Analýza robustnosti spojitých dynamických systémů v distribuovaném prostředí

parasim

Jan Papoušek

Dynamické systémy

soustava diferenciálních rovnic

$$\frac{\mathbf{y}}{dt} = f(\mathbf{y})$$

$$t \geq t_o, \mathbf{y}(t_o) = y_0$$

Chování dynamického systému

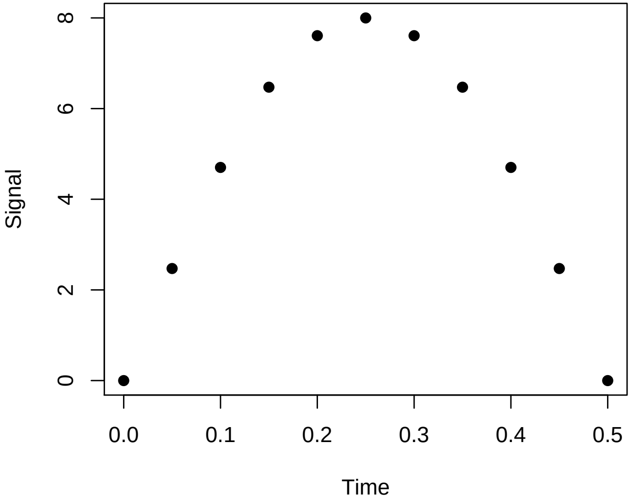
numerická simulace

$$t_{n+1} = t_n + h$$

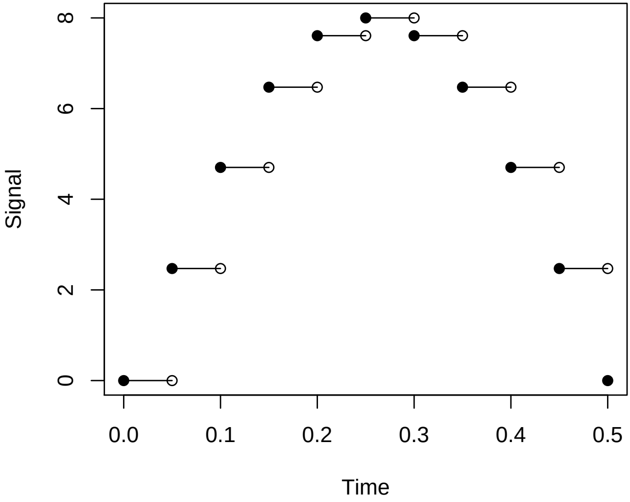
$$\mathbf{y}_n \sim \mathbf{y}(t_n)$$

(trejektorie chování, signál)

Chování dynamického systému



Chování dynamického systému



Vlastnost – STL

$$U = \{\mu_1, \mu_2, \ldots, \mu_k\}$$

$$\mu_i : \mathbb{R}^n \to \{T, F\}$$

sybila systems biology laboratory

Vlastnost – STL

$$U = \{\mu_1, \mu_2, \ldots, \mu_k\}$$

$$\mu_i : \mathbb{R}^n \to \{T, F\}$$

atomické propozice

$$P = \{1, \ldots, k\}$$

Vlastnost – STL

$$\varphi := T \mid p \mid \neg\varphi \mid \varphi_1 \wedge \varphi_2 \mid \varphi_1 \mathbf{U}_{[a,b]} \varphi_2$$

Vlastnost – STL

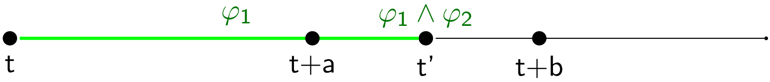
$$\varphi := T \mid p \mid \neg\varphi \mid \varphi_1 \wedge \varphi_2 \mid \varphi_1 \mathbf{U}_{[a,b]} \varphi_2$$

$$
\begin{aligned}
(\mathbf{y}, t) \models p \quad & \iff \mu_p(\mathbf{y}(t)) = T \\
(\mathbf{y}, t) \models \neg\varphi \quad & \iff (\mathbf{y}, t) \not\models \varphi \\
(\mathbf{y}, t) \models \varphi_1 \wedge \varphi_2 \quad & \iff (\mathbf{y}, t) \models \varphi_1 \text{ a současně } (\mathbf{y}, t) \models \varphi_2 \\
(\mathbf{y}, t) \models \varphi_1 \mathbf{U}_{[a,b]} \varphi_2 \quad & \iff \exists t' \in [t+a, t+b].(\mathbf{y}, t') \models \varphi_2 \\
& \qquad \text{a současně } \forall t'' \in [t, t'].(\mathbf{y}, t'') \models \varphi_1
\end{aligned}
$$

sybila systems biology laboratory

Vlastnost – STL

$$\varphi_1 \mathbf{U}_{[a,b]} \varphi_2$$

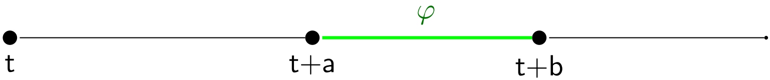


Vlastnost – STL

$$\mathbf{F}_{[a,b]}\varphi \; (T\,\mathbf{U}_{[a,b]}\varphi)$$

Vlastnost – STL

$$\mathbf{G}_{[a,b]}\varphi \ (\neg\mathbf{F}_{[a,b]}\neg\varphi)$$



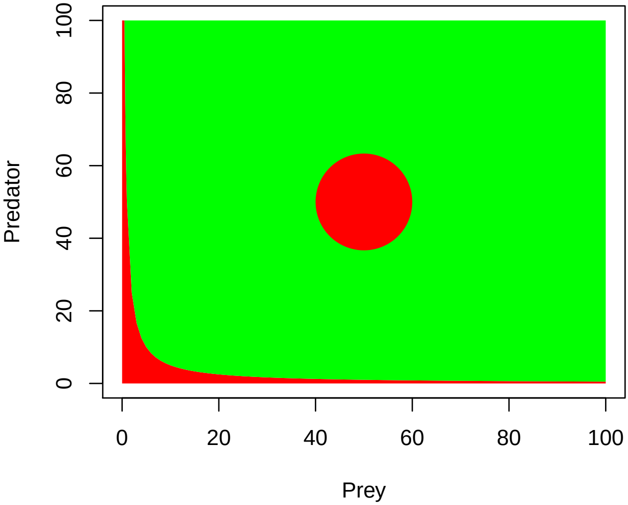
Parametry

$$\frac{dY_1}{dt} = \nu Y_1 - \alpha Y_1 \cdot Y_2 \qquad \frac{dY_2}{dt} = \alpha Y_1 \cdot Y_2 - \mu Y_2$$

proměnné $(Y_1,\ Y_2)$ – počáteční hodnoty

koeficienty $(\mu,\ \nu,\ \alpha)$

Cíl analýzy



Lokální robustnost

$$U' = \{\mu'_1, \mu'_2, \dots, \mu'_k\}$$

$$\mu'_i : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$$

Lokální robustnost

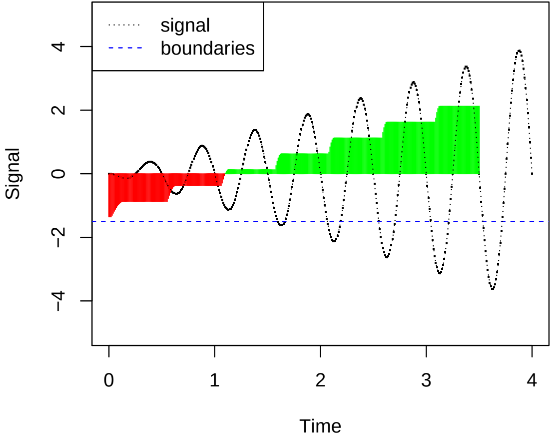
$$U' = \{\mu'_1, \mu'_2, \ldots, \mu'_k\}$$

$$\mu'_i : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$$

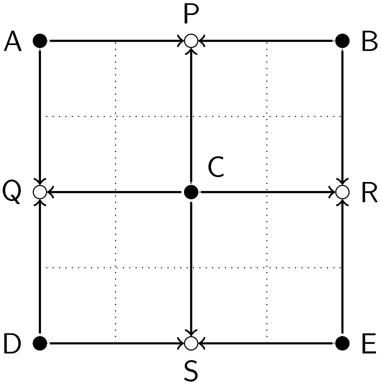
$$\begin{aligned}
\rho(p, \mathbf{y}, t) &= \mu'_p(\mathbf{y}(t)) \\
\rho(\neg\varphi, \mathbf{y}, t) &= -\rho(\varphi, \mathbf{y}, t) \\
\rho(\varphi_1 \wedge \varphi_2, \mathbf{y}, t) &= \min\Big(\rho(\varphi_1, \mathbf{y}, t), \rho(\varphi_1, \mathbf{y}, t)\Big) \\
\rho(\varphi_1 \mathbf{U}_{[a,b]} \varphi_2, \mathbf{y}, t) &= \max_{t' \in [t+a, t+b]} min\Big(\rho(\varphi_2, \mathbf{y}, t'), \min_{t'' \in [t, t']} \rho(\varphi_1, \mathbf{y}, t'')\Big)
\end{aligned}$$

Lokální robustnost

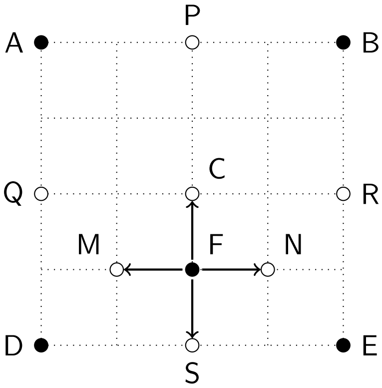
$$\mathbf{F}_{[0,\frac{1}{2}]} x \leq -k$$



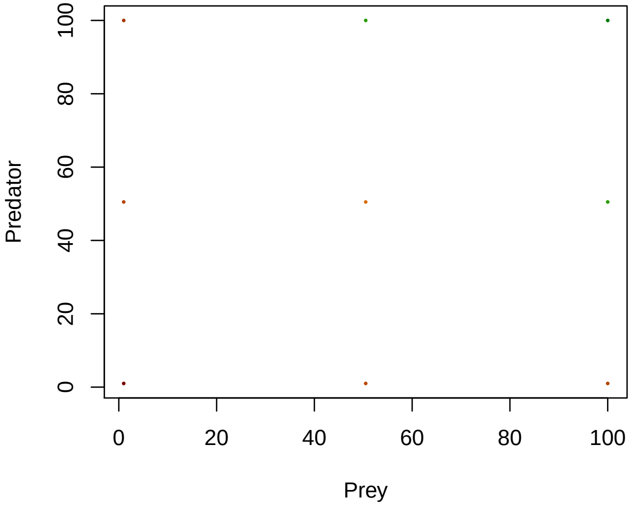
Průběh analýzy



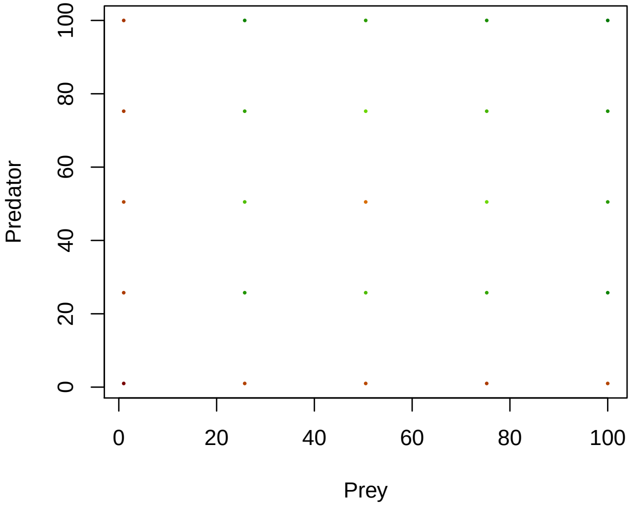
Průběh analýzy



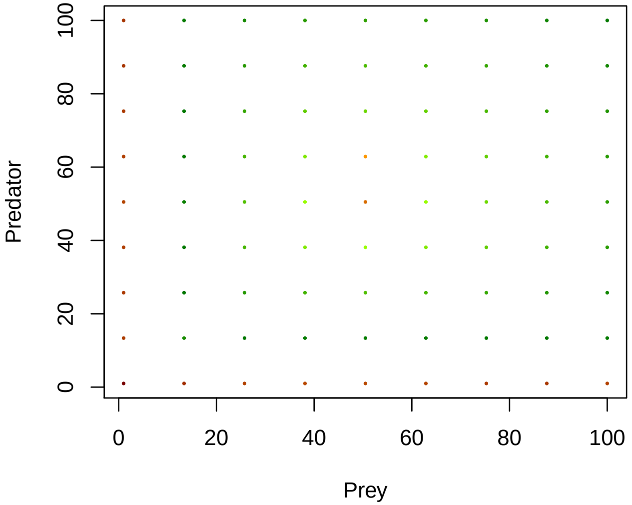
Průběh analýzy



Průběh analýzy

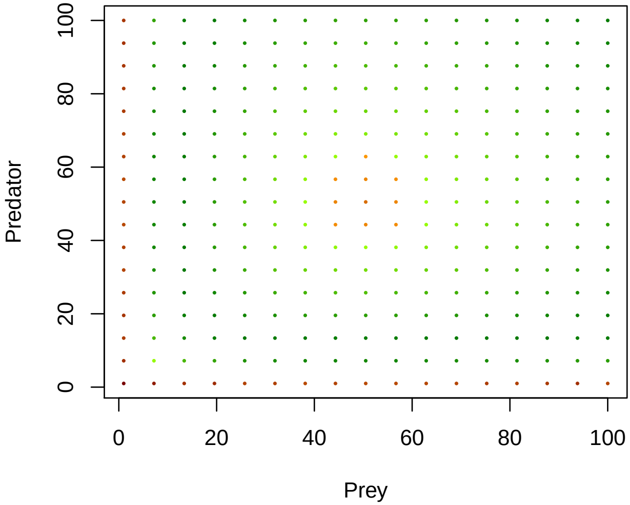


Průběh analýzy

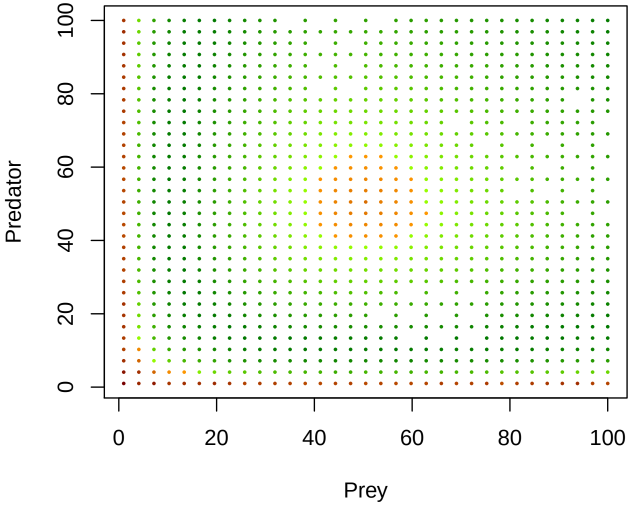


sybila
systems biology laboratory

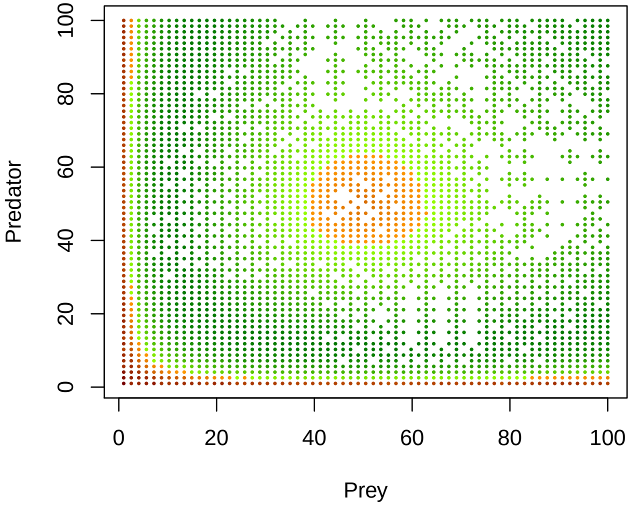
Průběh analýzy



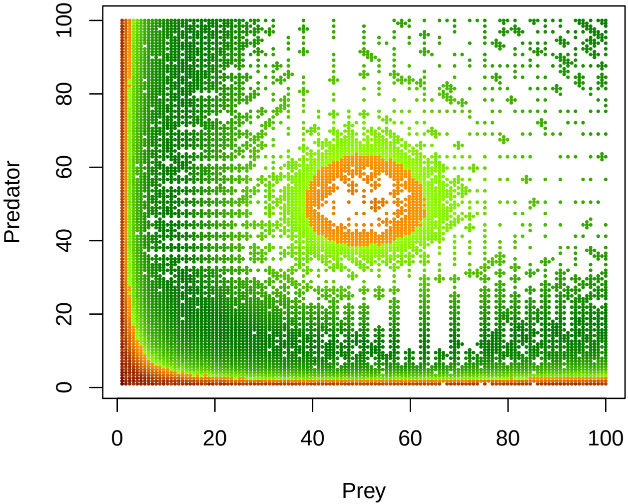
Průběh analýzy



Průběh analýzy



Průběh analýzy



Implementace

parasim

nástroj pro paralelní simulaci a verifikaci

Systém rozšíření

- jádro
  - životní cyklus
  - kontexty + služby
  - jednotná konfigurace
  - obohacování objektů
  - vzdálený přístup
- rozšíření
  - numerická simulace
  - výpočet robustnosti
  - zahušťování
  - výpočetní model
  - vizualizace
  - uživatelské rozhraní
  - a další ...

sybila systems biology laboratory

Systém rozšíření

- jádro
  - životní cyklus
  - kontexty + služby
  - jednotná konfigurace
  - obohacování objektů
  - vzdálený přístup
- rozšíření
  - numerická simulace
  - výpočet robustnosti
  - zahušťování
  - výpočetní model
  - vizualizace
  - uživatelské rozhraní
  - a další . . .

Systém rozšíření

- jádro
  - životní cyklus
  - kontexty + služby
  - jednotná konfigurace
  - obohacování objektů
  - vzdálený přístup
- rozšíření
  - numerická simulace
  - výpočet robustnosti (2 implementace, Tomáš Vejpustek)
  - zahušťování
  - výpočetní model
  - vizualizace (Tomáš Vejpustek)
  - uživatelské rozhraní (Tomáš Vejpustek)
  - a další ...

Výpočetní model

abstrakce nad konkrétním výpočetním prostředím

$$\mathrm{V} = V_1 \oplus V2 \oplus \ldots \oplus V_k$$

- V konečný výsledek
- V_i mezivýsledky
- $\oplus$ asociativní a komutativní operace spojování

Výpočetní model

- 2 výpočetní prostředí:
  - sdílená paměť
  - distribuovaná paměť
- výpočet má na starost kontejner $\longrightarrow$ výpočetní prostředí
- na začátku 1 výpočetní instance
- instance může kdykoliv vytvářet nové $\longrightarrow$ kontejner
- kontejner sbírá výsledky z vypočtených instancí $\longrightarrow$ konečný výsledek

Výpočetní model

- 2 výpočetní prostředí:
  - sdílená paměť
  - distribuovaná paměť
- výpočet má na starost kontejner $\longrightarrow$ výpočetní prostředí
- na začátku 1 výpočetní instance
- instance může kdykoliv vytvářet nové $\longrightarrow$ kontejner
- kontejner sbírá výsledky z vypočtených instancí $\longrightarrow$ konečný výsledek

Výpočetní model

- 2 výpočetní prostředí:
  - sdílená paměť
  - distribuovaná paměť
- výpočet má na starost kontejner $\longrightarrow$ výpočetní prostředí
- na začátku 1 výpočetní instance
- instance může kdykoliv vytvářet nové $\longrightarrow$ kontejner
- kontejner sbírá výsledky z vypočtených instancí $\longrightarrow$ konečný výsledek

Výpočetní model

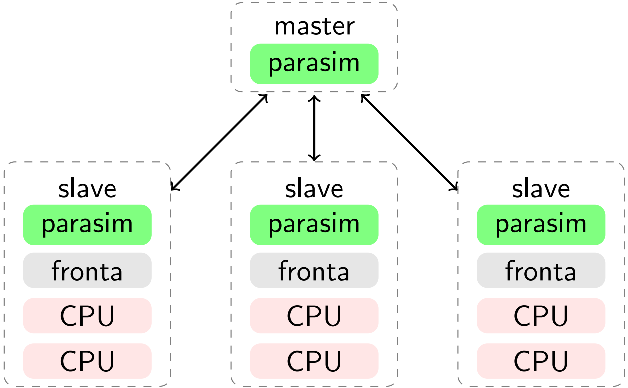
- 2 výpočetní prostředí:
  - sdílená paměť
  - distribuovaná paměť
- výpočet má na starost kontejner $\longrightarrow$ výpočetní prostředí
- na začátku 1 výpočetní instance
- instance může kdykoliv vytvářet nové $\longrightarrow$ kontejner
- kontejner sbírá výsledky z vypočtených instancí $\longrightarrow$ konečný výsledek

Výpočetní model

- 2 výpočetní prostředí:
  - sdílená paměť
  - distribuovaná paměť
- výpočet má na starost kontejner $\longrightarrow$ výpočetní prostředí
- na začátku 1 výpočetní instance
- instance může kdykoliv vytvářet nové $\longrightarrow$ kontejner
- kontejner sbírá výsledky z vypočtených instancí $\longrightarrow$ konečný výsledek

sybila systems biology laboratory

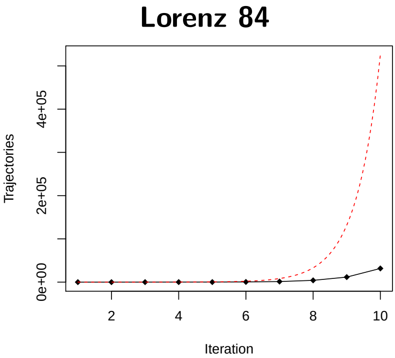
Distribuované prostředí

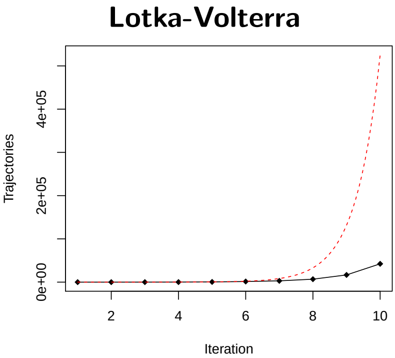


- vytvoření instance
- začátek výpočtu instance
- konec výpočtu instance

- balancováno
- konec výpočtu

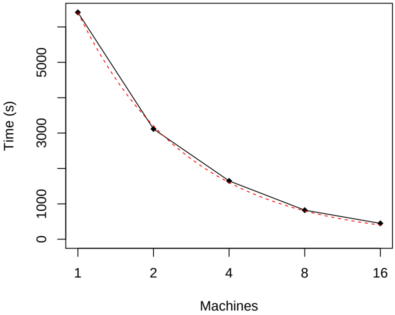
Počet potřebných primárních bodů



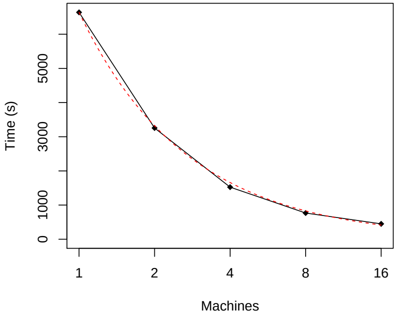


Škálovatelnost

Lorenz 84



Lotka-Volterra



Závěr

- rozšíření algoritmu pro analýzu dynamických systémů o lokální robustnost
- implementace v nástroji Parasim
- paralelizace ve sdílené a distribuované paměti
- velký důraz na rozšiřitelnost

Otázky

Balancování

$$\text{busy} \geq \textsc{Busy\_Bound}$$
$$\wedge$$
$$\text{idle} \leq \textsc{Idle\_Bound}$$
$$\wedge$$
$$\text{busy} \geq K \cdot \text{idle}$$

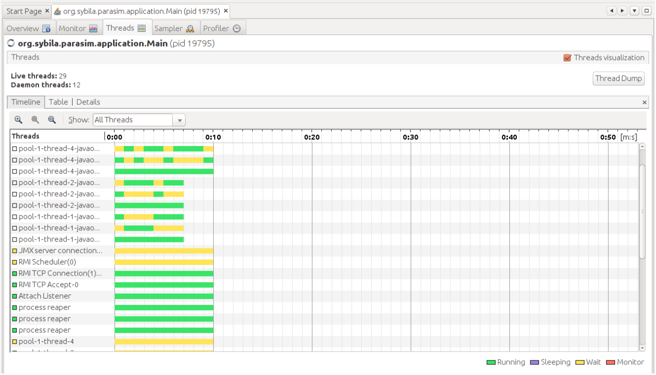
---

balancuje se instace s nejvyšší úrovní zahuštění

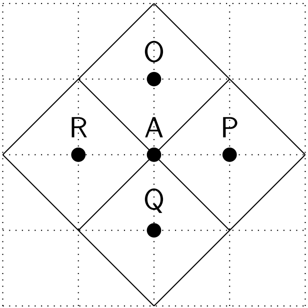
alternativou je instance s nejnižším cache hit
(výpočetně náročnější)

Podíl numerické simulace na času výpočtu (90 %)

jvisualvm (odhad) / vlastní rozšíření



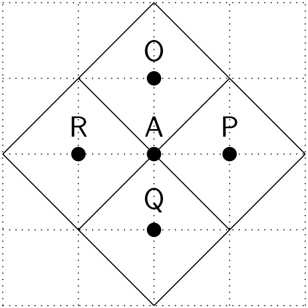
aktuálně vypnuté z důvodu výkonu



$$f(A) = \frac{R_A + f(O) + f(P) + f(Q) + f(R)}{5}$$

Globální robustnost

aktuálně vypnuté z důvodu výkonu



$$f(A) = \frac{R_A + \sum_{i=1}^{|N|} f(N_i) + (2d - |N|) \cdot R_A}{1 + 2d}$$

Kritická místa aplikace a možná vylepšení I

- numerická simulace (nyní GNU Octave)
- plná podpora SBML
- možnost navázat na předchozí výpočty
- vizualizace pro více parametrů
- refaktorování za účelem výpočtu globální robustnosti

Kritcká místa a možná vylepšení II