

# AG2 Update

## ASIC Workshop presentation

Andreas Schuppert, Richard Polzin, Konstantin Sharafutdinov, Chadi Barakat, Lars Küpfer

GEFÖRDERT VOM

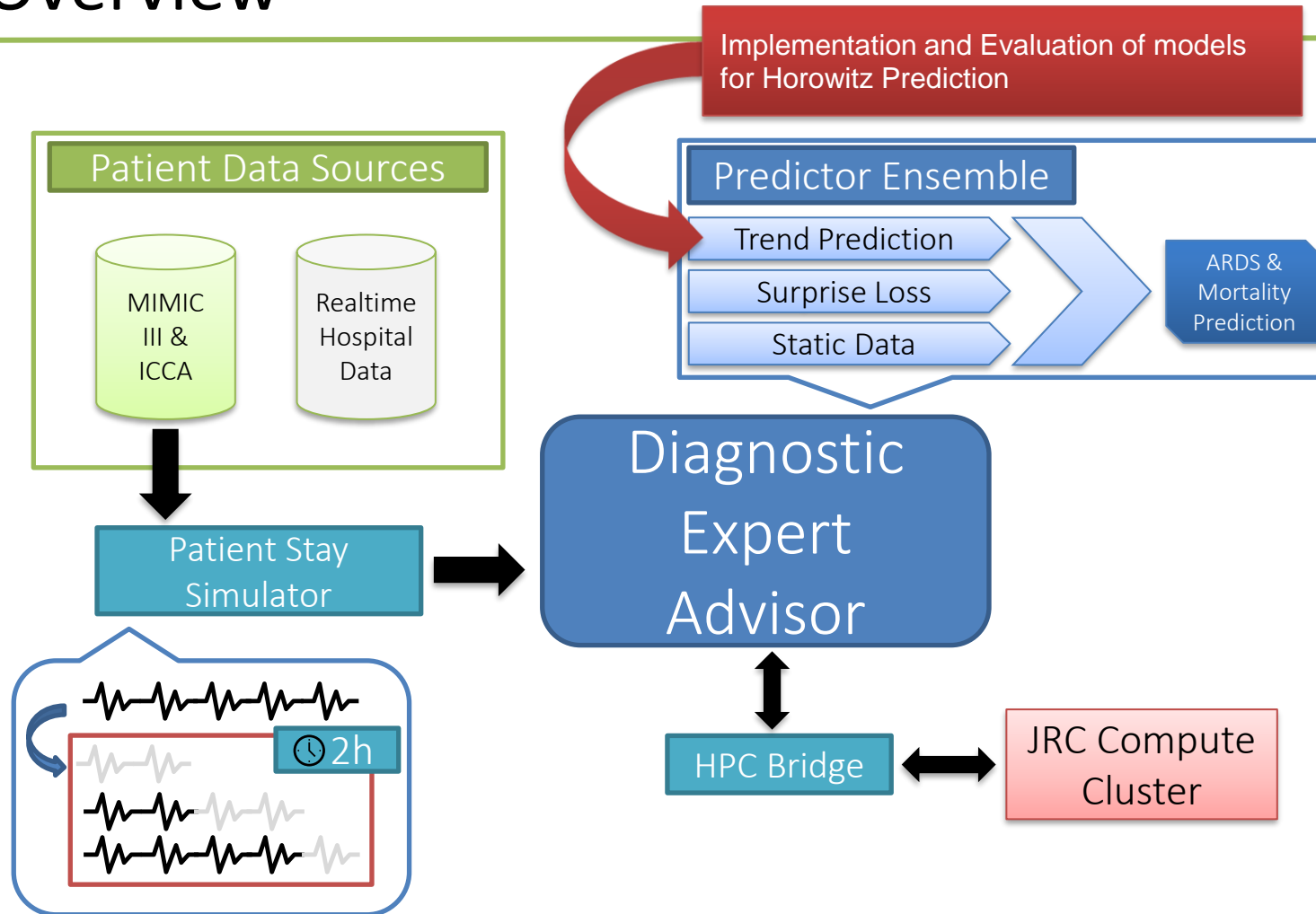


Bundesministerium  
für Bildung  
und Forschung

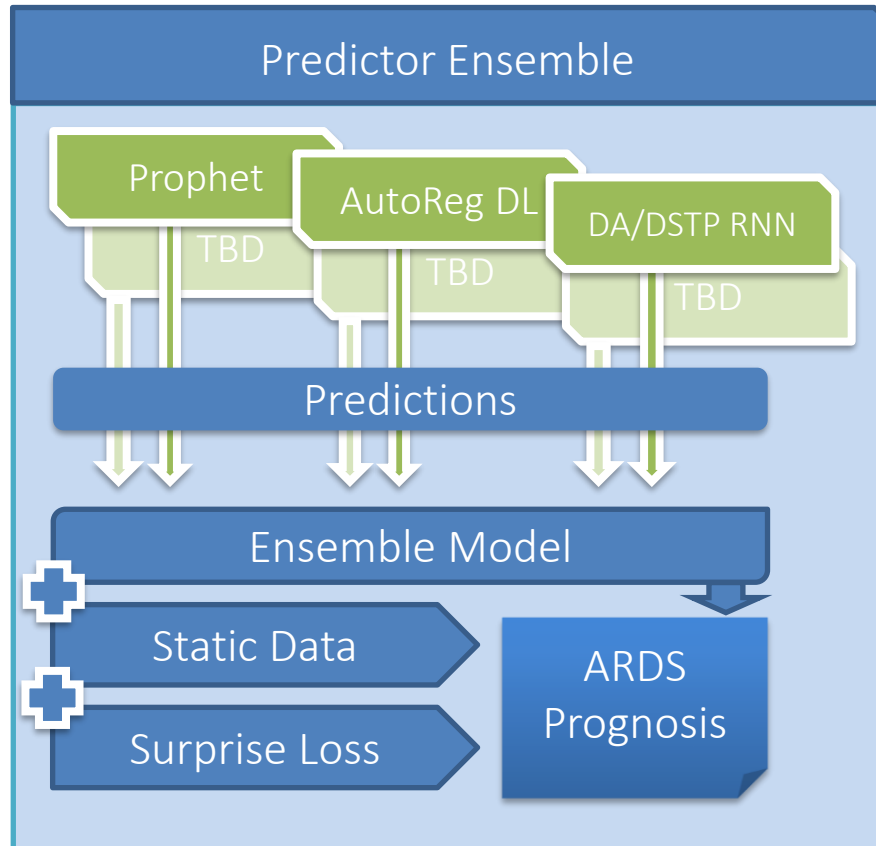


- Diagnostic Expert Advisor
- Kalibrierungsdaten
- Virtual Patient

# Diagnostic Expert Advisor: Structural Overview



# Diagnostic Expert Advisor: Predictor Ensemble



- Encapsulates different models
- Some models perform better for short term predictions, some perform better on long term predictions
- Voting / Weighting results leads to improved combined performance
- Extensible and flexible with individual preprocessing and tuning
- Allows for "model-independent" injection of static data and Surprise Loss for the final prediction

# Diagnostic Expert Advisor: Current Status

- A baseline set of traditional models (Linear Regression and ARIMA) as well as a multitude of machine learning models has been implemented and is being evaluated

Model Name	Released	Reference	Current Status
Facebook Prophet	2017	<a href="https://facebook.github.io/prophet/">https://facebook.github.io/prophet/</a>	implemented
Neural Prophet	2020	<a href="http://neuralprophet.com/">http://neuralprophet.com/</a>	implemented
Autoregressive Deep Learning	2020	<i>arXiv:2002.06103</i>	implemented
Dual Attention RNN	2017	<i>arXiv:1704.02971</i>	abandoned
Dual Stage - Two Phase RNN	2019	<i>arXiv:1904.07464</i>	abandoned

- Currently all models use the same input: The previous Horowitz Index (univariate) and are being trained anew for each subsequent patient

# Diagnostic Expert Advisor: Model Comparison Setup

- Cohort of 186 "critical" ARDS patients:
  - Horowitz-Index drops below 100, but
  - Only after it's been above 100 for at least 24 hours
- Evaluation:
  - Predictions start 12 hours after first Horowitz
  - Everything previous considered training data
  - Predict the next 12 hours
- Next Steps:
  - Add multivariate data
  - Transfer Learning



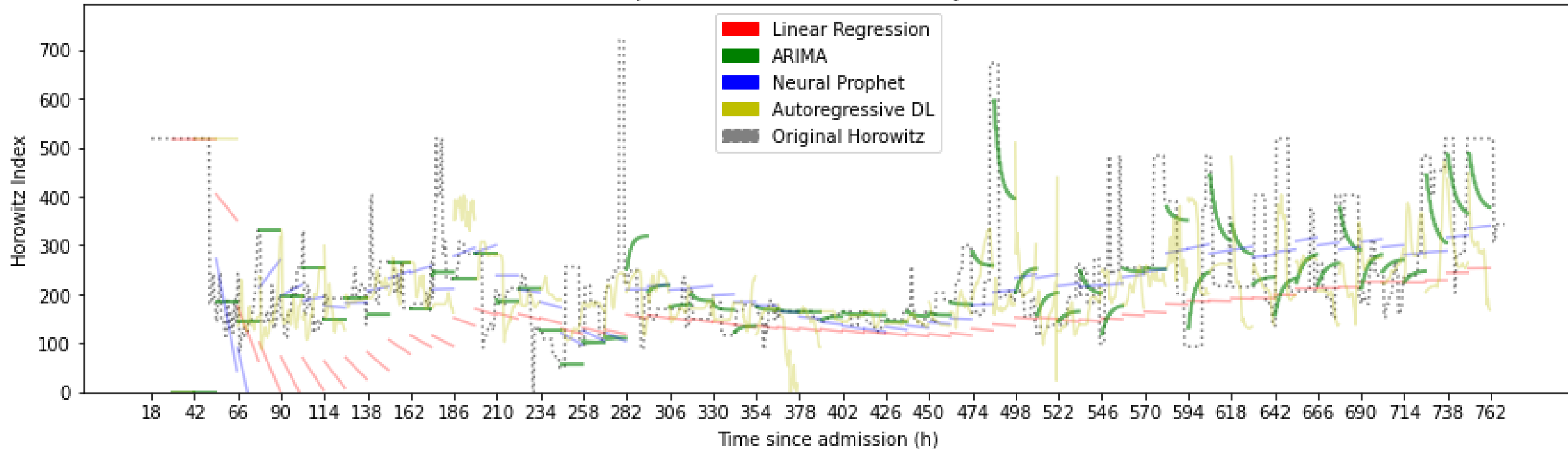
Model	Multivariate	Training Capacity
Traditional		
Lineare Regression	✓	low
ARIMA	✓	low
Facebook Prophet	✓	low
Neural Prophet	✓	medium
Autoregressive DL	✓	high
ML / DL		

# Diagnostic Expert Advisor: Model Comparison First Evaluation

Model Name	RMSE	MAE
Linear Regression	78	71
ARIMA	55	45
Facebook Prophet	301	266
Neural Prophet	70	63
Autoregressive Deep Learning	76	66

# Diagnostic Expert Advisor: Model Comparison Example

Horowitz Prediction Examples  
New predictions for 12 hours, every 12 hours





# Diagnostic Expert Advisor: Summary

---

- Results are not great, but a working baseline (as expected for univariate data)
- ARIMA works best, but very characteristic prediction style ("smoothing")
- Combination of different models should catch different errors
  
- Next Steps:
  - Include multivariate data
  - Transfer Learning for different patients
  
- Takeaway:
  - Machinery is setup, now following our strategy for optimization

# Kalibrierungsdaten

---

- Daten von 4 Standorten verfügbar
- Die Liste der fragwürdigen Parameter wurde erstellt und in 2 Kategorien sortiert:
  - Problem kann im JRC Combine gelöst werden
  - Problem soll zum entsprechenden Standort kommuniziert und da gelöst werden
- Eine Liste von unklaren für jeden Standort wurde vorbereitet
- Rückmeldungen von 3 Standorten wurden erhalten
  - Für 2 Standorte alle Fragen gelöst
  - Für 2 anderen Standorte noch viele offene Fragen, work in progress

# Kalibrierungsdaten

*script* - can be corrected by us; *requested* - additional information is needed; *A* - parameter is absent

Name	UK_00	UK_01	UK_02	UK_03
Horowitz-Quotient_(ohne_Temp-Korrektur)				
AF				
AF_spontan				
I:E		A	requested	A
Vt				
Vt_spontan				
individuelles_Tidalvolumen_pro_kg_idealem_Koerpergewicht		requested		requested
FiO2		script		script
FeO2	A	A	A	A
P_EI				
Compliance				requested
PEEP				
deltaP		requested	requested	
etCO2	script	requested		
24h-Bilanz_(Fluessigkeiten-Einfuhr_vs_-Ausfuhr)		script	script	A
paO2_(ohne_Temp-Korrektur)		requested		
paCO2_(ohne_Temp-Korrektur)				
pH_arteriell				
SaO2				



Checked Parameters	
0	AF
1	AF_spontan
2	BE_arteriell
3	Bicarbonat_arteriell
4	CK
5	CRP
6	HF
7	Haematokrit
8	Haemoglobin
9	Harnstoff
10	Horowitz-Quotient_(ohne_Temp-Korrektur)
11	INR
12	Kreatinin
13	Laktat_arteriell
14	Leukozyten
15	Lipase
16	MAP
17	PCT
18	PEEP
19	P_EI
20	SaO2
21	SpO2
22	Thrombozyten
23	Vt
24	pH_arteriell
25	pTT
26	paCO2_(ohne_Temp-Korrektur)
27	FiO2
28	paO2_(ohne_Temp-Korrektur)
29	ZVD
30	MPAP
31	Lymphozyten_prozentual
32	LDH



Parameters for analysis	
0	AF
1	Haematokrit
2	Harnstoff
3	HF
4	Kreatinin
5	Leukozyten
6	P_EI
7	PCT
8	PEEP
9	pTT
10	Thrombozyten

Die Parameter, die bei mehr als 70% der Patienten vorhanden sind

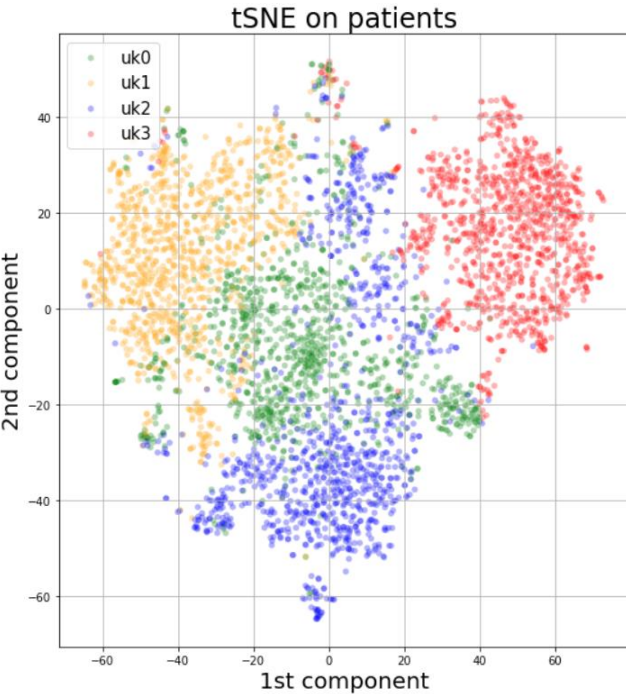
Überprüfte Parameter

# Kalibrierungsdaten: Workflow

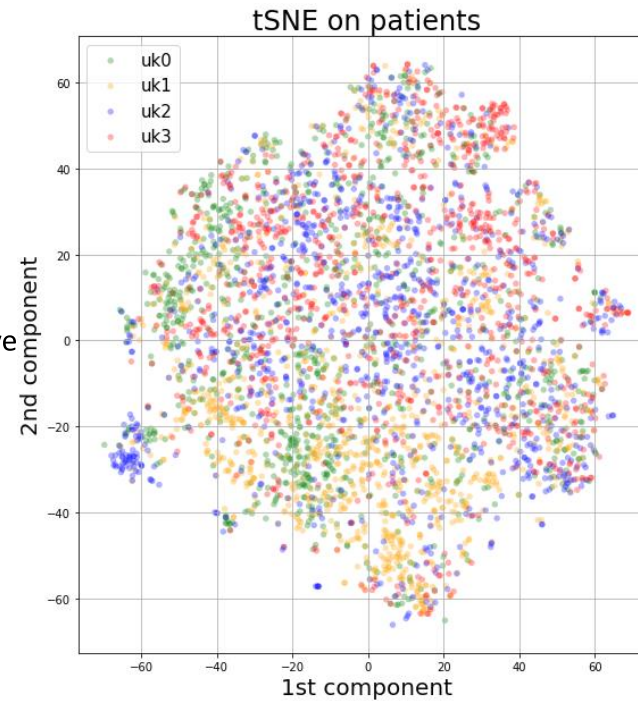
Ursprüngliche Daten

Nur überprüfte Parameter, die bei  
mehr als 70% der Patienten vorhanden  
sind

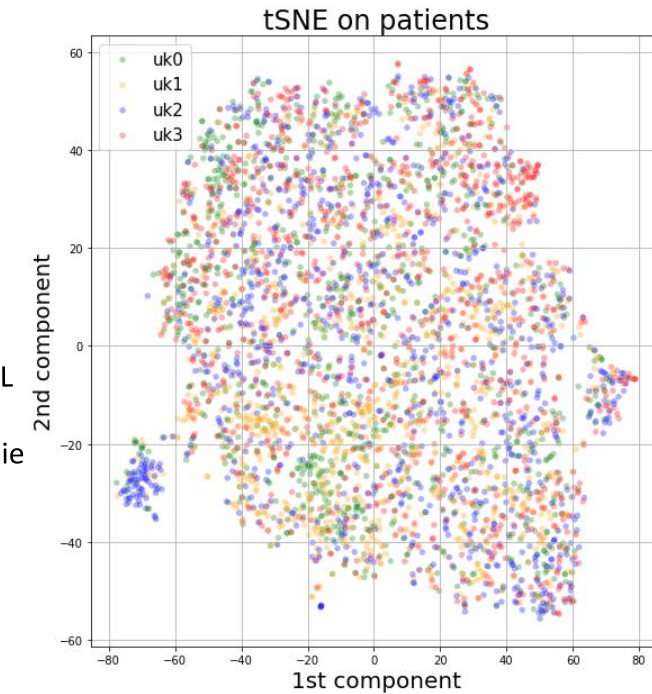
Die Parameter, die große  
Wichtigkeit für die Klassifizierung  
der Klinik haben, werden  
weggelassen (PEEP, pTT)



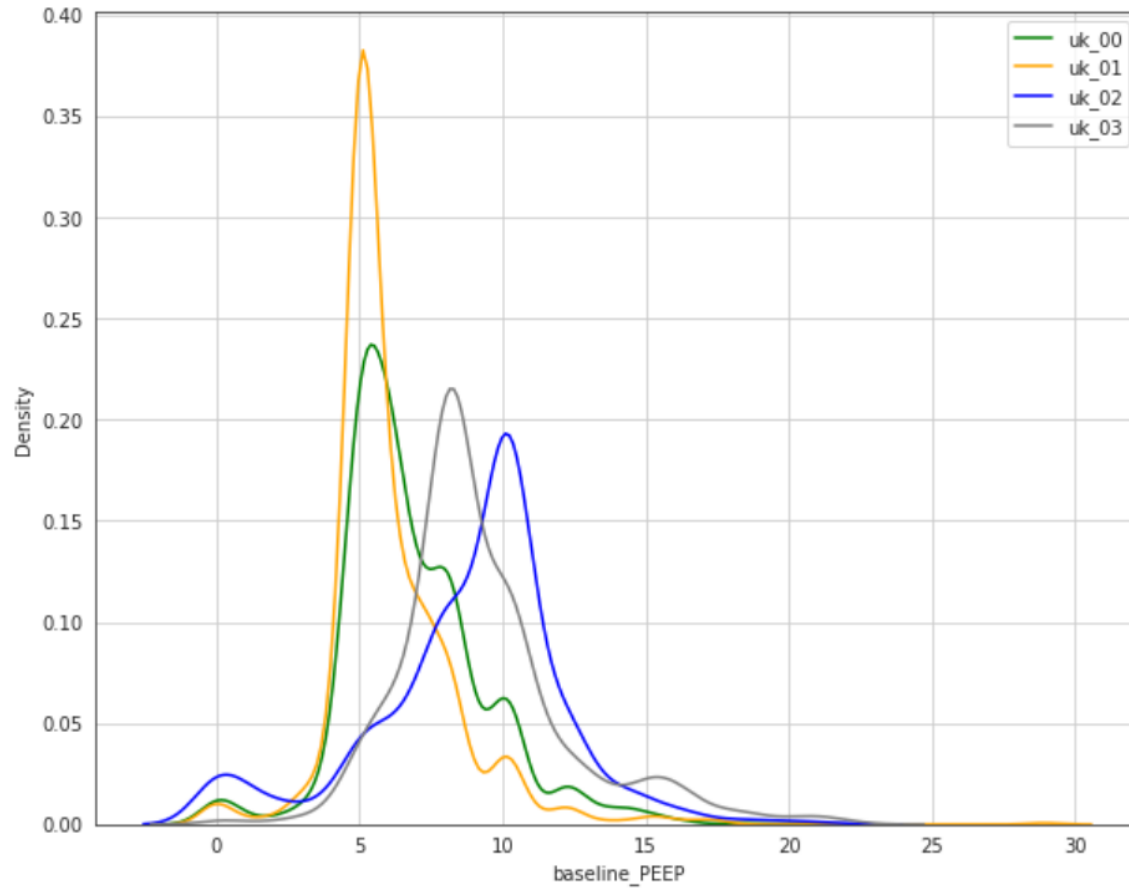
➔  
Visuelle/Quantitative  
Überprüfung



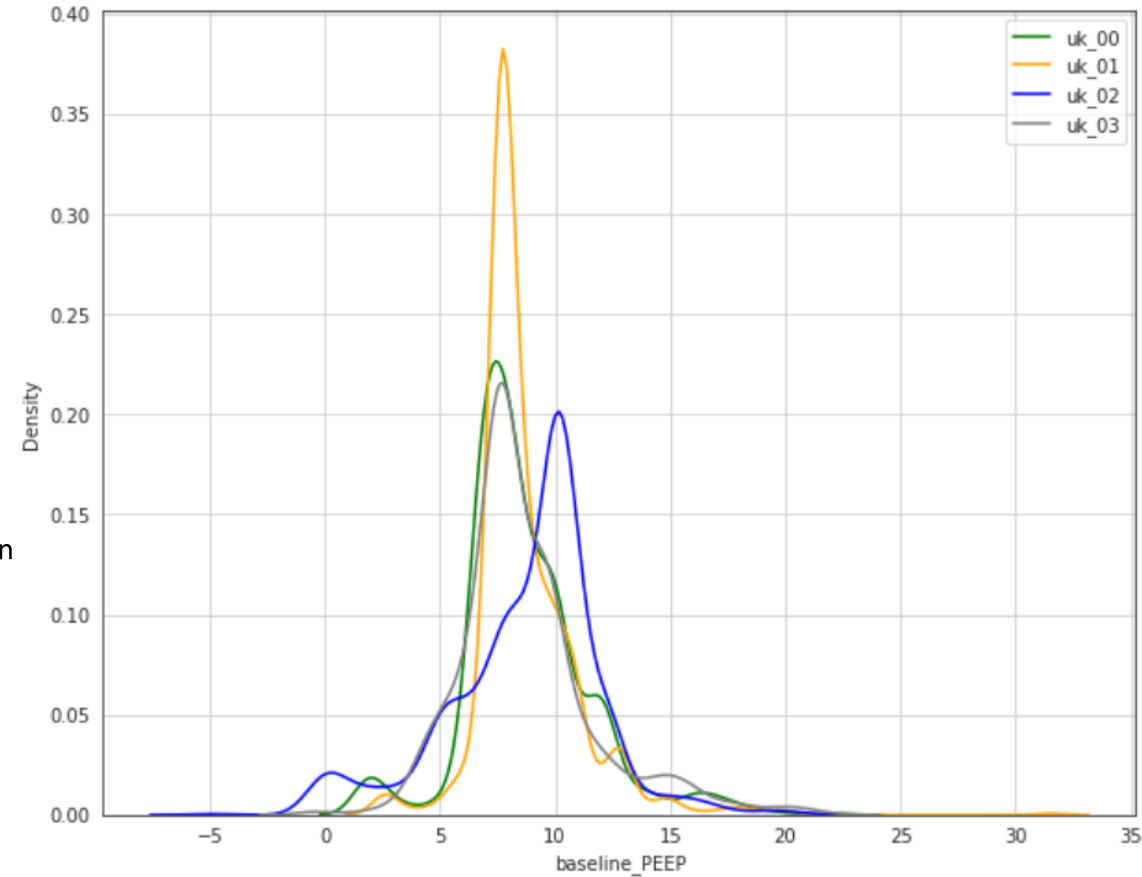
➔  
Anwendung der ML  
Methoden,  
Klassifizierung für die  
Klinik



# Kalibrierungsdaten: Kalibrierung



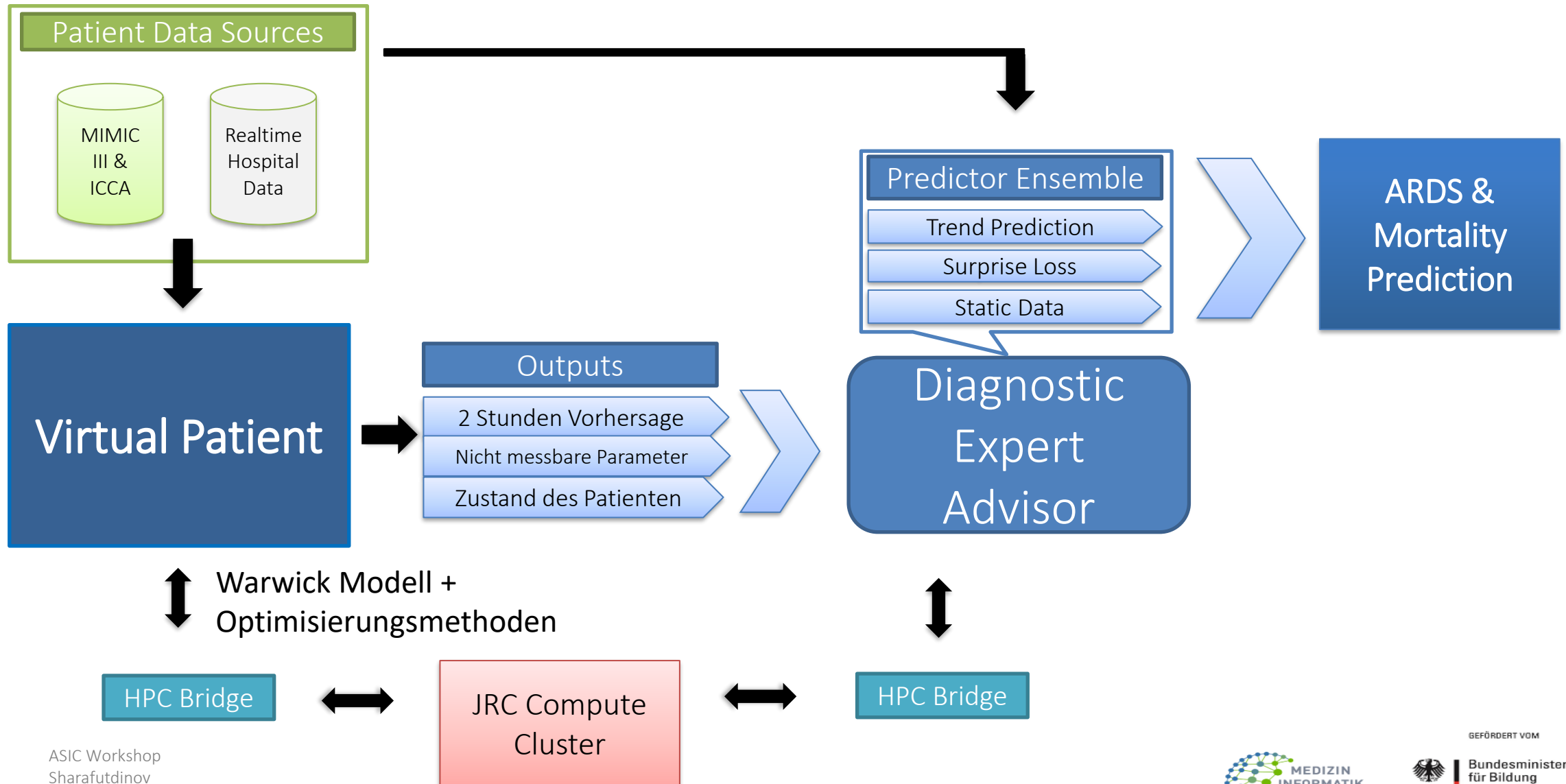
Auf den gleichen  
Mittelwert bringen



- Weitere Schritte

- Endgültige Kurierung nach der Rückmeldungen von den Standorten
- Die Suche nach den Parametern für Kalibrierung durch ML Methoden
- Kalibrierung
- Verwendung der Kalibrierungsdaten in VP und DEA

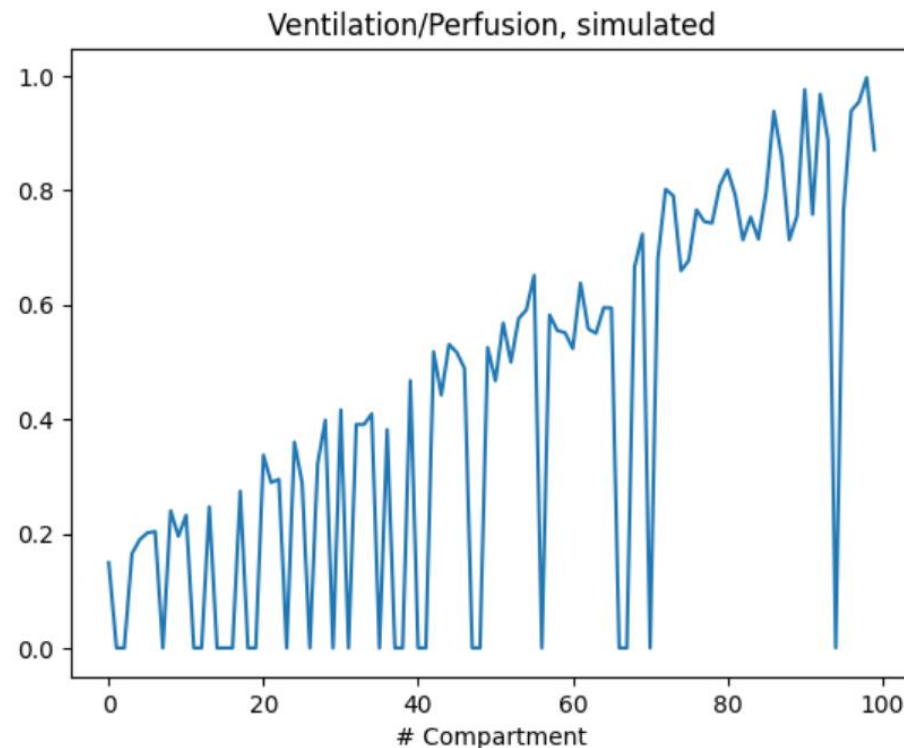
# ASIC System: Strukturelle Übersicht



# Virtual Patient: Simulation des ARDS Patienten

---

- ARDS Patient wird dadurch simuliert, dass:
  - die Lunge in 100 Kompartimente unterteilt ist
  - der Ventilation/Perfusion Quotient (V/Q) in manchen Bereichen beeinträchtigt wird
  - manche Kompartimente sind geschlossen durch den externen Druck (Bildung der Atelektasen)
  - der V/Q Quotient lässt sich durch die Parameter der Kompartimente simulieren





# Virtual Patient: Run Time Optimization

---

## Zusammenfassung:

1. Die Simulation selbst nimmt wesentlich mehr Zeit in Anspruch als das Speichern von Outputs/Abbildungen
2. Simulatoinshorizont und Iterationszeit tragen gleichermaßen zur Laufzeit bei
3. Parallelsimulation spielt eine große Rolle bei der Reduzierung der Zeit (3,75-fache Reduzierung fast proportional zur 4-fachen Erhöhung der Anzahl von Cores)
4. Niedrigste Zeit per Simulation: 5 Sekunden/Simulation (mit 40 Cores)

--> Trotzdem zu lang, weil für das Fitting die große Zahl der Simulationen durchgeführt werden muss

ID	Simulation horizon (min)	Iteration time (ms)	Generate_plot	number of workers	memory	Output Interval (iter)	Store outputs	Run time (min)
9	30	60	yes	10	8	1000	all	441.0
7	120	240	yes	10	8	1000	all	463.0
4	120	60	yes	40	2	1000	all	493.0
8	60	60	yes	10	8	1000	all	882.0
6	120	120	yes	10	8	1000	all	905.0
10	120	60	yes	10	8	1000	5	1711.0
5	120	60	no	10	8	1000	all	1747.0
2	120	60	yes	10	8	6000	all	1748.0
11(previous)	120	60	yes	10	8	1000	all	1754.0
1	120	60	yes	10	8	1000	all	1801.0

# Virtual Patient: Status heute

- Automatisierung/Übertragung auf den Cluster erfolgt
  - derzeit laufen Simulationen parallel auf RWTH Cluster
- Fitting des VP zu dem realen Patienten
  - Inputs/Outputs wurden definiert
  - einen minimalen Satz von Parametern fürs Fitting wurde definiert
  - Nächster Schritt: die Anpassung von VP an die realen Patienten (Optimizierung)
- Die Laufzeit des Simulators ist zu lang für das Online Fitting des VP zu dem realen Patienten
  - Der Simulator muss vereinfacht werden oder mit einem ML Modell ersetzt werden
  - Dazu werden viele Simulationen im Parameterraum durchgeführt
  - Die Simulationsparameter sollen intelligent ausgewählt werden, um den Parameterraum und anschließend das Daten-Repository zu füllen
  - Übergang zum HPC Jülich geplant

# Virtual Patient: Zugriff zum HPC

## ■ Data Analytics Module (DAM)

- Specific requirements for data science & analytics frameworks
- 16 nodes with 2x Intel Xeon Cascade Lake; 24 cores
- 1x NVIDIA V100 GPU / node
- 1x Intel STRATIX10 FPGA PCIe3 / node
- 384 GB DDR4 memory / node
- 2 TB non-volatile memore / node

## ■ DAM Prototype

- 3 x 4 GPUs Tesla Volta V100
- Slurm scheduling system

The screenshot displays the JuDoor web interface for project 'joaiml'. The top navigation bar includes 'JuDoor', 'Your account', and 'Mentoring'. The project details section shows: Project title: Joint Artificial Intelligence and Machine Learning Lab; Type: Computeproject; Principal Investigator: Prof. Dr. - Ing. Morris Riedel; Project Admins: Dr. Jenia Jitsev, Jay Roloff, Dr. Gabriele Cavallaro; Project Mentor: Prof. Dr. - Ing. Morris Riedel; Start date: 01.03.2019. Below this, there are sections for 'Group name', 'Active Budget', and 'Budget joaiml'. The main content area is titled 'JupyterLab Options' and features several dropdown menus: System (DEEP), Account (barakat1), Project (joaiml), and Partition (dp-dam). There is also an 'Email notification' toggle switch. At the bottom, there are input fields for 'Nodes [1, 16]' (set to 1) and 'Runtime (min) [1, 1200]' (set to 30), followed by a 'Start' button. The background of the JupyterLab interface shows a view of Jupiter and its moon.



<https://www.deep-projects.eu/>



GEFÖRDERT VOM



# Virtual Patient: Parallele Ausführung

- JuDoor-Konto für Konstantin erstellen.
- Aktuelle Analyse:
  - Integration des Warwick-Modells in unsere JupyterLab-Umgebung.
  - Module für eine erfolgreiche Implementierung.
  - Profitieren von allen verfügbaren Hardwareressourcen.
- Matlab-Skript Integration:
  - Müssen wir eine Integrationsmethode mit JupyterLab finden.
  - Wenn dies nicht möglich ist, müssen wir das Modell in C-Code exportieren.

# Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit!

SMITH ist angetreten, um die klinische Forschung in Deutschland nachhaltig zu verbessern.

GEFÖRDERT VOM



Bundesministerium  
für Bildung  
und Forschung

