами источника излучения. Рассчитывается случайная величина, определяющая длину свободного пробега фотона в среде. На каждом шаге часть фотонов поглощается средой, что проявляется в уменьшении веса пакета фотонов на соответствующую величину. По окончании акта поглощения рассматривается рассеяние пакета фотонов. При этом фотоны меняют направление своего движения случайным образом.

Описанная последовательность шагов повторяется до тех пор, пока большинство фотонов пакета не будут поглощены либо не покинут исследуемый объект. В соответствие с тем, каким образом прекращается моделирование фотона, все фотоны можно разделить на 3 класса – диффузионно-отраженные, поглощенные и прошедшие (рис. 1).

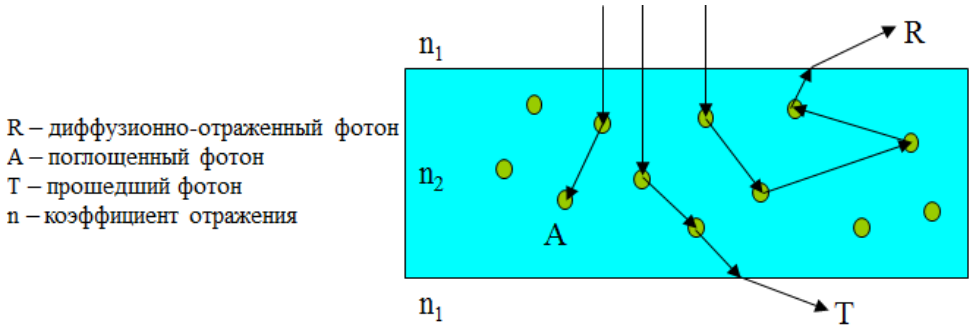

Рис. 1. Траектории движения и типы фотонов

В задачах оптической диффузионной спектроскопии дополнительно вводится понятие детектора – некоторой области на внешней границе среды, которая способна улавливать прошедшие через нее фотоны. И наиболее интересными являются траектории диффузионно-отраженных фотонов, прошедших через тот или иной детектор [10]. Полученная информация позволяет определить взаимное расположение источника и детекторов с тем, чтобы траектории фотонов, попавших в эти детекторы, проходили через интересующую исследователя область.

Отметим также, что для учета сложной геометрии тканей используется следующий подход. Объект моделирования разбивается на слои, границы которых представляются в виде триангулированных поверхностей. И на каждом шаге моделирования проверяется, пересекла ли траектория движения фотона границу текущего слоя. Для ускорения алгоритма поиска пересечения используются BVH-деревья [11].

2. Параллельный алгоритм для систем с общей и распределенной памятью

Методы Монте-Карло по своей природе хорошо распараллеливаются, так как проводимые в рамках метода испытания случайной величины обычно не зависят друг от

друга. В задаче моделирования распространения излучения трассировку фотонов также можно проводить независимо, что позволяет создавать эффективные параллельные алгоритмы для решения уравнения переноса излучения методом Монте-Карло.

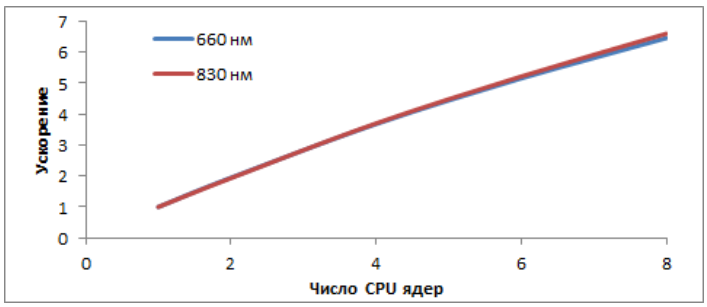

Рис. 2. Ускорение алгоритма моделирования распространения света на системах с общей памятью (2 процессора Intel Xeon L5630 (4 ядра в каждом), 24 ГБ RAM) при разных длинах волн источника излучения, 320 000 фотонов

Очевидным подходом к ускорению алгоритма моделирования является использование возможностей современных многоядерных процессоров. В силу высокой степени параллелизма задачи применение многоядерных CPU позволяется существенно сократить время моделирования. Проведенные эксперименты показывают, что эффективность распараллеливания описанного алгоритма на одном процессоре составляет 92%, а на двух CPU, установленных в рамках одного узла, 81%. Снижение эффективности во втором случае обусловлено увеличением числа запросов к оперативной памяти при постоянной ширине шины данных (рис. 2). Отметим, что все тесты проводились на геометрии головы человека, полученной по данным МРТ (~2 000 000 треугольников).

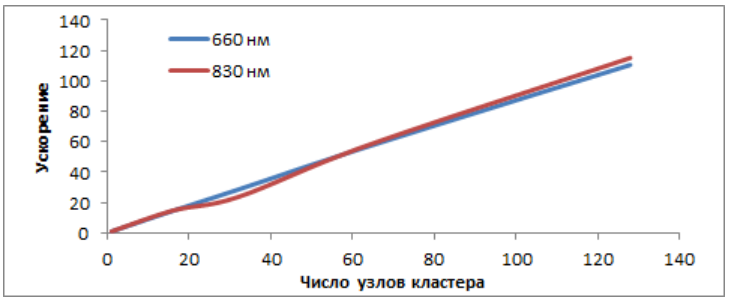

Рис. 3. Ускорение алгоритма моделирования распространения света на системах с распределенной памятью (128 узлов, на каждом 2 процессора Intel Xeon X5570, 12 ГБ RAM) при разных длинах волн источника излучения, 16 000 000 фотонов

Следующий шаг – использование систем с распределенной памятью. Принципиальной особенностью таких систем является необходимость организации обменов данными между отдельными узлами системы. Причем от степени эффективности обменов существенно зависит и скорость работы программы в целом. Отметим, что в рассматриваемой задаче передачу данных нужно делать только в начале и в конце работы алгоритма моделирования, а значит, данный алгоритм теоретически должен показывать хорошую эффективность распараллеливания и близкую к линейной масштабируемость.

Это подтверждается проведенными экспериментами. В частности, эффективность распараллеливания алгоритма на 128 узлах кластера составляет 90% (рис. 3).

3. Параллельный алгоритм для ускорителей Intel Xeon Phi

Intel Many Integrated Core (MIC) – архитектура многоядерной процессорной системы на базе x86 CPU ядер. Используется в сопроцессорах Intel Xeon Phi, предназначенных для ускорения задач общего назначения и составляющих в этом плане конкурен-

цию GPU. Основное достоинство данной архитектуры состоит в том, что для ее использования программисту не требуется изучать новые технологии и применять новые средства разработки. Основные отличия сопроцессора от CPU заключаются в следующем. Во-первых, число одновременно выполняющихся потоков на Intel MIC на порядок больше, чем на процессоре. И во-вторых, время доступа к памяти на сопроцессоре существенно больше, а, значит, нужно обратить особое внимание на эффективное использование кэш-памяти.

В качестве модели программирования для переноса алгоритма моделирования распространения света был выбран нативный (native) режим, когда весь код программы исполняется на сопроцессоре без использования CPU. Альтернативный вариант – offload режим, когда программа запускается на процессоре, а критические с точки зрения времени выполнения участки кода копируются для выполнения на сопроцессор. Выбор нативного режима обусловлен тем, что для использования ускорителя в этом случае не требуется модификации исходного кода.

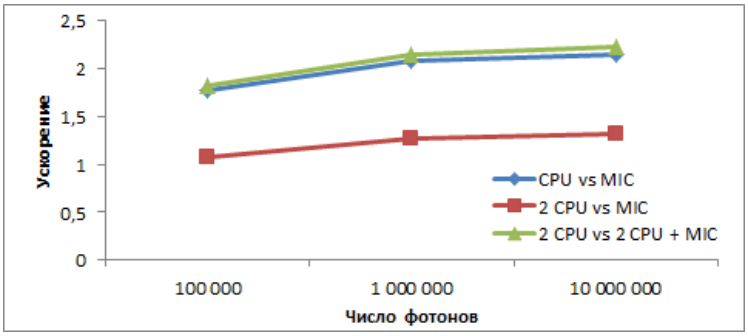

Рис. 4. Ускорение алгоритма моделирования распространения света на Intel MIC (2 процессора Intel Xeon X5680 (6 ядер), 32 ГБ RAM, Intel Xeon Phi SE10X)

Прямой перенос кода на Intel Xeon Phi позволил получить производительность на уровне 6-ядерного процессора Intel Xeon Phi X5680. Дальнейшие оптимизации, направленные на улучшение работы с памятью, позволили ускорить начальную версию программы на Intel MIC в 4 раза. Отметим, что те же оптимизации применялись и к CPU-версии кода, что позволило получить двукратный прирост производительности на процессоре. Полученные результаты приведены на рис. 4.

4. Параллельный алгоритм для графических процессоров

Алгоритм моделирования переноса излучения был перенесен также и на графические процессоры. За основу была взята оптимизированная версия, полученная на предыдущем этапе при работе с Intel Xeon Phi. Следует отметить, что те улучшения, направленные на работу с памятью, что были сделаны ранее в расчете на сопроцессор, оказались полезными и при работе с GPU. При этом использование графического процессора позволило получить производительность программы на уровне Intel Xeon Phi (в 3 раза быстрее процессора Intel Xeon L5630 с 4 ядрами). Результаты переноса приведены на рис. 5.

Заключение

В данной работе приведены результаты сравнения производительности параллельных алгоритмов для моделирования распространения света в гетерогенных средах с произвольной геометрией. Показано, что эффективность распараллеливания описанного здесь алгоритма на системах с общей и распределенной памятью близка к максимальной, масштабируемость на системах с распределенной памятью близка к линейной. Продемонстрированы результаты переноса алгоритма на графические процессоры

и ускорители Intel Xeon Phi. Показано, что производительность обоих типов ускорителей в данной задаче примерно одинакова.

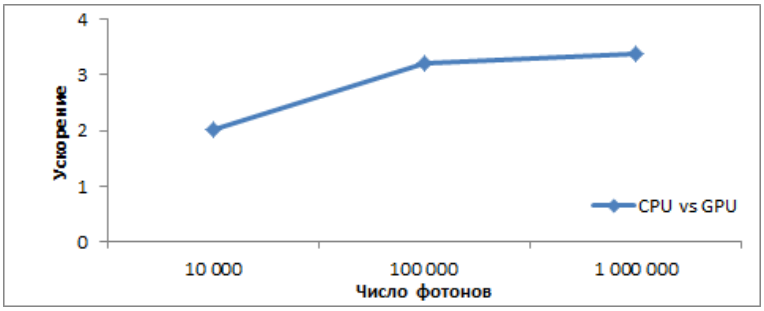

Рис. 5. Ускорение алгоритма моделирования распространения света на GPU (2 процессора Intel Xeon L5630 (4 ядра), 24 ГБ RAM, NVidia Tesla X2070)

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (соглашение 8741) и гранта Президента РФ МК-1652.2012.2 при организационной поддержке Лаборатории информационных технологий ННГУ.

Литература

1. Sorvoja H.S.S., Myllylä T.S., Kirillin M.Yu., Sergeeva E.A., Myllylä R.A., Elseoud A.A., Nikkinen J., Tervonen O., Kiviniemi V. Non-invasive, MRI-compatible fibreoptic device for functional near-IR reflectometry of human brain // Quantum Electorinics. – 2010. – Vol. 40, No. 12. – P. 1067-1073.
2. Chuang C.C., Chen C.M., Hsieh Y.S., Liu T.C., Sun C.W. Brain structure and spatial sensitivity profile assessing by near-infrared spectroscopy modeling based on 3D MRI data // J. Biophotonics. – 2013. – Vol. 6, No. 3. – P. 267-274.
3. Franceschini M.A., Boas D.A. Noninvasive measurement of neuronal activity with near-infrared optical imaging // Neuroimage. – 2004. – Vol. 21, No. 1. – P. 372-386.
4. Wang L., Jacques S.L. Hybrid model of Monte Carlo simulation and diffusion theory for light reflectance by turbid media // J. Opt. Soc. Am. A. Opt. Image. Sci. Vis. – 1993. – Vol. 10, No. 8. – P. 1746-1752.
5. Alerstam E., Andersson-Engels S., Svensson T. White Monte Carlo for time-resolved photon migration // J. Biomed. Opt. – 2008. – Vol. 13, No. 4. – P. 041304.
6. Chen N. Controlled Monte Carlo method for light propagation in tissue of semi-infinite geometry // Appl. Opt. – 2007. – Vol. 46, No. 10. – P. 1597-1603.
7. Majumdar A. Parallel performance study of Monte Carlo photon transport code on shared-, distributed-, and distributed-shared-memory architectures // International Parallel and Distributed Processing Symposium. – 2000. – P. 93.
8. Luu J., Redmond K., Yip Lo W.Ch., Chow P., Lilge L., Rose J. FPGA-based Monte Carlo computation of light absorption for photodynamic cancer therapy // 17th IEEE Symposium of Field-programmable Custom Computing Machines. – 2009. – P. 157-164.
9. Fang Q., Boas D.A. Monte Carlo simulation of photon migration in 3D turbid media accelerated by graphics processing units // Opt. Express. – 2009. – Vol. 17, No. 22. –P. 20178–20190.
10. Gorshkov A.V., Kirillin M.Yu. Monte Carlo simulation of brain sensing by optical diffuse spectroscopy // Journal of Computational Science. – 2012. – Vol. 3. – P. 498-503.
11. Горшков А.В., Коршунова А.Л. Оптимальный алгоритм поиска пересечений в задаче Монте-Карло-моделирования распространения зондирующего излучения в головном мозге человека // Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. – 2012. – Т. 5, Ч. 2. – С. 73-80.