

Zpráva za období říjen až prosinec 2012

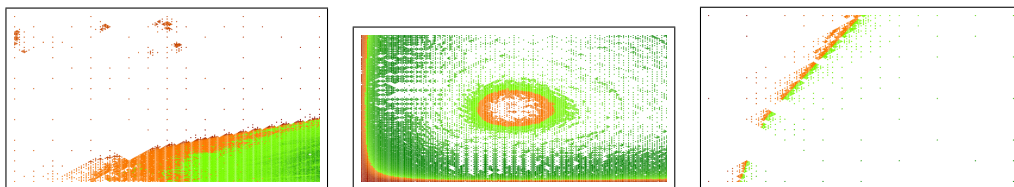
1 Třetí etapa

Ve druhé části třetí etapy, probíhající od začátku srpna do konce října, jsme se věnovali zejména optimalizaci a paralelizaci výpočtu a implementaci grafického rozhraní. Dále jsme se zaměřili na:

- lepší podporu SBML¹,
- spuštění analýzy nad několika reálnými modely,
- vizualizaci analýzy a odsimulovaných trajektorií,
- opravení chyb v analýze.

Výstupem této etapy měla být aplikace s grafickým rozhraním, pomocí které by mohl uživatel spravovat modely, vlastnosti, nastavení a výsledky analýzy. Vytvoření této aplikace bylo náročnější, než se očekávalo. Proto jsme následující čtvrtou etapu rozdělili na dvě (listopad, prosinec) a dokončení aplikace přesunuli do první z nich (listopad).

Vydaná verze z konce třetí etapy je k dispozici na stránkách našeho projektu², kde najdete též seznam vyřešených úkolů³.



Obrázek 1: Ukázka vizualizace výsledku analýzy několika modelů. Zelené body označují hodnoty, kde daná vlastnost platí, v červených bodech vlastnost naopak neplatí.

2 Čtvrtá etapa

Ve čtvrté etapě, probíhající od začátku do konce listopadu, jsme pracovali na dokončení grafického rozhraní a optimalizaci výpočtu, který se již v této etapě prováděl paralelně. Z hlediska optimalizace šlo zejména o:

- odstranění duplicitních výpočtů, zejména zlepšením práce cache, ve které se ukládají již odsimulované trajektorie,
- odstranění referencí na data již nepotřebných odsimulovaných trajektorií, aby mohla být zpracována pomocí *garbage collectoru*.

Grafické rozhraní bylo do konce čtvrté etapy uvedeno do zcela funkčního stavu (viz Obrázek 2). Komponenta zobrazující výsledky analýzy byla upravena tak, aby po kliknutí na bod výsledku odsimulovala příslušnou trajektorii, což se ukázalo jako nutné v průběhu třetí fáze (viz minulý

¹The Systems Biology Markup Language: <http://sbml.org>

²<https://github.com/sybila/parasim/zipball/1.0.0.M3>

³<https://github.com/sybila/parasim/issues?milestone=2&state=closed>

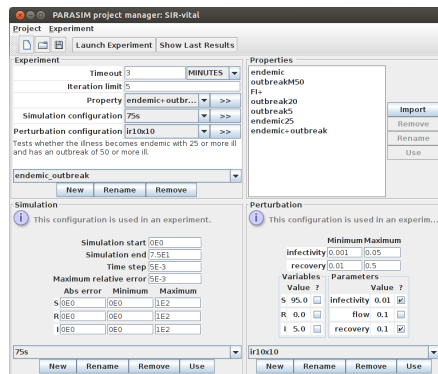
report⁴). Tato funkce byla naimplementována jednodušším způsobem, než se původně plánovalo, což však umožnilo přesunout práci na manažer pro správu projektů. Přitom je její současná podoba zcela dostačující. Zároveň bylo grafické rozhraní rozšířeno o komponentu zobrazující stav analýzy, což významnou měrou přispívá k interaktivitě aplikace.

Vydaná verze z konce čtvrté etapy je k dispozici na stránkách našeho projektu⁵, kde najdete též seznam vyřešených úkolů⁶.

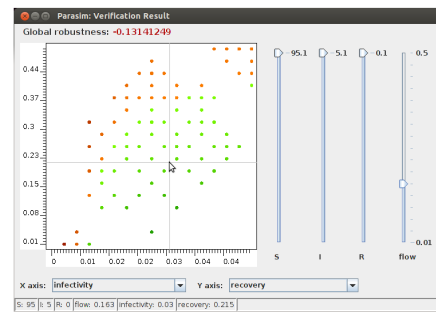
3 Pátá etapa

V páté etapě, probíhající od začátku do konce prosince, jsme pracovali na vydání finální verze aplikace, psaní testů a dokumentace⁷, včetně tutorialu s obrázky. Dále jsme se zaměřili na:

- spuštění analýzy nad dalšími reálnými modely (viz Obrázek 1),
- přidání globální robustnosti do analýzy,
- zjednodušení nastavení analýzy (bylo odstraněno nastavení pro počáteční rozdělení prostoru iniciálních hodnot).



(a) Manažer pro správu.



(b) Komponenta pro vizualizaci výsledků analýzy.

Obrázek 2: Screenshots z aplikace s grafickým rozhraním.

Finální verze z konce páté etapy je k dispozici na stránkách našeho projektu⁸, kde najdete též seznam vyřešených úkolů⁹.

4 Shrnutí

Byl vytvořen nástroj pro analýzu dynamických systémů modelovaných pomocí obyčejných diferenciálních rovnic. Tento nástroj je postaven na modulární architektuře, která usnadňuje vstup třetí strany do vývoje nástroje. Možnost jednoduše zaměnit nové moduly za ty stávající umožňuje optimalizaci a paralelizaci jednotlivých analytických algoritmů, stejně jako zavádění úplně nových součástí nástroje.

⁴ <https://github.com/sybila/parasim/blob/master/docs/reports/1.0.0.M2-3.pdf?raw=true>

⁵ <https://github.com/sybila/parasim/zipball/1.0.0.M4>

⁶ <https://github.com/sybila/parasim/issues?milestone=6&state=closed>

⁷ <https://github.com/sybila/parasim/wiki>

⁸ <https://github.com/sybila/parasim/zipball/1.0.0.Final>

⁹ <https://github.com/sybila/parasim/issues?milestone=3&page=1&state=closed>

Nástroj je tvořen dvěma aplikacemi: Grafickým rozhraním pro správu modelů, vlastností a nastavení analýzy a aplikací spustitelnou z příkazové řádky vhodnou zejména pro dávkové zpracování. Obě aplikace dokáží spustit analýzu a zobrazit její výsledek a nastavení analýzy vytvořená v grafickém rozhraní dokáže přecházet i aplikace z příkazové řádky.

Oproti původnímu plánu se upustilo od plné integrace modulu pro detekci cyklů u trajektorií. Tento modul je naimplementován a je plně kompatibilní s dalšími moduly, nicméně v samotné analýze se nepoužívá. Pro jeho smysluplné použití je nutné trajektorie simulovat po malých časových intervalech, odsimulovaná data spojovat, nad daty spouštět detekci cyklu a v případě detekovaného cyklu již další simulaci neprovádět. Ve stávající verzi nástroje se provádí pouze simulace pro jeden časový interval. Toto řešení, alespoň pro testované modely, zcela vyhovuje.

Pro tento nástroj, stejně jako pro jeho architekturu byla vytvořena dokumentace, která je volně přístupná na internetu. Tato dokumentace obsahuje jak články určené pro uživatele, zabývající se především tím, jak stáhnout, spustit a používat obě aplikace, tak stránky zaměřené spíše na vývojáře, které popisují například to, jak vytvořit vlastní modul.

Repozitář projektu dále obsahuje několik reálných modelů s přiloženými vlastnostmi a předpřipravenými analýzami, nad kterými byl nástroj vyzkoušen. Kdokoliv si může analýzu nad těmito modely pustit sám, modely a vlastnosti dále rozšiřovat, případně přidávat další.

Během řešení projektu se objevilo několik cest, kterými by se mohl ubírat další vývoj. Zejména se jedná o:

- vytvoření webové služby zpřístupňující analýzu online,
- použití rychlejších nástrojů pro řešení obyčejných diferenciálních rovnic ¹⁰,
- zahrnutí projekce do vizualizace výsledků analýzy.

¹⁰momentálně je použit Octave, <http://octave.sourceforge.net/>