

1 Anotace

Projekt si klade za cíl vytvoření nástroje 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 je zde podstatný aspekt vzniku modulární architektury, jež by umožňovala budoucí vývoj a testování optimalizace a paralelizace jednotlivých modulů i analytických algoritmů.

2 Cíle

1. Řešená úloha je ověření, za jakých iniciálních podmínek splňuje dynamický systém danou temporální vlastnost. Výchozím bodem je algoritmus prezentovaný v [2] a dále rozšířen na základě [1].

Problém byl rozdělen na podúkoly a jim příslušné moduly:

- (a) simulace systému diferenciálních rovnic,
- (b) detekce cyklu,
- (c) monitoring temporální vlastnosti,
- (d) určování vzdálenosti mezi trajektoriemi chování,
- (e) zahušťování prostoru iniciálních podmínek.

Největší pozornost byla do této doby věnována modulům (a) a (c). Ty se jeví být výpočetně nejnáročnější a možný způsob jejich optimalizace byl nastíněn v [4] a [3]. Je možné také navázat na vizuální zadávání temporálních vlastností prezentované v [5].

Aktuální stav je již nyní možné sledovat na <https://github.com/sybila/parasim>.

2. Projekt si klade za úkol vytvořit nástroj pro analýzu dynamických systémů pocházejících zejména z oblasti biologie. Projekt je vypracováván v návaznosti

na výzkum vedený v Laboratoři systémové biologie (Sybila). Cílem v kontextu laboratoře je vytvořit platformu pro jednoduchou implementaci výsledků výzkumu a jejich přenos do praxe.

Již existující samostatné moduly je nutné integrovat a rozšířit o další funkcionalitu (načítání modelu a vlastností, vizualizace napočítaných výsledků a exportování výsledků do souboru). Do budoucna se počítá s dalšími algoritmy pro analýzu dynamických systémů, a proto návrh a implementace architektury umožní integrovat další rozšíření. To otevře prostor pro účast třetích stran na vývoji.

V první verzi bude mít nástroj pouze rozhraní z příkazového řádku. Pro zvýšení přístupnosti však musí nástroj nabídnout i grafické uživatelské rozhraní. Není v plánu vytvořit editor modelů (takové nástroje jsou již k dispozici, např. Copasi, CellDesigner), avšak je pravděpodobné, že bude obsahovat editor temporálních vlastností. Klíčovými součástmi grafického rozhraní jsou:

- zobrazení výsledků analýzy,
- sdružení a správa modelů, vlastností a výsledků.

Po úspěšné integraci jednotlivých modulů bude nutné se zaměřit na akceleraci výpočtu. Na základě naměřených dat se rozhodne, zda se bude akcelarovat nějaký z modulů samostatně např. za použití technologie CUDA, nebo zda se výpočet bude spouštět v distribuovaném prostředí např. pomocí frameworku Hadoop.

Aby bylo podpořeno rozšíření mezi potenciální uživatele, bude nástroj umístěn na <https://github.com/sybila/parasim> a doplněn o uživatelskou dokumentaci a tutoriál. Program bude licencován pod GNU GPL, jejíž volnost by měla podpořit rozšiřování nástroje třetí stranou.

3. (a) duben, květen

Základní pracovní náplní bude integrace a dopisování modulů. Výstupem

bude prototyp nástroje spustitelný z příkazového řádku.

- Jan Papoušek – integrace modulů, vizualizace výsledků
- Tomáš Vejpustek – načítání vstupů, reprezentace dat, exportování výsledků

(b) červen, červenec

Na základě prototypu proběhne testování a profilování existujících modulů, jejichž výsledky budou shrnuty v technické zprávě. Zároveň bude vytvořena dokumentace prototypu ve formě manuálové stránky s příklady použití.

- Jan Papoušek – profilování, dokumentace
- Tomáš Vejpustek – testy, dokumentace

(c) srpen, září, říjen

Třetí etapa bude věnována návrhu a implementaci GUI společně s optimalizací časově náročných částí výpočtu. Optimalizace bude přitom vycházet z výsledků profilování. Na konci etapy bude nástroj vykazovat většinu navrhované funkcionality.

- Jan Papoušek – návrh optimalizace výpočtu a její implementace
- Tomáš Vejpustek – návrh a implementace GUI

(d) listopad, prosinec

Proběhne vyhodnocení optimalizace, testování a dokončování nástroje. Zároveň bude vytvořena uživatelská dokumentace. Dosažené výsledky budou shrnuty v závěrečné technické zprávě.

- Jan Papoušek – testy, další profilování, dokumentace
- Tomáš Vejpustek – testy, dokončení GUI, dokumentace

Reference

- [1] Alexandre Donzé and Oded Maler. Robust satisfaction of temporal logic over real-valued signals. In *Proceedings of the 8th international conference*

on Formal modeling and analysis of timed systems, FORMATS'10, pages 92–106, Berlin, Heidelberg, 2010. Springer-Verlag.

- [2] Sven DRAŽAN. Výpočetní analýza nelineárních dynamických systémů [online]. Diplomová práce, Masarykova univerzita, Fakulta informatiky, 2011 [cit. 2012-03-11].
- [3] Milan KOVÁČIK. Simulation-based analysis of large-scale dynamical systems [online], 2012 [cit. 2012-03-11].
- [4] Jan PAPOUŠEK. Paralelizace metod pro analýzu dynamických systémů pomocí grafické karty [online], 2011 [cit. 2012-03-11].
- [5] Tomáš VEJPUSTEK. Visual specification of temporal properties over time series [online], 2011 [cit. 2012-03-11].