

**Моделирование динамики
живых систем с
использованием
суперкомпьютерных
технологий**

**Г.В.Осипов
(ННГУ)**

Нелинейная динамика и суперкомпьютерные вычисления

- Школа теории колебаний академика А.А.Андронова
- Качественные методы исследования динамики систем
- Математическое моделирование
- Суперкомпьютерные вычисления

Живые системы

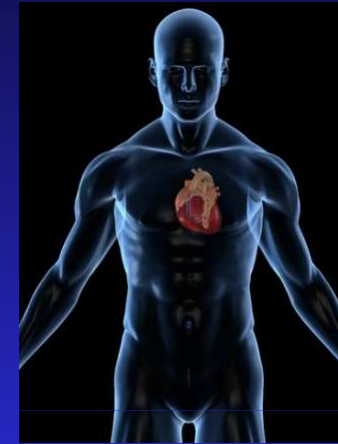
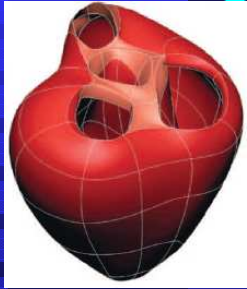
- Кардиосети
(сердечная ткань, целое сердце)

- Нейронные сети (участки мозга, целый мозг)

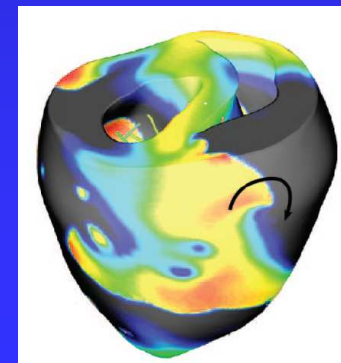
1. Сердце. Суперзадача – создание «виртуального сердца»

- Электрическая активность
- Механическая активность
- Сосуды
- Реальная геометрия
- Влияние нервной системы
- ...

Personalized Virtual Hearts for Personalized Arrhythmia Treatment

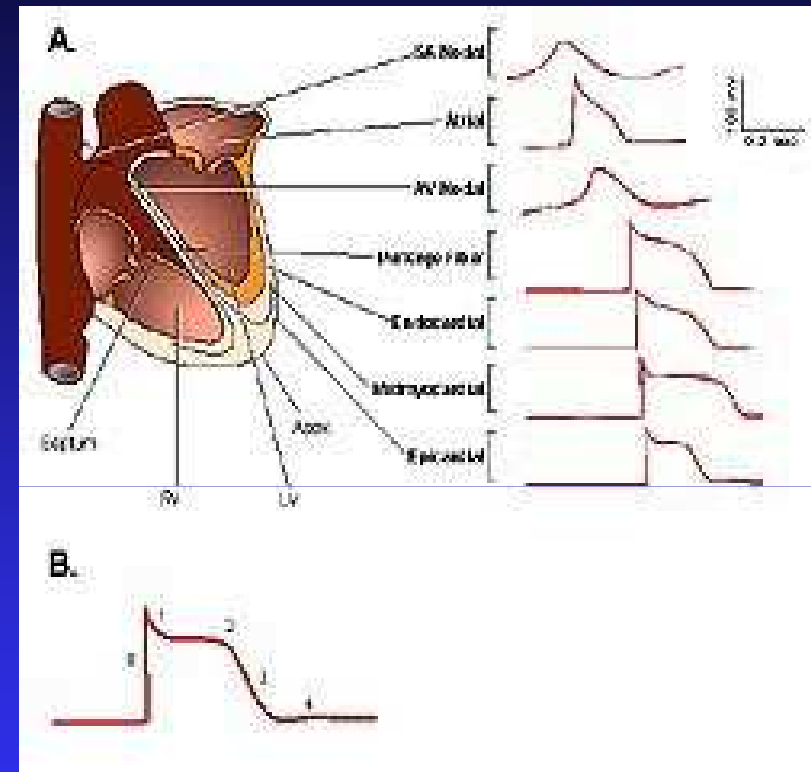
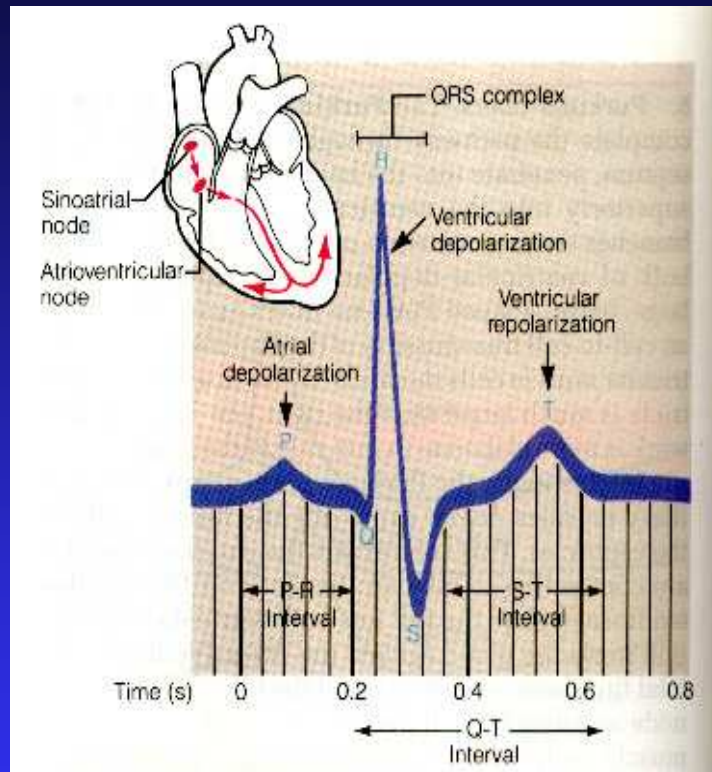


Расчет



Лечение

Нормальный ритм и сердечные аритмии

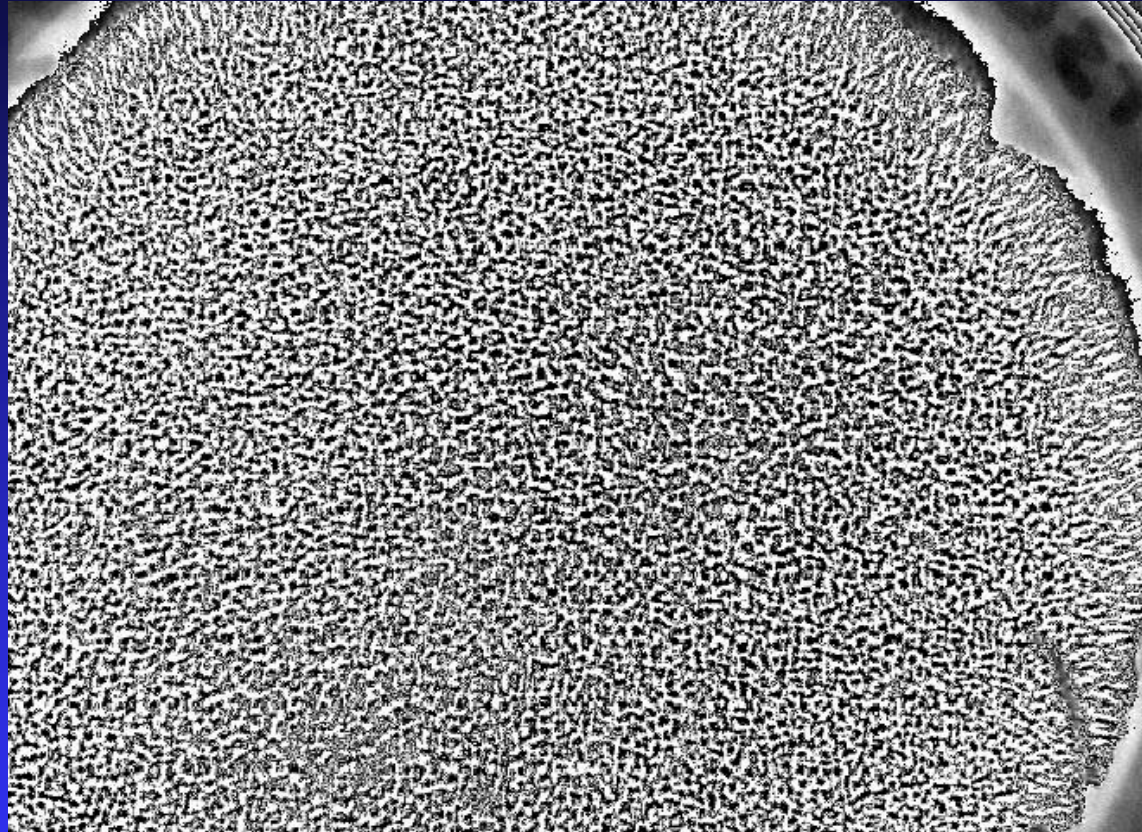


Волны электрической активности распространяются в сердечной ткани. Небольшая область - группа клеток, называемая пейсмейкерными, обеспечивает генерацию импульсов, необходимых для обеспечения нормального ритма сердца. А когда происходит пауза в распространении, это означает, что среда готовится к проведению следующей волны возбуждения. Этот ритм повторяется сотни раз каждый час.

Лаборатория электрофизиологии и моделирования сердца



Эксперименты с культурами сердечных клеток. Метод: Phase Contrast Imaging



- Микроскоп (слева)
- Культура клеток, наблюдаемая в микроскоп (справа)
- Аппаратура реагирует на изменение фазы колебаний клеток
- Белый цвет – клетка совершает колебания, черный цвет – клетка не двигается

Модели одной клетки

- Hodgkin-Huxley (1952)
- FitzHugh-Nagumo (1960,1961)
- Beeler-Reuter (1977)
- Luo-Rudy (1991,1994,2000)
- Ten Tusscher and Co. (2003)
- Zhang (2004)
- Maltsev-Lokatta(2010)
- Grandi (2010)
- ...

Модели среды

- Смешанные среды (автоколебательные, возбудимые и пассивные элементы)
- Мультидоменные модели
- Сложная геометрия

Модель Луо-Руди

$$dV/dt = -1/C (I_{Na} + I_{si} + I_K + I_{K1} + I_{Kp} + I_b + I_{stimulus})$$

$$I_{Na} = G_{Na} m^3 h j (V - E_{Na}) \quad I_{K1} = G_{K1} K_{1i}(V) (V - E_{K1})$$

$$I_{si} = G_{si} d f (V - E_{si}(V, c)) \quad I_{Kp} = G_{Kp} Kp(V) (V - E_{K1})$$

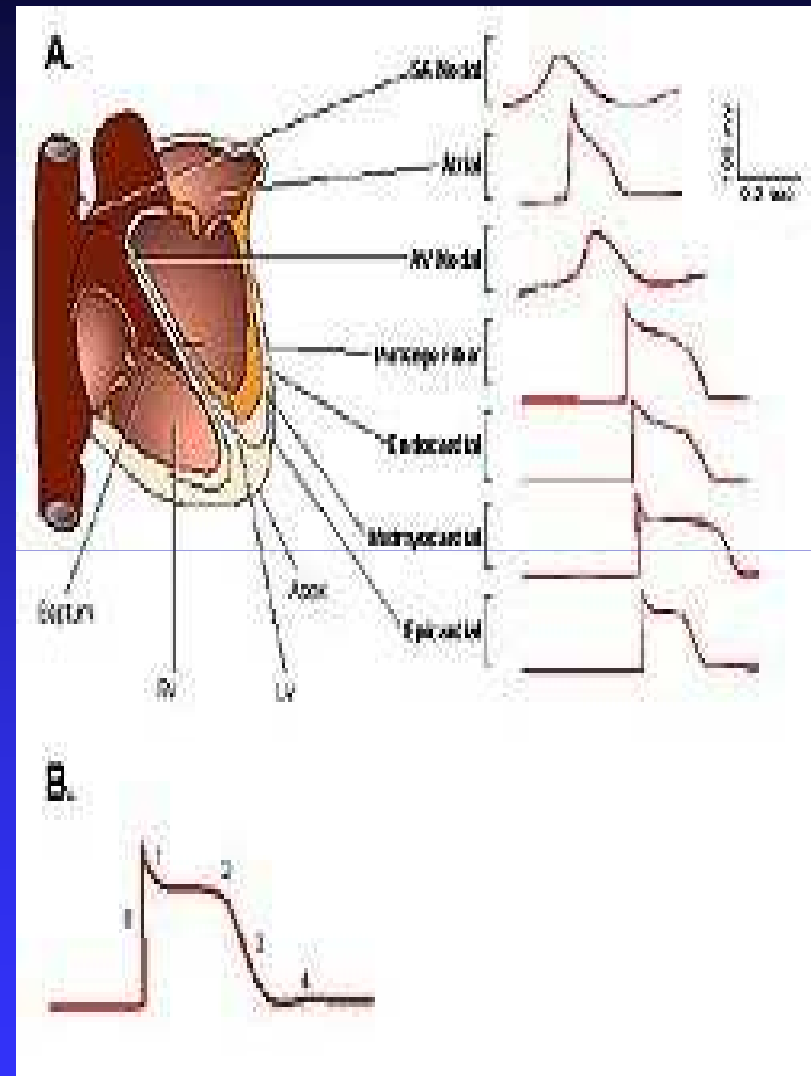
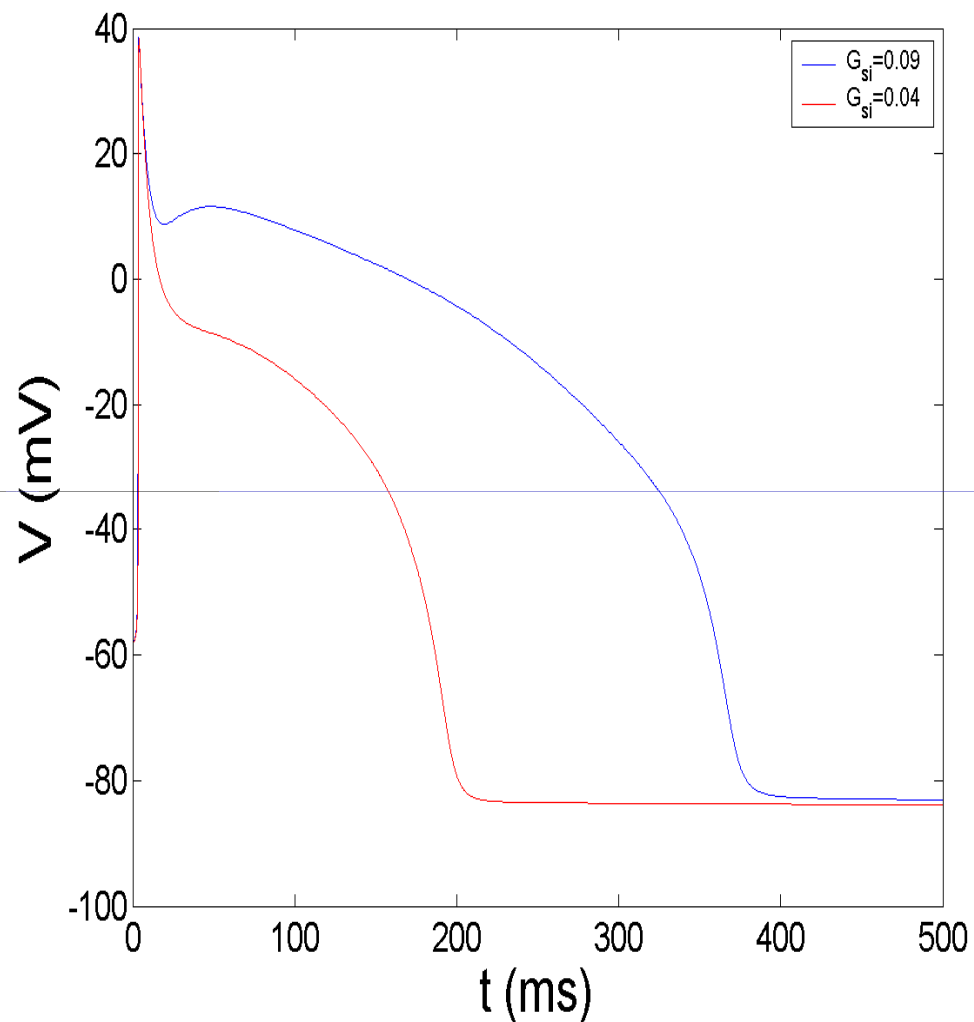
$$I_K = G_K x x_i(V) (V - E_K) \quad I_b = G_b (V - E_b)$$

$$dg_i/dt = \alpha_i(V) (1 - V) - \beta_i(V) V$$

$$dc/dt = -10^{-4} I_{si}(V, c, d, f) + 0.07(10^{-4} - c)$$

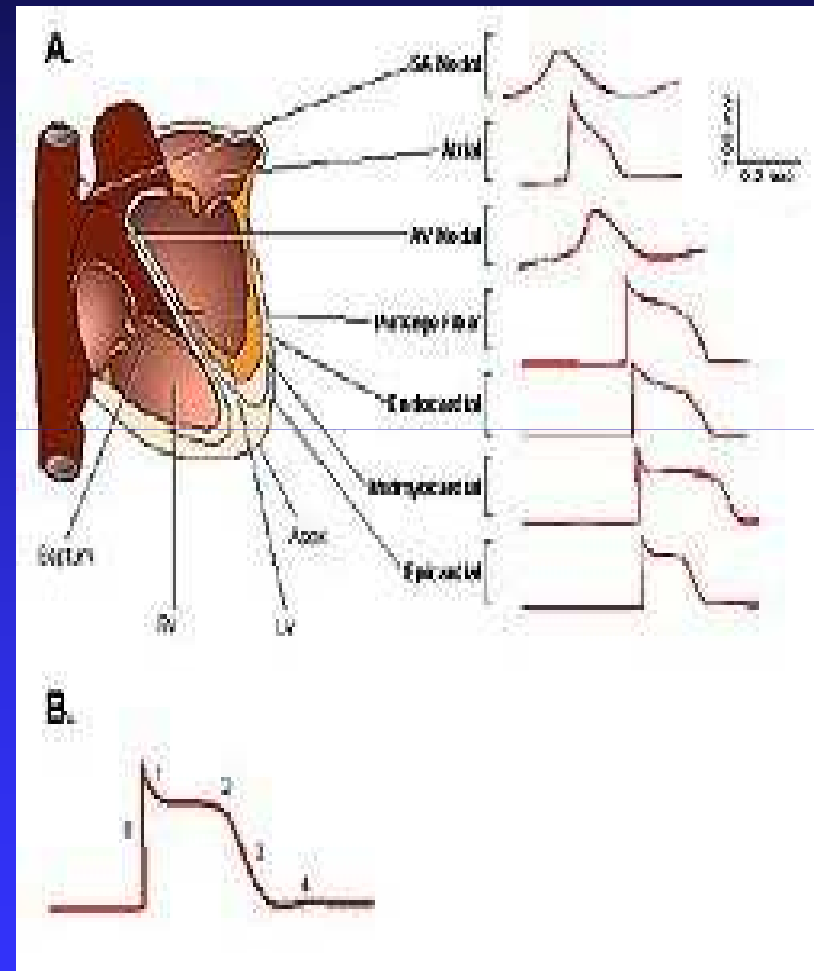
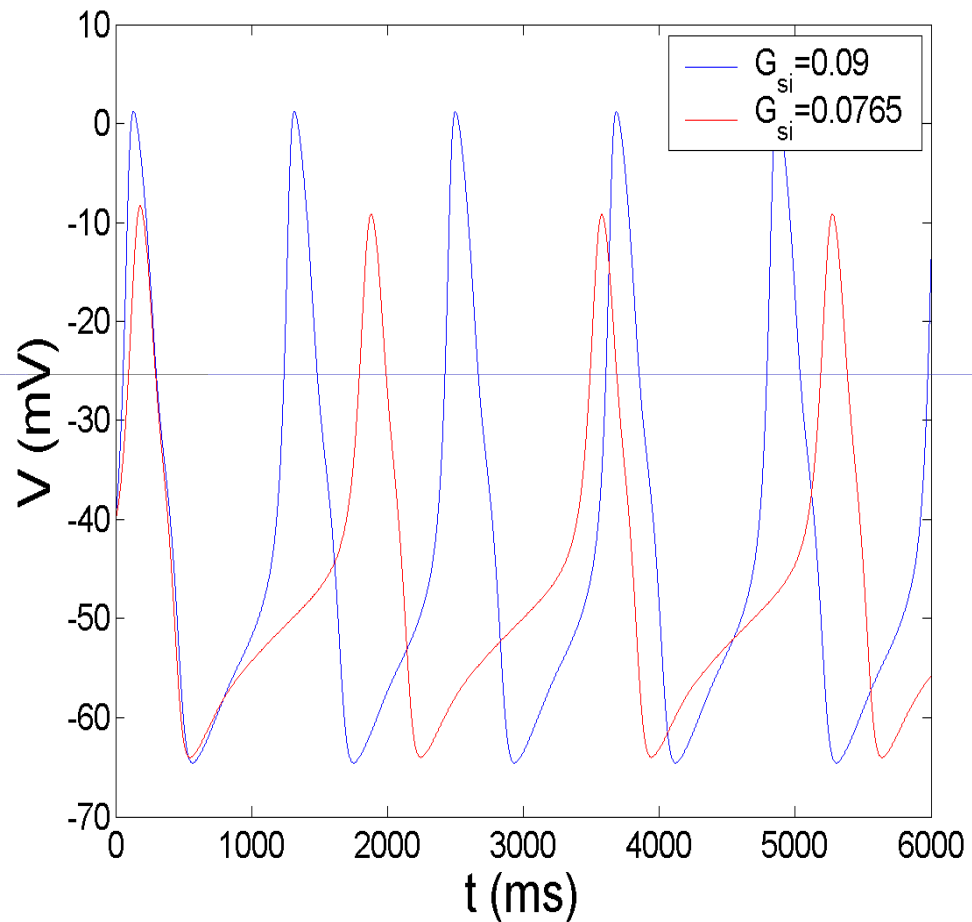
Управляющие параметры: G_{na} , G_{si} , G_K , G_{K1} , $I_{stimulus}$

Возбудимая клетка (кардиомиоцит)



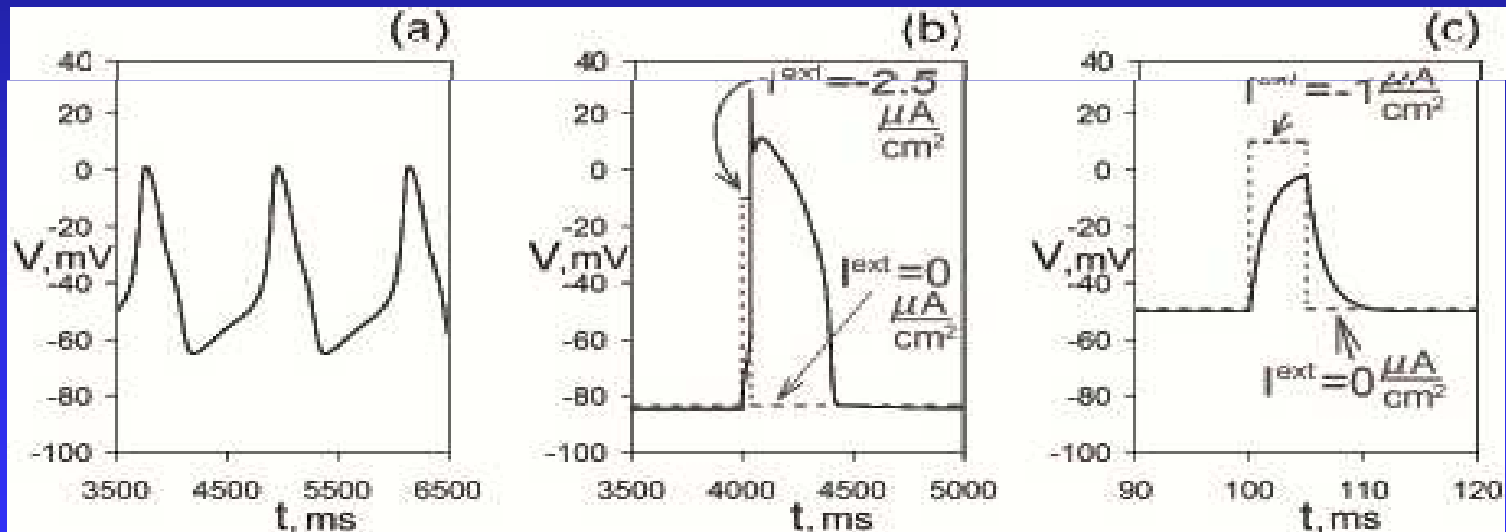
Зависимость от G_{si}

Автоколебательная клетка (пейсмекерная клетка синусного узла) ($G_{K1}=0$)



Модель Коля для фибробластов

$$\frac{dV_F}{dt} = -\frac{1}{C_F} G_F (V_F - E^{rest})$$



pacemaker

myocyte

fibroblast

Сети элементов

$$C_m \frac{\partial V}{\partial t} = -I_{\text{ion}} - I_{\text{stimulus}} + C_m D \nabla^2 V,$$

where V is the membrane voltage, $C_m = 1 \mu\text{F}/\text{cm}^2$ is the membrane capacitance, $D = 0.001 \text{ cm}^2/\text{ms}$ is the diffusion coefficient, I_{stimulus} is the input stimulus, and I_{ion} is the sum of six ionic currents,

$$I_{\text{ion}} = I_{\text{Na}} + I_{\text{si}} + I_{\text{K}} + I_{\text{K1}} + I_{\text{Kp}} + I_b$$

Вычислительная сложность экспериментов

- ◎ Для моделирования необходимо считать изменение миллиардов переменных!
- ◎ Большие длительности проводимых экспериментов.
- ◎ Необходимо проводить эксперименты большое число раз в широком диапазоне изменения параметров

Необходимость применения суперкомпьютерных технологий

Суперкомпьютерный кластер ННГУ

- Пиковая производительность 2.7
- Общий объем оперативной памяти
- 64 вычислительных узла
- CPU: 2xIntel XEON 5150 Dual Core (4x2.06

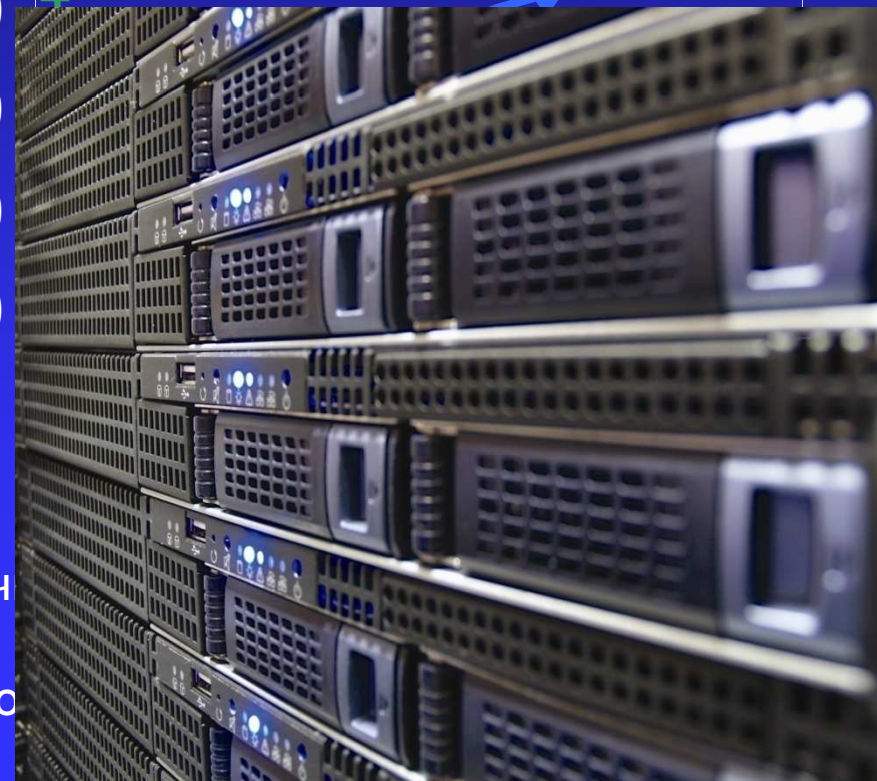


Был разработан
параллельный алгоритм
с использованием
специализированного
для данной задачи
метода интегрирования

2.06 Ghz cores)

RAM: 4Gb DDR2

- время вычисления конкретной задачи
- ускорение, получаемое при использовании (в разах) - синий



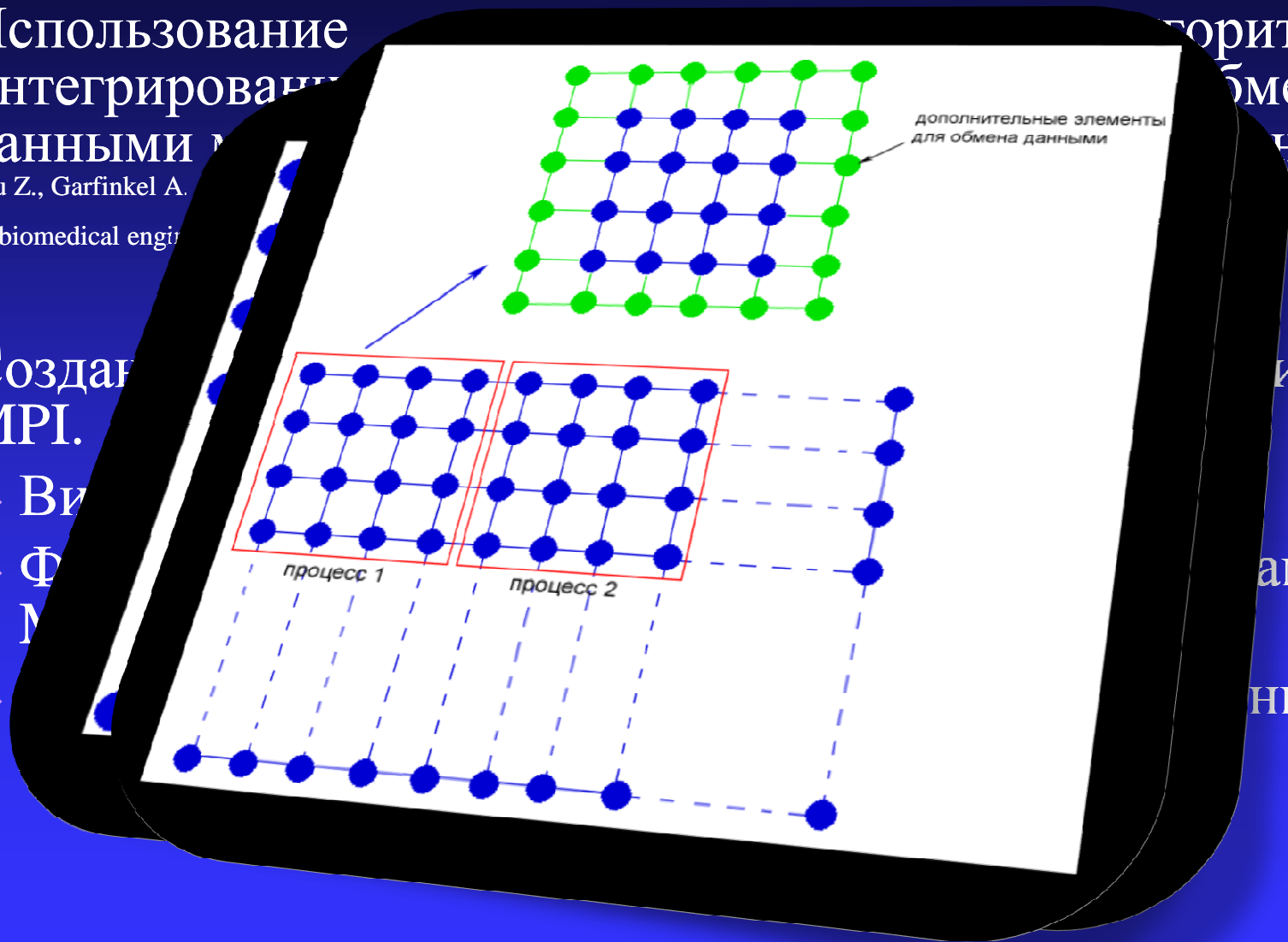
Ускорение

Описание алгоритма

- Использование интегрированных данных (Qu Z., Garfinkel A. on biomedical engin

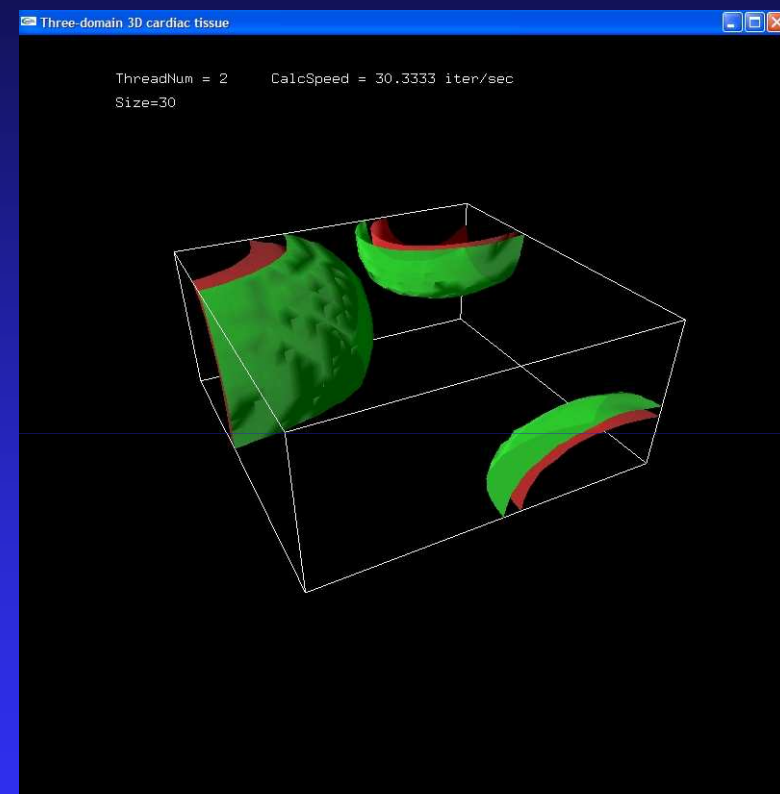
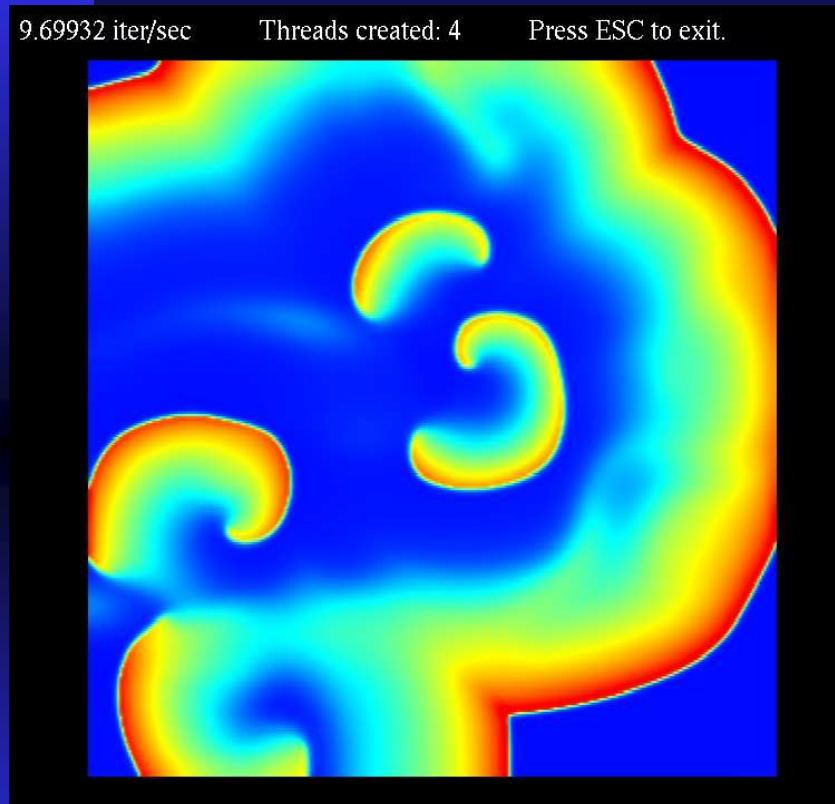
- Создание MRI.

- ◆ Вид
- ◆ Ф
- ◆ М
- ◆



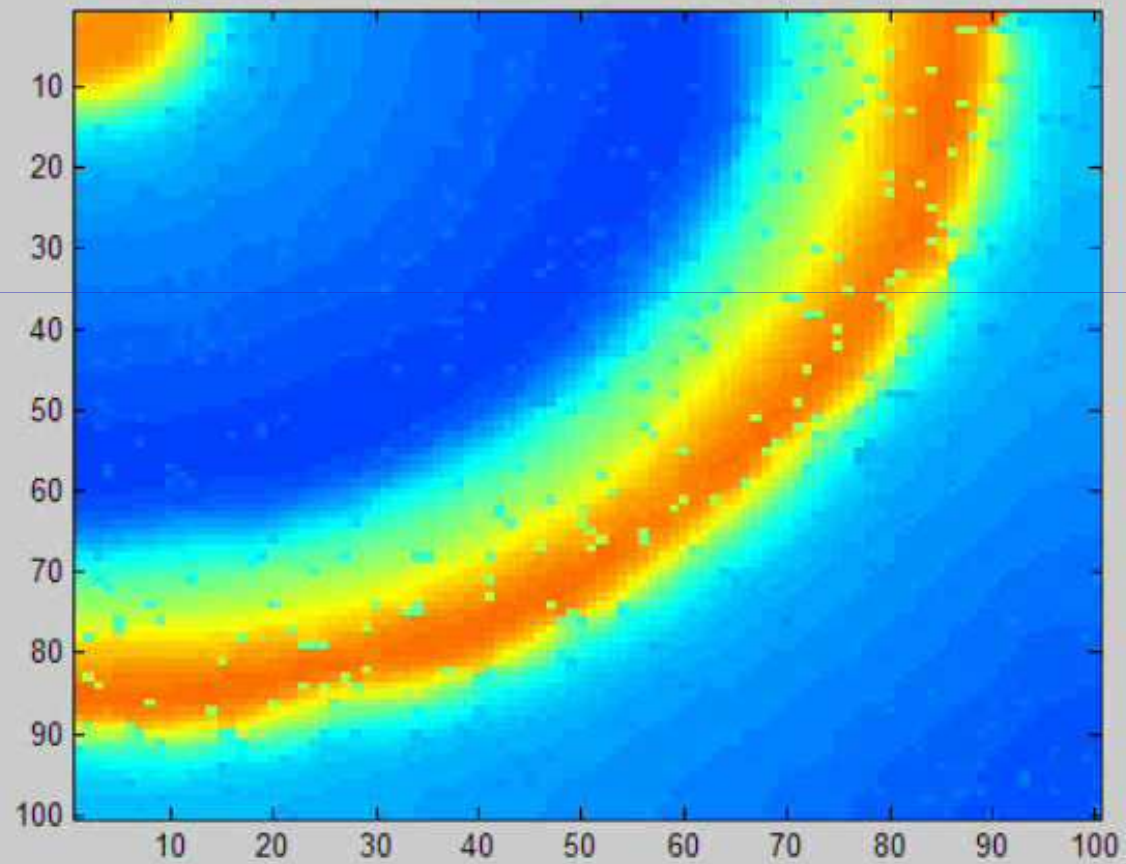
алгоритма
обмена
нии
actions
ием
ами;
ных;

Результаты моделирования



Кластерные вычисления (MPI) + Параллельные вычисления на машинах с общей памятью (Intel TBW)

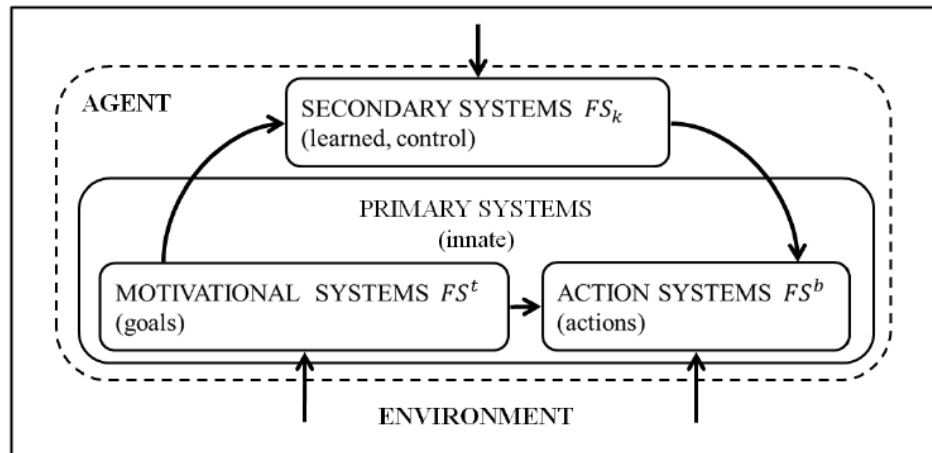
Волны в синусном узле



2. Нейросети (Центр интеллектуальных систем и робототехники)

- Последовательная активность
- Адаптивное поведение
- Задача: Используя принципы функционирования мозга животных, создадим искусственную нейронную сеть

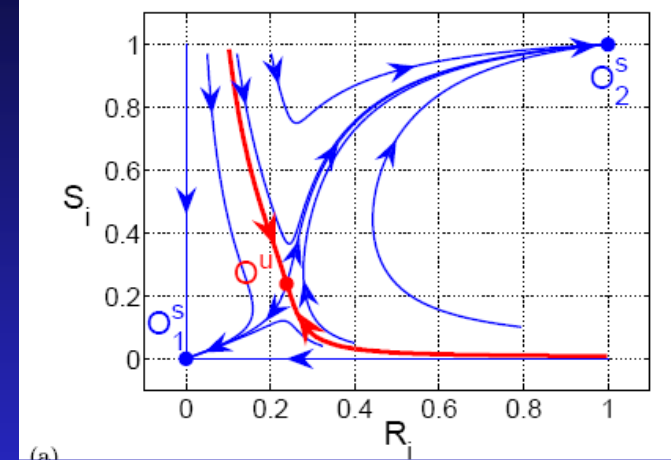
Модель адаптивного поведения агента на основе нейрофизиологической теории функциональных систем



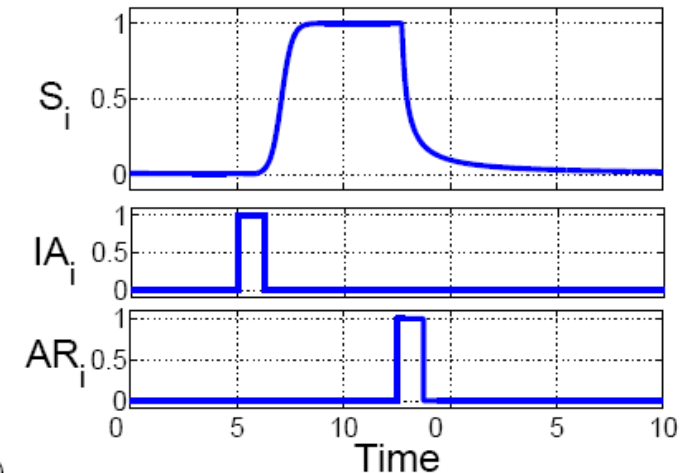
$$\begin{cases} \dot{S}_i = S_i(F_{x_0}(R_i) - \sum_j g_{ij}S_j - S_i) + \sigma_i^1 \\ \tau_i \dot{R}_i = R_i(S_i + I_i(t) - R_i) + \sigma_i^2, \end{cases}$$

$$\dot{C}_i = (F_{x_1}(S_i) - C_i)/\tau_c(S_i),$$

$$I_i = \alpha IA_i(t) - \beta AR_i(t) - \gamma C_i$$

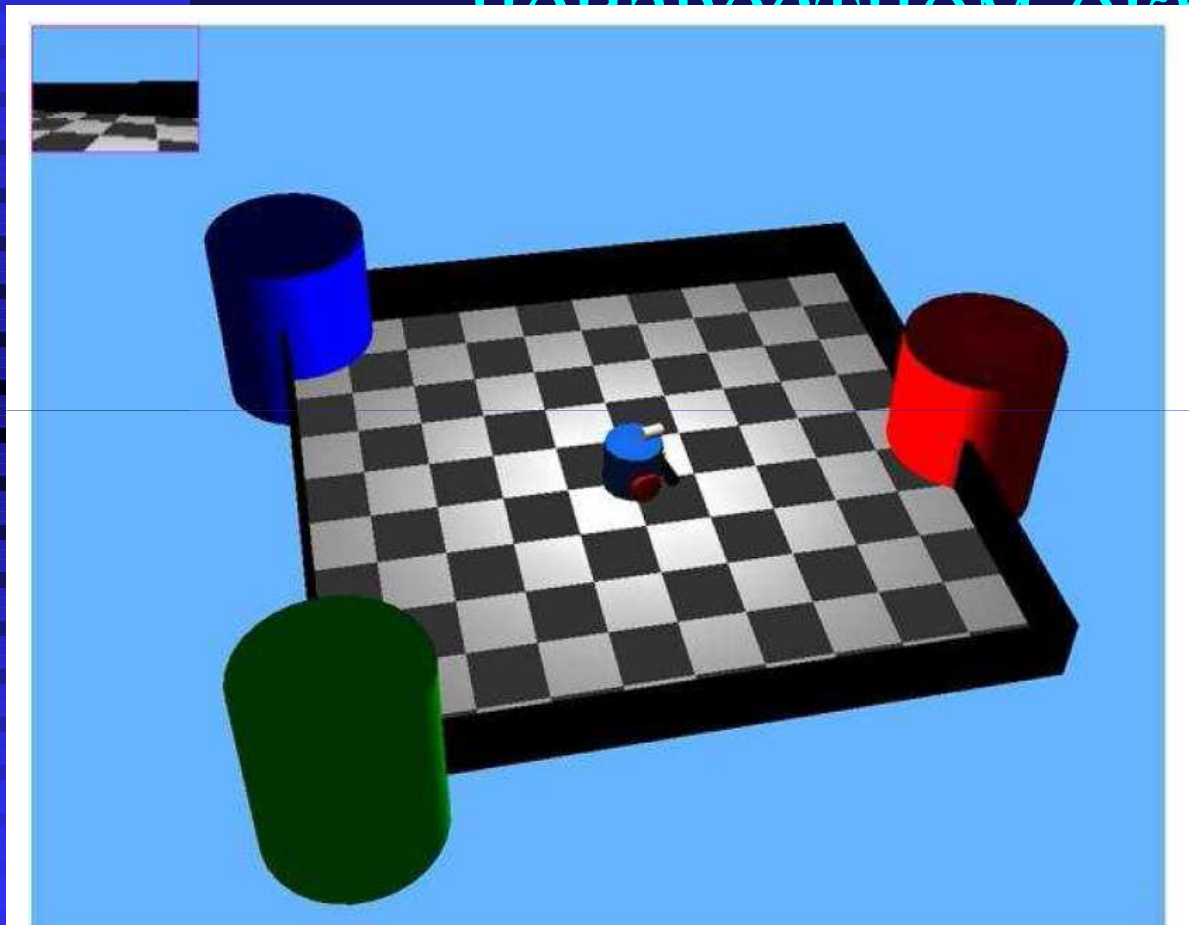


(a)



(b)

Адаптация мобильного робота в неизвестном окружении



-Робот должен зарядить батарею;

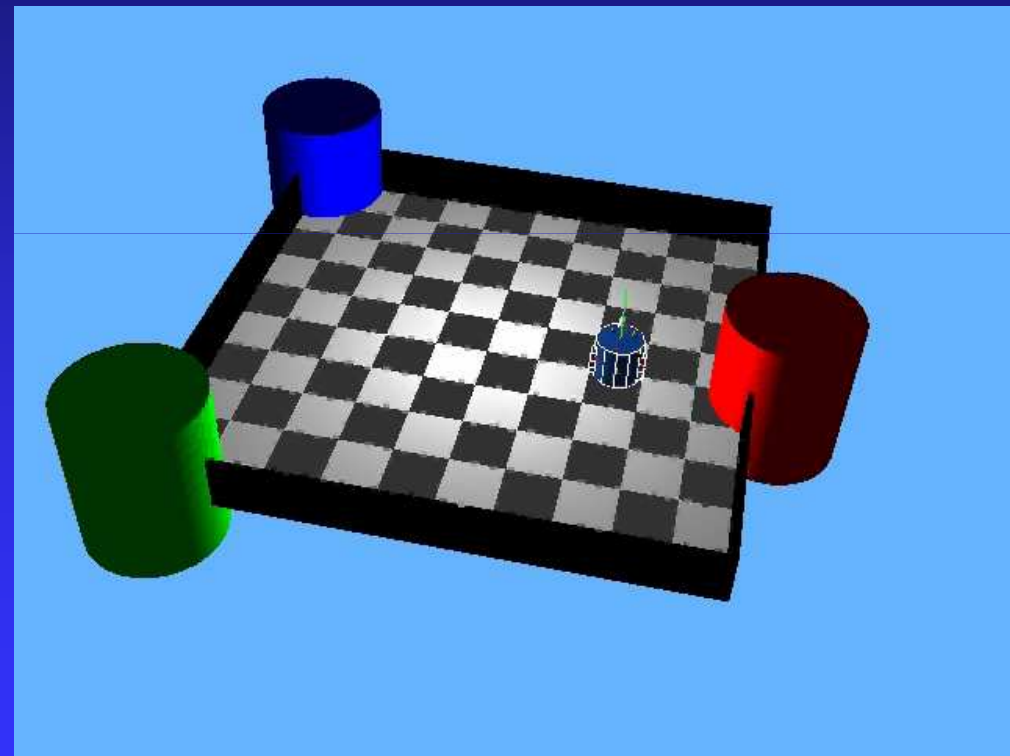
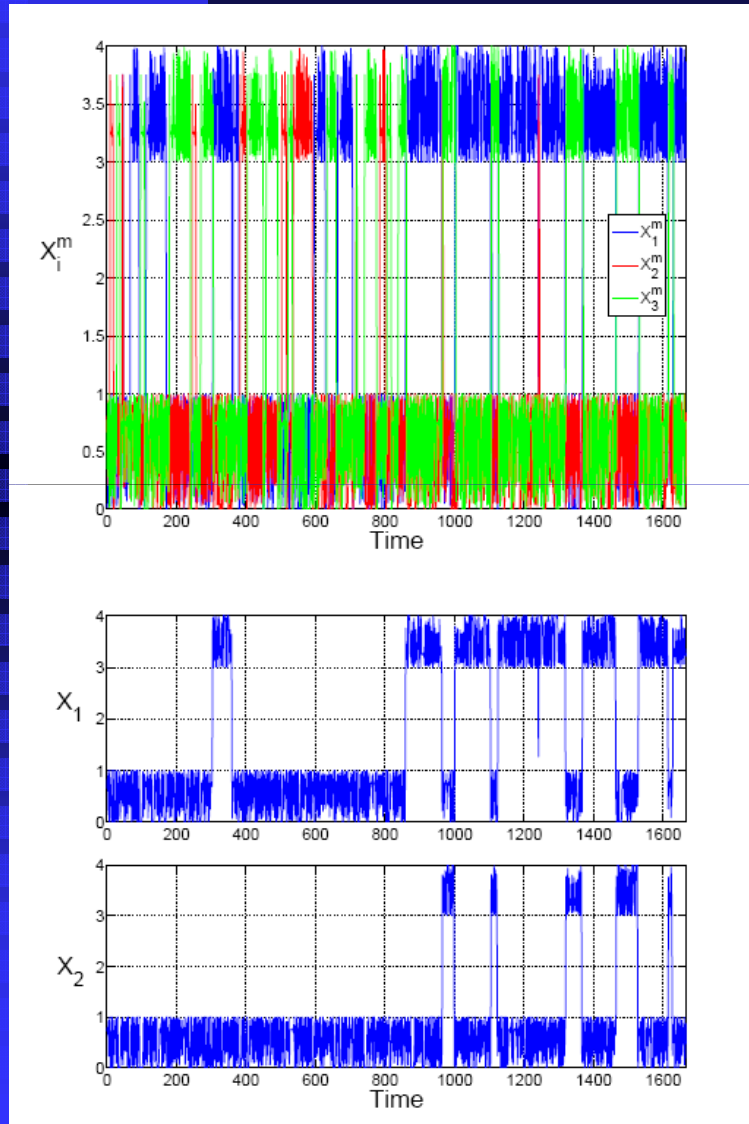
-Зарядка произойдет, если робот дойдет до красного цилиндра

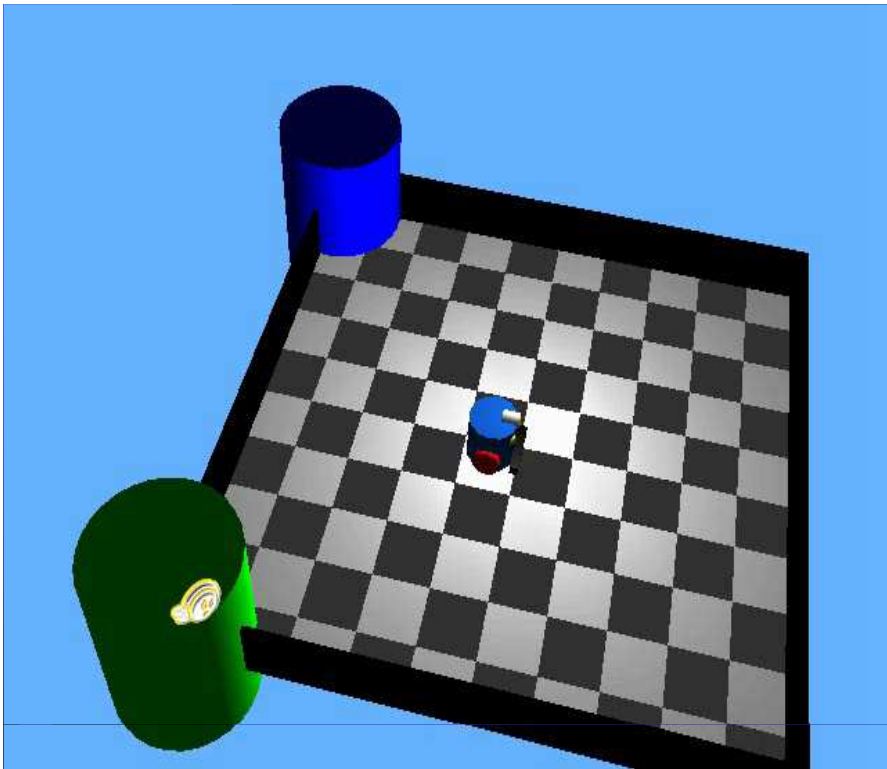
-Красного цилиндра сначала нет, он появится, если робот дойдет до зеленого цилиндра

Рисунок 4.9 — Экспериментальная установка, выполненная в программном комплексе Webots

Обучение

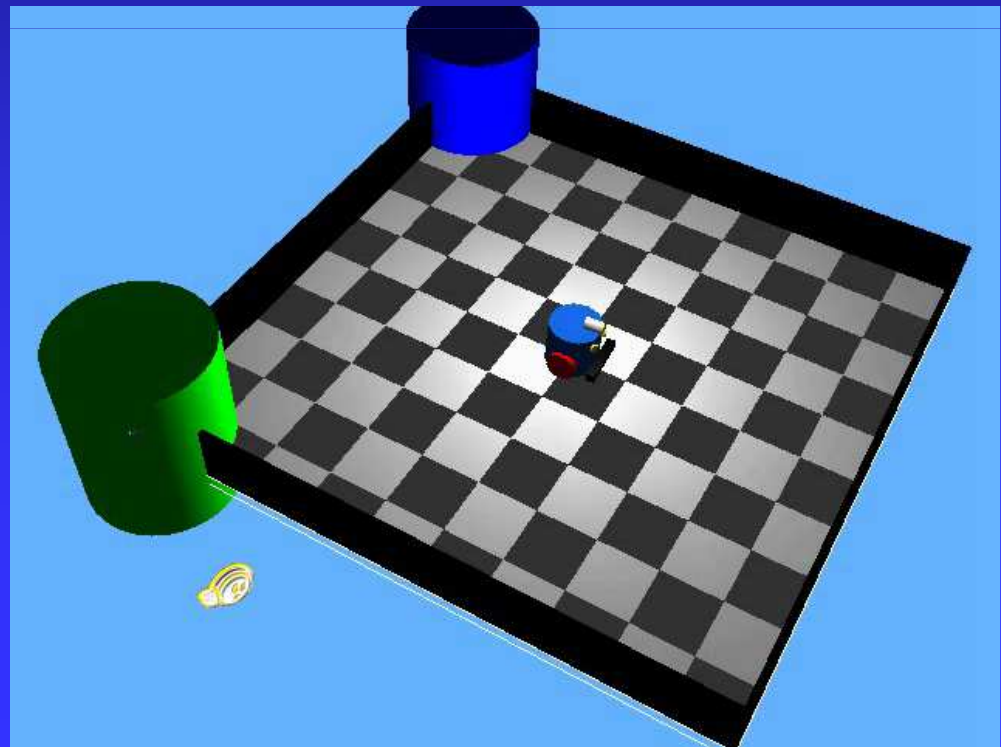
Процесс хаотического поиска





Финальные шаги обучения

Полностью обученный агент



Спасибо за внимание

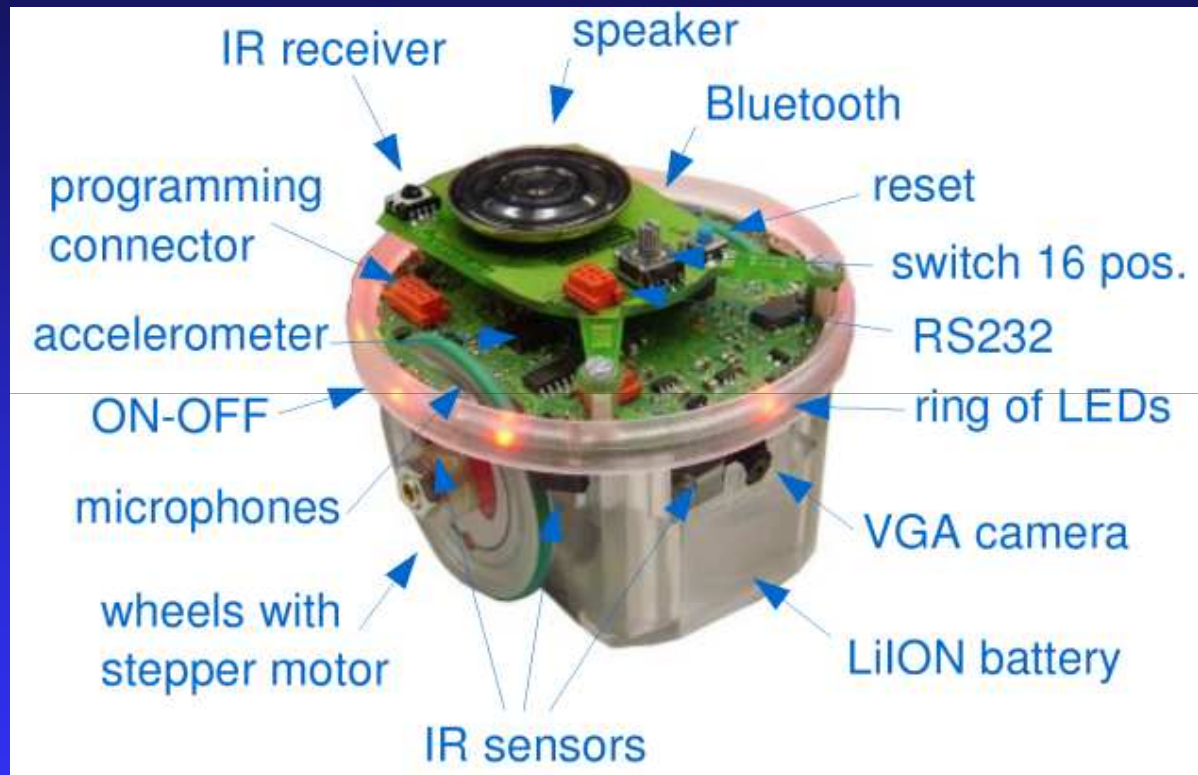
Литература.

1. Chaos, 2007,2008,2009,2010
2. Physical Review E, 2009,2010
3. EPL, 2009,2010.

Мобильный робот E-Ruck



Мобильный робот E-Ruck



Параллельные вычисления на машинах с общей памятью (Intel TBB)

