

Zpráva za období říjen až prosinec 2012

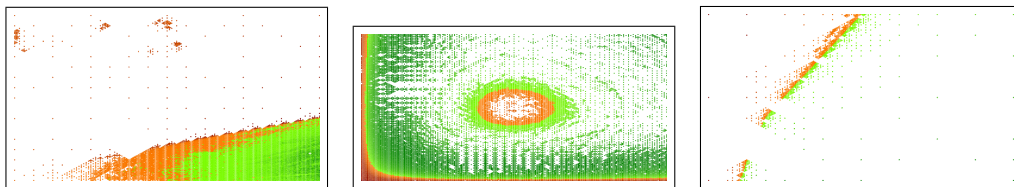
1 Třetí etapa

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*.

Vydaná verze z konce čtvrté etapy je k dispozici na stránkách našeho projektu⁴, kde najdete též seznam vyřešených úkolů⁵.

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>

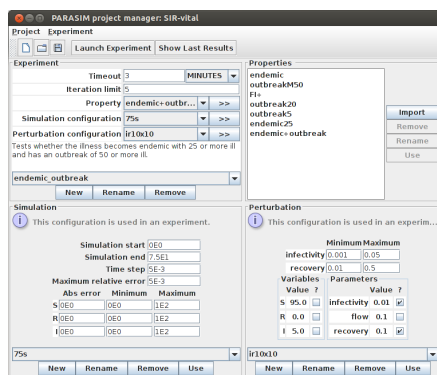
⁴<https://github.com/sybila/parasim/zipball/1.0.0.M4>

⁵<https://github.com/sybila/parasim/issues?milestone=6&state=closed>

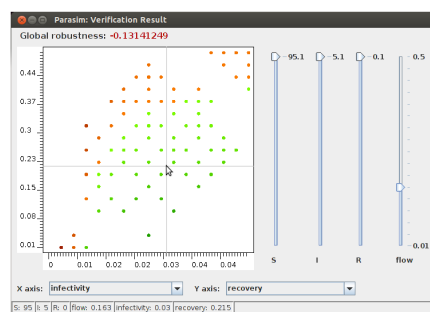
3 Pátá etapa

V páté etapě, probíhající od začátku do konce prosince, jsme pracovali na vydání finální verze aplikace, psaní testů a dokumentace⁶. Dále jsme se zaměřili na:

- spuštění analýzy nad dalšími reálnými modely,
- 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 projektu⁷, kde najdete též seznam vyřešených úkolů⁸.

4 Shrnutí

Byl vytvořen nástroj pro analýzu dynamických systémů modelovaných pomocí obyčejných diferenciálních rovnic. Na rozdíl od existujících nástrojů pro simulaci chování dynamických systémů a monitoring temporálních vlastností nad běhy těchto systémů byl kladen důraz na modulární architekturu, jež umožňuje budoucí vývoj a testování optimalizace a paralelizace jednotlivých modulů i analytických algoritmů.

Nástroj se skládá z aplikace s grafickým rozhraním pro správu modelů, vlastností a nastavení analýzy a aplikace pro příkazovou řádku vhodné zejména pro dávkové spouštění. Obě aplikace umí spustit analýzu a zobrazit její výsledek, to i v případě, že se jedná o vícerozměrná data.

Repozitář projektu obsahuje reálné modely s přiloženými vlastnostmi a nastaveními analýzy, 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 webovou službu zpřístupňující analýzu online,
- použití rychlejších nástrojů pro řešení obyčejných diferenciálních rovnic⁹,
- zahrnutí projekce do vizualizace výsledků analýzy.

⁶<https://github.com/sybila/parasim/wiki>

⁷<https://github.com/sybila/parasim/zipball/1.0.0.Final>

⁸<https://github.com/sybila/parasim/issues?milestone=3&page=1&state=closed>

⁹momentálně je použit Octave, <http://octave.sourceforge.net/>