

# Thermo Fisher S C I E N T I F I C

# Using Causal Relationship Model to Prioritize Simulation Parameters 使用因果关系模型来确定模拟参数的优先级

James LaDine, Ph.D.

Vice President, Research and Development, Chemical Analysis Division

#### The World Leader in Serving Science 服务科学的世界领导者

#### Analytical Instruments 分析仪器

Antimicrobial Susceptibility

**Testing Solutions** 

#### Life Sciences Solutions 生命科学产品和服务

#### Chromatography色谱 Mass **Clinical Oncology** Spectrometry 质谱 iCAP Triple Quad MS Vanquish UHPLC Genetic **Sciences** Next-Gen Sequencing Fusion Lumos MS 🌋hemical Analysis 化学和 **Electron** 环境分析 Microscopy Gemini Handheld Analyzer Titan Krios TEM SegStudio CE System Revenue Specialty Diagnostics 专业诊断 90亿美元销售额 **ImmunoDiagnostics** Clinical **Diagnostics** ImmunoCAP Allergy and EliA Autoimmunity Tests 34% **Microbiology Transplant PCT Biomarkers**

**Diagnostics** 

NXType High-Resolution

Genotyping

**Laboratory Products and Services** 

QuantStudio

Dx R qPCR

## 实验室产品 和服务



Laboratory

Chemicals



**Enterprise** and Instrument **Services** 

#### **Pharma Services**

Cell Culture

Reagents

Reproductive

Health

Microarrays

**Bioproduction** 

**Biosciences** 

Life Science Reagents



Lab **Consumables** E1 ClipTip





**Pathology** 

Rotary

Microtome

## A Mission We Are Proud Of 我们引以为傲的使命



We enable our customers to make the world healthier, cleaner, and safer 我们帮助客户使世界更健康、更清洁、更安全

## How Thermo Fisher Could Address "City Health"赛默飞如何解决"城市健康问题"

Instruments and Data Sources that we make 我们制作的仪器和数据源 Examples of Current Use 最新示范案例

## Challenges in Simulating a City 城市仿真面临的挑战



#### Problem of Scale

- Time Domains from Hours...to...Years
- Event Density from one meter to 1000 KM
- Problem of Variable Semi-Open System
  - · People, Food, Materials, Money...
  - Fuel, Power, Water, Air, Pollution, Waste...

The sum of a set of model terms  $(\delta x/\delta t)$  cannot be set equal to zero as a simplifying assumption for a simulation.

 $\Sigma$   $(\delta x/\delta t) = 0$  will be true within some time and space domains and false within other time and space domains; and we don't know which are which or how they change.

#### • 时间和空间尺度问题

- 时间域: 从小时到......年
- 事件密度:从1米到1000公里

#### • 可变半开放系统问题

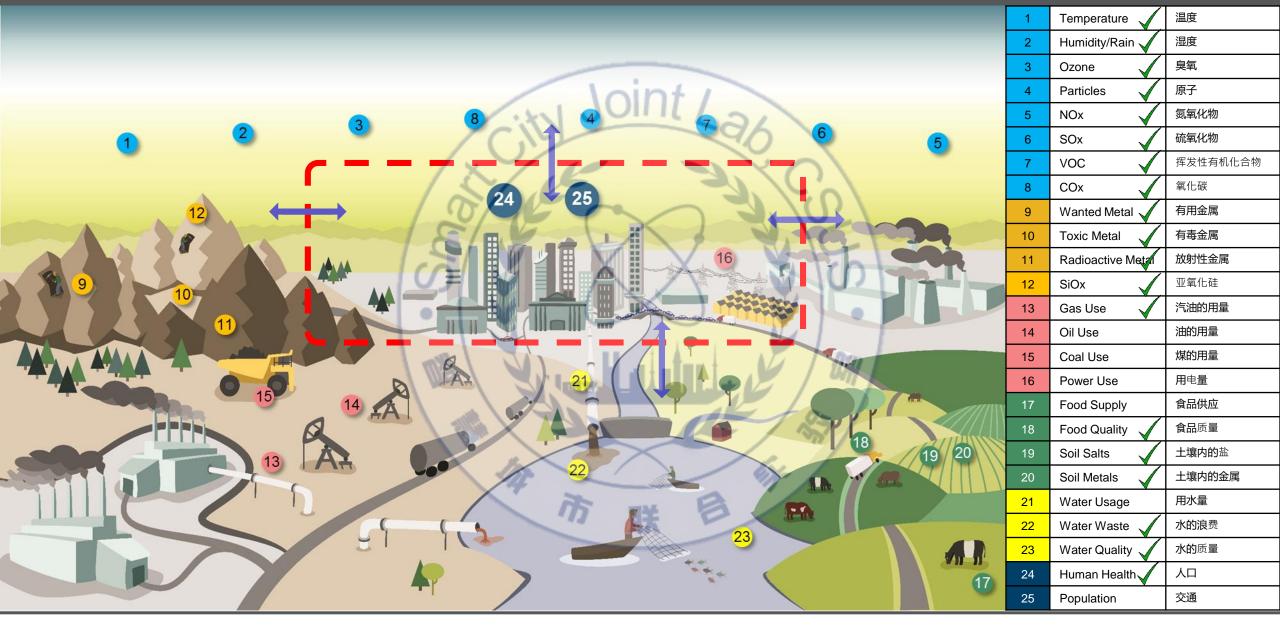
- 人, 食品, 材料, 钱
- 燃料, 电力, 水, 空气, 污染, 废物

作为模拟的简化假设,不能将一组模型 项 $(\delta x/\delta t)$  的总和设置为等于零。

 $\Sigma$  ( $\delta x/\delta t$ ) = 0 在某些时域和空域中为真, 在其他时域和空域内为假;我们不知道 哪个为真,哪个为假,也不知道它们是 如何改变的。



#### The Boundary of a City is Far Beyond the City 城市边界远远超越城市本身





#### Specific Products from Thermo Fisher Scientific 赛默飞的特定产品









1	Temperature	温度
2	Humidity/Rain	湿度
3	Ozone	臭氧
4	Particles	原子
5	NOx 🗸	氮氧化物
6	SOx	硫氧化物
7	voc 🗸	挥发性有机化合物
8	COx	氧化碳
9	Wanted Metal	有用金属
10	Toxic Metal	有毒金属
11	Radioactive Metal	放射性金属
12	SiOx	亚氧化硅
13	Gas Use	汽油的用量
14	Oil Use	油的用量
15	Coal Use	煤的用量
16	Power Use	用电量
17	Food Supply	食品供应
18	Food Quality	食品质量
19	Soil Salts	土壤内的盐
20	Soil Metals	土壤内的金属
21	Water Usage	用水量
22	Water Waste	水的浪费
23	Water Quality	水的质量
24	Human Health 🗸	人口
25	Population	交通

#### The Challenge of Full Simulation

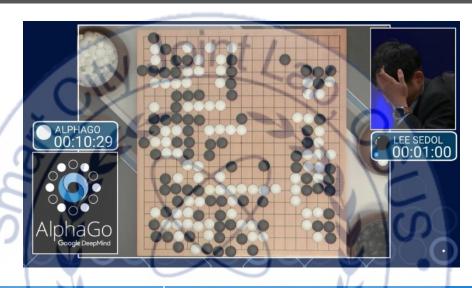
Comparison to Google Alpha Go 与Google AlphaGo比较

Simulating Complex Grid is extremely expensive 模拟复杂网格非常昂贵

Need to Prioritize Parameters for Heuristic Modeling 需要为启发式建模确定参数的优先级



## The Computational Cost of Modeling Complex Unbounded Systems 超复杂无界系统建模的计算成本



AlphaGo Google DeepMind	U - I - t I / / / / / / / / / / / / / / / / / /	Lee Sedol
2000 Processing Chips 2000加工芯片	Computer 计算机	Human Brain 人脑
1 Mega Watt (2% of a Nuclear Power Plant) 1兆瓦(占核电厂的2%)	Power 功率	20 Watts 20瓦
Two Hours 两个小时	Duration 持续时间	Two Hours 两个小时
90	Moves per game 每场比赛的动作	90
245 kg Coal 245千克煤	Fuel 燃料	0.5 kg Lunch 1 斤午餐
Games 1, 2, 3, and 5 第1, 2, 3, 5场比赛	Victories 胜利	Game 4 第4场比赛

#### Study the Problem Without Becoming the Problem 研究问题而不成为问题制造者





#### Simulating Go (10<sup>361</sup> Legal Games)

19 x 19 Grid with edges (Monte Carlo Tree Search)

One Binary State (Black, White), Zero Noise

A move is permanent, does not change prior moves

One Parameter per grid cell (Occupancy)

At end of each game, the parameter is reset.

Needs 2% of a Nuclear Power Plant, 2 Hours

#### **Simulating A City**

Variable Grid no edges

Mostly scalar states with variable noise

A change is temporary, can influence prior changes

Perhaps 50+ Parameters per grid cell

No Reset. Errors Accumulate.

Several Continuous Nuclear Power Plants (??)

Full Simulation of a City Makes "Super-Computers" into "Femto-Computers" 城市的全面模拟使"超级计算机"成为"毫微微-计算机"



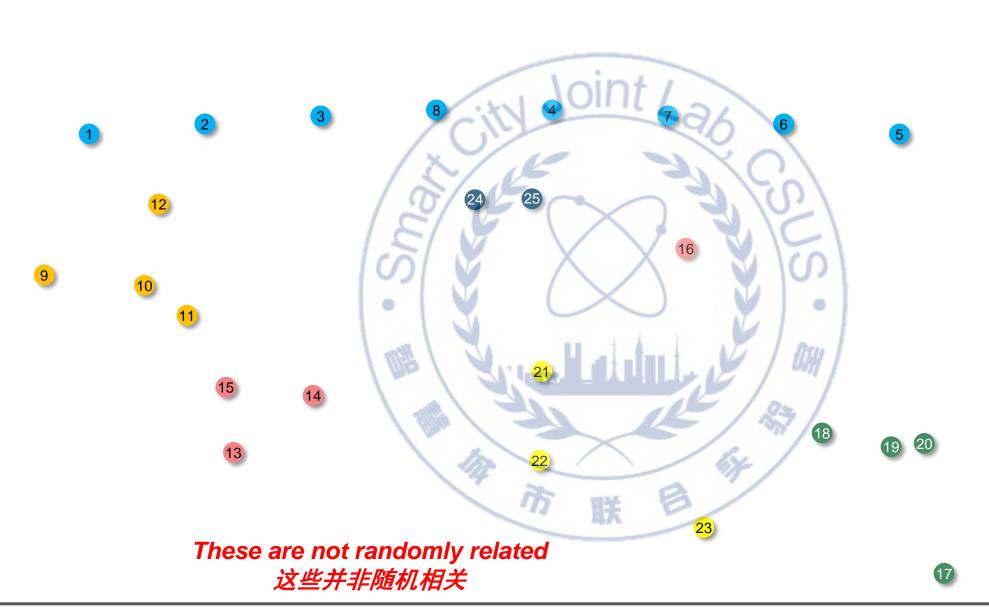
## Qualitative Causal Relationships to Prioritize Data Simulation 专注于用定性因果关系来考虑数据模拟<u>优先权</u>

How those Data Support Model of a City 如何支持一个城市的数据模型

How the Data could be Prioritized 如何确定数据的优先顺序



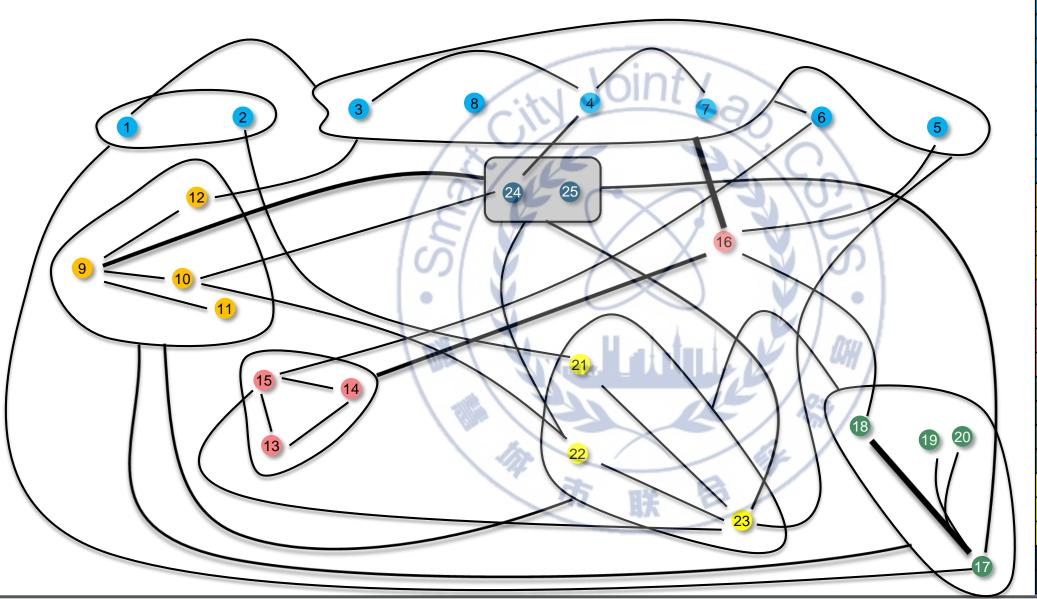
## The Connections That We Already Know 我们已经知道的联系



1	Temperature	温度
2	Humidity/Rain	湿度
3	Ozone	臭氧
4	Particles	原子
5	NOx	氮氧化物
6	SOx	硫氧化物
7	VOC	挥发性有机化合物
8	COx	氧化碳
9	Wanted Metal	有用金属
10	Toxic Metal	有毒金属
11	Radioactive M	放射性金属
12	SiOx	亚氧化硅
13	Gas Use	汽油的用量
14	Oil Use	油的用量
15	Coal Use	煤的用量
16	Power Use	用电量
17	Food Supply	食品供应
18	Food Quality	食品质量
19	Soil Salts	土壤内的盐
20	Soil Metals	土壤内的金属
21	Water Usage	用水量
22	Water Waste	水的浪费
23	Water Quality	水的质量
24	Human Health	人口
25	Population	交通



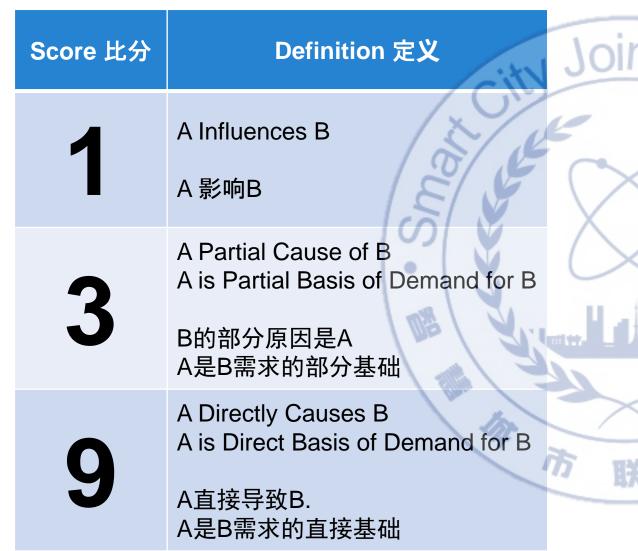
## The Connections That We Already Know 我们已经知道的联系

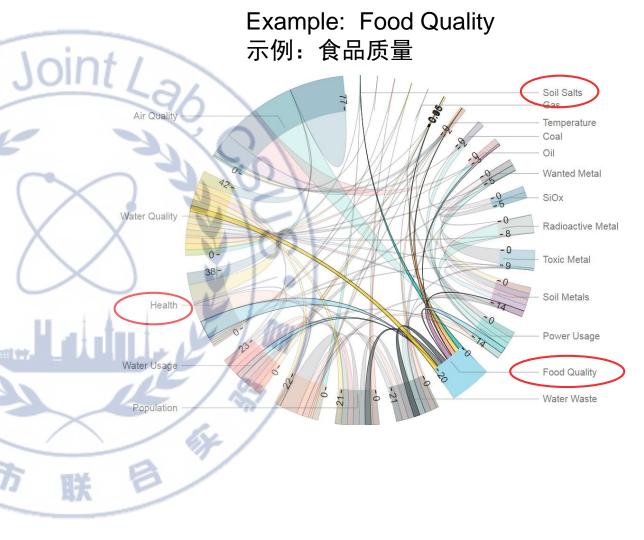


1 Temperature 温度   2 Humidity/Rain 湿度   3 Ozone 臭氧   4 Particles 原子   5 NOx 氮氧化物   6 SOx 硫氧化物   7 VOC 挥发性有机化合物   8 COx 氧化碳   9 Wanted Metal 有用金属   10 Toxic Metal 有毒金属   11 Radioactive M 放射性金属   12 SiOx 亚氧化硅   13 Gas Use 汽油的用量   14 Oil Use 油的用量   15 Coal Use 煤的用量   16 Power Use 用电量   17 Food Supply 食品供应   18 Food Quality 食品质量   19 Soil Salts 土壤内的盐   20 Soil Metals 土壤内的金属   21 Water Usage 用水量   22 Water Waste 水的浪费   23 Water Quality 水的质量   24 Human Health 人口   25 Population 交通			
3	1	Temperature	温度
4 Particles 原子 5 NOx 氮氧化物 6 SOx 硫氧化物 7 VOC 挥发性有机化合物 8 COx 氧化碳 9 Wanted Metal 有用金属 10 Toxic Metal 有毒金属 11 Radioactive M 放射性金属 12 SiOx 亚氧化硅 13 Gas Use 汽油的用量 14 Oil Use 油的用量 15 Coal Use 煤的用量 16 Power Use 用电量 17 Food Supply 食品供应 18 Food Quality 食品质量 19 Soil Salts 土壤内的金属 21 Water Usage 用水量 22 Water Waste 水的浪费 23 Water Quality 水的质量 24 Human Health 人口	2	Humidity/Rain	湿度
5NOx氮氧化物6SOx硫氧化物7VOC挥发性有机化合物8COx氧化碳9Wanted Metal有用金属10Toxic Metal有毒金属11Radioactive M放射性金属12SiOx亚氧化硅13Gas Use汽油的用量14Oil Use油的用量15Coal Use煤的用量16Power Use用电量17Food Supply食品供应18Food Quality食品质量19Soil Salts土壤内的盐20Soil Metals土壤内的金属21Water Usage用水量22Water Waste水的浪费23Water Quality水的质量24Human Health人口	3	Ozone	臭氧
6 SOx 硫氧化物 7 VOC 挥发性有机化合物 8 COx 氧化碳 9 Wanted Metal 有用金属 10 Toxic Metal 有毒金属 11 Radioactive M 放射性金属 12 SiOx 亚氧化硅 13 Gas Use 汽油的用量 14 Oil Use 油的用量 15 Coal Use 煤的用量 16 Power Use 用电量 17 Food Supply 食品供应 18 Food Quality 食品质量 19 Soil Salts 土壤内的盐 20 Soil Metals 土壤内的金属 21 Water Usage 用水量 22 Water Waste 水的浪费 23 Water Quality 水的质量 24 Human Health 人口	4	Particles	原子
7 VOC 挥发性有机化合物 8 COx 氧化碳 9 Wanted Metal 有用金属 10 Toxic Metal 有毒金属 11 Radioactive M 放射性金属 12 SiOx 亚氧化硅 13 Gas Use 汽油的用量 14 Oil Use 油的用量 15 Coal Use 煤的用量 16 Power Use 用电量 17 Food Supply 食品供应 18 Food Quality 食品质量 19 Soil Salts 土壤内的金属 21 Water Usage 用水量 22 Water Waste 水的浪费 23 Water Quality 水的质量 24 Human Health 人口	5	NOx	氮氧化物
8 COx 氧化碳 9 Wanted Metal 有用金属 10 Toxic Metal 有毒金属 11 Radioactive M 放射性金属 12 SiOx 亚氧化硅 13 Gas Use 汽油的用量 14 Oil Use 油的用量 15 Coal Use 煤的用量 16 Power Use 用电量 17 Food Supply 食品供应 18 Food Quality 食品质量 19 Soil Salts 土壤内的金属 21 Water Usage 用水量 22 Water Waste 水的浪费 23 Water Quality 水的质量 24 Human Health 人口	6	SOx	硫氧化物
9 Wanted Metal 有用金属 10 Toxic Metal 有毒金属 11 Radioactive M 放射性金属 12 SiOx 亚氧化硅 13 Gas Use 汽油的用量 14 Oil Use 油的用量 15 Coal Use 煤的用量 16 Power Use 用电量 17 Food Supply 食品供应 18 Food Quality 食品质量 19 Soil Salts 土壤内的盐 20 Soil Metals 土壤内的金属 21 Water Usage 用水量 22 Water Waste 水的浪费 23 Water Quality 水的质量 24 Human Health 人口	7	VOC	挥发性有机化合物
10 Toxic Metal 有毒金属 11 Radioactive M 放射性金属 12 SiOx 亚氧化硅 13 Gas Use 汽油的用量 14 Oil Use 油的用量 15 Coal Use 煤的用量 16 Power Use 用电量 17 Food Supply 食品供应 18 Food Quality 食品质量 19 Soil Salts 土壤内的盐 20 Soil Metals 土壤内的金属 21 Water Usage 用水量 22 Water Waste 水的浪费 23 Water Quality 水的质量 24 Human Health 人口	8	COx	氧化碳
11 Radioactive M 放射性金属 12 SiOx 亚氧化硅 13 Gas Use 汽油的用量 14 Oil Use 油的用量 15 Coal Use 煤的用量 16 Power Use 用电量 17 Food Supply 食品供应 18 Food Quality 食品质量 19 Soil Salts 土壤内的盐 20 Soil Metals 土壤内的金属 21 Water Usage 用水量 22 Water Waste 水的浪费 23 Water Quality 水的质量 24 Human Health 人口	9	Wanted Metal	有用金属
12 SiOx 亚氧化硅 13 Gas Use 汽油的用量 14 Oil Use 油的用量 15 Coal Use 煤的用量 16 Power Use 用电量 17 Food Supply 食品供应 18 Food Quality 食品质量 19 Soil Salts 土壤内的盐 20 Soil Metals 土壤内的金属 21 Water Usage 用水量 22 Water Waste 水的浪费 23 Water Quality 水的质量 24 Human Health 人口	10	Toxic Metal	有毒金属
13 Gas Use 汽油的用量 14 Oil Use 油的用量 15 Coal Use 煤的用量 16 Power Use 用电量 17 Food Supply 食品供应 18 Food Quality 食品质量 19 Soil Salts 土壤内的盐 20 Soil Metals 土壤内的金属 21 Water Usage 用水量 22 Water Waste 水的浪费 23 Water Quality 水的质量 24 Human Health 人口	11	Radioactive M	放射性金属
14 Oil Use 油的用量 15 Coal Use 煤的用量 16 Power Use 用电量 17 Food Supply 食品供应 18 Food Quality 食品质量 19 Soil Salts 土壤内的盐 20 Soil Metals 土壤内的金属 21 Water Usage 用水量 22 Water Waste 水的浪费 23 Water Quality 水的质量 24 Human Health 人口	12	SiOx	亚氧化硅
Coal Use   煤的用量	13	Gas Use	汽油的用量
16Power Use用电量17Food Supply食品供应18Food Quality食品质量19Soil Salts土壤内的盐20Soil Metals土壤内的金属21Water Usage用水量22Water Waste水的浪费23Water Quality水的质量24Human Health人口	14	Oil Use	油的用量
17 Food Supply 食品供应 18 Food Quality 食品质量 19 Soil Salts 土壤内的盐 20 Soil Metals 土壤内的金属 21 Water Usage 用水量 22 Water Waste 水的浪费 23 Water Quality 水的质量 24 Human Health 人口	15	Coal Use	煤的用量
18 Food Quality 食品质量 19 Soil Salts 土壤内的盐 20 Soil Metals 土壤内的金属 21 Water Usage 用水量 22 Water Waste 水的浪费 23 Water Quality 水的质量 24 Human Health 人口	16	Power Use	用电量
19 Soil Salts 土壤内的盐 20 Soil Metals 土壤内的金属 21 Water Usage 用水量 22 Water Waste 水的浪费 23 Water Quality 水的质量 24 Human Health 人口	17	Food Supply	食品供应
20 Soil Metals 土壤内的金属 21 Water Usage 用水量 22 Water Waste 水的浪费 23 Water Quality 水的质量 24 Human Health 人口	18	Food Quality	食品质量
21     Water Usage     用水量       22     Water Waste     水的浪费       23     Water Quality     水的质量       24     Human Health     人口	19	Soil Salts	土壤内的盐
22     Water Waste     水的浪费       23     Water Quality     水的质量       24     Human Health     人口	20	Soil Metals	土壤内的金属
23 Water Quality 水的质量 24 Human Health 人口	21	Water Usage	用水量
24 Human Health 人口	22	Water Waste	水的浪费
	23	Water Quality	水的质量
25 Population 交通	24	Human Health	人口
	25	Population	交通

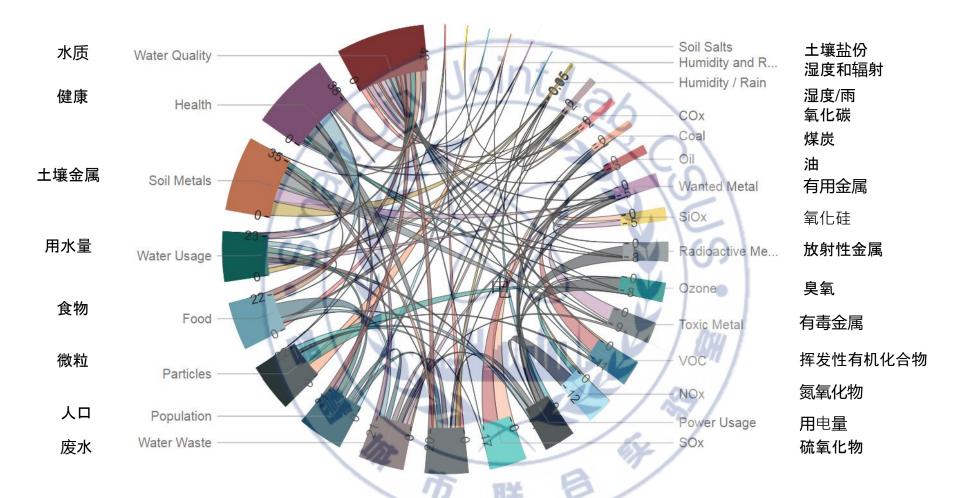


#### Scoring System for Causal Connections 因果关系评分系统



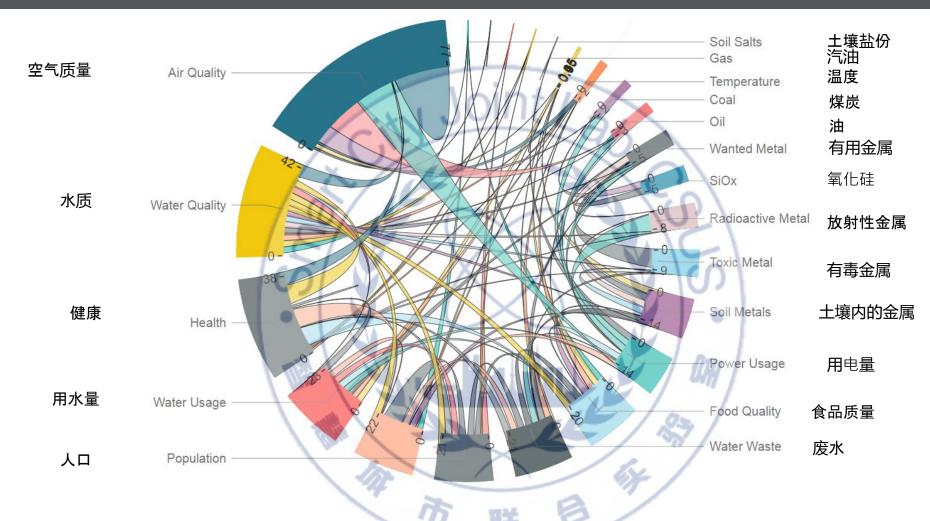


## Nodes and Predictive Strength 节点和预测强度



Chord Diagram Illustrates the Size and Importance of Nodes in Heuristic relationships (启发式关系中节点大小与重要性弦图)

## Simplified Node Analysis 简化的节点分析



Water Quality and Air Quality may be Super-Predictive Nodes for Health and Population of a City 水质和空气质量可能是城市健康和人口的超级预测节点

#### Summary

- Thermo Fisher has very large product offering of instruments that would generate important data for modeling parameters
- The number of relevant parameters for "City Health" is very large.
- Heuristic analysis of logical parameters in a grid would be extremely costly.
- Therefore simplifying, prioritizing, and reducing simulation parameters is necessary.
- Analysis of causal relationship are one way to simplify and prioritize parameters.
- In one scheme, water quality and air quality are highly influential for any data model.
- Thermo Fisher would be pleased to discuss potential collaboration.

- Thermo Fisher有许多仪器可以为建模参数生成重要数据
- 与"城市健康"相关的参数数量太多。
- 对网格中所有逻辑参数的启发式分析将非常昂贵。
- 因此,需要简化,优先化和减少模拟参数。
- 因果关系分析是简化和优先考虑参数的一种方法。
- 在一个方案中, 水质和空气质量对任何数据模型都具有很大影响。
- Thermo Fisher很乐意讨论潜在的合作。



