Τίτλος Έργου: «StochSocS: Συστήματα σε Ψηφίδα για Παράλληλη Στοχαστική Προσομοίωση Βιολογικών Δικτύων στη Βιολογία Συστημάτων»

(κωδικός 3828 και Κ.Α. 70/3/12367)

ΠΑΡΑΔΟΤΕΟ 2.1

Απεικόνιση Αλγορίθμων Στοχαστικής Προσομοίωσης σε Πολυ-Πύρηνη Αρχιτεκτονική NoC

ΑΘΗΝΑ

ΦΕΒΡΟΥΑΡΙΟΣ 2015

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007–2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

ΠΙΝΑΚΑΣ ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΩΝ

ΛΙΣΤΑ ΕΙΚΟΝΩΝ

ΛΙΣΤΑ ΠΙΝΑΚΩΝ

1. ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Η *Βιολογία Συστημάτων* (systems biology) έχει αναδειχθεί σε σημαντικό διεπιστημονικό πεδίο έρευνας δημιουργώντας νέες προκλήσεις όχι μόνο για τους βιολόγους, αλλά και για τους επιστήμονες και μηχανικούς υπολογιστών. Μεγάλη πρόκληση αποτελεί η ικανότητα να συλλαμβάνουμε και να αναλύουμε τη δυναμική συμπεριφορά των μεγάλου μεγέθους δικτύων βιοχημικών αντιδράσεων, που μοντελοποιούν τη λειτουργία ολόκληρων κυτταρικών υποσυστημάτων (όπως π.χ. τα μεταβολικά δίκτυα, δίκτυα σηματοδότησης ή μεταγραφής) ή και οργανισμών. Η ολοένα αυξανόμενη πολυπλοκότητα αυτών των "βιομοντέλων", που μπορεί να φτάσουν τις χιλιάδες βιομοριακές αλληλεπιδράσεις, δημιουργεί την πιεστική ανάγκη να δημιουργηθούν εξελιγμένα συστήματα προσομοίωσης υψηλών επιδόσεων που να μπορούν εύκολα και αποδοτικά να χρησιμοποιούνται από κάθε επιστήμονα-χρήστη σύγχρονου υλικού και λογισμικού υπολογιστών με λογικό κόστος και κατανάλωση ενέργειας [1]. Η υπολογιστική ισχύς που απαιτείται για τέτοιες προσομοιώσεις αυξάνεται δραματικά καθώς τα βιομοντέλα κλιμακώνονται για να περιγράψουν ολόκληρα υποσυστήματα κυττάρων ή οργανισμών [2].

Υπάρχουν δύο προσεγγίσεις για την ακριβή προσομοίωση συστημάτων βιοχημικών αντιδράσεων χωρίς να θυσιάζεται η ακρίβεια της προσομοίωσης. Η πρώτη προσέγγιση χρησιμοποιεί ντετερμινιστικές μεθόδους που βασίζονται σε συνήθεις διαφορικές εξισώσεις (ODEs), ενώ η δεύτερη και πιο ρεαλιστική προσπαθεί να μιμηθεί τον τρόπο που λειτουργεί η φύση και λαμβάνει υπόψη της τον ενδογενή και εξωγενή "θόρυβο" των βιολογικών συστημάτων βασιζόμενη σε αλγόριθμους στοχαστικής προσομοίωσης. Αυτοί οι αλγόριθμοι χρησιμοποιούν διεργασίες Μαρκώβ ως στοχαστικό μοντέλο για τις βιοχημικές αντιδράσεις, με σκοπό την προσέγγιση της εξέλιξης της κατάστασης του συστήματος μετά από διακριτές αντιδράσεις. Επιπλέον, μπορεί κανείς να εκτελέσει πειράματα Monte Carlo για την κατ' επανάληψη εκτέλεση αυτών των αλγορίθμων, με διαφορετικές αρχικές συνθήκες π.χ. ως προς τις κινητικές σταθερές των αντιδράσεων ή τις συγκεντρώσεις των αντιδρώντων βιομορίων σε κάθε επανάληψη, προκειμένου να μελετήσει τη στοχαστικότητα της συμπεριφοράς του συστήματος.

Ο DT Gillespie έχει αναπτύξει τους πιο δημοφιλείς Αλγόριθμους Στοχαστικής Προσομοίωσης (SSA) που χρησιμοποιούνται σήμερα, με πρώτη την λεγόμενη "Αμεση Μέθοδο" (Direct Method SSA) [3]. Για μοντέλα με *m* αντιδράσεις ο αλγόριθμος έχει ασυμπτωτικά γραμμική πολυπλοκότητα χρόνου, *O(m)*. Μια εναλλακτική εκδοχή του αλγορίθμου είναι ο "Μέθοδος της Πρώτης Αντίδρασης" του Gillespie (First Reaction Method-FRM). Η FRM-SSA έχει την ίδια πολυπλοκότητα με την DM-SSA, ωστόσο, παραλληλοποιείται πιο εύκολα και μπορεί να προσφέρει υψηλές επιδόσεις και επεκτασιμότητα με τη χρήση παράλληλων αρχιτεκτονικών υλικού ειδικού σκοπού. Μια άλλη δημοφιλής έκδοση SSA είναι η "Μέθοδος της Επόμενης Αντίδρασης" (Next Reaction Method - NRM) που εισήγαγαν οι Gibson και Bruck [4] με μειωμένη πολυπλοκότητα χρόνου *O(logm),* η οποία όμως, σε αντίθεση με την FRM-SSA, είναι πολύ δύσκολο να παραλληλοποιηθεί αποτελεσματικά.

Στη διεθνή βιβλιογραφία υπάρχουν λίγες προτάσεις για την αποδοτική υλοποίηση αλγορίθμων στοχαστικής προσομοίωσης κάνοντας χρήση υλικού ή / και λογισμικού υψηλών επιδόσεων. Οι επιταχυντές υλικού (hardware accelerators) που έχουν κατασκευαστεί εκμεταλλεύονται την εγγενώς παράλληλη φύση των FPGAs, ενώ συγχρόνως καταναλώνουν χαμηλή ενέργεια. Ωστόσο, ο σχεδιαστής των συστημάτων αυτών θα πρέπει να

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

επιτύχει μια λεπτή ισορροπία ανάμεσα στη πολυπλοκότητα του βιο-μοντέλου προς προσομοίωση και στο μέγεθος της συσκευής FPGA που θα χρησιμοποιηθεί, ως προς τους διατιθέμενους on-chip πόρους της (LUTs, RAM και DSP blocks). Παραδείγματα τέτοιων FPGA υλοποιήσεων είναι οι αρχιτεκτονικές που περιγράφονται στα άρθρα [5], [6].

Παρομοίως, οι λύσεις με χρήση Μονάδων Επεξεργασίας Γραφικών (GPU) που έχουν προταθεί εκμεταλλεύονται τη μαζικά παράλληλη υπολογιστική ισχύ των GPUs, οι οποίες είναι πλέον οικονομικά αποδοτικές και άμεσα διαθέσιμες στα PC που χρησιμοποιεί ο μέσος επιστήμονας. Σημαντικό μειονέκτημά τους ωστόσο είναι τη δυσκολία ανάπτυξης αποδοτικών «πυρήνων» (software kernels) για κάθε διαφορετικό βιομοντέλο προς προσομοίωση, καθώς και η έλλειψη μεγάλης χωρητικότητας από γρήγορες μνήμες RAM πάνω στο τσίπ (hardware), παράγοντες που δυσκολεύουν τις στοχαστικές προσομοιώσεις πολύπλοκων βιομοντέλων, με μεγάλο αριθμό βιοχημικών αντιδράσεων και των μοριακων ειδών. Ετσι οι GPUs χρησιμοποιούνται κυρίως για την παράλληλη εκτέλεση πολλαπλών επαναλλείψεων στοχαστικής προσομοίωσης απλών μοντέλων [7], [8].

Κυρίαρχα χρησιμοποιούνται προσομοιωτές αμιγώς λογισμικού για σταθμούς εργασίας (PC workstations) που είναι ευρέως διαθέσιμοι στην επιστημονική κοινότητα σήμερα. Αυτές είναι εύκολο να εγκατασταθούν και να ρυθμιστεί η χρήση τους, ωστόσο δεν έχουν την απόδοση των επιταχυντών υλικού λόγω της σειριακής φύσης του λογισμικό τους. Ωστόσο, εξελίξεις στις σύγχρονες τεχνικές μεταγλώττισης σε συνδυασμό με τη ραγδαία πρόοδο σε τεχνικές παραλληλοποίησης σε επίπεδο εντολής (instruction-level parallelism - ILP) των multi-core επεξεργαστών, συμβάλλουν στον μετριασμό της έλλειψης εξειδικευμένου και μαζικά παράλληλου υλικού. Προσομοιωτές όπως ο COPASI [9], αξιοποιούν αυτές τις καινοτομίες προκειμένου να παρέχουν αξιοπρεπείς επιδόσεις σε στοχαστικές προσομοιώσεις με βάση τους αλγόριθμους SSA (DM και NRM). Εκτός από τον COPASI, υπάρχουν και άλλοι αξιόλογοι προσομοιωτές λογισμικού, ανάμεσα σε αυτούς αναφέρουμε τα StochKit [10], iBioSim [11] και το πακέτο SimBiology της Matlab [12].

Εκείνο που όλες οι παραπάνω λύσεις δεν παρέχουν είναι μια συνδυασμένη προσέγγιση, που, αξιοποιώντας τόσο λογισμικό όσο και υλικό, να είναι σε θέση να εκμεταλλευτεί ταυτόχρονα την επεξεργαστική ισχύ που όλες, ή ορισμένες, από τις παραπάνω αρχιτεκτονικές επιταχυντών υλικού μπορούν να παρέχουν. Μια τέτοια ολιστική προσέγγιση (framework) θα μπορούσε να παρακάμψει τα μειονεκτήματα της κάθε μίας από αρχιτεκτονικές επιταχυντών, καθιστώντας τις πιο ελκυστικές προς χρήση σε απαιτητικά πειράματα στοχαστικής προσομοίωσης για σχεδιασμό φαρμάκων. Μια τέτοια προσέγγιση θα επέτρεπε στους επιστήμονες συστημικής βιολογίας να εκτελούν παράλληλα πολλές επαναλήψεις της στοχαστικής προσομοίωσης απλών βιομοντέλων (με μικρό αριθμό βιοχημικών αντιδράσεων) σε αρχιτεκτονικές με περιορισμένη on-chip μνήμη (π.χ. GPUs), ή/και μεγάλα μοντέλα (με χιλιάδες αντιδράσεων και / ή μοριακών ειδών) σε παράλληλες αρχιτεκτονικές υλικού με δυνατότητα ρύθμισης της on-chip μνήμης (π.χ. FPGAs). Ταυτόχρονα, και οι δύο από τους παραπάνω τύποι μοντέλων θα μπορούσαν να τροφοδοτούνται αρχικά για λιγότερες επαναλήψεις σε ένα πολυ-πύρηνο επεξεργαστή γενικού σκοπού, κατά την αρχική φάση ανάπτυξης και επικύρωσης των νέων βιομοντέλων. Επιπλέον, σε σταθμούς εγασίας που διαθέτουν επιταχυντές υλικού, ο επιμερισμός αυτός θα μπορούσε να υλοποιείται αυτόματα, χωρίς ο τελικός χρήστης να πρέπει να παρέμβει.

Σε αυτή τη Τεχνική Αναφορά παρουσιάζουμε τη σχεδίαση ενός πλήρως παραμετροποιημένου πλαισίου λογισμικού προσομοίωσης (simulation framework) που μπορεί εύκολα να προσαρμοστεί και να παράξει παράλληλο λογισμικό τύπου SPMD (single processor multiple data) για στοχαστικές προσομοιώσεις σε

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

ποικιλία υποκείμενων many-core αλλά και multi-core επεξεργαστών. Πρώτος μας στόχος ήταν η υλοποίηση και δοκιμή παράλληλου λογισμικού στην επεξεργαστική μονάδα *Single-chip Cloud Computer* (SCC) της Intel [13] μια πειραματική CPU με 48 πυρήνες διατεταγμένους σε δίκτυο τύπου πλέγματος (mesh-type Network On Chip). Ο επεξεργαστής SCC παρέχεται από τα Intel Labs στην επιστημονική κοινότητα ως ένα σύστημα για έρευνα και μελέτη της αναμενόμενης συμπεριφοράς του υλικού και του λογισμικού των νέων many-core CPUs τύπου NoC, με δεκάδες πυρήνες. Επιλέξαμε αυτή τη CPU ως πρώτο στόχο για το λογισμικό μας λόγω της μαζικά παράλληλης αρχιτεκτονικής της, που σε αντίθεση με τα FPGAs και τα GPUs, μπορεί να αξιοποιηθεί χρησιμοποιώντας ευρέως καθιερωμένα μοντέλα και τεχνικές παράλληλου προγραμματισμού. Χρησιμοποιήσαμε το πλαίσιο που αναπτύξαμε για να παραλληλοποιήσουμε τους δημοφιλείς αλγόριθμους FRM-SSA και NRM-SSA έτσι ώστε να μπορεί να εκτελεστεί αποδοτικά στην Intel SCC CPU. Αποδείξαμε ότι σημαντική επιτάχυνση (speedup) μπορεί να επιτευχθεί με αποδοτική χρήση των πολλαπλών πυρήνων που διαθέτει αυτός ο many-cores επεξεργαστής. Απ'όσο είμαστε σε θέση να γνωρίζουμε, αυτή είναι η πρώτη παράλληλη υλοποίηση SSA αλγορίθμων για επεξεργαστές αρχιτεκτονικής NoC many-cores στη βιβλιογραφία. Η επεκτασιμότητα που παρέχει η αύξηση των πυρήνων μπορεί να καταστήσει τη λύση του παράλληλου λογισμικού ανταγωνιστική σε σχέση με τις λιγότερο ευέλικτες υλοποιήσεις υλικού ειδικού σκοπού, με βάση τα FPGAs και τα GPUs. Επιπλέον, το λογισμικό μας μπορεί εύκολα να επεκταθεί και να συμπεριλάβει και άλλους αλγόριθμους SSA αλλά και να στοχεύσει και σε άλλες αρχιτεκτονικές, όπως π.χ. οι πολυπήρινοι επεξεργαστές κοινόχρηστης μνήμης (shared memory multi-core CPUs), όπως π.χ. ο δημοφιλής Intel core i7 κ. α.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

2. ΟΙ ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΙ ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΗΣ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ

2.1 Υπόβαθρο και Συναφείς Εργασίες

Ένα στοχαστικό μοντέλο δικτύου χημικών αντιδράσεων αποτελείται από *n* μοριακά είδη $\{S_1, \dots, S_n\}$ με αρχικές συγκεντρώσεις $\{X_1, \dots . X_n\}$ που αλληλοεπιδρούν μέσω *m* καναλιών αντιδράσεων$\{R_1, \dots R_m\}$. Για να απλοποιήσουμε την ανάλυση, θεωρούμε ότι όλα τα είδη είναι ομοιόμορφα κατανεμημένα σε έναν όγκο Ω στο εσωτερικό ενός κελιού μοναδιαίου μεγέθους. Η υπόθεση αυτή μας επιτρέπει να απλοποιήσουμε τους υπολογισμούς, αγνοώντας τις χωρικές επιπτώσεις που υπάρχουν στον πραγματικό κόσμο. Αν θεωρήσουμε $\boldsymbol{X_i}(t)$ τη συγκέντρωση των ειδών S_i κατά τη χρονική στιγμή t, τότε τη χρονική στιγμή t η κατάσταση του συστήματος είναι $\boldsymbol{X}(t) = (X_2(t), X_2(t), \dots . X_n(t))$, με αρχικές συνθήκες $\boldsymbol{X_0(t) = x_0}$ τη χρονική στιγμή $t = t_0$.

Η στοχαστική προσομοίωση ακολουθεί το παραπάνω διάνυσμα καταστάσεων των συγκεντρώσεων του δικτύου σε επιλεγμένα διακριτά χρονικά διαστήματα, χωρίς τη ρητή επίλυση διαφορικών εξισώσεων από την οποία εξαρτάται η δυναμική ενός συστήματος. Εάν μια αντίδραση R_μ ενεργοποιηθεί τότε η τρέχουσα κατάσταση $\boldsymbol{x}$ ενημερώνεται μέσω ενός συντελεστή, έτσι ώστε η νέα κατάσταση είναι η $\boldsymbol{X(t + \tau) = x + v_\mu}$. Ισχύει ότι $\boldsymbol{v_\mu} = (v_{1\mu}, \dots, v_{n\mu})$, όπου ο συντελεστής $v_{i\mu}$ αντιπροσωπεύει την αλλαγή της στοιχειομετρίας του είδους S_i λόγω της ενεργοποίησης της αντίδρασης R_μ. Επίσης, κάθε αντίδραση R_μ σχετίζεται με ένα σταθερό ρυθμό πιθανότητας c_μ, ο οποίος είναι ανάλογος του ρυθμού της αντίδρασης και αντιστρόφως ανάλογος του όγκου Ω, όπως παρουσιάζεται στις εξισώσεις 7(α) και 7(β) της αναφοράς [3].

Η πιθανότητα ένας τυχαία επιλεγμένος συνδυασμός αντιδρώντων να αλληλεπιδράσει και πυροδοτήσει μια αντίδραση R_μ, στον επόμενο απειροελάχιστο χρονικό διάστημα $[t, t + dt]$, δίνεται από τον τύπο $c_\mu * dt$. Η ροπή (τάση) $a_\mu(\boldsymbol{x})$ (propensity) μιας αντίδρασης R_μ στην κατάσταση X υπολογίζεται πολλαπλασιάζοντας τη σταθερά c_μ με το πλήθος των πιθανών συνδυασμών των μοριακών αντιδρώντων της αντίδρασης, όπως φαίνεται στις εξισώσεις (21) έως (26) του [3]. Έτσι, για τη δεύτερης τάξης αντιδράσεις με αντιδρώντα S_1 και S_2, ισχύει ότι:

$$\alpha_\mu = X_1 * X_2 * c_\mu \qquad (1)$$

Η παραπάνω διαδικασία ακολουθεί την Μαρκοβιανή θεωρία, όπου η επόμενη κατάσταση εξαρτάται μόνο από την προηγούμενη. Προσομοιώνοντας κατά αυτόν τον τρόπο το μοντέλο, αποδίδονται οι διαδρομές των καταστάσεων $\boldsymbol{X(t)}$. Ο αρχικός αλγόριθμος στοχαστική προσομοίωσης (SSA) του Gillespie, που ονομάζεται επίσης Άμεση Μέθοδος' (Direct Method – DM), βασίζεται στην παραπάνω διατύπωση και επιταχύνει τη διαδικασία με την εισαγωγή μιας νέας συνάρτησης $p(\tau, \mu \mid x, t)$, η οποία εκφράζει την πιθανότητα η επόμενη αντίδραση R_μ να συμβεί μέσα στο επόμενο απειροελάχιστο χρονικό διάστημα $[t, t + \tau]$, δεδομένου ότι η τρέχουσα κατάσταση του συστήματος είναι $\boldsymbol{X(t) = x}$. Η διαδικασία αυτή πλεονεκτεί, διότι μπορεί να μεταβαίνει από τη μια χρονική στιγμή στην επόμενη χωρίς να χρειάζεται να υπολογιστούν οι ενδιάμεσες καταστάσεις, όπου καμία αντίδραση δεν συμβαίνει. Κατά αυτό τον τρόπο, η ενημέρωση των αντιδρώντων και των προϊόντων συμβαίνει σε διακριτές ποσότητες και η μέθοδος είναι εφαρμόσιμη ακόμα κι αν διατηρούνται σε χαμηλές τιμές οι συγκεντρώσεις των μοριακών ειδών, άλλο ένα αξιοσημείωτο πλεονέκτημα σε σχέση με τους ντετερμινιστικούς αλγορίθμους προσομοίωσης.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Αν και ο αλγόριθμος DM – SSA λειτουργεί σωστά για μοντέλα μικρών βιοχημικών δικτύων, είναι δύσκολο να παραλληλοποιηθεί και απαιτεί πολύ περισσότερο χρόνο για μεσαία και μεγάλα μοντέλα. Λαμβάνοντας υπόψιν αυτούς τους περιορισμούς, ο Gillespie εισήγαγε ως ενναλακτική λύση έναν ισοδύναμο αλγόριθμο στοχαστικής προσομοίωσης, τον First Reaction Method (FRM). Με βάση τον αλγόριθμο αυτόν, υπολογίζεται για κάθε αντίδραση R_μ ένας πιθανός (δυνητικός) χρόνος ενεργοποίησης τ_j. Το κανάλι αντίδρασης R_μ με τον μικρότερο χρόνο τ_μ προσδιορίζεται ως νικητήρια αντίδραση, η οποία θα συμβεί στο τέλος του κύκλου αντιδράσεων (Reaction Cycle – RC). Δεδομένου ότι ο υπολογισμός του χρόνο τ_j για κάθε αντίδραση είναι ανεξάρτητος από τους υπόλοιπους υπολογισμούς, ο αλγόριθμος επιδέχεται ένα μεγάλο βαθμό παραλληλοποίησης.

Στη συνέχεια ακολουθούν τα βήματα εκτέλεσης του αλγορίθμου First Reaction Method (FRM):

1. Αρχικοποίηση του συστήματος $\boldsymbol{x = x_0}$ (καθορισμός των αρχικών πληθυσμών κάθε μοριακού είδους) και αρχικοποίηση του χρόνου προσομοίωσης, $t = t_0$.

2. Υπολογισμός όλων των τάσεων (propensities) $\alpha_j(x)$ των αντιδράσεων $\{R_j, j = 1, 2, ..., m\}$ του μοντέλου.

3. Για κάθε αντίδραση R_j, υπολογισμός του χρόνου της δυνητικής εκτέλεσης:

$$\tau_j = \frac{1}{\alpha_j(x)} \, ln\left(\frac{1}{r_j}\right)$$

   όπου r_j είναι ψευδοτυχαίοι μοναδιαίοι αριθμοί στο διάστημα [0, 1]

4. Εύρεση της αντίδρασης R_μ με το μικρότερο χρόνο ενεργοποίησης τ_μ.

5. Εκτέλεση της αντίδρασης R_μ ανανεώνοντας τη κατάσταση του συστήματος $\boldsymbol{x := x + \nu_\mu}$ (δηλαδή μεταβολή των πληθυσμών των μοριακών ειδών βάση του διανύσματος στοιχειομετρίας $\boldsymbol{\nu_\mu}$ της αντίδρασης R_μ) καθώς και του χρόνου προσομοίωσης, $t := t + \tau_\mu$.

6. Εάν το σύστημα έχει φτάσει τον επιθυμητό χρόνο προσομοίωσης ($t > T_{sim}$) τότε ο αλγόριθμος τερματίζει αλλιώς μεταβαίνει ξανά στο βήμα 2.

Μια πολύ ενδιαφέρουσα παρατήρηση που μπορεί να γίνει στους αλγορίθμους του Gillespie είναι ότι συνήθως, η αντίδραση R_μ δεν επηρεάζει τις τάσεις α_j όλων των υπολοίπων αντιδράσεων ενός βίο-μοντέλου. Κάτι τέτοιο σημαίνει ότι, δεν είναι απαραίτητο να υπολογίζονται, σε κάθε κύκλο αντιδράσεων, όλες οι τάσεις των αντιδράσεων παρά μόνο οι τάσεις των αντιδράσεων εκείνων που επηρεάστηκαν από τη τελευταία R_μ αντίδραση. Οι Gibson και Bruck καταλήγοντας στο παραπάνω συμπέρασμα επινόησαν τον αλγόριθμο στοχαστικής προσομοίωσης Next Reaction Method (NRM-SSA) [4], ο οποίος εκμεταλλευόμενος αυτή τη παρατήρηση έχει πολυπλοκότητα εκτέλεσης $O(logm)$ σε σύγκριση με τον αλγόριθμο FRM-SSA που έχει πολυπλοκότητα εκτέλεσης $O(m)$.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007–2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Ο FRM – SSA μπορεί να παραλληλοποιηθεί μοιράζοντας την παραπάνω υπολογιστική ανάγκη σε N διαφορετικές μονάδες επεξεργασίας. Τα βήματα 2 έως 5 του αλγορίθμου FRM αποτελούν έναν κύκλο αντιδράσεων (Reaction Cycle – RC), όπου κάθε κύκλος αντιδράσεων μπορεί να εκτελεστεί παράλληλα μέσω της κατανομής m αντιδράσεων στις N επεξεργαστικές μονάδες. Από εδώ και στο εξής, η συγκεκριμένη μέθοδος κατανομής των αντιδράσεων του ίδιου μοντέλου σε περισσότερες από μια επεξεργαστικές μονάδες (cores-PEs), θα αναφέρεται ως *Single Simulation in Parallel* (SSIP) και ο αντίστοιχος φόρτος εργασίας ανά κύκλο αντιδράσεων της εκάστοτε μονάδας θα ισούται με:

$$W_{SSIP} = m / N \text{ αντιδράσεις.} \qquad (5)$$

Εφόσον, όμως, επιθυμούμε να διεξάγουμε τα πειράματα βασιζόμενοι στην Monte Carlo θεωρία, επαναλαμβάνοντας R φορές την ίδια προσομοίωση με διαφορετικές αρχικές συνθήκες, διαφορετικές αρχικές συγκεντρώσεις των μοριακών ειδών, διαφορετικές σταθερές των αντιδράσεων, διαφορετική ακολουθία τυχαίων αριθμών ή ακόμα και προσομοίωση διαφορετικών μοντέλων μαζί, τότε μπορούμε να κατανέμουμε τις επαναλήψεις αυτές σε N διαφορετικές μονάδες επεξεργασίας. Σε αυτήν την τεχνική κατανομής, στο εξής, θα αναφερόμαστε ως *Multiple Simulation (runs) in Parallel* (MSIP) και ο αντίστοιχος φόρτος εργασίας της εκάστοτε μονάδας σε αριθμό επαναλήψεων της προσομοίωσης θα ισούται με:

$$W_{MSIP} = R / N. \qquad (6)$$

Όπως αναφέρθηκε και προηγουμένως στο εισαγωγικό κεφάλαιο, ο αλγόριθμος FRM του Gillespie έχει υλοποιηθεί κυρίως σε FPGAs, GPUs και πολυπύρηνες αρχιτεκτονικές (multi-core), και όχι σε πολυπύρηνες διατάξεις (many-cores), όπως η πειραματική πλατφόρμα SSC NoC της εταιρίας Intel. Δεδομένης της x86 επεξεργαστικής αρχιτεκτονικής του, είναι μια ιδανική περίπτωση για την υλοποίηση αυτών των παράλληλων αλγορίθμων καθώς διαθέτει το βασικό πλεονέκτημα των άμεσα διαθέσιμων μοντέλων προγραμματισμού, γλωσσών προγραμματισμού και βοηθητικών εργαλείων. Επιπλέον, με βάση τη NoC (Network on Chip) αρχιτεκτονική του επιτυγχάνονται γρήγορες ταχύτητες διασύνδεσης μεταξύ των πυρήνων, γεγονός που ελαχιστοποιεί το χρόνο αναμονής επικοινωνίας και μεγιστοποιεί το εύρος ζώνης του εκάστοτε πυρήνα.

Μέχρι σήμερα δεν έχουν γίνει αρκετές προσπάθειες να χρησιμοποιηθούν πολυπύρηνες διατάξεις (many-cores) σε τομείς της συστημικής βιολογίας και της βιοπληροφορικής. Η πλειοψηφία των όποιων προσπαθειών έχουν γίνει αφορά στην ευθυγράμμιση πρωτεϊνών, όπως π.χ με τον αλγόριθμο των Needleman και Wunsch, που δείχνει σημαντική βελτίωση της ταχύτητας όταν τρέχει σε πολυπύρηνο επεξεργαστή, ή στη σύγκριση της δομής πρωτεϊνών με πολλαπλά κριτήρια (μια πρωτεϊνη με όλα τα δείγματα ή όλες με όλα τα δείγματα) όπως αναφέρεται και στην εργασία [14]. Υπάρχει σημαντικό κενό γιατί οι πολυπύρηνες διατάξεις και τα συστήματα NoC αρχιτεκτονικής, παρά την ευελιξία τους και τις αυξημένες δυνατότητες σε παράλληλη επεξεργασία, δεν χρησιμοποιούνται ακόμα ευρέως στη συστημική βιολογία και στη βιοπληροφορική.

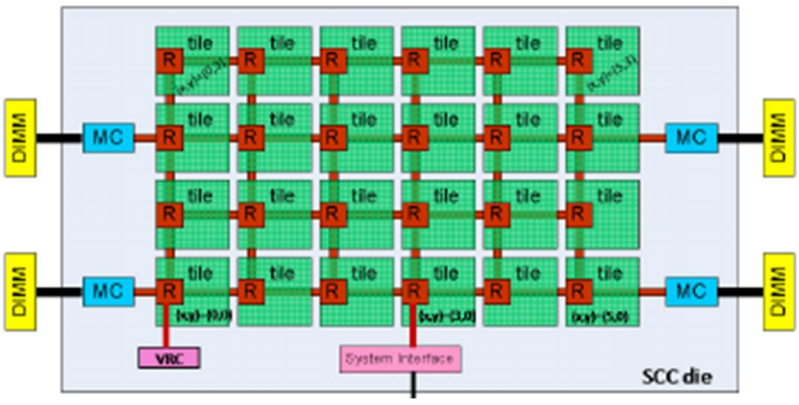
Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

3. Ο SINGLE-CHIP CLOUD COMPUTER ΕΠΕΞΕΡΓΑΣΤΗΣ

3.1 Εισαγωγή

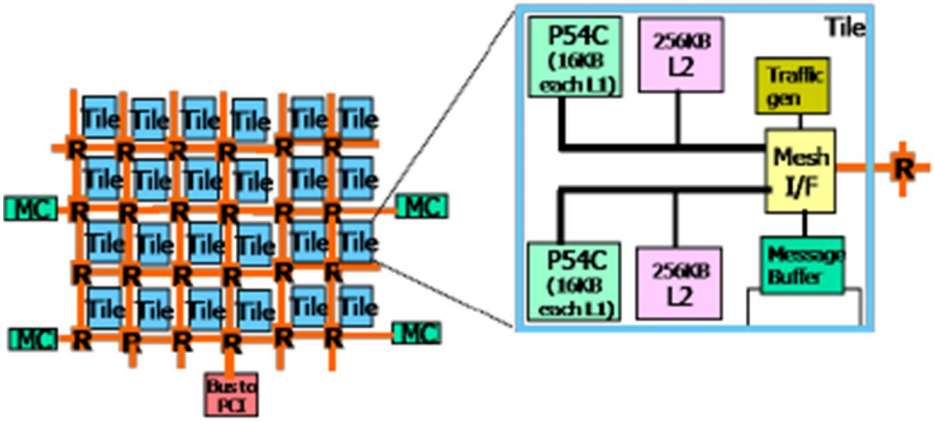
Ο Intel "Single-chip Cloud Computer" (SCC) [13] είναι ένας πειραματικός πολυπήρηνος επεξεργαστής ο οποίος διαθέτει αρχιτεκτονική τύπου 'δίκτυο σε ψηφίδα' (Network on Chip – NoC) που περιλαμβάνει ένα δισδιάστατο δικτυακό πλέγμα από 24 'πλακίδια' (tiles) με διαστάσεις 4 X 6 όπως φαίνεται και στην Εικόνα 1. Κάθε ένα από τα πλακίδια περιλαμβάνει δύο πυρήνες Pentium P54C μαζί με 32 KB κρυφής μνήμης L1 (μοιρασμένη στη μέση μεταξύ δεδομένων και εντολών) και 256 KB κρυφής μνήμης L2. Περιλαμβάνει επίσης και μια μονάδα διεπαφής με το δικτυακό πλέγμα (Mesh Interface Unit – MIU), η οποία περιέχει κύκλωμα που επιτρέπει στο δικτυακό πλέγμα και τους πυρήνες να λειτουργούν σε διαφορετικές συχνότητες ρολογιού. Τέλος περιλαμβάνει και μια ειδική προσωρινή μνήμη αποστολής μηνυμάτων (Message Passing Buffer – MPB) μεγέθους 16KB, με την οποία μπορεί και υποστηρίζει τη γρήγορη επικοινωνία μεταξύ των πυρήνων του δικτύου.

Κάθε πυρήνας του επεξεργαστή έχει τη δυνατότητα να εκτελέσει προγράμματα τύπου SPMD (Ένα Πρόγραμμα Πολλά Δεδομένα - Single Program Multiple Data), είτε πάνω από ένα λειτουργικό σύστημα, όπως το GNU/Linux, είτε πάνω από μια ειδική βάση λογισμικού (framework) που ονομάζεται 'BareMetalC' και η οποία επιτρέπει την εκτέλεση κώδικα απευθείας στους πυρήνες του επεξεργαστή, χωρίς τη διαμεσολάβηση κάποιου λειτουργικού συστήματος. Όποια επιλογή και αν κάνει ο χρήστης για τον τρόπο εκτέλεσης της εφαρμογής του, οι πυρήνες που την εκτελούν επικοινωνούν μεταξύ τους χρησιμοποιώντας είτε κοινή μνήμη χωρίς 'συνοχή της κρυφής μνήμης' (cache-coherence) μέσω των 4 ελεγκτών μνήμης DDR3 που βρίσκονται πάνω στο τσιπ, είτε αποστέλλοντας κατανεμημένα μηνύματα της ειδικής προσωρινής μνήμης αποστολής μηνυμάτων (MPB) που βρίσκεται σε κάθε πλακίδιο και η οποία αναφέρθηκε παραπάνω. Αυτή την ειδική μνήμη τη διαχειρίζεται η βιβλιοθήκη RCCE [15] που μοιάζει πολύ με αντίστοιχες βιβλιοθήκες MPI, όπως η MPICH [16], και η οποία αναπτύχθηκε από την ίδια την ομάδα του SCC επεξεργαστή με σκοπό την επικοινωνία των πυρήνων του μέσω μηνυμάτων.



Εικόνα 1: Ο Intel SCC NoC πολυπύρηνος επεξεργαστής με 24 'πλακίδια' (2 πυρήνες το καθένα), δρομολογητές (R) και ελεγκτές μνήμης DDR3 (MC) [13].

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



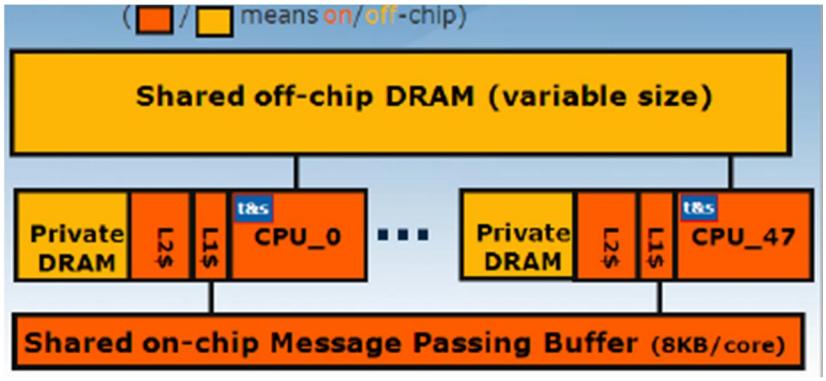
Εικόνα 2: Κάθε 'πλακίδιο' περιέχει δύο Pentium P54C πυρήνες x86, αντίστοιχες κρυφές μνήμες L1 και L2, την ειδική κρυφή μνήμη ανταλλαγής μηνυμάτων (MPB) και τη μονάδα διεπαφής με το δικτυακό πλέγμα (MIU) [13].

3.2 Η Αρχιτεκτονική του SCC NoC

Οι πυρήνες του SCC NoC επεξεργαστή είναι δεύτερης γενιάς Pentium P54C με 32-bit x86 αρχιτεκτονική συνόλου εντολών (Instuction Set Architecture – ISA) και μπορούν να επιτύχουν συχνότητες λειτουργίας εως 800 MHz. Οι συγκεκριμένοι πυρήνες είναι μικροί σε μέγεθος καθώς εκτελούν τις εντολές τους με τη σειρά εισόδου τους και δε χρειάζονται πολύπλοκες ψηφιακές διατάξεις για να αναδιατάξουν τις εντολές χωρίς να αλλοιωθεί το αποτέλεσμα τους, όπως κάνουν οι σύγχρονοι υπερβαθμωτοί (superscalar) και εκτός σειράς (out of order) επεξεργαστές. Αυτό φυσικά μειώνει τις επιδόσεις τους σε ρυθμό εκτέλεσης εντολών ανά κύκλο (Instructions Per Cycle – IPC) αλλά αυτό δεν είναι τόσο σημαντικό καθώς οι απόλυτες επιδόσεις δεν ήταν ο λόγος επιλογής των συγκεκριμένων επεξεργαστικών πυρήνων. Αντιθέτως η επιλογή τους βασίστηκε στο μικρό τους μέγεθος και στη δυνατότητα να χωρέσουν πολλοί από αυτούς πάνω στο ίδιο ολοκληρωμένο κύκλωμα ώστε οι επιστήμονες να μελετήσουν τη διασύνδεση τους και τον τρόπο που η συγκεκριμένη NoC αρχιτεκτονική εκτελεί το λογισμικό εφαρμογών και αλληλεπιδρά μαζί του.

Κάθε πλακίδιο (tile), που φαίνεται σε μεγένθυνση στην Εικόνα 2, περιέχει δύο πυρήνες και συνδέεται σε ένα δρομολογητή (router) μέσω της μονάδας διεπαφής με το δικτυακό πλέγμα (Mesh Interface Unit – MIU) η οποία δίνει πρόσβαση στο υπόλοιπο δίκτυο. Η μονάδα MIU λαμβάνει και στέλνει πακέτα από και προς το δίκτυο χρησιμοποιώντας ένα δίκαιο και ισότιμο (round robin) σχήμα εναλλαγής των δύο πυρήνων που περιέχει το κάθε πλακίδιο. Είναι επίσης υπεύθυνη για τις αστοχίες της κρυφής μνήμης (cache misses) όπου όταν συμβαίνει αυτό αναλαμβάνει τη μετατροπή των 32-bit διευθύνσεων που διαχειρίζεται ο κάθε πυρήνας σε 34-bit διευθύνσεις συστήματος οι οποίες είναι κατάλληλες για τους 4 ελεγκτές μνήμης DDR3 που διαθέτει ο επεξεργαστής. Η μετάφραση των διευθύνσεων επιτυγχάνεται μέσω ένος πίνακα εύρεσης (Lookup Table – LUT) που έχει τοποθετηθεί σε κάθε πυρήνα. Οι 4 ελεγκτές μνήμης DDR3 έχουν τη δυνατότητα να διευθυνσιοδοτήσουν εως και 16 GB (2^{34}) bit DDR3 μνήμης για μέγιστο συνολικό μέγεθος μνήμης 4 X 16 GB = 64 GB.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



Εικόνα 3: Η ιεραρχία της μνήμης όπου κάποιες περιοχές βρίσκονται οργανωμένες είτε πάνω στο τσιπ για κάθε πυρήνα (L1, L2) και για κάθε 'πλακίδιο' (MPB) είτε εξωτερικά του τσιπ τόσο ως ιδιωτική (private) όσο και ως κοινή (shared) μνήμη DDR3 SDRAM [17].

Στο νότιο μέρος του επεξεργαστή βρίσκεται ένας δρομολογητής ο οποίος συνδέει τον επεξεργαστή και το δίκτυο του με ένα FPGA ολοκληρωμένο κύκλωμα που δρα σαν γέφυρα εισόδου και εξόδου (I/O) με τον υπολογιστή που διαχειρίζεται τον επεξεργαστή μέσω του πρωτοκόλλου PCI Express (PCIe) [17]. Ο υπολογιστής αυτός που διαθέτει την κονσόλα διαχείρισης ονομάζεται MCPC (Management Console PC) και η κύρια λειτουργία του πέρα από την εκτέλεση των προγραμμάτων του χρήστη είναι να επιτρέπει την επανεκκίνηση των πυρήνων, τη ρύθμιση τους και το φόρτωμα λειτουργικού συστήματος σε αυτούς. Επιτρέπει επίσης τη ρύθμιση των τάσεων και των συχνοτήτων του επεξεργαστή κάτι που μπορεί να επιτευχθεί και από τα ίδια τα προγράμματα που εκτελεί ο επεξεργαστής. Συνολικά υπάρχουν 8 τμήματα (domains) που μπορούν να ρυθμιστούν με διαφορετικές τάσεις και 25 τμήματα που μπορούν να ρυθμιστούν με διαφορετικές συχνότητες λειτουργίας.

3.3 Η Οργάνωση της Μνήμης

Η μνήμη στην οποία έχει πρόσβαση ο SCC NoC επεξεργαστής είναι οργανωμένη σε ξεχωριστά τμήματα διευθύνσεων όπου κάθε ένα αφορά ένα ξεχωριστό στυλ προγραμματισμού. Τα τμήματα αυτά διευθύνσεων είναι για τους πυρήνες είτε ιδιωτικά (private), είτε κοινά (shared) είτε κατανεμημένα (distributed) όπου το τελευταίο αφορά την ειδική προσωρινή μνήμη αποστολής μηνυμάτων (Message Passing Buffer – MPB) και η οποία είναι η πιο σημαντική αρχιτεκτονική συνεισφορά του επεξεργαστή όσον αφορά την οργάνωση της μνήμης του. Η ιεραρχία των μνημών που διαθέτει ο επεξεργαστής είναι άμεσα προσβάσιμη από τις εφαρμογές τις οποίες εκτελεί και οι οποίες μπορούν να τη χρησιμοποιούν είτε για υπολογισμούς είτε για επικοινωνία μεταξύ τους. Η Εικόνα 3 δείχνει αυτήν την ιεραρχία και τα ξεχωριστά τμήματα της μνήμης που αυτή διαθέτει.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Ο προγραμματιστής αρχικά έχει στη διάθεση του ιδιωτική μνήμη για τον κάθε πυρήνα. Η μνήμη αυτή παρέχεται μέσω ενός από τους τέσσερις ελεγκτές μνήμης DDR3 που δίνουν πρόσβαση σε εξωτερική από το τσίπ μνήμη DDR3 ανάλογα με τη θέση στην οποία βρίσκεται ο κάθε πυρήνας πάνω στο τσίπ. Το τελευταίο χωρίζεται σε 4 περιοχές με 6 'πλακίδια' το καθένα τα οποία αντιστοιχούν σε 12 πυρήνες που τελικά έχουν πρόσβαση σε έναν συγκεκριμένο ελεγκτή μνήμης DDR3. Οι πίνακες LUT που διαθέτουν οι πυρήνες είναι ρυθμισμένοι κατάλληλα ώστε να δίνουν πρόσβαση στον κάθε πυρήνα μόνο σε συγκεκριμένα τμήματα διευθύνσεων. Αυτό αντιστοιχεί στην κλασική μνήμη που έχει στη διάθεσή του οποιοσδήποτε μονοπύρηνος επεξεργαστής του παρελθόντος και έτσι ισχύουν οι κλασικοί κανόνες πρόσβασης με τα δεδομένα να περνούν κανονικά από τις κρυφές μνήμης των πυρήνων. Έτσι για την εγγραφή δεδομένων προς την μνήμη DDR3 εκτός του τσίπ, τα δεδομένα μεταφέρονται από τους καταχωρητές του πυρήνα / επεξεργαστή στις κρυφές μνήμες L1 και L2 και τέλικά στη μνήμη DDR3. Ακριβώς η αντίστροφη διαδικασία συμβαίνει για το διάβασμα δεδομένων από τη μνήμη DDR3 προς τους καταχωρητές.

Οι ίδιοι ελεγκτές μνήμης DDR3 δίνουν πρόσβαση και σε κοινές περιοχές μνήμης για όλους τους πυρήνες. Αυτές οι περιοχές είναι ρυθμισμένες στους πίνακες LUT χωρίς 'συνοχή της κρυφής μνήμης' (cache-coherence) με σκοπό την αποφυγή προβλημάτων λόγω έλλειψης στο υλικό ενός πρωτοκόλλου συνοχής της κρυφής μνήμης. Αυτό σημαίνει πως οι κρυφές μνήμες L1 και L2 παρακάμπτονται τελείως και τα δεδομένα καταλήγουν κατευθείαν στους καταχωρητές του κάθε πυρήνα οπότε ο προγραμματιστής κατά την πρόσβαση στην κοινή μνήμη έχει την πλήρη ευθύνη για τη σειρά των μεταφορών δεδομένων που εκτελεί μεταξύ των πυρήνων. Για την αποφυγή των προβλημάτων ορθότητας που προκαλούνται από τη σειρά των μεταφορών μπορεί να χρησιμοποιήσει τον ειδικό καταχωρητή test-and-set που διαθέτει ο κάθε πυρήνας, ώστε να 'κλειδώσει' προσωρινά αυτές τις κοινές περιοχές μνήμης όταν γίνεται ανάγνωση η εγγραφή τους.

Για να αντισταθμίσει ο επεξεργαστής την έλλειψη ενός πρωτόκολλου συνοχής της κρυφής μνήμης στο υλικό του, διαθέτει έναν νέο τύπο μνήμης ο οποίος επιτρέπει την αποτελεσματική επικοινωνία μέσω μηνυμάτων μεταξύ των πυρήνων. Αυτός ο νέος τύπος μνήμης ονομάζεται 'τύπος προσωρινής μνήμης για αποστολή μηνυμάτων' (Message Passing Buffer Type – MPBT) και ουσιαστικά περιλαμβάνει και συνδυάζει όλες τις ειδικές κρυφές μνήμες αποστολής μηνυμάτων (MPB) που βρίσκονται κατανεμημένες σε κάθε πυρήνα του επεξεργαστή. Κάθε ένα από τα πλακίδια του επεξεργαστή, με 2 πυρήνες, διαθέτει 16 KB μνήμης MPB (8 KB ξεχωριστά αφιερωμένα σε κάθε πύρηνα) και συνεπώς το συνολικό μέγεθος αυτού του νέου τύπου μνήμης είναι 24 X 16KB = 384 KB. Στον πίνακα σελίδων (page table) του κάθε πυρήνα έχει δεσμευτεί ένα συγκεκριμένο bit το οποίο δείχνει αν η συγκεκριμένη σελίδα αφορά δεδομένα του MPBT ή όχι. Λογισμικό που αναπτύχθηκε παλαιότερα και δε γνωρίζει για την ύπαρξη αυτού του νέου τύπου μνήμης μπορεί και εκτελείται χωρίς αλλαγές. Αν αυτό το bit σημειωθεί ως ενεργό τότε τα δεδομένα περνάνε από την κρυφή μνήμη L1 αλλά όχι από την L2. Για να μπορεί το λογισμικό να εφαρμόσει δικό του πρωτόκολλο συνοχής της κρυφής μνήμης οι σχεδιαστές του επεξεργαστή πρόσθεσαν μια νέα εντολή στην αρχιτεκτονική συνόλου εντολών x86 του κάθε P54C πυρήνα. Αυτή η εντολή μόλις εκτελεστεί θέτει ως άκυρες, χωρίς όμως να τις διαγράφει, όλες τις σειρές δεδομένων (cache lines) της κρυφής μνήμης L1 οι οποίες είναι σημειωμένες ότι περιέχουν MPBT δεδομένα ώστε οι επόμενες προσβάσεις στις ίδιες διευθύνσεις να φύγουν κατευθείαν προς την εξωτερική από το τσιπ μνήμη DDR3 μέσω των αντίστοιχων ελεγκτών μνήμης πάνω στο τσιπ.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

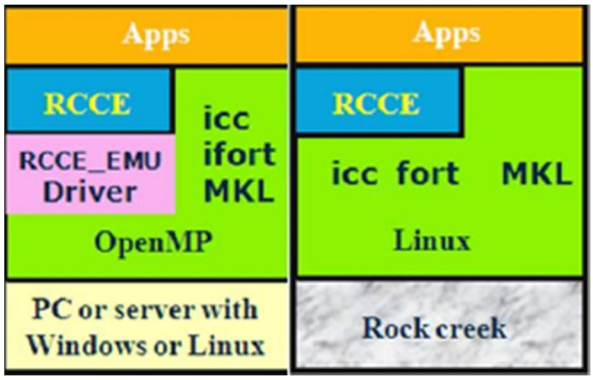
3.4 Οι Πλατφόρμες και τα Εργαλεία Ανάπτυξης Λογισμικού

Οι πλατφόρμες λογισμικού του Intel SCC NoC είναι παρόμοιες με αυτές που διαθέτουν τα τυπικά πολυπύρηνα συστήματα ανάπτυξης λογισμικού. Η πιο συχνά χρησιμοποιούμενη πλατφόρμα για ανάπτυξη λογισμικού στον Intel SCC NoC βασίζεται σε μια ειδική έκδοση του λειτουργικού συστήματος GNU/Linux ονόματι SCC Linux το οποίο μπορεί και τρέχει ξεχωριστά πάνω σε κάθε πυρήνα του επεξεργαστή. Το σύστημα περιλαμβάνει οδηγούς συσκευών (drivers) οι οποίοι δίνουν πρόσβαση στην ειδική προσωρινή μνήμη αποστολής μηνυμάτων (MPB) καθώς και σε άλλες συσκευές και χαρακτηριστικά που διαθέτει το σύστημα όπως η διασύνδεση με την κονσόλα διαχείρισης στο MCPC που διαχειρίζεται τον επεξεργαστή και στο δίκτυο επικοινωνιών (εκτός MPB) μεταξύ των πυρήνων του επεξεργαστή που τους επιτρέπει να έχουν κοινή πρόσβαση στο δικτυακό σύστημα αρχείων (NFS) του MCPC.

Η ανάπτυξη λογισμικού μπορεί να γίνει με τις περισσότερες γλώσσες προγραμματισμού οι οποίες διαθέτουν κατάλληλο μεταγλωττιστή x86 ή κάποιο συμβατό περιβάλλον εκτέλεσης, διερμηνέα (interpreter) ή εικονική μηχανή (VM). Για λόγους όμως ταχύτητας και πλήρους πρόσβασης στο υλικό η επιλογή συνήθως γίνεται μεταξύ της γλώσσας C και της C++ [18]. Αν το μηχάνημα ανάπτυξης είναι διαφορετικό από το μηχάνημα διαχείρισης του επεξεργαστή (MCPC), ο προγραμματιστής πρέπει να "χτίσει" εκ των προτέρων έναν ‘cross’ μεταγλωττιστή που να έχει τη δυνατότητα να παράγει εκτελέσιμα τα οποία τρέχουν, κατά προτίμηση βελτιστοποιημένα, σε x86 Pentium (i586) αρχιτεκτονικές. Τα εκτελέσιμα μπορεί να επιλέξει να είναι στατικά ή δυναμικά συνεδεμένα με τις βιβλιοθήκες που χρησιμοποιούν, ανάλογα με το αν χρειάζεται ευκολία διαχείρισης ή πλήρη έλεγχο συμβατότητας με άλλες βιβλιοθήκες (π.χ libc, linux-ld.so) που περιέχει το εγκατεστημένο λειτουργικό σύστημα (SCC Linux) αντίστοιχα. Αν επιλέξει δυναμική σύνδεση τότε έχει στη διάθεση του πολύ περισσότερες επιλογές σχετικά με τις βιβλιοθήκες που μπορεί να χρησιμοποιήσει και να συνδεθεί μαζί τους το εκτελέσιμο.

Πέραν από την πλατφόρμα βασισμένη σε GNU/Linux λειτουργικό σύστημα που αναφέρθηκε παραπάνω, υπάρχει η επιλογή στον προγραμματιστή να χρησιμοποιήσει το ‘BareMetalC’ πακέτο ανάπτυξης λογισμικού (framework) το οποίο είναι χαμηλού επιπέδου (low-level) και επιτρέπει σε λογισμικό γραμμένο στη γλώσσα C να εκτελεστεί απευθείας στους πυρήνες του επεξεργαστή, χωρίς την ανάγκη παρουσίας ενός κανονικού λειτουργικού συστήματος όπως το GNU/Linux. Από τη στιγμή που είναι χαμηλού επιπέδου παρέχει πλήρη και άμεση πρόσβαση σε όλα τα χαρακτηριστικά του υλικού, παρ’ όλα αυτά έχει περιορισμένη δυνατότητα αντιστοίχησης πράξεων I/O στη μνήμη του συστήματος (memory mapped I/O) με αποτέλεσμα να μην είναι μια εύχρηστη και αποτελεσματική λύση στην περίπτωση που θέλουμε να αναπτύξουμε εφαρμογές ενός ορισμένου μεγέθους και πολυπλοκότητας.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



Εικόνα 4 - Η θέση του της βιβλιοθήκης RCCE και του εξομοιωτή (emulator) στην πλατφόρμα λογισμικού

Όπως αναφέρθηκε και προηγουμένως στην ενότητα οργάνωσης της μνήμης, ο Intel SCC NoC επεξεργαστής υποστηρίζει ένα πλήθος από μοντέλα προγραμματισμού. Παρ' όλα αυτά όμως η απουσία συνοχής της κρυφής μνήμης μεταξύ των πυρήνων του μας δείχνει ότι το πιο φυσικό και αποδοτικό μοντέλο προγραμματισμού είναι το κατανεμημένο, όπου οι πυρήνες του επεξεργαστή επικοινωνούν μεταξύ τους μέσω ανταλλαγής μηνυμάτων. Για αυτό το σκοπό η Intel δημιούργησε μια ειδική βιβλιοθήκη που ονόμασε RCCE [15], [19] (δεν είναι ακρωνύμιο) και η οποία υποστηρίζει τόσο την πλατφόρμα ανάπτυξης με λειτουργικό σύστημα GNU/Linux όσο και αυτήν χωρίς αυτό (BareMetalC). Η θέση της βιβλιοθήκης στην πλατφόρμα λογισμικού φαίνεται στην Εικόνα 4. Πρέπει να σημειωθεί ότι η συγκεκριμένη βιβλιοθήκη υποστηρίζει μόνο σύγχρονη (blocking) αποστολή μηνυμάτων και όχι ασύγχρονη (non-blocking) καθώς η δεύτερη από τη φύσης της απαιτεί την ύπαρξη νημάτων, κάτι που δεν υποστηρίζουν οι αρκετά παλιάς τεχνολογίας πυρήνες Pentium P54C του επεξεργαστή.

Η βιβλιοθήκη RCCE χρησιμοποιεί το γνωστό και συνηθισμένο στους προγραμματιστές που έχουν εξοικειωθεί με την κατανεμημένη αποστολή μηνυμάτων μοντέλο προγραμματισμού SPMD (Single Program Multiple Data). Η εφαρμογή εκκινείται (σχεδόν) ταυτόχρονα σε όλους τους πυρήνες του επεξεργαστή μέσω ενός βοηθητικού προγράμματος κελύφους (shell script) που ονομάζεται *rccerun* και είναι εγκατεστημένο στο MCPC που διαχειρίζεται τον επεξεργαστή. Αυτό εκτελεί ουσιαστικά ένα πρόγραμμα *ssh* (pssh) το οποίο έχει τη δυνατότητα να συνδεθεί και να εκτελέσει παράλληλα σε όλους τους πυρήνες το εκτελέσιμο πρόγραμμα τύπου SPMD που έχει αναπτύξει ο προγραμματιστής και το οποίο είναι αποθηκευμένο και προσβάσιμο από ολους μέσω του δικτυακού σύστημα αρχείων (NFS) που αναφέρθηκε προηγουμένως. Κατά το συγκεκριμένο μοντέλο εκτέλεσης η εφαρμογή εκκινείται σε κάθε πυρήνα του επεξεργαστή με τυχαία και μη γνωστή σειρά εκτέλεσης. Συνεπώς τα SPMD προγράμματα που είναι συμβατά δεν πρέπει να εναποθέτουν την ορθή λειτουργία τους σε μια συγκεκριμένη σειρά εκτέλεσης από τους πυρήνες του επεξεργαστή.

Τα εκτελέσιμα που εκκινούν σε όλους τους πυρήνες αντιστοιχούν το καθένα σε μια μονάδα εκτέλεσης (Unit of Execution – UE) η οποία είναι μια αφηρημένη (abstract) έννοια για έναν πράκτορα (agent) ο οποίος αυξάνει τον μετρητή προγράμματος (Program Counter – PC) του πυρήνα και δημιουργεί πρόοδο εκτέλεσης στο πρόγραμμα. Επειδή είναι αφηρημένη έννοια μπορούμε να αντιστοιχήσουμε τη μονάδα εκτέλεσης είτε σε μια διεργασία είτε σε ένα νήμα του λειτουργικού συστήματος. Οι μονάδες εκτέλεσης αφού αντιστοιχιθούν σε κάθε πυρήνα παραμένουν σε αυτόν μέχρι και τον τερματισμό του προγράμματος που εκτελούν. Κάθε μια διαθέτει

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

ένα ειδικό αναγνωριστικό, γνωστό και ως βαθμός (rank), το οποίο παίρνει τιμές από *0* εως *N-1,* όπου *N* είναι ο αριθμός των πυρήνων του επεξεργαστή που εργάζονται στην ίδια ομάδα επικοινωνίας (communicator) της εφαρμογής. Αρχικά όλοι οι πυρήνες και οι αντίστοιχες μονάδες εκτέλεσης ανήκουν στην αρχική - "παγκόσμια" (global) ομάδα επικοινωνίας, όμως ο προγραμματιστής έχει την επιλογή να διαχωρίσει την αρχική ομάδα σε περισσότερες μικρότερες ομάδες ανάλογα με την κατανομή των εργασιών (tasks) που θέλει να επιτύχει στην εφαρμογή του.

Το μέγεθος και η πολυπλοκότητα της διασύνδεσης προγραμματισμού εφαρμογών (Application Programming Interface – API) της βιβλιοθήκης RCCE είναι μικρό και περιέχει μόνο τις απολύτως απαραίτητες λειτουργίες για την υποστήριξη εφαρμογών που χρησιμοποιούν κατανεμημένη αποστολή μηνυμάτων. Αυτό κάνει την ίδια τη βιβλιοθήκη μικρή σε μέγεθος κώδικα και συνεπώς σχετικά εύκολη για χρήση και συντήρηση από μικρές ομάδες ανάπτυξης λογισμικού. Αν υπάρχει ανάγκη για περισσότερες λειτουργίες και χαρακτηριστικά τότε προτρέπουμε τους προγραμματιστές να χρησιμοποιήσουν μια πιο πλήρη βιβλιοθήκη, όπως αυτές του MPI π.χ την MPICH [16] η οποία λειτουργεί στον Intel SCC NoC επεξεργαστή κανονικά και ονομάζεται RCKMPI [20]. Να σημειώσουμε εδώ ότι υπάρχει και ένα προχωρημένο API για την RCCE βιβλιοθήκη το οποίο ονομάζεται ‘gory’ και προορίζεται για χρήση από έμπειρους προγραμματιστές παράλληλων συστημάτων καθώς δίνει πλήρη έλεγχο στη διαχείριση της ειδικής προσωρινής μνήμης αποστολής μηνυμάτων (MPB).

Τέλος πρέπει να αναφέρουμε ότι το λογισμικό που αναπτύχθηκε για εκτέλεση στον Intel SCC NoC επεξεργαστή μπορεί να εκτελεστεί και πέρα από το ίδιο τσίπ, σε έναν λειτουργικό εξομοιωτή που παρέχεται με τη βιβλιοθήκη RCCE και ο οποίος χρησιμοποιεί διασύνδεση με τη βιβλιοθήκη OpenMP [21]. Αυτός ο εξομοιωτής μπορεί και τρέχει στο τοπικό (πιθανά πολυπύρηνο) μηχάνημα ανάπτυξης λογισμικού και αντιστοιχεί τους πυρήνες του Intel SCC NoC επεξεργαστή, και άρα τις μονάδες εκτέλεσης που αναφέρθηκαν παραπάνω, σε ξεχωριστά νήματα που δημιουργεί η βιβλιοθήκη OpenMP για αυτόν τον σκοπό. Η θέση του εξοιμοιωτή στην πλατφόρμα λογισιμικού φαίνεται στην Εικόνα 4. Είναι αδιαμφισβήτητα ένα πάρα πολύ χρήσιμο εργαλείο και το χρησιμοποιήσαμε εκτενώς σε όλες τις φάσεις ανάπτυξης και δοκιμών του λογισμικού στοχαστικής προσομοίωσης. Το συγκεκριμένο λογισμικό θα περιγραφεί αναλυτικά στην επόμενη ενότητα.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

4. ΤΟ ΛΟΓΙΣΜΙΚΟ ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΗΣ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ

4.1 Εισαγωγή

Στην παρούσα ενότητα θα παρουσιάσουμε το λογισμικό προσομοίωσης που αναπτύξαμε στα πλαίσια της Δράσης 2.1 του έργου. Το συγκεκριμένο λογισμικό αναλαμβάνει πλήρως όλη τη ροή της προσομοίωσης, από τη ρύθμιση των παραμέτρων και το φόρτωμα των δεδομένων στις μνήμες του υπολογιστικού συστήματος μέχρι και την εκτέλεση της στοχαστικής προσομοίωσης, μοιράζοντας το φορτίο υπολογισμού στους διαθέσιμος πυρήνες του επεξεργαστή σύμφωνα με τις απαιτήσεις και επιλογές του τελικού χρήστη.

Το λογισμικό προσομοίωσης είναι γραμμένο στη γλώσσα προγραμματισμού C++ [18]. Η επιλογή της συγκεκριμένης γλώσσας έγινε με κύριο γνώμονα την ανάγκη για τις καλύτερες δυνατές επιδόσεις, καθώς οι στοχαστικές προσομοιώσεις έχουν αυξημένο υπολογιστικό φορτίο. Οι υποστηριζόμενες πλατφόρμες υλικού στις οποίες αναπτύχθηκε και δοκιμάστηκε το λογισμικό είναι τόσο η πολυπύρηνη Intel SCC κεντρική επεξεργαστική μονάδα (CPU) [13], όσο και ο τοπικός υπολογιστής με τετραπύρηνη Intel Core i7 CPU στον οποίο έγινε η ανάπτυξη του. Η πρώτη είναι η κατεξοχήν πλατφόρμα – στόχος της συγκεκριμένης Δράσης 2.1 ενώ η δεύτερη χρησιμοποιήθηκε μέσω του εξομοιωτή λειτουργίας (functional emulator) της πρώτης πλατφόρμας. Ο εξομοιωτής αυτός λειτουργεί χρησιμοποιώντας την βιβλιοθήκη παράλληλης εκτέλεσης OpenMP [21] η οποία και αντιστοιχίζει τους υπάρχοντες πυρήνες – νήματα εκτέλεσης του τοπικού επεξεργαστή στους πυρήνες της πολυπύρηνης Intel SCC NoC CPU.

Η διαρρύθμιση του λογισμικού είναι βαθμωτή (modular) και χρησιμοποιήθηκε αντικειμενοστραφής μοντελοποίηση σε όλα τα συστατικά του ώστε να γίνει καλύτερος επιμερισμός των λειτουργιών κάθε μονάδας και συστατικού. Αυτό μας επέτρεψε για παράδειγμα να ξεχωρίσουμε τις επικοινωνιακές από τις υπολογιστικές λειτουργίες στα βαθύτερα στρώματα της προσομοίωσης όπως αυτά που περιλαμβάνουν τα συστατικά των αλγορίθμων στοχαστικής προσομοίωσης (SSA) που υποστηρίζονται. Επίσης μας έδωσε τη δυνατότητα να υποστηρίζουμε τις δύο παραπάνω πλατφόρμες υλικού και να γίνει δυνατή η μεταφορά του σε άλλες με λογικό κόπο για την ολοκλήρωση των όποιων τροποποιήσεων.

Το λογισμικό μας υποστηρίζει προσομοιώσεις δικτύων βιοχημικών αντιδράσεων $2^{ης}$ και $3^{ης}$ τάξης με έως 3 αντιδρώντα και 5 προϊόντα μοριακά είδη η καθεμία. Τα δίκτυα αυτά μπορούν να έχουν μεγάλο πλήθος αντιδράσεων (m) και αριθμό μοριακών ειδών (n) και κατά συνέπεια δεν υπάρχει περιορισμός μεγέθους ή πολυπλοκότητας από τη μεριά του λογισμικού. Φυσικά όσο αυξάνεται το πλήθος και η πολυπλοκότητα, εξίσου αυξάνονται και οι απαιτήσεις σε υπολογιστική ισχύ και ο πραγματικός χρόνος ολοκλήρωσης της προσομοίωσης.

Για καλύτερη αξιοποίηση της διαθέσιμης υπολογιστικής ισχύος του επεξεργαστή στον οποίο εκτελείται, το λογισμικό παρέχει τη δυνατότητα προσομοιώσεων με δύο διαφορετικούς τρόπους παράλληλης λειτουργίας. Ο πρώτος τρόπος ονομάζεται SSIP (Single Simulation In Parallel) και σε αυτόν οι m αντιδράσεις ενός κύκλου αντιδράσεων (RC) κατανέμονται κατ'αναλογία μεταξύ των διαθέσιμων N πυρήνων του επεξεργαστή και εκτελούνται παράλληλα. Με αυτόν τον τρόπο κάθε πυρήνας θα αναλάβει να εκτελέσει υπολογιστικό φορτίο $W_{SSIP} = m / N$ αντιδράσεων ανά RC (fine grain parallelism). Σε αυτήν την περίπτωση θα θέλαμε ιδανικά η παράλληλη επιτάχυνση S (seedup) να πλησιάζει τον αριθμό N των πυρήνων ενώ η παράλληλη αποδοτικότητα E

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007–2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

(efficiency) τον αριθμό 1, όμως η εκτίμηση μας λόγω των επιβαρύνσεων της επικοινωνίας μεταξύ δυο διαδοχικών κύκλων αντιδράσεων (RCs) το κάνει μη εφικτό και στόχος μας παραμένει να ερευνήσουμε πως μπορεί να ελαχιστοποιηθεί η επικοινωνία, ή έστω να μεγαλώσει το κλάσμα υπολογισμού προς επικοινωνία ανά RC, χρησιμοποιώντας μεγάλα βιό-μοντέλα με πολλές αντιδράσεις (1K+) ή βελτιστοποιώντας τις κατανεμημένες λειτουργίες εύρεσης ελαχίστου (reduction).

Ο δεύτερος τρόπος παράλληλης λειτουργίας ονομάζεται MSIP (Multiple Simulation In Parallel) και σε αυτόν οι διαθέσιμοι πυρήνες επεξεργαστή εκτελούν παράλληλα διαφορετικές προσομοιώσεις. Η κάθε προσομοίωση που εκτελείται μπορεί να αφορά το ίδιο βίο-μοντέλο, με πιθανώς διαφορετικούς παραμέτρους, ή και τελείως διαφορετικά βίο-μοντέλα. Στην περίπτωση που το βιο-μοντέλο θέλουμε να είναι το ίδιο και με τις ίδιες παραμέτρους τότε η κάθε τέτοια προσομοίωση είναι ουσιαστικά μια επανάληψη (repetition) της προηγούμενης με διαφορετική όμως ακολουθία τυχαίων αριθμών. Οι επαναλήψεις κατανέμονται μεταξύ των N πυρήνων ώστε κάθε πυρήνας να αναλάβει να εκτελέσει υπολογιστικό φορτίο $W_{MSIP} = R / N$ επαναλήψεις (coarse grain parallelism). Σε αυτήν την περίπτωση θα θέλαμε ιδανικά η παράλληλη επιτάχυνση S (seedup) να πλησιάζει τον αριθμό N ενώ η παράλληλη αποδοτικότητα E (efficiency) τον αριθμό 1. Για τη Δράση 2.2, στόχος μας και στους δύο τρόπους λειτουργίας να βελτιστοποιήσουμε την παρεχόμενη παράλληλη επεξεργαστική ισχύ σύμφωνα με τις παραπάνω αρχικές εκτιμήσεις αλλά και μετρήσεις τώρα που έχουμε στη διάθεση μας τα πρώτα αποτελέσματα με εκτελέσεις βασισμένες σε κάποια βασικά βιό-μοντέλα.

Ένας ακόμα τρόπος λειτουργίας που προτείνουμε και έχουμε υλοποιήσει αλλά δεν έχουμε ακόμα δοκιμάσει είναι ο Υβριδικός HSIP (Hybrid Simulation In Progress). Ο συγκεκριμένος τρόπος κατανέμει τις m αντιδράσεις ενός κύκλου αντιδράσεων (RC) αλλά επιπλέον και τις R επαναλήψεις που επιθυμεί ο χρήστης κατ'αναλογία μεταξύ C ομάδων πυρήνων (clusters) από N πυρήνες του επεξεργαστή η καθεμία. Κάθε ομάδα πυρήνων εκτελεί παράλληλα τις m αντιδράσεις μιας επανάληψης (SSIP) ενώ την ίδια στιγμή πολλές επαναλήψεις εκτελούνται παράλληλα στις C ομάδες πυρήνων (MSIP). Για παράδειγμα, μπορούμε να χωρίσουμε τους πυρήνες σε C = 4 ομάδες με καθεμία να περιέχει N = 12 πυρήνες . Σε αυτή την περίπτωση έχουμε $C \times N = 4 \times 12 = 48$ πυρήνες συνολικά, όπου κάθε ομάδα εκτελεί $R / C = R / 4$ επαναλήψεις παράλληλα. Κάθε επανάληψη μοιράζει το φορτίο της μεταξύ των $N = 12$ πυρήνων της ομάδας, και κάθε πυρήνας εκτελεί παράλληλα $m / N = m / 12$ αντιδράσεις σε κάθε RC σε λειτουργία SSIP.

Οι υποστηριζόμενοι αλγόριθμοι στοχαστικής προσομοίωσης (SSA) είναι σύμφωνα με τους στόχους της Δράσης 2.1 οι FRM-SSA και NRM-SSA. Ο FRM SSA αλγόριθμος μπορεί να εκτελεστεί και με τους δύο τρόπους παράλληλης λειτουργίας (SSIP & MSIP). Ο δεύτερος και πιο αποδοτικός NRM SSA αλγόριθμος υλοποιήθηκε ώστε να μπορεί να εκτελεστεί με τον MSIP τρόπο λειτουργίας. Αυτός διαπιστώσαμε ότι είναι ο και ο μοναδικός τρόπος που μπορεί να παραλληλοποιηθεί αποδοτικά ο συγκεκριμένος αλγόριθμος, καθώς χρησιμοποιεί ουρά προτεραιότητας της οποίας η διαχείριση δεν είναι εφικτό να παραλληλοποιηθεί αποδοτικά σε χαμηλό επίπεδο (με τον SSIP τρόπο). Η ουρά προτεραιότητας χρησιμοποιείται ώστε να γνωρίζει ο αλγόριθμος τον ελάχιστο χρόνο που προκύπτει από τις, συνήθως λίγες, επηρεαζόμενες (από την τρέχουσα επιλεγμένη) αντιδράσεις του κάθε κύκλου αντιδράσεων. Η συγκεκριμένη δομή απ'οτι φαίνεται δεν είναι εφικτό να διαμοιραστεί παράλληλα στους πολλούς πυρήνες του Intel SCC NoC CPU ή ακόμα και στον τοπικό τετραπύρηνο επεξεργαστή.

Οι προσομοιώσεις που εκκινεί ο χρήστης μέσω του λογισμικού μας μοιράζονται κατάλληλα στους πυρήνες των πλακιδίων (4 X 6 = 24) της πολυπύρηνης Intel SCC NoC CPU ή στους πυρήνες κάποιου τοπικά διαθέσιμου πολυπύρηνου επεξεργαστή σύμφωνα με τις ρυθμίσεις του χρήστη. Οι ρυθμίσεις αυτές αφορούν τον

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

προσδιορισμό χαρακτηριστικών, όπως το προς προσομοίωση βίο-μοντέλο, ο τρόπος παράλληλης λειτουργίας, ο αλγόριθμος (FRM SSA ή NRM SSA) και ο τρόπος λειτουργίας (SSIP ή MSIP) της στοχαστικής προσομοίωσης, ο αριθμός *R* των επιθυμητών επαναλήψεων (repetitions) της προσομοίωσης κ.α., καθώς και σχετικά με τους πυρήνες που θέλει να χρησιμοποιήσει ο χρήστης. Η επιλογή των πυρήνων βασίζεται τόσο στο εύρος τους άρα και στον αριθμό τους, όσο και στη θέση των πλακιδίων που αυτοί ανήκουν αν πρόκειται για πυρήνες του πολυπυρηνου Intel SCC NoC επεξεργαστή.

Τα μοντέλα δικτύων βιοχημικών αντιδράσεων προς προσομοίωση πρέπει να διατίθενται σε στάνταρ μορφή SBML (Systems Biology Markup Language) [22] η οποία είναι και η πιο διαδεδομένη μορφή κωδικοποίησης μοντέλων στη Συστημική Βιολογία (Systems Biology). Για να υποστηρίξουμε την είσοδο δεδομένων από βιο-μοντέλα αποθηκευμένα σε αρχεία SBML αναπτύξαμε ειδικό λογισμικό (SBML Parser) το οποίο διαβάζει την SBML αναπαράσταση του κάθε βίο-μοντέλου προς προσομοίωση και παράγει τις κατάλληλες δομές δεδομένων που θα χρησιμοποιήσει το λογισμικό. Οι κύριες δομές που παράγει για τον π.χ αλγόριθμο FRM-SSA είναι αυτές των *m* αντιδράσεων (Reaction Table) και των μοριακών ειδών (Species Table) του δικτύου βιοχημικών αντιδράσεων προς στοχαστική προσομοίωση. Για τον αλγόριθμο NRM-SSA παράγονται οι προηγούμενες δομές καθώς και μια νέα, ο γράφος των εξαρτήσεων (Dependency Graph). Ο συγκεκριμένος γράφος είναι υπεύθυνος για τη συγκράτηση των επηρεαζόμενων αντιδράσεων από κάθε μια από τις *m* αντιδράσεις.

Αφού ολοκληρωθούν όλες οι προσομοιώσεις με όλες τις επιθυμητές επαναλήψεις, τα αποτελέσματα βρίσκονται σε ένα δυαδικό αρχείο αποτελεσμάτων. Αυτό το αρχείο το αναλύει ειδικό λογισμικό που αναπτύξαμε (SSA Results Parser) και δημιουργεί αρχεία που μπορεί να χειριστεί ο τελικός χρήστης με σκοπό τη μελέτη τους ή τη δημιουργία γραφημάτων (plots). Το λογισμικό λειτουργεί με πλήρη αποδοτικότητα σε πολυπύρηνους επεξεργαστές καθώς είναι πολυ-νηματικό (multi-threaded) έτσι ώστε να ελαχιστοποιηθεί η αναμονή του τελικού χρήστη καθώς το χρησιμοποιεί είτε ξεχωριστά είτε ενσωματωμένο μέσα στο λογισμικό προσομοίωσης. Επίσης μπορεί και εξάγει συνολικά στατιστικά των δεδομένων, όπως μέσους όρους των *n* μοριακών πληθυσμών, ελάχιστους και μέγιστους πληθυσμούς ανά μοριακό είδος, αριθμό κύκλων αντιδράσεων (RCs) ανά επανάληψη της πεοαομοίωσης, χρόνους προσομοίωσης για κάθε μια από αυτές κ.α.

4.2 Εργαλεία Ανάπτυξης και βιβλιοθήκες

Όπως αναφέρθηκε και στην προηγούμενη ενότητα το λογισμικό προσομοίωσης αναπτύχθηκε χρησιμοποιώντας ως γλώσσα επιλογής τη C++ και συγκεκριμένα το ISO/IEC 14882:2011 στάνταρ της γνωστό και ως C++11 [23]. Η επιλογή της συγκεκριμένης γλώσσας έγινε με κύριο γνώμονα την ανάγκη για τις καλύτερες δυνατές επιδόσεις, καθώς οι στοχαστικές προσομοιώσεις που εκτελεί το λογισμικό προσομοίωσης έχουν αυξημένο υπολογιστικό φορτίο. Η C++ μαζί με τον πρόγονο της τη γλώσσα C διαθέτουν μεταγλωττιστές οι οποίοι μπορούν και μεταφράζουν το πηγαίο πρόγραμμα με αποδοτικό τρόπο, παράγοντας κώδικα μηχανής (machine code) που εκμεταλλεύεται όσο το δυνατόν καλύτερα τον επεξεργαστή και γενικότερα το μηχάνημα-στόχο στο οποίο θα γίνει η εκτέλεση. Πέραν όμως από λόγους ταχύτητας, επιλέξαμε τη C++ γιατί είναι μια γλώσσα που διαθέτει υψηλή εκφραστικότητα και κατάλληλες δομές μοντελοποίησης που επιτρέπουν στους σχεδιαστές και προγραμματιστές να αναπτύξουν κώδικα που είναι καθαρός και συντηρείται πιο εύκολα, τώρα αλλά και αν χρειαστεί στο μέλλον.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Οι μεταγλωττιστές που χρησιμοποιήσαμε για τη δημιουργία των εκτελέσιμων του λογισμικού είναι ανοιχτού λογισμικού και προσφέρονται δωρεάν. Ο πρώτος είναι ο πολύ γνωστός GNU GCC (έκδοση 4.9 [24]) και ο δεύτερος είναι ο λιγότερο γνωστός LLVM Clang (έκδοση 3.5 [25]). Αρχικά επιλέξαμε να χρησιμοποιήσουμε δύο διαφορετικούς μεταγλωττιστές ώστε σε οποιοδήποτε πρόβλημα να μπορούμε να λάβουμε δύο διαφορετικές προσεγγίσεις μεταγλώττισης και έτσι να οδηγηθούμε σε εξεύρεση λύσης ταχύτερα. Αργότερα διαπιστώσαμε ότι θα ήταν προς όφελος μας να έχουμε τη δυνατότητα να συγκρίνουμε την ποιότητα και την ταχύτητα των εκτελέσιμων που παράγουν οι δύο αυτοί διαφορετικοί μεταγλωττιστές. Τελικά καταλήξαμε να χρησιμοποιούμε το Clang καθ'όλη τη διάρκεια της ανάπτυξης καθώς διαθέτει καλύτερα μηνύματα λαθών, ειδικά στην περίπτωση των C++ templates, ενώ για την παραγωγή των τελικών βελτιστοποιημένων εκτελέσιμων χρησιμοποιήσαμε τον GCC που θεωρούμε πως είναι ένα βήμα μπροστά στον τομέα της βελτιστοποίησης (optimization) σε σχέση με τον Clang. Πέραν από τους μεταγλωττιστές που αναφέραμε χρειάστηκε να επιλέξουμε και ένα καλό σύστημα κατασκευής εκτελέσιμων (build tool) όπου επιλέξαμε το πολύ γνωστό CMake (έκδοση 3.1 [26]). Η συγγραφή του κώδικα έγινε είτε σε ενιαίο περιβάλλον ανάπτυξης (Integrated Development Environment – IDE) όπου επιλέξαμε το Qt Creator 3.3 [27] είτε με τη χρήση προγραμματιστικού κειμενογράφου (programmer's text editor) όπως ο Vim (έκδοση 7.4 [28]). Ο απασφαλματωτής (debugger) της επιλογής μας ήταν ο GNU DBG (έκδοση 7.8 [29]). Το σύστημα ελέγχου εκδόσεων του κώδικα (revision control system) που χρησιμοποιήσαμε ήταν το Git (έκδοση 2.1 [30]).

Από τη στιγμή που θέλαμε το λογισμικό προσομοίωσης να μπορεί να εκτελεστεί σε διαφορετικού τύπου πλατφόρμες υλικού με πιθανά διαφορετικές αρχιτεκτονικές επεξεργαστών έπρεπε να βρεθεί τρόπος να μεταγλωττιστεί ο πηγαίος κώδικας της C++11 σε εκτελέσιμο που έχει προορισμό εκτελέσιμου (target) την εκάστοτε αρχιτεκτονική. Οι υποστηριζόμενες πλατφόρμες υλικού στις οποίες αναπτύχθηκε και δοκιμάστηκε το λογισμικό είναι και οι δύο αρχιτεκτονικής συνόλου εντολών (Instruction Set Architecture) x86, διαφοροποιούνται ωστόσο στη γενιά και στο εύρος των λέξεων που διαχειρίζονται. Η πολυπύρηνη Intel SCC NoC CPU διαθέτει x86 ISA και η μικρο-αρχιτεκτονική της (micro-architecture) είναι η Pentium (i586) καθώς περιέχει πυρήνες δεύτερης γενιάς Pentium (P54C). Ο τοπικός υπολογιστής στον οποίο αναπτύχθηκε το λογισμικό διαθέτει μια τετραπύρηνη Intel Core i7 CPU η οποία διαθέτει x86_64 ISA με μικρο-αρχιτεκτονική Core $4^{ης}$ γενιάς.

Το σύστημα ανάπτυξης διέθετε ήδη μεταγλωττιστή που έχει προορισμό τον εαυτό του οπότε και δε χρειάστηκε να δημιουργηθεί μεταγλωττιστής για αυτό το σκοπό. Το ίδιο δε συνέβαινε όμως και για την Intel SCC NoC CPU όπου στη συγκεκριμένη περίπτωση δημιουργήσαμε έναν GCC 4.9 cross-compiler ο οποίος έχει προορισμό εκτελέσιμου την x86 ISA με βελτιστοποίηση για την Pentium i586 μικρο-αρχιτεκτονική. Η διαδικασία δημιουργίας του συγκεκριμένου compiler από τον πηγαίο κώδικα του ήταν σχετικά πολύπλοκη και έτσι αποφασίσαμε να χρησιμοποιήσουμε για αυτή τη διαδικασία το εργαλείο Cross-Tool NG [31] (έκδοση 1.2). Το εργαλείο αυτό ειδικεύεται στη δημιουργία cross-compilers με όλα τα απαραίτητα συστατικά και με τα σωστά βήματα καθώς πέραν από τον ίδιο το μεταγλωττιστή πρέπει να δημιουργηθούν και από την αρχή όλα τα περιφερειακά πακέτα λογισμικού που χρειάζονται κατά τη φάση της μεταγλώττισης, όπως οι βασικές βιβλιοθήκες προγραμματισμού (libc, libstdc++), ο συμβολομεταφραστής (assembler), ο συνδετής (linker) κ.α. Επίσης για καλύτερη συμβατότητα είναι επιθυμητό όλα τα παραπάνω να μεταγλωττιστούν από την αρχή χρησιμοποιόντας τον μεταγλωττιστή που μόλις φτιάχτηκε. Τέτοιοι μεταγλωττιστές που έχουν ξαναχρησιμοποιηθεί μια ή περισσότερες φορές για να (ξανα)φτιάξουν τον εαυτό τους ονομάζονται στη βιβλιογραφία Καναδέζικοι cross μεταγλωττιστές (Canadian cross compiler).

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Πέραν της ανάγκης που είχαμε για επιδόσεις προσπαθήσαμε να αναπτύξουμε ένα λογισμικό προσομοίωσης το οποίο να είναι εύχρηστο και στιβαρό (robust). Για να ικανοποιήσουμε αυτούς τους δύο στόχους βρήκαμε και χρησιμοποιήσαμε μερικές δημοφιλής βιβλιοθήκες ανάπτυξης ανοιχτού λογισμικού. Η συλλογή βιβλιοθηκών Boost [32] (έκδοση 1.57) μας βοήθησαν να υλοποιήσουμε λειτουργίες που σχετίζονται με τη διαχείριση και τη μόνιμη φόρτωση στη μνήμη (memory mapping) αρχείων, με λειτουργίες συμβολόσειρών (string) και τμηματοποίηση τους (tokenization) κ.α. Επίσης χρησιμοποιήσαμε και κάποιες βιβλιοθήκες ανοιχτού λογισμικού της εταιρείας Google. Αυτές είναι με τυχαία σειρά: η Google Log [33] που παρέχει εύχρηστες και αρκετά παραμετροποιήσιμες υποδομές καταγραφής συμβάντων (logging facilities), η Google Flags [34] που επιτρέπει τη δήλωση και διαχείριση ενός πλήθους από ορίσματα της γραμμής εντολών (command line arguments) και τέλος χρησιμοποιήθηκε και η βιβλιοθήκη Google Testing [35] η οποία παρέχει υποδομές τακτικών δοκιμών για τις μονάδες που αναπτύξαμε. Τέτοιες δοκιμές μονάδων είναι γνωστές ως unit-tests και αποτελούν ένα πολύ ουσιώδες και απαραίτητο συστατικό της ανάπτυξης λογισμικού μεσαίας και μεγάλης κλίμακας, ειδικά σε επιστημονικές εφαρμογές όπως οι προσομοιωτές που λειτουργούν στον κλάδο της υπολογιστικής βιολογίας και στον οποία ανήκει και το συγκεκριμένο έργο.

Γενικότερα εναρμονιστήκαμε με τις ορθές πρακτικές του χώρου της ανάπτυξης επιστημονικού λογισμικού και προσπαθήσαμε να μεγιστοποιήσουμε τη στιβαρότητα του λογισμικού μας και συνεπώς τη γενικότερη επιτυχία του. Όλα τα εργαλεία ανάπτυξης λογισμικού και οι βιβλιοθήκες που χρησιμοποιήσαμε βρίσκονται στον παρακάτω Πίνακα Ι μαζί με μια σύντομη περιγραφή τους:

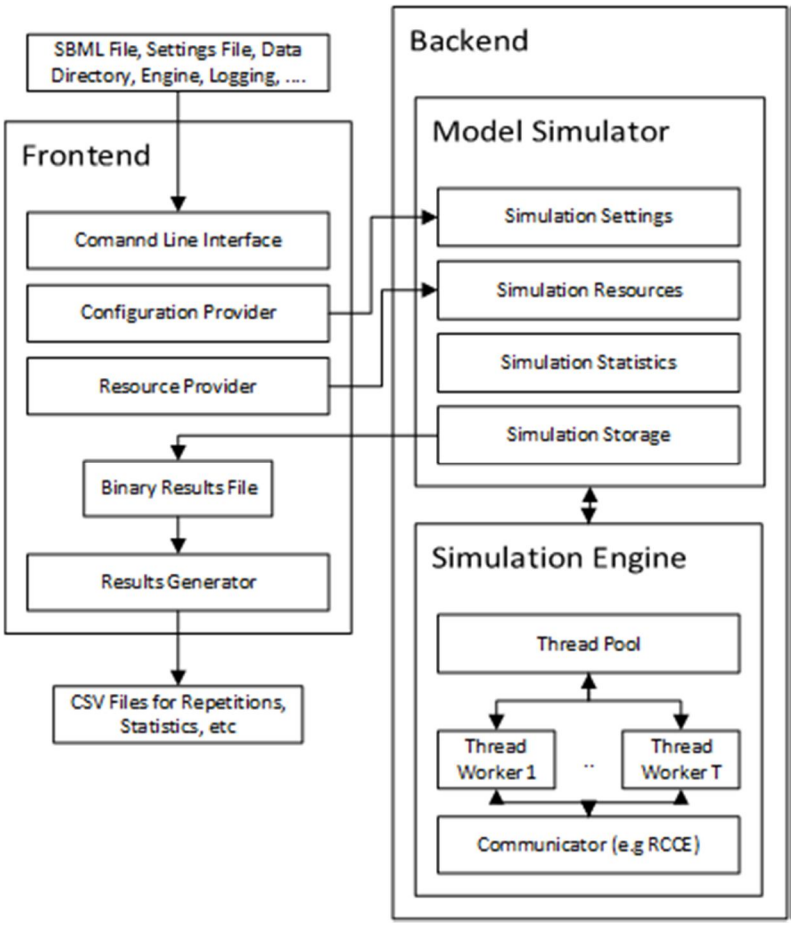
Πίνακας 1: Εργαλεία και βιβλιοθήκες ανάπτυξης που χρησιμοποιήσαμε.

Εργαλείο	**Όνομα**
Μεταγλωττιστής C++11 για ανάπτυξη	LLVM Clang 3.5 [25]
Μεταγλωττιστής C++11 για τελικό εκτελέσιμο	GNU GCC 4.9 [24]
Εργαλείο κατασκευής μεταγλωττιστών cross	Cross Tool NG 1.2 [31]
Σύστημα κατασκευής εκτελέσιμων (build tool)	Cmake 3.1 [26]
Ενιαίο περιβάλλον ανάπτυξης (IDE)	Qt Creator 3.3 [27]
Προγραμματιστικός κειμενογράφος (text editor)	Vim 7.4 [28]
Απασφαλματωτής (debugger)	GNU DBG 7.8 [29]
Βιβλιοθήκες ανάπτυξης	Boost 1.57 [32], GLog 0.3.3 [33], GFlags 2.1 [34] & GTest 1.7 [35]

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

4.3 Τα Συστατικά του Λογισμικού Προσομοίωσης

Το λογισμικό προσομοίωσης περιέχει διαφορετικές μονάδες όπου η κάθε μια έχει μία συγκεκριμένη αρμοδιότητα. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα το λογισμικό να είναι βαθμωτό (modular) και εύχρηστο καθ'όλη τη διάρκεια της ανάπτυξης του αλλά και μετέπειτα κατά το στάδιο της συντήρησης. Μπορούμε να χωρίσουμε τις μονάδες σε δύο λογικές ομάδες – κατηγορίες όπως φαίνεται και στο Σχήμα 1. Η πρώτη ομάδα περιλαμβάνει μονάδες με τις οποίες αλληλεπιδρά άμεσα ο χρήστης του συστήματος. Αυτές οι 'frontend' μονάδες είναι υπεύθυνες για να παρέχουν τη διασύνδεση με τη γραμμη εντολών (command line interface – CLI Component), τη διαρύθμιση των προσομοιώσεων που επιθυμεί να εκτελέσει ο χρήστης (Configuration Provider), τη διατήρηση και παροχή των κατάλληλων δομών δεδομένων του κάθε βιο-μοντέλου (Resource Provider) και τέλος την ανάλυση των αποτελεσμάτων που βρίσκονται σε δυαδική μορφή και τη μετατροπή τους σε αρχεία που μπορούν να επεξεργαστεί ο χρήστης περαιτέρω ή να δημιουργήσει από αυτά γραφήματα (Results Generator).



Εικόνα 5: Τα συστατικά του λογισμικού χωρισμένα σε 'frontend' και 'backend' ομάδες.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Η δεύτερη ομάδα από μονάδες περιέχει όσες είναι κατεξοχήν υπεύθυνες για την εκτέλεση των προσομοιώσεων που ρύθμισε ο χρήστης. Αυτές περιλαμβάνονται μέσα στην κεντρική μονάδα προσομοίωσης που ονομάζεται Model Simulator και η οποία περικλείει άλλες μικρότερες μονάδες που διαχειρίζονται τις δομές δεδομένων που παρείχαν οι 'frontend' μονάδες κατά τη διάρκεια της αρχικοποίησης των ρυθμίσεων της προσομοίωσης (Simulation Settings), του βιο-μοντέλου (Simulation Resources), όπως επίσης και μονάδες που διαχειρίζονται τα αποτελέσματα και τα γράφουν ανά τακτά χρονικά διαστήματα στο δυαδικά αρχεία στο δίσκο (Simulation Storage), ή παράγουν γενικά στατιστικά προσομοίωσης (Simulation Statistics). Τέλος περικλείει και την μονάδα Simulation Engine, η οποία είναι υπεύθυνη για την εκτέλεση της προσομοίωσης στο υλικό (hardware) που διαθέτει και έχει ρυθμίσει ο χρήστης (π.χ Intel SCC NoC). Αυτή η μονάδα περιέχει ξεχωριστή μονάδα για τις ανάγκες σε υπολογισμούς και δομές δεδομένων του αλγορίθμου, η οποία ονομάζεται ThreadPool και η οποία περιέχει περαιτέρω υπομονάδες ThreadWorker για αυτόν το σκοπό, ανάλογα με τον επιθυμητό αλγόριθμο στοχαστικής προσομοίωσης (π.χ ThreadWorkerFRM). Ο αριθμός των αντικειμένων ThreadWorker που δημιουργούνται κατά την εκτέλεση ισούται με τα threads στα οποία επιθυμεί ο χρήστης να διαμοιράσει την εργασία. Στις επόμενες δύο υπο-ενότητες θα παρουσιάσουμε πιο αναλυτικά τις μονάδες που αναφέρθηκαν παραπάνω.

4.3.1 Frontend

Η ομάδα 'frontend' περιλαμβάνει μονάδες με τις οποίες αλληλεπιδρά άμεσα ο χρήστης του συστήματος και γιαυτό το σκοπό επιλέξαμε να τις φτιάξουμε χωρίς να έχουν γνώση των 'backend' μονάδων που εκτελούν τη στοχαστική προσομοίωση στο διαθέσιμο υλικό (hardware) σύμφωνα με τον επιλεγμένο αλγόριθμο στοχαστικής προσομοίωσης. Αυτός ο διαχωρισμός (decoupling) επιτρέπει ευελιξία και ελευθερία κινήσεων κατά την ανάπτυξη του λογισμικού και μετέπειτα κατά τη συντήρηση του με πιθανές τροποποιήσεις και αναβαθμίσεις στο μέλλον των αρχιτεκτονικών του υλικού (hardware architectures) πέραν του Intel SCC NoC ή του Core i7 που χρησιμοποιήσαμε. Επιτρέπει επίσης την προσθήκη διαφορετικών αλγορίθμων στοχαστικής προσομοίωσης, πέραν αυτών που διαθέτει και υποστηρίζει το λογισμικό μας τη στιγμή που γράφεται το παρόν κείμενο (FRM SSA, NRM SSA).

Command Line Interface - CLI

Ο χρήστης του συστήματος αλληλεπιδρά με αυτό μέσω μιας διασύνδεσης γραμμών εντολών (command line interface – CLI) η οποία του επιτρέπει να επιλέξει την τοποθεσία και το όνομα του αρχείου ρυθμίσεων της προσομοίωσης (configuration file), την τοποθεσία και το τελικό όνομα του δυαδικού αρχείου που θα συγκρατεί τα δεδομένα που παράχθηκαν κατά την προσομοίωση (results file), καθώς και τον φάκελο δεδομένων (data folder) ο οποίος περιέχει τις δομές δεδομένων του προς προσομοίωσης βιο-μοντέλου (resources). Ο χρήστης έχει επίσης τη δυνατότητα να επιλέξει και να παρέχει στο λογισμικό την επιλογή του για καταγραφή συμβάντων (logging) και σε ποιο βάθος (verbosity) επιθυμεί να γίνεται αυτό, όπως επίσης και να τρέξει κάποιες δοκιμές για τις μονάδες που διαθέτουν τέτοιες δοκιμές (unit tests), πριν την εκκίνηση της προσομοίωσης.

Configuration Provider

Το αρχείο ρυθμίσεων είναι ένα απλό αρχείο κειμένου ώστε να μπορεί να το τροποποιήσει εύκολα ο χρήστης. Περιέχει τις επιθυμητές παραμέτρους της προσομοίωσης. Μια λίστα αυτών φαίνεται στον Πίνακα 2 μαζί με ενδεικτικές τιμές για ένα παράδειγμα που έχει ρυθμιστεί για να προσομοιωθεί το βιο-μοντέλο ASYN

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

[36] χρησιμοποιώντας τον FRM-SSA αλγόριθμο, σε όλους τους 48 πυρήνες του Intel SCC NoC επεξεργαστή για 100 επαναλήψεις (repetitions) όπου κάθε μια διαρκεί 1 εβδομάδα του βιολογικού πειράματος (lab time). Αυτός ο χρόνος αναφέρεται όχι σε πραγματικό χρόνο αλλά σε εικονικό χρόνο που αντιστοιχεί στο χρόνο που θα περίμενε ο επιστήμονας στο εργαστήριο αν εκτελούσε το αντίστοιχο πείραμα.

Μια άλλη σχετική επιλογή που έχει ο χρήστης στη διάθεση του είναι αυτή της περιόδου δειγματοληψίας (sampling period). Η περίοδος δειγματοληψίας είναι αυτή που ρυθμίζει κάθε πότε το σύστημα γράφει τα τρέχοντα αποτελέσματα της προσομοίωσης στο δυαδικό αρχείο αποτελεσμάτων. Τα αποτελέσματα αυτά είναι κυρίως οι μοριακοί πληθυσμοί των μοριακών ειδών οπότε ο καθορισμός της περιόδου δειγματοληψίας έχει άμεσο αντίκτυπο στο μέγεθος του δυαδικού αρχείου αποτελεσμάτων. Αν μειώσουμε την περίοδο το αρχείο αυξάνεται σε μέγεθος καθώς γράφονται πολύ πιο συχνά δεδομένα, οπότε είναι σημαντικό ο χρήστης να ρυθμίσει αυτή την παράμετρο όσο πιο κοντά στις ανάγκες του. Στο σημείο αυτό πρέπει να αναφέρουμε ότι η περίοδος δειγματοληψίας δεν επηρεάζει κατά οποιονδήποτε άλλο τρόπο την εκτέλεση της προσομοίωσης η οποία τρέχει κανονικά και με τον ίδιο ρυθμό όποια τιμή, μεγάλη ή μικρή, έχει η περίοδος δειγματοληψίας.

Η τελευταία αλλά εξίσου σημαντική ρύθμιση που μπορεί να κάνει ο χρήστης στο αρχείο ρυθμίσεων είναι η επιλογή του μέγιστου αριθμού βημάτων που επιτρέπεται να εκτελέσει ο αλγόριθμος στοχαστικής προσομοίωσης μέσα σε μια περίοδο δειγματοληψίας. Κάθε ένας κύκλος προσομοίωσης (reaction cycle – RC) αντιστοιχεί σε ένα βήμα οπότε η συγκεκριμένη ρύθμιση αφορά ουσιαστικά τα μέγιστα RCs που επιτρέπονται μέσα σε μια περίοδο δειγματοληψίας. Ο περιορισμός των RCs επιτρέπει τη διατήρηση της προσομοίωσης σε μια ορθή κατάσταση κατά την οποία αν ξεπεραστεί ο μέγιστος αυτός αριθμός διακόπτεται η επανάληψη που εκτελείται εκείνη τη στιγμή και το σύστημα προχωράει στην εκτέλεση της επόμενης. Η διακοπή αυτή είναι απαραίτητη στην περίπτωση που τα χρονικά βήματα που παράγονται (τ_μ) είναι πολύ μικρά και δε μπορούν να οδηγήσουν με επιτυχία στον επιθυμητό χρόνο προσομοίωσης και άρα στην ολοκλήρωση της επανάληψης και τελικά της προσομοίωσης συνολικά. Ο αριθμός των βημάτων διακοπής εξαρτάται από τη δυναμική συμπεριφορά του μοντέλου και μπορεί να βρίσκεται για κάποια μοντέλα στην κλίμακα των χιλιάδων (π.χ 4.000 βήματα για το ASYN μοντέλο είναι αρκετά), ενώ σε κάποια άλλα να βρίσκεται στην κλίμακα των εκατομμυρίων (π.χ 1.000.000 βήματα για το LVS μοντέλο).

Πίνακας 2: Οι ρυθμίσεις της προσομοίωσης

Παράμετρος	**Περιγραφή**	**Παράδειγμα**
Όνομα βιο-μοντέλου	Το όνομα του SBML βιο-μοντέλου	ASYN
Αριθμός αντιδράσεων *(m)*	Πόσες αντιδράσεις διαθέτει το βιο-μοντέλο	136
Αριθμός ειδών *(n)*	Πόσα μοριακά είδη διαθέτει το βιο-μοντέλο	90
Αλγόριθμος SSA	Ο επιθυμητός αλγόριθμος SSA (FRM ή NRM)	FRM
Τρόπος λειτουργίας	Ο επιθυμητός τρόπος λειτουργίας (SSIP ή MSIP)	SSIP
Εύρος πυρήνων *(N)*	Το εύρος των πυρήνων που θα ανατεθεί δουλειά	[00 – 48]
Εύρος νημάτων	Το εύρος των νημάτων που θα ανατεθεί δουλειά	[00 – 00]

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Παράμετρος	**Περιγραφή**	**Παράδειγμα**
Αριθμός επαναλήψεων (R)	Ο αριθμός των επαναλήψεων της προσομοίωσης	100
Χρόνος προσομοίωσης *(T_{sim})*	Ο συνολικός χρόνος προσομοίωσης σε sec	604800
Περίοδος δειγματοληψίας *(T_{sam})*	Το διάστημα μεταξύ των δειγμάτων σε sec	3600
Μέγιστος αριθμός βημάτων	Βήματα σε μια SP πριν διακοπή η επανάληψη	4000

Resource Provider

Οι περιγραφές των βίο-μοντέλων που έχει τη δυνατότητα να προσομοιώσει το σύστημα πρέπει να βρίσκονται σε κατάλληλα αρχεία σύμφωνα με το στάνταρ SBML [22]. Κάθε τέτοιο αρχείο περιλαμβάνει όλες τις απαραίτητες πληροφορίες του όπως οι *m* αντιδράσεις και τα *n* μοριακά είδη. Πριν από την εκκίνηση της προσομοίωσης ο Resource Provider διαβάζει και αναλύει το αρχικό SBML αρχείο με σκοπό να παράξει τις δομές δεδομένων για την κυρίως φάση της προσομοίωσης. Αυτές οι δομές είναι ο πίνακας των αντιδράσεων (Reaction Table – RT Table) και ο πίνακας των μοριακών ειδών (Species Table – ST Table) για τον αλγόριθμο FRM SSA, ενώ ο αλγόριθμος NRM SSA χρειάζεται τις προηγούμενες δύο συν μια νέα, τον πίνακα εξαρτήσεων (Dependency Graph Table – DG Table).

Ο πίνακας RT των αντιδράσεων περιέχει *m* στοιχεία, όσες είναι και οι αντιδράσεις του μοντέλου. Κάθε αντίδραση περιέχει ξεχωριστούς δείκτες (διευθύνσεις) για τα αντιδρώντα και ξεχωριστούς δείκτες για τα προϊόντα. Οι δείκτες αυτοί αφορούν τα μοριακά είδη που είναι αποθηκευμένα στον αντίστοιχο πίνακα μοριακών ειδών ST. Πέραν από τους δείκτες αυτούς, κάθε αντίδραση περίεχει και τη σταθερά αντίδρασης c_μ, το διάνυσμα $\boldsymbol{\nu}_\mu$ με τη στοιχειομετρεία της αντίδρασης καθώς και το βαθμό της αντίδρασης (2^η ή 3^η). Ο πίνακας ST περιέχει τις αρχικές συγκεντρώσεις $\{X_1, \ldots, X_n\}$ των *n* μοριακών ειδών που συμμετέχουν στις αντιδράσεις του συγκεκριμένου βίο-μοντέλου. Ο πίνακας DG για τον αλγόριθμο NRM SSA διαθέτει όπως και ο πίνακας RT *m* στοιχεία, ένα για κάθε αντίδραση. Το κάθε στοιχείο περιέχει τις εξαρτώμενες από αυτήν αντιδράσεις μαζί με το συνολικό αριθμό αυτών.

Results Generator

Τα αποτελέσματα της προσομοίωσης αποθηκεύονται σε δυαδικά αρχεία. Αυτά τα αρχεία έχουν μια ειδική δομή για τα δεδομένα που περιέχουν σχετικά με τις επαναλήψεις που εκτελέστηκαν και τις περιόδους δειγματοληψίας που περιέχει η κάθε μια επανάληψη. Η ειδική αυτή δομή είναι κατανοητή από τον Results Generator ο οποίος έχει τη δυνατότητα να διαβάσει αυτά τα αρχεία και να παράξει αρχεία κατανοητά από ανθρώπους-χρήστες, όπως είναι τα αρχεία τιμών που διαχωρίζονται από κόμματα (comma separated value αρχεία – CSV αρχεία). Τα CSV αρχεία μπορούν να διαβαστούν με τη σειρά τους από άλλες εφαρμογές και προγράμματα τα οποία μπορούν να δημιουργήσουν διαγράμματα από τα δεδομένα. Τέτοιες εφαρμογές και προγράμματα είναι το Microsoft Excel, το LibreOffice Calc καθώς και το Matlab. Για κάθε επανάληψη στα δυαδικά αρχεία περιλαμβάνονται οι μοριακοί πληθυσμοί όλων των ειδών σε συγκεκριμένες χρονικές στιγμές, σύμφωνα με την περίοδο δειγματοληψίας που έχει επιλεχθεί από τον χρήστη στο αρχείο ρυθμίσεων. Στο τέλος των αποτελεσμάτων κάθε επανάληψης υπάρχουν και συνολικά στατιστικά για την επανάληψη, όπως είναι ο αριθμός των κύκλων αντιδράσεων (reaction cycles – RCs) που εκτελέστηκαν.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

4.3.2 Backend

Το κυρίως μέρος της προσομοίωσης εκτελείται από μονάδες που ανήκουν σε αυτή την ομάδα. Η διεργασίες του προσομοιωτή που εκτελούνται σε κάθε υπολογιστικό κόμβο (π.χ πυρήνας του Intel SCC NoC CPU) μετά από την αρχικοποίηση και την οργάνωση των δομών δεδομένων της προσομοίωσης δημιουργούν τελικά από ένα αντικείμενο Model Simulator η καθεμία. Κάθε τέτοιο αντικείμενο ελέγχει και συγχρονίζει τα υπόλοιπα components που περιέχει από κάτω του. Αυτά είναι μικρότερα από το ίδιο και αναλαμβάνουν τη διατήρηση και παροχή δομών δεδομένων αντίστοιχων με το όνομα τους. Έτσι έχουμε τις εξής μικρότερες μονάδες:

- Simulation Settings – περιέχει και προωθεί τις ρυθμίσεις της προσομοίωσης σύμφωνα με τις επιλογές του χρήστη στο αρχείο ρυθμίσεων
- Simulation Resources – περιέχει και προωθεί τα δεδομένα του βιο-μοντέλου που προσομοιώνεται δηλαδή τους πίνακες RT, ST για τον αλγόριθμο FRM-SSA και τους πίνακες RT, ST και DG για τον αλγόριθμο NRM-SSA
- Simulation Storage - αποθηκεύει τα αποτελέσματα στα δυαδικά αρχεία αποτελεσμάτων σε κάθε περίοδο δειγματοληψίας (SP)
- Simulation Statistics - παράγει συνολικά στατιστικά προσομοίωσης
- Simulation Engine – εκτελεί την προσομοίωση με βάση το υλικό (hardware) και τον αλγόριθμο στοχαστικής προσομοίωσης που επέλεξε ο χρήστης.

Η τελευταία μονάδα Simulation Engine είναι και η πιο σημαντική στο λογισμικό προσομοίωσης. Η μονάδα αυτή είναι υπεύθυνη για την κατανομή του υπολογιστικού φορτίου μεταξύ όλων των διεργασιών και νημάτων που εκτελούνται ταυτόχρονα σε όλους τους υπολογιστικούς κόμβους. Η κατανομή αυτή γίνεται για την ώρα στατικά που σημαίνει ότι είναι ανεξάρτητη από το βιο-μοντέλο, το υπολογιστικό και επικοινωνιακό φορτίο του σε κάθε νήμα κάθε κόμβου και γενικότερα την τρέχουσα κατάσταση της προσομοίωσης. Τα τοπικά νήματα σε κάθε κόμβο συγχρονίζονται μέσω της μονάδας Thread Pool η οποία και τα περιέχει μαζί με ένα αντικείμενο Thread Barrier σε περίπτωση που ο στοχαστικός αλγόριθμος απαιτεί να φτάσουν όλα μαζί σε ένα σημείο του κώδικα και να συνεχίσουν από εκεί όλα μαζί ταυτόγχρόνα. Οι διεργασίες που εκτελούνται κατενεμημένα σε διαφορετικούς κόμβους συγχρονίζονται μέσω μηνυμάτων με τη βοήθεια της βιβλιοθήκης RCCE όπως αυτή περιγράφτηκε αναλυτικά στο Κεφάλαιο 3.

Κάθε νήμα που δημιουργείται από τη μονάδα ThreadPool χρησιμοποιεί ένα αντικείμενο Thread Worker που είναι παράγωγο (derived) αντικείμενο με βάση τον αλγόριθμο στοχαστικής προσομοίωσης που εκτελείται. Συνεπώς τα αντικείμενα αυτά είναι τύπου Thread Worker FRM ή Thread Worker NRM αντίστοιχα με τους υποστηριζόμενους για την ώρα αλγόριθμους. Αυτά περιέχουν τις δομές δεδομένων και τις αλγοριθμικές δομές – συναρτήσεις του επιλεγμένου αλγόριθμου. Ο συγκεκριμένος σχεδιασμός επιτρέπει την προσθήκη περαιτέρω αλγορίθμων στοχαστικής προσομοίωσης στο μέλλον με τον ελάχιστον δυνατό κόπο. Στόχος μας είναι να παρέχουμε στους προγραμματιστές τη δυνατότητα να συνδέσουν δυναμικά (dynamic linking) τέτοια αντικείμενα με το λογισμικό προσομοίωσης. Αυτό ελπίζουμε πως θα δημιουργήσει ένα πλήθος επεκτάσεων με νέους αλγορίθμους, μετατροπή παλαιότερων ή ακόμα και υβριδικούς αλγόριθμους τους οποίους μπορούμε είτε να ενσωματώσουμε αργότερα στο ίδιο το λογισμικό ή να τους διαθέτουμε δωρεάν σε άλλους επιστήμονες, βιολόγους ή μηχανικούς μέσα από κάποια ιστοσελίδα που θα δημιουργηθεί για αυτό το σκοπό.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Τα αντικείμενα Thread Worker FRM / NRM αντιστοιχούν στις μονάδες εκτέλεσης (units of execution – UE) που αναφέρθηκαν στο Κεφάλαιο 3. Αυτά είναι υπεύθυνα για την εκτέλεση των υπολογισμών σε κάθε επανάληψη της προσομοίωσης όπου συνεχώς ολοκληρώνονται κύκλοι προσομοίωσης (reaction cycles). Σε κάθε τέτοιο κύκλο υπολογίζεται η νικητήρια αντίδραση μεταξύ των αντιδράσεων που έχουν κατανεμηθεί στη μονάδα εκτέλεσης που τον ολοκληρώνει. Η νικητήρια αντίδραση είναι αυτή η οποία έχει τον μικρότερο χρόνο ενεργοποίησης σύμφωνα με τον αλγόριθμο στοχαστικής προσομοίωσης που εκτελούμε (FRM / NRM). Κατά τον τρόπο λειτουργίας MSIP κάθε μονάδα εκτέλεσης αναλαμβάνει την εκτέλεση όλων των αντιδράσεων συνεπώς δεν υπάρχει ανάγκη για επικοινωνία με τις υπόλοιπες μονάδες εκτέλεσης κατά τη φάση της σύγκρισης.

Αντιθέτως στον τρόπο λειτουργίας SSIP οι χρόνοι ενεργοποίησης τ_j της κάθε αντίδρασης R_j συγκρίνονται μεταξύ όλων των μονάδων εκτέλεσης που συμμετέχουν στη συγκεκριμένη επανάληψη της προσομοίωσης. Αυτές οι μονάδες εκτέλεσης αντιστοιχούν σε όλες τις διεργασίες που τρέχουν κατανεμημένα στους κόμβους - πυρήνες επεξεργασίας (π.χ 1 εως 48 για τον Intel SCC NoC CPU) με όλα τους τα νήματα εκτέλεσης που τους αντιστοιχούν (π.χ 1 για τον Intel SCC NoC CPU). Συνεπώς το σύνολο των μονάδων εκτέλεσης που συμμετέχουν σε κάθε επανάληψη της προσομοίωσης είναι $\Sigma_{UE} = N * T$ και κάθε μονάδα εκετέλεσης αναλαμβάνει την εκτέλεση και σύγκριση $m / (N * T)$ αντιδράσεων, όπου N είναι ο αριθμός των κόμβων – πυρήνων επεξεργασίας και T είναι ο αριθμός των νημάτων που μπορεί ο καθένας τους να εκτελέσει. Η ρύθμιση των επιθυμητών αριθμών N και T μπορεί να γίνει από το χρήστη στο αρχείο ρυθμίσεων, διαφορετικά οι τιμές αυτές θέτονται αυτόματα από το σύστημα στις μέγιστες τιμές τους ανάλογα με το υλικό στο οποίο εκτελούνται.

Κάθε κύκλος αντιδράσεων ξεκινά με όλες τις μονάδες εκτέλεσης να υπολογίζουν χρόνους ενεργοποίησης τ_j για όλες τις αντιδράσεις που έχει αναλάβει η καθεμία από αυτές. Κάθε νέος χρόνος τ_j συγκρίνεται με τον προηγούμενο ελάχιστο χρόνο μέχρι να υπολογιστούν όλοι τους και να βρεθεί ο ελάχιστος χρόνος $\tau_{j\ min}$ για την κάθε μια μονάδα εκτέλεσης. Αυτοί οι $N * T$ στον αριθμό χρόνοι $\tau_{j\ min}$ συγκρίνονται μεταξύ τους χρησιμοποιώντας την κατάλληλη μέθοδο επικοινωνίας σύμφωνα με τις ρυθμίσεις της μονάδας προσομοίωσης (Simulation Engine) που περιέχει την κάθε μονάδα εκτέλεσης. Όταν βρεθεί ο ελάχιστος χρόνο ενεργοποίησης τ_j μεταξύ όλων των μονάδων εκτέλεσης τότε όλες τους ανανεώνουν τον πίνακα των μοριακών ειδών τους (ST) με βάση τη στοιχειομετρία της νικητήριας αντίδρασης. Η ανανέωση γίνεται τόσο για τα αντιδρώντα (το πολύ 3) όπου μειώνεται ο πληθυσμός τους όσο και για τα προϊόντα (το πολύ 5) όπου αυξάνεται ο πληθυσμός τους αντίστοιχα. Στη συνέχεια, και αφού όλες οι μονάδες εκτέλεσης ολοκληρώσουν τις ανανεώσεις, ο χρόνος προσομοίωσης αυξάνεται σε όλες τους και αυτό σηματοδοτεί το τέλος του τρέχοντος κύκλου αντιδράσεων και την αρχή του επόμενου.

Καθώς ολοκληρώνονται κύκλοι αντιδράσεων ο χρόνος της προσομοίωσης αυξάνεται σταδιακά εως ότου ξεπεράσει το επόμενο χρονικό σημείο δειγματοληψίας. Όταν συμβεί αυτό η κύρια μονάδα εκτέλεσης, που είναι και η μοναδική σε μια ομάδα, αναλαμβάνει να ενεργοποιήσει τη μονάδα αποθήκευσης (Simulation Storage) για να γίνει η εγγραφή των μοριακών ειδών εκείνη τη χρονική στιγμή στο κατάλληλο δυαδικό αρχείο δεδομένων. Όταν ολοκληρωθεί αυτό, η προσομοίωση προχωράει κανονικά στον επόμενο κύκλο αντιδράσεων. Σε πολυνηματικά (multi-threaded) μηχανήματα υπάρχει επιλογή να εκκινείται ένα νέο νήμα για να εκτελέσει την εγγραφή στο αρχείο ώστε να μη καθυστερεί το κυρίως νήμα στους υπολογισμούς του και έτσι να μη καθυστερεί με τη σειρά του τις υπόλοιπες μονάδες εκτέλεσης.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Η επικοινωνία των μονάδων εκτέλεσης μπορεί να συμβεί μόνο κατά δύο συγκεκριμένες φάσεις του αλγόριθμου στοχαστικής προσομοίωσης. Η πρώτη συμβαίνει άπαξ στην αρχή της προσομοίωσης πριν εκτελεστεί η πρώτη επαναληψη της. Κατά τη διάρκεια αυτής, η κύρια μονάδα εκτέλεσης διαβάζει από τα κατάλληλα αρχεία όλες τις απαραίτητες δομές δεδομένων του βιο-μοντέλου που αφορά την επανάληψη της προσομοίωσης και τις κατανέμει – διαμοιράζει μεταξύ όλων των υπολοίπων μονάδων εκτέλεσης στην ομάδα που ανήκει. Το πρότυπο - μοτίβο (pattern) της επικοινωνίας σε αυτή την περίπτωση μπορεί να είναι είτε ‘εκπομπή’ (broadcast) είτε διαμοιρασμός (scatter) ανάλογα με το αν θέλουμε όλες οι μονάδες εκτέλεσης να λάβουν μια ενιαία ή μια περιορισμένη αναπαράσταση των δομών δεδομένων του βίο-μοντέλου αντίστοιχα.

Η δεύτερη φάση επικοινωνίας συμβαίνει μέσα στον κάθε κύκλο αντιδράσεων όπου υπάρχει η ανάγκη να συγκριθούν οι ελάχιστοι χρόνοι $\tau_{j\ min}$ που υπολογίστηκαν από την κάθε μονάδα εκτέλεσης. Κατά τη διάρκεια αυτής της επικοινωνίας όλες οι μονάδες εκτέλεσης στέλνουν τους δικούς τους ελάχιστους χρόνους $\tau_{j\ min}$ στην κύρια μονάδα εκτέλεσης η οποία με τη σειρά της βρίσκει τον ελάχιστο από αυτούς και ειδοποιεί όλες τις υπόλοιπες μονάδες για το χρόνο αυτόν και το αναγνωριστικό της αντίδρασης από την οποία παράχθηκε ο συγκεκριμένος χρόνος. Αυτό ολοκληρώνει την επικοινωνία και όλες οι μονάδες εκτέλεσης μπορούν να προχωρήσουν στην ανανέωση των μοριακών πληθυσμών μέσα στην κατάλληλη δομή (ST) του βίο-μοντέλου σύμφωνα με το διάνυσμα στοιχειομετρίας $\boldsymbol{\nu_\mu}$ της νικητήριας αντίδρασης $R_{\mu.}$

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

5. ΕΠΙΔΟΣΕΙΣ ΚΑΙ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

Σε αυτή την ενότητα θα περιγράψουμε τις προσομοιώσεις που πραγματοποιήθηκαν προκειμένου να αξιολογήθεί η ρυθμοαπόδοση (throughput) και οι επιδόσεις (performance) του πλαισίου λογισμικού παράλληλης προσομοίωσης που αναπτύξαμε όταν αυτό χρησιμοποιείται για να τρέχει το ίδιο βιομοντέλο σε διαφορετικές αρχιτεκτονικές πολυ-πύρηνων επεξεργαστών. Μετρήσαμε τους χρόνους εκτέλεσης και τους συνολικούς κύκλους αντίδρασης (reaction cycles - RCs) που εκτελούνται κατά τη διάρκεια όλων των επαναλήψεων της προσομοίωσης και υπολογίσαμε τη *ρυθμοαπόδοση* (σε εκατομύρια κύκλους αντίδρασης ανά δευτερόλεπτο - MRC / sec), τις *επιδόσεις* (σε εκατομύρια αντιδράσεις ανά δευτερόλεπτο - MR / sec), τον *συντελεστή επιτάχυνσης* (speedup - S) που επιτυγχάνεται σε σχέση με ένα πυρήνα, και την *αποδοτικότητα* (efficiency) που είναι ο λόγος του συντελεστή επιτάχυνσης προς τον αριθμό των πυρήνων, για μια ποικιλία των βασικών διαμορφώσεων

5.1 Πειράματα

Όλες οι προσομοιώσεις στον SCC εκτελέστηκαν χρησιμοποιώντας τον αλγόριθμο FRM SSA, τόσο σε MSIP (Πείραμα 1) όσο και σε SSIP (Πείραμα 2) τρόπο λειτουργίας. Η πρώτη βάση για τη συγκριτική αξιολόγηση (baseline) καθορίστηκε εκτελώντας την ίδια προσομοίωση σε ένα μόνο πυρήνα του Intel SCC NoC επεξεργαστή, δηλ. σε ένα Intel Pentium (P54C) που λειτουργεί στά 800MHz και τρέχει λειτουργικό σύστημα SCC Linux. Η δεύτερη βαση καθορίστηκε τρέχοντας το ίδιο μοντέλο χρησιμοποιώντας το πλαίσιο του λογισμικού που αναπτύξαμε, αλλά τώρα με αυτό να στοχεύει την εκτέλεση σε ένα πυρήνα ενός πολύ ισχυρού σταθμού εργασίας με βάση τον επεξεργαστή Intel Core i7 4790K στα 4GHz (με όλους τους πυρήνες ενεργούς - όχι Turbo) 32 GB μνήμη RAM και λειτουργικό σύστημα GNU / Linux.

Σε όλες τις προσομοιώσεις χρησιμοποιήθηκε το ίδιο βιομοντέλο που έχουμε αναπτύξει και έχει γίνει αποδεκτό για συμπερίληψη στη γνωστή Βάση Δεδομένων EBI Biomodels [36]. Το ASYN βιομοντέλο αναπτύχθηκε για να μελετήσουμε τις επιπτώσεις του πολυμερισμού της γνωστής πρωτεΐνης α-συνουκλεΐνης (ASYN) στην διατάραξη της ομοιόστασης των ντοπαμινεργικών νευρώνων, φαινόμενο που εικάζεται ευρέως ότι παίζει κομβικό ρόλο στην εμφάνιση της νόσου του Parkinson [37]. Το μοντέλο ASYN έχει $m = 136$ αντιδράσεις (mass action kinetics) και $n = 90$ μοριακά είδη και θεωρείται τυπικό βιομοντέλο μεσαίου μεγέθους του EBI DB.

5.2 Πειράματα Προσομοίωσης

Στα πρώτα μας πειράματα χρησιμοποιήσαμε τον SCC NoC επεξεργαστή για να εκτελέσει ένα μεγάλο αριθμό ($R = 9600$) επαναλήψεων του βιομοντέλου ASYN σε λειτουργία τύπου MSIP, με αξιοποίηση όλων των 48 πυρήνων (200 επαναλήψεις ανά πυρήνα). Αυτό το είδος της προσομοίωσης είναι χρήσιμο για την εκτίμηση της μέγιστης αναμενόμενης απόδοσης που μπορεί να προσφέρει μια CPU, αφού μετά την εκκίνηση, όπου λαμβάνει

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

χώρα μετάδοση ή διασπορά των δεδομένων του βιομοντέλου, οι ανεξάρτητες επαναλήψεις προχωρούν παράλληλα και δεν απαιτείται καμία επικοινωνία μεταξύ των πυρήνων.

Οι 48 πυρήνες του SCC NoC επεξεργαστή ολοκλήρωσαν την εκτέλεση των 9600 επαναλήψεων, που αποτελούνταν από συνολικά 1.51 δισεκατομμύρια κύκλους αντιδράσεων, σε 10623 δευτερόλεπτα. Η επιτευχθείσα ρυθμοαπόδοση ήταν 0,14 MRC / s και οι επιδόσεις, λαμβάνοντας υπόψη τον αριθμό των αντιδράσεων του μοντέλου (*m = 136*), ανήλθε σε 1,94 MR / s. Αυτή είναι η εκτίμηση της μέγιστης αναμενόμενης επίδοσης που ο Intel SCC NoC πολλαπλών-πυρήνων επεξεργαστής μπορεί να προσφέρει κατά τη διάρκεια μιας στοχαστικής προσομοίωσης με χρήση του αλγορίθμου FRM-SSA. Άλλο ενδιαφέρον εύρημα με αυτή τη ρύθμιση, που διανέμει ένα μεγάλο αριθμό επαναλήψεων ανάμεσα σε όλους τους πυρήνες, είναι ότι μία επανάληψη της προσομοίωση του βιομοντέλου ASYN ολοκληρώνεται σε περίπου 1.1 sec κατά μέσο όρο.

Το δεύτερο πείραμα επικεντρώνεται στο να διαπιστώσει το κόστος της επικοινωνίας και τις επιπτώσεις της όταν χρησιμοποιείται παράλληλη εκτέλεση του FRM-SSA αλγορίθμου στον επεξεργαστή SCC NoC, διαμοιράζοντας τις αντιδράσεις ενός κύκλου αντιδράσεων σε πολλούς πυρήνες (λειτουργία SSIP). Αυτό το είδος προσομοίωσης μπορεί να μας δείξει πόσο γρήγορα μειώνεται η αποδοτικότητα με τον αριθμό των πυρήνων για ένα δεδομένο μέγεθος του προβλήματος (βιομοντέλου) και πόσοι πυρήνες μπορούν να χρησιμοποιούνται αποδοτικά, πριν δηλαδή σταματήσει να αυξάνεται ο συντελεστής επιτάχυνσης (speedup levels off) κατά την εκτέλεση μιας επανάληψης της προσομοίωσης.

Τα αποτελέσματα δείχνονται στον Πίνακα 3 όπου η επιτάχυνση, η αποδοτικότητα, οι επιδόσεις υπολογίζονται με βάση το χρόνο που απαιτείται για να ολοκληρωθεί η προσομοίωση όταν χρησιμοποιείται υποσύνολο των πυρήνων του επεξεργαστή SCC NoC. Ο αριθμός των ενεργών πυρήνων μετεβάλλετο από 1 έως και 8, καθότι η επιτάχυνση παύει να αυξάνεται μετά από ένα σημείο. Αυτό οφείλεται στο ότι καθώς ο αριθμός των πυρήνων αυξάνεται, αυξάνεται το κόστος επικοινωνίας ενώ μειώνεται ο φόρτος εργασίας (computation work) ανά πυρήνα διότι το μέγεθος του προβλήματος (total work) που διαμοιράζεται στους πυρήνες παραμένει σταθερό. Έτσι το κόστος επικοινωνίας κυριαρχεί των υπολογισμών κάτι που οδηγεί, όπως είναι φυσικό, σε μείωση των επιδόσεων. Γι αυτό προτείνουμε την αξιοποίηση μικρών υποσυνόλων πυρήνων (clusters) για τον παράλληλο υπολογισμό των δυνητικών χρόνων των αντιδράσεων (λειτουργία SSIP) και, ταυτόχρονα την χρήση πολλών τέτοιων συστάδων (clusters) πυρήνων που εκτελούν ανεξάρτητες επαναλήψεις της προσομοίωσης παράλληλα.

Πίνακας 3: Η απόδοση του Intel SCC NoC επεξεργαστή κατά την εκτέλεση του αλγορίθμου FRM SSA με τρόπο λειτουργίας SSIP

Intel SCC Cores	Time (sec)	Speedup	Efficiency	Throughput (RC/s)	Performance (MR/s)
1	3420	1.00	1.00	2304	0.313
2	1928	1.77	0.89	4092	0.557
4	1101	3.11	0.78	7145	0.972
6	926	3.69	0.62	8515	1.16
8	848	4.03	0.50	9292	1.27

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Το τρίτο πείραμα είναι παρόμοιο με το δεύτερο, αλλά με χρήση του πλαισίου λογισμικού που αναπτύξαμε σε διαφορετικό μηχάνημα-στόχο, που βασίζεται στον Core i7 επεξεργαστή πολλών πυρήνων (multi-core). Αυτό το πείραμα μας επιτρέπει να αξιολογήσουμε όχι μόνον την απόδοση ενός σύγχρονου επεξεργαστή άμεσα διαθέσιμου στους επιστήμονες (θυμηθείτε ότι ο SCC NoC είναι μια πειραματική CPU), αλλά και πώς αυτός συμπεριφέρεται καθώς ο αριθμός των διαθέσιμων πυρήνων κλιμακώνεται. Σημειώστε ότι σε αυτή τη περίπτωση το πλαίσιο μας χρησιμοποιεί τη κοινόχρηστη μνήμη (shared memory) μεταξύ των νημάτων που εκτελούνται. Δεν υπάρχει στο υλικό του επεξεργαστή Core i7 τύπος μνήμης όπως η ειδική προσωρινή μνήμη ανταλλαγής μηνυμάτων (MPB) του επεξεργαστή SCC NoC, την οποία το πλαίσιο μπορεί μόνο να εξομοιώσει με την χρήση και διαχείριση (κλείδωμα) ισοδύναμων δομών κοινόχρηστης μνήμης που επιβάλλουν καθυστερήσεις.

Ο Core i7 επεξεργαστής πολλών πυρήνων (multi-core) της Intel υλοποιεί δύο νήματα υλικού ανά πυρήνα για μια συνολική ταυτόχρονη εκτέλεση 8 νημάτων και έτσι μπορούμε να επιχειρήσουμε άμεσες συγκρίσεις αποδοτικότητας μεταξύ επεξεργαστών πολλών-πυρήνων (multi-core) και πολλαπλών-πυρήνων (many-core). Όπως φαίνεται στον Πίνακα 4 παρατηρούμε την ίδια υποβάθμιση επιτάχυνσης και αποδοτικότητας σε αυτό το multi-core επεξεργαστή, αλλά και σε μεγαλύτερο βαθμό. Αυτό είναι αναμενόμενο, δεδομένου ότι η εκτέλεση του αλγορίθμου FRM-SSA με βάση το πλαίσιό μας παραμένει η ίδια και η επικοινωνία πάλι κυριαρχεί των υπολογισμών όσο ο αριθμός των πυρήνων αυξάνεται και μάλιστα αυτό συμβαίνει τώρα γρηγορότερα (δηλ. σε μικρότερο αριθμό πυρήνων).

Πίνακας 4: Ηαπόδοση του Intel Core i7 4790K επεξεργαστή κατά την εκτέλεση του αλγόριθμου FRM SSA με τρόπο λειτουργίας SSIP

Intel SCC Cores	Time (s)	Speedup	Efficiency	Throughput (RC/s)	Performance (MR/s)
1	199	1.00	1.00	39622	5.39
2	114	1.75	0.87	69243	9.42
4	84	2.36	0.59	93395	11.76

Η ταχύτερη πτώση της αποδοτικότητας οφείλεται στην έλλειψη στο υλικό του multi-core επεξεργαστή υλοποίησης δομών μνήμης όπως η ειδική προσωρινή μνήμη ανταλλαγής μηνυμάτων (MPB). Ο Core i7 μπορεί μόνο να μιμηθεί αυτό το είδος μνήμης και ως εκ τούτου δεν εκμεταλλεύεται τα πλεονεκτήματα που αυτές οι δομές παρέχουν στον Intel SCC NoC επεξεργαστή σε επίπεδο υλικού. Φυσικά η ρυθμοαπόδοση και οι επιδόσεις είναι, σε απόλυτες τιμές, πολύ μεγαλύτερες στον Core i7 επεξεργαστή διότι αυτή η multi-core CPU αποτελείται από πυρήνες τελευταίας γενιά με πολύ ανώτερη μικρο-αρχιτεκτονική σχεδιαση και λειτουργεί σε 5X τη συχνότητα ρολογιού του SCC NoC. Πιστεύουμε ότι οι multi-core επεξεργαστές επόμενης γενιάς θα πρέπει πιθανά να υλοποιούν παρόμοιες δομές μνήμης όπως η MPB στο υλικό για αύξηση της αποδοτικότητας της επικοινωνίας μεταξύ των πυρήνων, χωρίς να χρειάζεται να καταφεύγουν πάντα σε κοινόχρηστη μνήμη και αναπόφευκτα σε τεχνικές όπως οι ‘κλειδαριές’ και τα γενικά πρωτόκολλα συνοχής της κρυφής μνήμης (cache coherence protocols) που επιφέρουν σοβαρές καθυστερήσεις στην επικοινωνία. Φυσικά οι απόλυτες επιδόσεις του Core i7 που πλησιάζουν τα 12 MR/sec είναι εντυπωσιακές και αποτελούν ελπιδοφόρο μήνυμα για τα

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

πλεονεκτήματα που οι πολύ-πύρηνοι επεξεργαστές μπορεί να προσφέρουν στην στοχαστική προσομοίωση πολύ μεγάλων βιο-μοντέλων (με χιλιάδες αντιδράσεις), κάτι που θα επιχειρήσουμε στο άμεσο μέλλον, και θα συζητήσουμε στο Παραδοτέο 2.2 του έργου.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

6. ΑΝΑΦΟΡΕΣ

[1] M. V. Schneider, *In Silico Systems Biology*, Humana Press, 2013.

[2] M. Tomita, «Whole-cell simulation: a grand challenge of the 21st century,» *TRENDS in Biotechnology,* . vol.19, 2001, pp. 205 - 210

[3] D. T. Gillespie, «Stochastic simulation of chemical kinetics,» *Annu. Rev. Phys. Chem.,* vol. 58, 2007, pp. 35-55.

[4] M. A. Gibson και J. Bruck, «Efficient exact stochastic simulation of chemical systems with many species and many channels,» *The Journal of Physical Chemistry A,* vol. 104(9), 2000, pp. 1876-1889.

[5] O. Hazapi, E. Logaras και E. S. Manolakos, «A soft IP core generating SoCs for the efficient stochastic simulation of large Biomolecular Networks using FPGAs,» *Electronics, Circuits and Systems (ICECS), 2012 19th IEEE International Conference on,* 2012, pp. 77-80.

[6] L. Macchiarulo, «A massively parallel implementation of Gillespie algorithm on FPGAs,» *Engineering in Medicine and Biology Society, 2008. EMBS 2008. 30th Annual International Conference of the IEEE,* 2008, pp. 1343-1346.

[7] H. Li και L. Petzold, «Efficient parallelization of the stochastic simulation algorithm for chemically reacting systems on the graphics processing unit,» *International Journal of High Performance Computing Applications,* vol. 24, 2010, pp. 106-116.

[8] G. Klingbeil, R. Erban, M. Giles και P. K. Maini, «Stochsimgpu: parallel stochastic simulation for the systems biology toolbox 2 for MATLAB,» *Bioinformatics,* vol. 27, 2011, pp. 1170-1171.

[9] S. Hoops, S. Sahle, R. Gauges, C. Lee, J. Pahle, S. Natalia, M. Singhal, L. Xu, P. Mendes και U. Kummer, «COPASI—a complex pathway simulator,» *Bioinformatics,* vol. 22, 2006, pp. 3067-3074.

[10] K. R, S. W. Sanft, J. F. Min Roh, R. K. Lim και L. R. Petzold, «StochKit2: software for discrete stochastic simulation of biochemical systems with events,» *Bioinformatics,* pp. 2457-2458, 2011.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

[11] «iBioSim,» http://www.async.ece.utah.edu/iBioSim/. [accesed 10/2 /2015].

[12] «SimBiology,» Mathworks, http://www.mathworks.com/products/simbiology [accesed 10/2 /2015].

[13] J. Howard, S. Dighe, S. Vangal, G. Ruhl, N. Borkar, S. Jain, V. Erraguntla, M. Konow, M. Riepen, M. Gries, G. Droege, T. Lund-Larsen, S. Steibl, S. Borkar, V. De και R. Van Der Wijngaart, «A 48-Core IA-32 Processor in 45 nm CMOS Using On-Die Message-Passing and DVFS for Performance and Power Scaling,» *IEEE Journal of Solid-State Circuits,* τόμ. 46, αρ. 1, pp. 173-183, 2011.

[14] A. Sharma, A. Papanikolaou και E. S. Manolakos, «Accelerating All-to-All Protein Structures Comparison with TMalign,» σε *IEEE International Symposium on Parallel & Distributed Processing, Workshops and Phd Forum (IPDPSW)*, Cambridge, MA, 2013, pp. 510-519.

[15] «RCCE,» Intel, http://www.intel.com/content/www/us/en/research/intel-labs-rcce-single-chip-cloud-brief.html. [accesed 10/2 /2015].

[16] «MPICH,» http://www.mpich.org. [accesed 10/2 /2015].

[17] T. Mattson, R. van der Wijngaart, M. Riepen, T. Lehnig, P. Brett, W. Haas, P. Kennedy, J. Howard, S. Vangal, N. Borkar, G. Ruhl και S. Dighe, «The 48-core SCC Processor: the Programmer's View,» *Internal Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC),* vol., no., pp.1,11, 13-19, November 2010.

[18] D. Anderson, T. Shanley και R. Budruk, “PCI express system architecture”, Addison-Wesley Professional, 2004.

[19] «ISO CPP,» https://www.isocpp.org/. [accesed 10/2 /2015].

[20] I. A. C. Ureña, M. Riepen και M. Konow, «RCKMPI - Lightweight MPI Implementation for Intel's Single-chip Cloud Computer (SCC),» *Recent Advances in the Message Passing Interface - 18th European MPI Users' Group Meeting, EuroMPI 2011*, Santorini, Greece, 2011, pp. 208-217

[21] «OpenMP,» http://www.openmp.org/. [accesed 10/2 /2015].

[22] M. Hucka, A. Finney, H. M. Sauro, H. Bolouri, J. Doyle, H. Kitano, A. Arkin, B. Bornstein, D. Bray και A. Cornish-Bowden, «The systems biology markup language (SBML): a medium for representation and exchange of biochemical network models,» *Bioinformatics,* vol. 19, 2003, pp. 524-531.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007–2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

[23] «ISO / IEC 14882:2011,» ISO, http://www.iso.org/iso/catalogue_detail.htm?csnumber=50372. [accesed 10/2 /2015].

[24] «GCC,» GNU, http://gcc.gnu.org/. [accesed 10/2 /2015].

[25] «Clang,» LLVM, http://clang.llvm.org/. [accesed 10/2 /2015].

[26] «CMake,» Kitware, http://www.cmake.org/. [accesed 10/2 /2015].

[27] «Qt Creator,» Digia Plc, http://www.qt.io/. [accesed 10/2 /2015].

[28] «Vim,» http://www.vim.org/. [accesed 10/2 /2015].

[29] «DBG,» GNU, http://www.gnu.org/software/gdb/. [accesed 10/2 /2015].

[30] «Git,» http://www.git-scm.com/. [accesed 10/2 /2015].

[31] «Cross-Tool NG,» http://www.crosstool-ng.org/. [accessed 10 2 2015].

[32] «Boost Libraries,» http://www.boost.org/. [accessed 10-2-2015].

[33] «GLog,» Google, https://code.google.com/p/google-glog/. [accessed 10-2-2015].

[34] «GFlags,» Google, https://code.google.com/p/gflags/. [accesed 10/2 /2015].

[35] «GTest,» Google. Available: https://code.google.com/p/googletest/. [accessed 10-2-2015].

[36] Eleftherios Ouzounoglou, Dimitrios Kalamatianos , Evangelia Emmanouilidou , Maria Xilouri, Leonidas Stefanis, Kostas Vekrellis and Elias S Manolakos, «Modeling of alpha-synuclein effects on neuronal homeostasis,». Available: http://www.ebi.ac.uk/biomodels-main/BIOMD0000000559. [accessed 10-2-2015].

[37] Eleftherios Ouzounoglou, Dimitrios Kalamatianos , Evangelia Emmanouilidou , Maria Xilouri, Leonidas Stefanis, Kostas Vekrellis and Elias S Manolakos, «In silico modeling of the effects of alpha-synuclein oligomerization on dopaminergic neuronal homeostasis,» *BMC Systems Biology,* vol. 8, May 2014, pp. 1-18