

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

(κωδικός 3828 και Κ.Α. 70/3/12367)

ΠΑΡΑΔΟΤΕΟ 1.3

Επικύρωση των αρχιτεκτονικών SoCs με FPGAs

ΑΘΗΝΑ

ΟΚΤΩΒΡΙΟΣ 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

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



ΕΣΠΑ
2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

Δηλώνω υπεύθυνα και εν γνώσει των συνεπειών του νόμου ότι το Παραδοτέο «Επικύρωση των αρχιτεκτονικών SoCs με FPGAs» αποτελεί πρωτότυπο έργο και δεν έχουν χρησιμοποιηθεί άλλες πηγές πέρα από αυτές στις οποίες γίνεται αναφορά. Όπου υπάρχει αναπαραγωγή δεδομένων, πινάκων και παραθεμάτων, αυτό δηλώνεται ρητά.

Ηλίας Μανωλάκος



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης

ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



ΕΣΠΑ
2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

ΠΙΝΑΚΑΣ ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΩΝ

1.	ΕΙΣΑΓΩΓΗ.....	9
1.1	Περίληψη Αρχιτεκτονικών	9
1.2	Διάρθρωση Παραδοτέου	9
2.	BENCHMARK BIOMODELS	11
2.1	Linear Chain System - LCS.....	11
2.2	Linear Chain System Enzymatic – LCSE.....	11
3.	ΘΕΩΡΗΤΙΚΗ ΑΝΑΛΥΣΗ ΕΠΙΔΟΣΕΩΝ.....	14
3.1	FRM-SoC Επιδόσεις.....	14
3.2	NRM-SoC Επιδόσεις.....	16
4.	ΕΠΙΚΥΡΩΣΗ FRM-SOC.....	19
4.1	Επικύρωση λειτουργίας.....	19
4.1.1	Ορισμός Πειραμάτων	19
4.1.2	Σύγκριση Αποτελεσμάτων.....	21
4.1.3	Συμπεράσματα.....	24
4.2	Ανάλυση Επιδόσεων.....	25
4.2.1	Επικύρωση επιδόσεων.....	25
4.2.2	Σύγκριση με COPASI.....	27
4.2.3	Συμπεράσματα.....	29
5.	ΕΠΙΚΥΡΩΣΗ NRM SOC	30
5.1	Επικύρωση Λειτουργίας.....	30
5.1.1	Εκτέλεση Πειραμάτων.....	30
5.1.2	Σύγκριση Αποτελεσμάτων.....	30
5.1.3	Συμπεράσματα.....	34
5.2	Ανάλυση Επιδόσεων.....	34
5.2.1	Επικύρωση Επιδόσεων	34
5.2.2	Σύγκριση με COPASI.....	36
5.2.3	Συμπεράσματα.....	36
6.	ΣΥΓΚΡΙΣΗ FPGA SOCS.....	39
6.1	Σύγκριση αρχιτεκτονικών.....	39
6.1.1	Σύγκριση επιδόσεων.....	39
6.1.2	Σύγκριση σε επίπεδο κατανάλωσης πόρων υλικού	42
6.2	Συμπεράσματα.....	43
7.	ΤΕΛΙΚΑ ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ.....	44



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



ΕΣΠΑ
2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

ΑΝΑΦΟΡΕΣ..... 45



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



ΕΣΠΑ
2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

ΠΙΝΑΚΑΣ ΕΙΚΟΝΩΝ

Εικόνα 1: Ο γράφος εξαρτήσεων (Dependencies Graph) του μοντέλου LCSE για τις πρώτες 8 αντιδράσεις με $D_{aver}=5$.	13
Εικόνα 2: Θεωρητικά αναμενόμενη διεκπεραιωτική ικανότητα (α) και επίδοση (β) του συστήματος FRM SoC ως συνάρτηση του πλήθους αντιδράσεων του βιομοντέλου (m) και του αριθμού των PEs (N). Συχνότητα λειτουργίας 175 MHz.	15
Εικόνα 3: Η ανάλυση της καθυστέρησης λόγω διοχέτευσης του πυρήνα NRM.	16
Εικόνα 4: Θεωρητικά αναμενόμενη διεκπεραιωτική ικανότητα (Reaction Throughput) του NRM SoC συναρτήσει του πλήθους των αντιδράσεων (m) και του μέσου όρου επηρεαζόμενων αντιδράσεων (D_{aver}). Συχνότητα λειτουργίας 200MHz.	17
Εικόνα 5: Πρώτο πείραμα επικύρωσης της αρχιτεκτονικής FRM SoC. Αποτελέσματα προσομοίωσης του βιομοντέλου LVS και σύγκριση αποτελεσμάτων με τον προσομοιωτή COPASI.	21
Εικόνα 6: Δεύτερο πείραμα επικύρωσης της αρχιτεκτονικής FRM SoC. Αποτελέσματα προσομοίωσης του βιομοντέλου EK και σύγκριση αποτελεσμάτων με τον προσομοιωτή COPASI.	22
Εικόνα 7: Τρίτο πείραμα επικύρωσης της αρχιτεκτονικής FRM SoC. Αποτελέσματα προσομοίωσης του βιομοντέλου ASYN και σύγκριση αποτελεσμάτων με τον προσομοιωτή COPASI.	23
Εικόνα 8: Τέταρτο πείραμα επικύρωσης της αρχιτεκτονικής FRM SoC. Αποτελέσματα προσομοίωσης των μοριακών ειδών A13_3, A13_15 και A14_14 του βιομοντέλου SIMD 15x15.	24
Εικόνα 9: Αποτελέσματα των πραγματικών επιδόσεων της αρχιτεκτονικής FRM1xN για $N=1, 8, 16$ και 32 (συχνότητα λειτουργίας 175MHz) χρησιμοποιώντας τα μοντέλα LCSE 2 ^{ης} και 3 ^{ης} τάξης για $m=2^{9..12}$.	28
Εικόνα 10: Σύγκριση των επιδόσεων της αρχιτεκτονικής FRM SoC (συχνότητα λειτουργίας 175MHz) με τις επιδόσεις του προσομοιωτή COPASI.	29
Εικόνα 11: Πρώτο πείραμα επικύρωσης της αρχιτεκτονικής NRM SoC. Αποτελέσματα προσομοίωσης του βιομοντέλου LVS και σύγκριση αποτελεσμάτων με τον προσομοιωτή COPASI.	31
Εικόνα 12: Δεύτερο πείραμα επικύρωσης της αρχιτεκτονικής NRM SoC. Αποτελέσματα προσομοίωσης του βιομοντέλου EK και σύγκριση αποτελεσμάτων με τον προσομοιωτή COPASI.	31
Εικόνα 13: Δεύτερο πείραμα επικύρωσης της αρχιτεκτονικής NRM SoC. Αποτελέσματα προσομοίωσης του βιομοντέλου EK και σύγκριση αποτελεσμάτων με τον προσομοιωτή COPASI.	32
Εικόνα 14: Τρίτο πείραμα επικύρωσης της αρχιτεκτονικής NRM SoC. Αποτελέσματα προσομοίωσης του βιομοντέλου ASYN και σύγκριση αποτελεσμάτων με τον προσομοιωτή COPASI.	32
Εικόνα 15: Τρίτο πείραμα επικύρωσης της αρχιτεκτονικής NRM SoC. Αποτελέσματα προσομοίωσης του βιομοντέλου ASYN και σύγκριση αποτελεσμάτων με τον προσομοιωτή COPASI.	33
Εικόνα 16: Τέταρτο πείραμα επικύρωσης της αρχιτεκτονικής NRM SoC. Αποτελέσματα προσομοίωσης των μοριακών ειδών A13_3, A13_15 και A14_14 του βιομοντέλου SIMD 15x15.	33
Εικόνα 17: Σύγκριση πειραματικών και αναμενόμενων επιδόσεων με το βιομοντέλο LCSE 2 ^{ης} τάξης για $m=2K$ και $D_{aver}=17, 33, 65, 94$.	37
Εικόνα 18: Επιδόσεις της αρχιτεκτονικής NRM SoC και σύγκριση των επιδόσεων με τον προσομοιωτή COPASI με μοντέλο LCSE 2 ^{ης} και 3 ^{ης} τάξης για σταθερό $m=2K$ και κλιμακούμενο D_{aver} .	37
Εικόνα 19: Σύγκριση αρχιτεκτονικών FRM1x32 SoC (συχνότητα λειτουργίας 175 MHz) και NRM1x1 SoC (συχνότητα λειτουργίας 160 MHz)	41
Εικόνα 20: Σύγκριση αρχιτεκτονικών FRM16x1 (συχνότητα λειτουργίας 220 MHz) και NRM16x1 (συχνότητα λειτουργίας 180 MHz) με το βιομοντέλο ASYN για $R=512, 1K, 2K, 4K, 8K$ και $16K$.	42





Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης

ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



ΕΣΠΑ
2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

ΠΙΝΑΚΑΣ ΠΙΝΑΚΩΝ

Πίνακας 1: Κύρια χαρακτηριστικά των αρχιτεκτονικών FRM-SoC και NRM-SoC.....	9
Πίνακας 2: Καθυστερήσεις λόγω διοχέτευσης της διόδου δεδομένων	15
Πίνακας 3: Πείραμα επικύρωσης λειτουργίας της αρχιτεκτονικής χρησιμοποιώντας το βιομοντέλο LVS.....	19
Πίνακας 4: Πείραμα επικύρωσης λειτουργίας της αρχιτεκτονικής χρησιμοποιώντας το βιομοντέλο EK.....	20
Πίνακας 5: Πείραμα επικύρωσης λειτουργίας της αρχιτεκτονικής χρησιμοποιώντας το βιομοντέλο ASYN	20
Πίνακας 6: Πείραμα επικύρωσης λειτουργίας της αρχιτεκτονικής χρησιμοποιώντας το βιομοντέλο SIDM	20
Πίνακας 7: Πειράματα αξιολόγησης των επιδόσεων της αρχιτεκτονικής FRM SoC με το μοντέλο LCSE	25
Πίνακας 8: Αξιολόγηση επιδόσεων της αρχιτεκτονικής FRM SoC και του προσομοιωτή COPASI με το μοντέλο LCSE512 2 ^{ης} τάξης.....	25
Πίνακας 9: Αξιολόγηση επιδόσεων της αρχιτεκτονικής FRM SoC και του προσομοιωτή COPASI με το μοντέλο LCSE1K 2 ^{ης} τάξης.....	25
Πίνακας 10: Αξιολόγηση επιδόσεων της αρχιτεκτονικής FRM SoC και του προσομοιωτή COPASI με το μοντέλο LCSE2K 2 ^{ης} τάξης.....	26
Πίνακας 11: Αξιολόγηση επιδόσεων της αρχιτεκτονικής FRM SoC και του προσομοιωτή COPASI με το μοντέλο LCSE4K 2 ^{ης} τάξης.....	26
Πίνακας 12: Αξιολόγηση επιδόσεων της αρχιτεκτονικής FRM SoC και του προσομοιωτή COPASI με το μοντέλο LCSE512 3 ^{ης} τάξης.....	26
Πίνακας 13: Αξιολόγηση επιδόσεων της αρχιτεκτονικής FRM SoC και του προσομοιωτή COPASI με το μοντέλο LCSE1K 3 ^{ης} τάξης.....	26
Πίνακας 14: Αξιολόγηση επιδόσεων της αρχιτεκτονικής FRM SoC και του προσομοιωτή COPASI με το μοντέλο LCSE2K 3 ^{ης} τάξης.....	26
Πίνακας 15: Αξιολόγηση επιδόσεων της αρχιτεκτονικής FRM SoC και του προσομοιωτή COPASI με το μοντέλο LCSE4K 3 ^{ης} τάξης.....	27
Πίνακας 17: Αξιολόγηση επιδόσεων της αρχιτεκτονικής NRM SoC και του προσομοιωτή COPASI με το μοντέλο LCSE 2 ^{ης} τάξης με σταθερό $m=2K$ για $D_{aver}=17, 33, 65$ και 94	35
Πίνακας 16: Αξιολόγηση των επιδόσεων της αρχιτεκτονικής NRM SoC με το μοντέλο LSCE.....	35
Πίνακας 18: Αξιολόγηση επιδόσεων της αρχιτεκτονικής NRM SoC και του προσομοιωτή COPASI με το μοντέλο LCSE 3 ^{ης} τάξης με σταθερό $m=2K$ για $D_{aver}=20, 36, 68$ και 97	35
Πίνακας 19: Αξιολόγηση επιδόσεων της αρχιτεκτονικής NRM SoC και του προσομοιωτή COPASI με το μοντέλο LCSE 2 ^{ης} τάξης με σταθερό $D_{aver}=33$ για $m=512, 1K, 2K$ και $4K$	35
Πίνακας 20: Αξιολόγηση επιδόσεων της αρχιτεκτονικής NRM SoC και του προσομοιωτή COPASI με το μοντέλο LCSE 3 ^{ης} τάξης με σταθερό $D_{aver}=36$ για $m=512, 1K, 2K$ και $4K$	36
Πίνακας 21: Αποτελέσματα από τη σύγκριση των επιδόσεων των αρχιτεκτονικών FRM1x32 () και NRM1x1 με το μοντέλο LCSE για $m=512, 1K, 2K$ και $4K$ και $D_{aver}=20, 36, 68$ και 97	40
Πίνακας 22: Σύγκριση υλοποιήσεων σε επίπεδο κατανάλωσης πόρων υλικού χρησιμοποιώντας το FPGA XC7K325T	43



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



ΕΣΠΑ
2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης

ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



ΕΣΠΑ
2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

1. ΕΙΣΑΓΩΓΗ

1.1 Περίληψη Αρχιτεκτονικών

Η ολοκλήρωση των Δράσεων 1.1 και 1.2 (βλ. Παραδοτέα 1.1 “Σχεδίαση αρχιτεκτονικής SoC για τον FRM-SSA” και 1.2 “Σχεδίαση αρχιτεκτονικής SoC για τον NRM-SSA”) οδήγησε στην ανάπτυξη δύο υπολογιστικών πόρων για την επιτάχυνση της εκτέλεσης των αλγορίθμων στοχαστικής προσομοίωσης βιομοριακών δικτύων FRM-SSA [1] και NRM-SSA [2]. Οι αρχιτεκτονικές FRM-SoC και NRM-SoC [3] αντίστοιχα κωδικοποιήθηκαν χρησιμοποιώντας τη γλώσσα περιγραφής υλικού VHDL και υλοποιούνται με τη χρήση κυκλωμάτων επαναδιατάξιμης λογικής (Field Programmable Gate Arrays - FPGA). Οι αρχιτεκτονικές αυτές έχουν μορφή “μαλακού πυρήνα” (soft IP core) και είναι ευέλικτες ως προς τα χαρακτηριστικά του βιολογικού δικτύου αλλά και ως προς την κατανάλωση των διαθέσιμων πόρων του εκάστοτε FPGA. Ο Πίνακας 1 συνοψίζει τα κύρια χαρακτηριστικά και των δύο αρχιτεκτονικών.

Πίνακας 1: Κύρια χαρακτηριστικά των αρχιτεκτονικών FRM-SoC και NRM-SoC

Ευελξία και Generic παράμετροι (m, n, C, N)	Οι αρχιτεκτονικές είναι παραμετρικές σε επίπεδο σύνθεσης ως προς τον αριθμό των αντιδράσεων (m), ο ως προς τον αριθμό των μοριακών ειδών (n), ως προς τον αριθμό των πυρήνων (C) και ως προς τον αριθμό των επεξεργαστικών μονάδων (Processing Units - PUs) ανά πυρήνα (N)
Τρόποι λειτουργίας (SSIP, MSIP, HSIP)	Η αρχιτεκτονική FRM-SoC υποστηρίζει τον τρόπο λειτουργίας SSIP (Single Simulation In Parallel) κατά τον οποίο οι διαθέσιμες μονάδες επεξεργασίας (Processing Units - PUs) χρησιμοποιούνται για την παράλληλη εκτέλεση του αλγορίθμου FRM-SSA. Και οι δύο αρχιτεκτονικές υποστηρίζουν τον τρόπο λειτουργίας MSIP (Multiple Simulation In Parallel) κατά τον οποίο κάθε πυρήνας διαθέτει μόνο μια PU έτσι ώστε ο κάθε πυρήνας να μπορεί να εκτελέσει διαφορετική προσομοίωση.
Δυναμικός προγραμματισμός συστήματος	Οι αρχιτεκτονικές είναι σχεδιασμένες με τέτοιο τρόπο ώστε να δέχονται δυναμικά τα δεδομένα μιας προσομοίωσης χωρίς να απαιτείται η χρονοβόρα διαδικασία της σύνθεσης.
Αντιδράσεις έως τρίτης τάξης	Και οι δύο αρχιτεκτονικές υποστηρίζουν βιοχημικές αντιδράσεις έως τρίτης τάξης λαμβάνοντας υπόψη όλες τις πιθανές στοιχειομετρίες.
Πολύπλοκα δίκτυα χιλιάδων αντιδράσεων	Χρησιμοποιώντας ένα μεσαίου μεγέθους FPGA το σύστημα μπορεί να υποστηρίξει έως 4K κανάλια αντιδράσεων και μοριακούς πληθυσμούς
Κλιμάκωση και υψηλές επιδόσεις	Και οι δύο αρχιτεκτονικές κλιμακώνονται αποδοτικά σύμφωνα με τις απαιτήσεις του προβλήματος ώστε να επεξεργάζονται δεκάτομμυρια κανάλια αντιδράσεων το δευτερόλεπτο επιτυγχάνοντας έτσι την εκτέλεση εκατομμυρίων βημάτων προσομοίωσης το δευτερόλεπτο.

1.2 Διάρθρωση Παραδοτέου

Για την επικύρωση των αρχιτεκτονικών FRM-SoC και NRM-SoC σχεδιάσαμε μια σειρά πειραμάτων που στόχο είχαν την επαλήθευση της ορθής λειτουργίας αλλά και την διερεύνηση των επιδόσεων που επιτυγχάνονται από αυτές. Για την επικύρωση της λειτουργίας των αρχιτεκτονικών χρησιμοποιήσαμε πραγματικά βιομοντέλα που

έχουν γνωστή συμπεριφορά ενώ για την διασταύρωση των αποτελεσμάτων χρησιμοποιήσαμε δημοφιλή προγράμματα προσομοίωσης μοριακών δικτύων. Για την επικύρωση των επιδόσεων και την κλιμάκωση τους δημιουργήσαμε δύο συνθετικά βιομοντέλα (benchmark biomodels) των οποίων ο αριθμός των μοριακών ειδών, ο αριθμός των αντιδράσεων τους αλλά και εξαρτήσεις μεταξύ αυτών καθορίζεται με ελεγχόμενο τρόπο.

Το υπόλοιπο του παραδοτέου οργανώνεται ως εξής:

Στην Ενότητα 2 παρουσιάζονται αναλυτικά τα δύο συνθετικά βιομοντέλα που δημιουργήσαμε για την επικύρωση των επιδόσεων.

Στην Ενότητα 3 παρουσιάζεται η θεωρητική ανάλυση επιδόσεων των δύο αρχιτεκτονικών SoCs.

Στις Ενότητες 4 και 5 παρουσιάζονται τα αποτελέσματα της επικύρωσης της λειτουργίας και των επιδόσεων της κάθε αρχιτεκτονικής SoC.

Στην Ενότητα 6 ακολουθεί η σύγκριση των δύο αρχιτεκτονικών SoCs τόσο σε επίπεδο επιδόσεων όσο και σε επίπεδο κατανάλωσης πόρων υλικού.

Στην 7^η και τελευταία ενότητα συνοψίζουμε τα αποτελέσματα και παραθέτουμε τα τελικά συμπεράσματα μας.

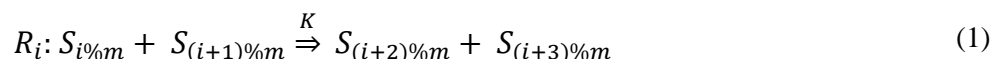
2. Benchmark Biomodels

Για την επικύρωση των επιδόσεων δημιουργήσαμε δύο συνθετικά μοντέλα (benchmark biomodels). Το πρώτο συνθετικό μοντέλο ονομάζεται Linear Chain System - LCS. Το μοντέλο αυτό αποτελείται από m αντιδράσεις οι οποίες ενεργοποιούνται αλυσιδωτά η μια μετά την άλλη έχοντας τον ίδιο ρυθμό αντίδρασης K . Το πλήθος (m) και η τάξη των αντιδράσεων καθορίζεται από τον χρήστη σύμφωνα με τις ανάγκες του. Παρότι το LCS μοντέλο δεν μοντελοποιεί κανένα βιολογικό φαινόμενο είναι ιδανικό για την αξιολόγηση των επιδόσεων ενός συστήματος λόγω του ελεγχόμενου πλήθους αντιδράσεων που μπορεί εύκολα να κλιμακωθεί. Για το λόγο αυτό το χρησιμοποιήσαμε για την επικύρωση των επιδόσεων της αρχιτεκτονικής FRM-SoC. Ωστόσο οι επιδόσεις της αρχιτεκτονικής NRM-SoC δε μπορούν να διερευνηθούν με το μοντέλο LCS καθώς η εκτέλεση του αλγορίθμου NRM-SSA δεν επηρεάζεται από τον αριθμό των αντιδράσεων ενός μοντέλου (m) αλλά από τον μέσο αριθμό των επηρεαζόμενων αντιδράσεων από κάθε αντίδραση (D_{aver}). Για το λόγο αυτό δημιουργήσαμε ένα δεύτερο συνθετικό μοντέλο το οποίο επεκτείνει το LCS έτσι ώστε να είναι ελεγχόμενος και ο αριθμός των επηρεαζόμενων αντιδράσεων. Το μοντέλο αυτό ονομάζεται Linear Chain System Enzymatic - LCSE. Στις δύο επόμενες ενότητες παρουσιάζονται αναλυτικά οι ιδιότητες των μοντέλων LCS και LCSE.

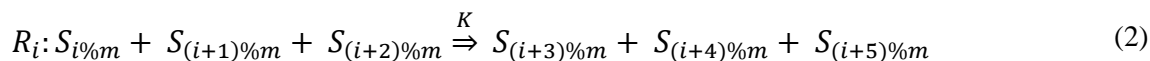
2.1 Linear Chain System - LCS

Όπως προαναφέρθηκε, οι αντιδράσεις του μοντέλου LCS ενεργοποιούνται αλυσιδωτά η μια μετά την άλλη. Για την καλύτερη κατανόηση της δομής του μοντέλου δίνονται οι σχέσεις (1) και (2) οι οποίες περιγράφουν το LCS δευτέρας και τρίτης τάξης αντίστοιχα.

- **LCS δευτέρας τάξης:**



- **LCS τρίτης τάξης:**



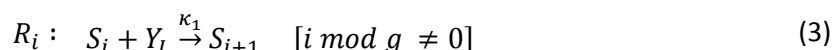
όπου $i=1, \dots, m$

Χρησιμοποιώντας τις σχέσεις (1) και (2) μπορούμε να κατασκευάσουμε μοντέλα δευτέρας και τρίτης τάξης με οποιοδήποτε αριθμό αντιδράσεων m επιθυμούμε.

2.2 Linear Chain System Enzymatic – LCSE

Δεδομένου ότι το μοντέλο LCS κλιμακώνεται ως προς το πλήθος των αντιδράσεων (m) και όχι ως προς το μέσο πλήθος των επηρεαζόμενων αντιδράσεων (D_{aver}), δημιουργήσαμε ένα καινούργιο μοντέλο για το οποίο ο χρήστης μπορεί να ορίζει το πλήθος των επηρεαζόμενων αντιδράσεων. Για να το πετύχουμε αυτό δημιουργούμε σύνολα αντιδράσεων στα οποία συμμετέχει ένα κοινό μοριακό είδος, που ενδεικτικά ονομάζουμε «Υπόστρωμα» (Y). Στη συνέχεια ακολουθεί η γενική φόρμουλα που περιγράφει το μοντέλο LCSE, δευτέρας και τρίτης τάξης αντίστοιχα:

- **LCSE δευτέρας τάξης**



$$R_i : S_i + Y_L \xrightarrow{\kappa_1} S_{i+1-g} \quad [i \bmod g = 0] \quad (4)$$

$$R_i' : S_{i+1} \xrightarrow{\kappa_2} S_i + Y_L \quad [i \bmod g \neq 0] \quad (5)$$

$$R_i' : S_{i+1-g} \xrightarrow{\kappa_2} S_i + Y_L \quad [i \bmod g = 0] \quad (6)$$

$$L = \lfloor \frac{i-1}{g} \rfloor + (\frac{m}{2} + 1) \quad (7)$$

- **LCSE τρίτης τάξης**

$$R_i : S_i + S_{i+1} + Y_L \xrightarrow{\kappa_1} S_{i+2} + S_{i+3} \quad [i \bmod g \neq 0] \quad (8)$$

$$R_i : S_i + S_{i+1-g} + Y_L \xrightarrow{\kappa_1} S_{i+2-g} + S_{i+3-g} \quad [i \bmod g = 0] \quad (9)$$

$$R_i' : S_{i+2} + S_{i+3} \xrightarrow{\kappa_2} S_i + S_{i+1} + Y_L \quad [i \bmod g \neq 0] \quad (10)$$

$$R_i' : S_i + S_{i+1-g} \xrightarrow{\kappa_2} S_i + S_{i+1-g} + Y_L \quad [i \bmod g = 0] \quad (11)$$

$$L = \lfloor \frac{i-1}{g} \rfloor + (\frac{m}{2} + 1) \quad (12)$$

όπου $i = 1, 2, \dots, m/2$, με συνολικά $m/2$ αντιστρέψιμες αντιδράσεις, οι οποίες μέσω των σχέσεων (3) - (6), για 2^{ης} τάξης μοντέλα, και μέσω των σχέσεων (8) – (11), για 3^{ης} τάξης μοντέλα, μπορούν να αναλυθούν σε m μη αντιστρέψιμες αντιδράσεις. Για να διατηρηθεί η δυναμική του συστήματος που περιγράφει το μοντέλο ορίζουμε k_1 και k_2 τους συντελεστές των αντιδράσεων για τους οποίους πρέπει να ισχύει $k_1 \ll k_2$. Η παράμετρος g ορίζει το πλήθος των αντιδράσεων στις οποίες συμμετέχει το ίδιο “υπόστρωμα” (Y), και προκειμένου το μοντέλο να έχει ομαλή συμπεριφορά, θα πρέπει το πλήθος των αντιδράσεων m να είναι ακέραιο πολλαπλάσιο της παραμέτρους g . Επομένως, αν ορίσουμε c είναι το πλήθος των ομάδων των αντιστρέψιμων αντιδράσεων με το ίδιο “υπόστρωμα” (Y) και συνεπώς το πλήθος των μοριακών ειδών Y , τότε ισχύει ότι $m/2 = c * g \Rightarrow c = m/(2 * g)$.

Με βάση την παραπάνω ανάλυση, ορίζουμε τις παρακάτω σχέσεις, για το συνολικό πλήθος των μοριακών ειδών (n) του μοντέλου και το μέσο όρο των επηρεαζόμενων αντιδράσεων (D_{aver}) αντίστοιχα:

- **Πλήθος μοριακών ειδών:**

$$n = \frac{m}{2} + c \Rightarrow n = \frac{m * (g + 1)}{2 * g} \quad (13)$$

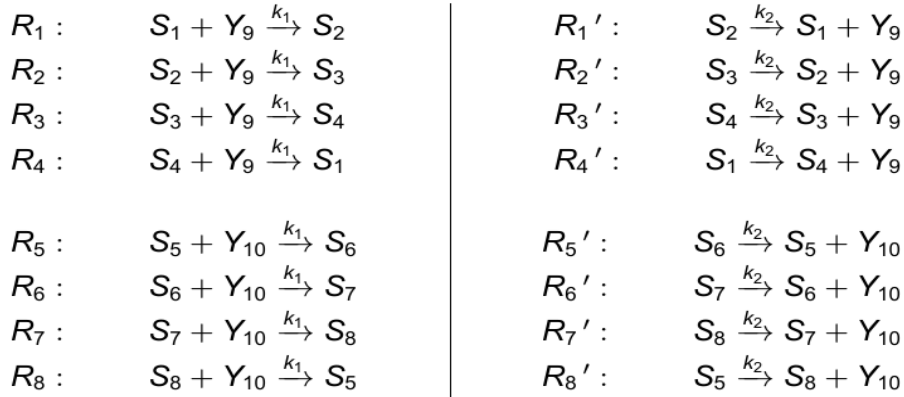
- **LCSE δευτέρας τάξης:**

$$D_{aver} = g + 1 \quad (14)$$

- **LCSE τρίτης τάξης:**

$$D_{aver} = g + 4 \quad (15)$$

Ακολουθεί ένα ενδεικτικό παράδειγμα του μοντέλου LCSE 2^{ης} τάξης για $m = 16$ αντιδράσεις και $g = 4$. Με βάση τις σχέσεις (13) και (14) προκύπτουν συνολικά $n = 16 * (4 + 1) / 2 * 4 = 80 / 8 = 10$ μοριακά είδη και μέσος όρος επηρεαζόμενων αντιδράσεων $D_{aver} = 4 + 1 = 5$ αντιδράσεις.



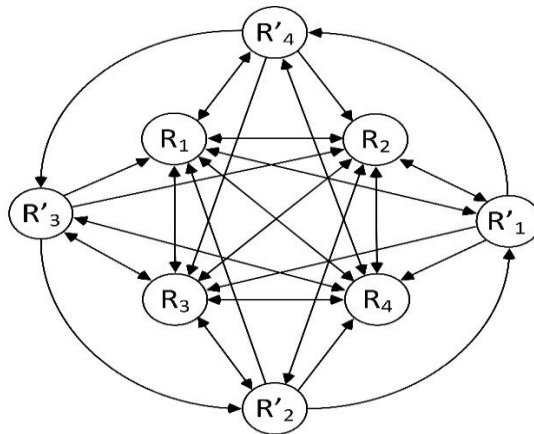
Στη συνέχεια, παρουσιάζουμε ενδεικτικά τις επηρεαζόμενες αντιδράσεις των αντιδράσεων R_1, R_1', R_5 και R_5' ενώ η Εικόνα 1 απεικονίζει ένα κομμάτι του γράφου εξαρτήσεων του μοντέλου LCSE και συγκεκριμένα περιγράφει τις εξαρτήσεις των πρώτων 8 αντιδράσεων του παρακάτω παραδείγματος για D_{aver} :

$$R_1 : R_2, R_3, R_4, R_1', R_4'$$

$$R_1' : R_1, R_2, R_3, R_4, R_4'$$

$$R_5 : R_6, R_7, R_8, R_5', R_8'$$

$$R_5' : R_5, R_6, R_7, R_8, R_8'$$



Εικόνα 1: Ο γράφος εξαρτήσεων (Dependencies Graph) του μοντέλου LCSE για τις πρώτες 8 αντιδράσεις με $D_{aver}=5$.

3. Θεωρητική Ανάλυση Επιδόσεων

Στην ενότητα που ακολουθεί θα παρουσιαστούν τα αποτελέσματα της θεωρητικής ανάλυσης σχετικά με την αναμενόμενη απόδοση των αρχιτεκτονικών FRM-SoC και NRM-SoC. Η απόδοση και των δύο αρχιτεκτονικών χαρακτηρίζεται από τα πόσα στοχαστικά βήματα προσομοίωσης μπορούν να εκτελέσουν σε ένα δευτερόλεπτο. Στα Παραδοτέα 1.1 και 1.2 ορίσαμε ένα στοχαστικό βήμα προσομοίωσης ως ένα κύκλο αντιδράσεων (Reaction Cycle - RC) κατά το οποίο εξετάζονται όλες οι αντιδράσεις ενός βιομοντέλου προκειμένου να υπολογιστεί η επόμενη κατάσταση του συστήματος. Ο αριθμός των κύκλων αντιδράσεων ανά δευτερόλεπτο καθορίζει τη διεκπαιρευτική ικανότητα του συστήματος (throughput) και υπολογίζεται από την παρακάτω σχέση (16):

$$T = \frac{1}{L_{RC} \cdot t_{cycle} \text{ (sec)} \cdot 10^6} \text{ (MRC/sec)} \quad (16)$$

Μέσω της σχέσης (16) μπορούμε να υπολογίσουμε το πόσα εκατομμύρια κύκλοι αντιδράσεων (Mega Reaction Cycles – MRC / sec) μπορούν να εκτελεστούν σε ένα δευτερόλεπτο από κάθε αρχιτεκτονική. Η διεκπαιρευτική ικανότητα του συστήματος εξαρτάται από δύο μεγέθη, τους κύκλους ρολογιού που μεσολαβούν για την ολοκλήρωση ενός κύκλου αντιδράσεων (Reaction Cycle Latency - L_{RC}) και από τη περίοδο του ρολογιού που χρησιμοποιείται για το χρονισμό των συστημάτων. Χρησιμοποιώντας μια εφικτή περίοδο ρολογιού μπορούμε να διερευνήσουμε την απόδοση του συστήματος βάση της τιμής του L_{RC} . Η τιμή του L_{RC} διαφοροποιείται στις δύο αρχιτεκτονικές. Στις δύο επόμενες ενότητες ακολουθεί η ανάλυση του L_{RC} για κάθε αρχιτεκτονική ξεχωριστά ενώ θα συζητηθεί και το πώς επηρεάζεται η απόδοση των συστημάτων από τον αριθμό των αντιδράσεων και των επεξεργαστικών μονάδων.

3.1 FRM-SoC Επιδόσεις

Η τιμή του L_{RC} καθορίζεται από το μονοπάτι εκείνο το οποίο έχει τη μεγαλύτερη καθυστέρηση σε κύκλους ρολογιού κατά τη διάρκεια ενός RC. Για την FRM-SoC αρχιτεκτονική η τιμή του L_{RC} υπολογίζεται από τη σχέση (17):

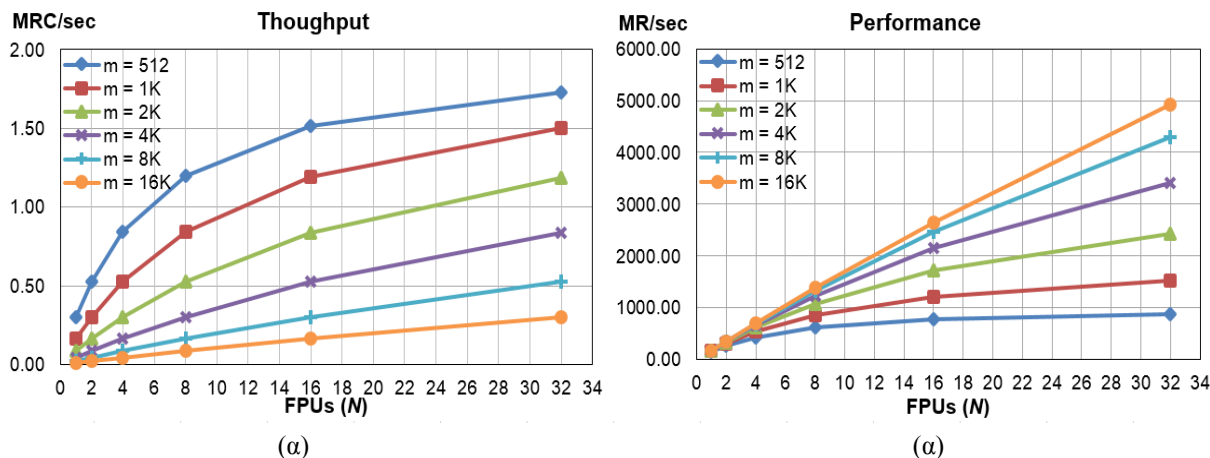
$$L_{RC} = \frac{m}{N} + \text{Log}_2(N) + K \quad (\text{cc}) \quad (17)$$

όπου $K = 83$ κύκλοι.

Ο πρώτος όρος της σχέσης (m/N) προκύπτει από την παραλληλοποίηση του αλγορίθμου FRM-SSA. Πιο συγκεκριμένα, στην FRM-SoC αρχιτεκτονική (βλ. Παραδοτέο 1.1 “Σχεδίαση αρχιτεκτονικής SoC για τον FRM-SSA”) το αρχικό σύνολο m αντιδράσεων ενός βιομοντέλου κατανέμεται στις N διαθέσιμες επεξεργαστικές μονάδες προκειμένου να επιτευχθεί η παράλληλη επεξεργασία τους. Ο δεύτερος όρος οφείλεται από την καθυστέρηση της μονάδα COMP TREE. Η μονάδα αυτή δέχεται τους χρόνους t_j που υπολόγισε η κάθε επεξεργαστική μονάδα ξεχωριστά και χρησιμοποιώντας ένα δέντρο συγκριτών εντοπίζει τον συνολικά μικρότερο χρόνο ενεργοποίησης t_j . Συνεπώς ο όρος $\text{Log}_2(N)$ προκύπτει από την καθυστέρηση λόγω διασωλήνωσης των επιπέδων του δέντρου συγκριτών. Η τελευταίος όρος της σχέσης (17) είναι μια σταθερά τιμή (K) και προκύπτει από την άθροιση όλων των σταθερών καθυστερήσεων των μονάδων που χρησιμοποιούνται κατά τη διάρκεια εκτέλεσης ενός κύκλου αντιδράσεων. Θα πρέπει να αναφερθεί η αρχιτεκτονική της FRM επεξεργαστικής

Πίνακας 2: Καθυστερήσεις λόγω διοχέτευσης της διόδου δεδομένων

Level/Unit	FPU Datapath		FMU	FRM CORE	
Dataflow	Data Fetch	Lower Branch	CMP TREE	Species/Time Update	Others
Latency (cc)	5	$47+(m/N)$	$\log_2(N)$	25	6



Εικόνα 2: Θεωρητικά αναμενόμενη διεκπαιρωτική ικανότητα (α) και επίδοση (β) του συστήματος FRM SoC ως συνάρτηση του πλήθους αντιδράσεων του βιομοντέλου (m) και του αριθμού των PEs (N). Συχνότητα λειτουργίας 175 MHz.

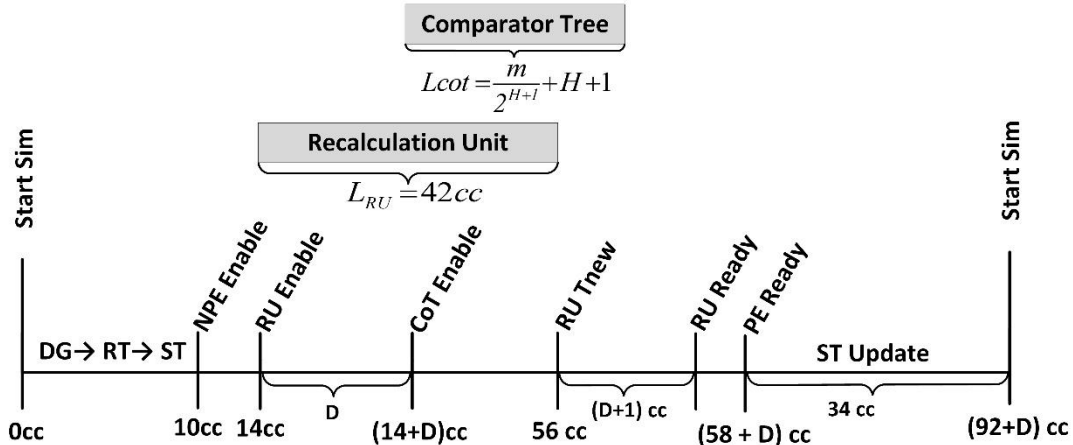
μονάδας αποτελείται από δύο μονοπάτια δεδομένων. Όπως είναι αναμενόμενο, στη σταθερά K συμπεριλαμβάνεται μόνο το πιο αργό μονοπάτι δεδομένων το περιέχει τον υπολογισμό των τάσεων (propensity) της κάθε αντίδρασης. Ο Πίνακας 2 δείχνει τις καθυστερήσεις της διόδου δεδομένων κατά τη διάρκεια ενός κύκλου δεδομένων. Οι καθυστερήσεις αυτές εξηγούνται αναλυτικά στο Παραδοτέο 1.1 “Σχεδίαση αρχιτεκτονικής SoC για τον FRM-SSA”. Επίσης από τις σταθερές καθυστερήσεις του 2 προκύπτει και η τιμή της σταθεράς K η οποία ισούται με 83 κύκλους ρολογιού.

Στην αρχιτεκτονική FRM-SoC μπορούμε πέρα από την διεκπαιρωτική ικανότητα (throughput) να αξιολογήσουμε και την επίδοση της (Performance) υπολογίζοντας τον συνολικό αριθμό αντιδράσεων που μπορεί να επεξεργαστεί σε ένα δευτερόλεπτο. Η απόδοση της αρχιτεκτονικής FRM-SoC προκύπτει από τη σχέση (18):

$$P = T \cdot m \quad (MR/sec) \quad (18)$$

Η παραπάνω σχέση προκύπτει από το γινόμενο της διεκπαιρωτικής ικανότητας με το συνολικό πλήθος αντιδράσεων (m) ενός βιομοντέλου και το αποτέλεσμα της μας δείχνει το πόσα εκατομμύρια αντιδράσεις το δευτερόλεπτο (Mega Reactions – MR/sec) μπορεί να επεξεργαστεί η αρχιτεκτονική FRM-SoC, ανεξαρτήτως του μοντέλου που εκτελεί.

Θεωρώντας τη συχνότητα λειτουργίας των 175 MHz, η οποία σύμφωνα με τα στατιστικά υλοποίησης είναι μια εφικτή συχνότητα, προχωρήσαμε στην θεωρητική ανάλυση της αναμενόμενης απόδοσης του συστήματος χρησιμοποιώντας τις σχέσεις (16) και (18). Τα αποτελέσματα της ανάλυσης αυτής συνοψίζονται στην Εικόνα 2.



Εικόνα 3: Η ανάλυση της καθυστέρησης λόγω διοχέτευσης του πυρήνα NRM.

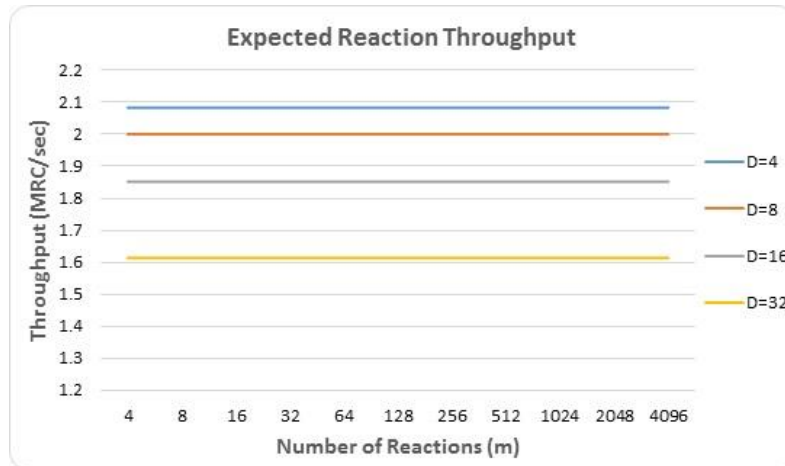
Στην Εικόνα 2 δίνονται δύο διαγράμματα που δείχνουν την αναμενόμενη διεκπεραιωτική ικανότητα (throughput) και απόδοση (performance) της FRM-SoC αρχιτεκτονικής καθώς ο αριθμός των επεξεργαστικών μονάδων ($N=2^{1..5}$) κλιμακώνεται παράλληλα με τον αριθμό των αντιδράσεων ($m=2^{9..14}$).

Ο οριζόντιος άξονας και στα δύο διαγράμματα αντιπροσωπεύει την κλιμάκωση των επεξεργαστικών μονάδων της αρχιτεκτονικής. Ο κάθετος άξονας στο αριστερό διάγραμμα (α) αντιπροσωπεύει τη διεκπεραιωτική ικανότητα (throughput) της αρχιτεκτονικής ενώ στο δεξιό διάγραμμα (β) αντιπροσωπεύει την επίδοση της (performance).

Από τα διαγράμματα αυτά παρατηρούμε ότι η επίδοση του συστήματος, για N έως 32, τείνει να αυξάνεται γραμμικά όσο το μέγεθος του βιομοντέλου μεγαλώνει. Η γραμμική αύξηση της επίδοσης, καθώς οι αντιδράσεις του βιομοντέλου αυξάνουν, δείχνει την άκρως αποδοτική αξιοποίηση των διαθέσιμων πόρων.

3.2 NRM-SoC Επιδόσεις

Όπως υποδεικνύει η Εικόνα 3, ένας κύκλος αντιδράσεων ξεκινάει με την ενεργοποίηση του σήματος *start_sim* και ολοκληρώνεται με την εκκίνηση του επόμενου κύκλου αντίδρασης. Η ροή των δεδομένων ξεκινάει από τον γράφο εξαρτήσεων (DG), από όπου εξάγονται οι διευθύνσεις των επηρεαζόμενων αντιδράσεων, στη συνέχεια καταλήγουν στον πίνακα των αντιδράσεων (RT) και στον πίνακα των μοριακών ειδών (ST) από όπου εξάγονται όλα τα δεδομένα που συμμετέχουν στον επαναυπολογισμό του χρόνου ενεργοποίησης της εκάστοτε επηρεαζόμενης αντίδρασης. Στη συνέχεια, ενεργοποιείται η κεντρική επεξεργαστική μονάδα του πυρήνα (NPE) (βλ. Παραδοτέο 1.2 “Σχεδίαση αρχιτεκτονικής SoC για τον NRM-SSA”, Κεφ. 6), η οποία εκτελεί όλες τις αριθμητικές και λογικές πράξεις που χρειάζονται ώστε να προκύψει η επόμενη νικητήρια αντίδραση. Όπως φαίνεται στο διάγραμμα της Εικόνας 3, αρχικά ενεργοποιείται η μονάδα RU προκειμένου να διαβαστούν και να στιγματιστούν οι D χρόνοι των αντιδράσεων από τον πίνακα **T**. Αφού αποδεσμευτεί ο πίνακας **T**, ενεργοποιείται το δέντρο συγκριτών CoT ώστε να βρεθεί η αντίδραση με το μικρότερο χρόνο τ_j του πίνακα **T**. Το ύψος του δέντρου καθορίζεται αποκλειστικά από το πλήθος των αντιδράσεων (m) ώστε να ισχύει $L_{cot} < L_{RU}$. Κατά αυτό τον τρόπο, το CoT ολοκληρώνει τις συγκρίσεις πριν η RU ολοκληρώσει τις αριθμητικές πράξεις, αποφεύγοντας έτσι την επιπλέον καθυστέρηση που απαιτείται για τον καθορισμό της αντίδρασης με τον μικρότερο χρόνο ενεργοποίησης του πίνακα **T**. Συνεπώς, ορίζουμε την καθυστέρηση (latency) της μονάδας NPE ως $L_{NPE} = \max\{L_{RU}, L_{CoT}\} + D + 1 + 6 = L_{RU} + D + 7 = 42 + 7 + D = 49 + D(cc)$. Άρα, $L_{NPE} = 49 + D(cc)$.



Εικόνα 4: Θεωρητικά αναμενόμενη διεκπεραιωτική ικανότητα (Reaction Throughput) του NRM SoC συναρτήσει του πλήθους των αντιδράσεων (m) και του μέσου όρου επηρεαζόμενων αντιδράσεων (D_{aver}). Συχνότητα λειτουργίας 200MHz.

Όταν η μονάδα NPE υπολογίσει την επόμενη νικητήρια αντίδραση, τότε ο πυρήνας NRM μεταβαίνει στην κατάσταση ανανέωσης των πληθυσμών των μοριακών ειδών με βάση την στοιχειομετρία που ορίζει η νικητήρια αντίδραση. Για τον λόγο αυτό απαιτούνται επιπλέον 34 κύκλοι ρολογιού μέχρις ότου το σύστημα να είναι έτοιμο να ξεκινήσει τον επόμενο κύκλο αντίδρασης. Εν κατακλείδι, ένας κύκλος αντίδρασης απαιτεί συνολικά L_{RC} κύκλους ρολογιού (cc) προκειμένου να καθοριστεί η επόμενη νικητήρια αντίδραση και το σύστημα να μεταβεί στην επόμενη κατάσταση. Στο σημείο αυτό πρέπει να τονίσουμε το γεγονός ότι ο τελικός απαιτούμενος χρόνος ενός κύκλου αντιδράσεων είναι ανεξάρτητος από το μέγεθος του μοντέλου (m) και καθορίζεται από το πλήθος των επηρεαζόμενων αντιδράσεων (D).

Έχοντας αναλύσει την καθυστέρηση της κάθε μονάδας αλλά και τον συνολικό χρόνο καθυστέρησης ενός κύκλου αντιδράσεων, είμαστε πλέον σε θέση να εκτιμήσουμε την συνολική απόδοση του NRM Core. Δεδομένου ότι η μετάβαση του συστήματος από τη μια κατάσταση στην επόμενη εξαρτάται από την χρονική καθυστέρηση L_{RC} , χρησιμοποιούμε αυτό το μέγεθος για τη θεωρητική μελέτη της διεκπεραιωτικής ικανότητας (Reaction Throughput) του NRM Core.

Για την εκτίμηση του MRC/sec θα πρέπει πρώτα να έχουν καθοριστεί τόσο το μέγεθος L_{RC} όσο και η συχνότητα λειτουργίας του συστήματος. Ο μαθηματικός τύπος (20) δίνει το τελικό Reaction Throughput ενός πυρήνα του συστήματος σε MRC/sec, αποδεικνύονται ότι εξαρτάται άμεσα από το μέσο πλήθος των επηρεαζόμενων αντιδράσεων (D_{aver}) των RCs ενός βιομοντέλου και όχι από το συνολικό πλήθος των αντιδράσεων (m):

$$L_{RC} = 92 + D \text{ (cc)} \quad (19)$$

$$T = \frac{1}{(92 + D) \cdot t_{cycle} \text{ (sec)} \cdot 10^6} \text{ (MRC/sec)} \quad (20)$$

Όπως παρατηρούμε από το διάγραμμα της Εικόνας 4, με συχνότητα λειτουργίας τα 200MHz ($t_{cycle} = 5ns$), η διεκπεραιωτική ικανότητα (Reaction Throughput) του NRM Core δεν επηρεάζεται από το πλήθος των αντιδράσεων (m) αλλά μόνο από το μέσο όρο των επηρεαζόμενων αντιδράσεων D_{aver} του εκάστοτε μοντέλου.

Κατά αυτό τον τρόπο επιβεβαιώνεται η χρησιμότητα του NRM έναντι του FRM για βιομοντέλα με $D_{aver} \ll m$. Ωστόσο, είναι κατανοητό ότι όσο αυξάνεται το D_{aver} ομοίως αυξάνεται το μέγεθος L_{RC} και συνεπώς μειώνεται η διεκπεραιωτική ικανότητα του συστήματος.



4. Επικύρωση FRM-SoC

Στην ενότητα που ακολουθεί αρχικά παρουσιάζονται τα αποτελέσματα που σχετίζονται με την επικύρωση της λειτουργίας της αρχιτεκτονικής FRM SoC. Έπειτα παρουσιάζονται τα αποτελέσματα της αξιολόγησης των επιδόσεων της. Για την εκτέλεση όλων των πειραμάτων αξιολόγησης χρησιμοποιήσαμε την αναπτυξιακή κάρτα KC705 της εταιρίας Xilinx [4] η οποία φέρει το FPGA XC7K325T της οικογένειας Kintex 7 επίσης της ίδιας εταιρείας.

4.1 Επικύρωση λειτουργίας

Για την επικύρωση της λειτουργίας της αρχιτεκτονικής διεξάγαμε πειράματα με διαφορετικά βιομοντέλα και στη συνέχεια επαναλάβαμε τα ίδια πειράματα χρησιμοποιώντας τον δημοφιλή προσομοιωτή βιοχημικών αντιδράσεων COPASI [5] προκειμένου να επαληθεύσουμε την “ορθότητα” των αποτελεσμάτων. Για κάθε πείραμα εκτελέσαμε 16K στοχαστικές επαναλήψεις ώστε να προσεγγίσουμε στατιστικά με όσο το δυνατόν μεγαλύτερη ακρίβεια τη δυναμική συμπεριφορά των διαφορετικών βιομοντέλων. Για την εκτέλεση των πειραμάτων χρησιμοποιήσαμε τον τρόπο λειτουργίας MSIP προκειμένου να παραλληλοποιήσουμε την εκτέλεση των 16K επαναλήψεων. Πιο συγκεκριμένα, χρησιμοποιήσαμε 16 FRM πυρήνες όπου κάθε πυρήνας ήταν υπεύθυνος για την εκτέλεση 1K στοχαστικών επαναλήψεων ενώ στη διάθεση του είχε μόνο μια επεξεργαστική μονάδα, οδηγώντας στο αρχιτεκτονικό σχήμα FRM16x1 SoC (βλ. Παραδοτέο 1.1 “Σχεδίαση αρχιτεκτονικής SoC για τον FRM-SSA”, $C = 16$ πυρήνες, $N = 1$ επεξεργαστική μονάδα). Το σχήμα αυτό δύναται να λειτουργήσει στη συχνότητα των 220 MHz.

4.1.1 Ορισμός Πειραμάτων

Στη συνέχεια ακολουθούν τέσσερις πίνακες στους οποίους περιγράφονται οι παράμετροι των προσομοιώσεων αλλά και τα βιομοντέλα που χρησιμοποιήθηκαν σε κάθε περίπτωση. Στο πρώτο πείραμα επικύρωσης χρησιμοποιήσαμε ένα βιομοντέλο τύπου θηρευτή/θηράματος (**Lotka Voltera System – LVS** [6]) με τις παραμέτρους που δίνονται στον Πίνακα 3. Το απλό αυτό μοντέλο αποτελείται από $m = 3$ αντιδράσεις και $n = 2$ μοριακά είδη ενώ εκτελέστηκε για $R = 16K$ επαναλήψεις με διάρκεια επανάληψης $T_{sim} = 60$ δευτερόλεπτα.

Πίνακας 3: Πείραμα επικύρωσης λειτουργίας της αρχιτεκτονικής χρησιμοποιώντας το βιομοντέλο LVS

Παράμετροι	$T_{sim} = 60s, T_{sam} = 1s, R = 16K, MIS^1 = 10^6$ steps
Μοντέλο	Lotka-Voltera - LVS
Αρχικοί Πληθυσμοί	Prey = 100, Predator = 100
Αντιδράσεις	$R_1: \text{Prey} \rightarrow 2\text{Prey}, R_2: \text{Prey} + \text{Predator} \rightarrow 2\text{Predator},$ $R_3: \text{Predator} \rightarrow \emptyset$
Σταθερές	$K_1 = 0.5, K_2 = 0.0025, K_3 = 0.3$

Στο δεύτερο πείραμα που εκτελέσαμε χρησιμοποιήσαμε ένα βιομοντέλο που μοντελοποιεί την κινητική ενζυμικών αντιδράσεων (**Enzyme Kinetics – EK** [7]) με τις παραμέτρους που δίνονται στον Πίνακα 4. Το

¹ Μέγιστος επιτρεπόμενος αριθμός εσωτερικών βημάτων ανάμεσα σε δύο περιόδους δειγματοληψίας (Max Internal Steps - MIS). βλ. Παραδοτέο 1.1 “Σχεδίαση αρχιτεκτονικής SoC για τον FRM-SSA”, Κεφ. 3.3.

Πίνακας 4: Πείραμα επικύρωσης λειτουργίας της αρχιτεκτονικής χρησιμοποιώντας το βιομοντέλο EK

Παράμετροι	$T_{sim} = 80s, T_{sam} = 10s, R = 1M, MIS = 10^6$ steps
Μοντέλο	Enzyme Kinetics - EK
Αρχικοί Πληθυσμοί	$E = 120, S = 300, ES = 0, P = 0$
Αντιδράσεις	$R_1: E + S \rightarrow ES, R_2: ES \rightarrow E + S, R_3: ES \rightarrow E + P$
Σταθερές	$K_1 = 0.01, K_2 = 0.1, K_3 = 1$

βιομοντέλο EK αποτελείται από $m = 3$ αντιδράσεις και $n = 4$ μοριακά είδη ενώ το πείραμα εκτελέστηκε για $R = 16K$ στοχαστικές επαναλήψεις με διάρκεια επανάληψης $T_{sim} = 80$ δευτερόλεπτα. Μετά το χρονικό διάστημα των ογδόντα δευτερολέπτων η δυναμική συμπεριφορά του συστήματος σταθεροποιείται λόγω του μηδενισμού των μοριακών πληθυσμών των ειδών S και ES .

Στο τρίτο πείραμα χρησιμοποιήσαμε το βιομοντέλο **Alpha-Synuclein – ASYN** [8] με τις παραμέτρους που δίνονται στον Πίνακα 5. Το βιομοντέλο αυτό περιγράφεται από $m = 134$ αντιδράσεις και $n = 90$ μοριακά είδη ενώ το πείραμα εκτελέστηκε επίσης για $R = 16K$ στοχαστικές επαναλήψεις με χρονική διάρκεια κάθε επανάληψης $T_{sim} = 1$ εβδομάδα.

Πίνακας 5: Πείραμα επικύρωσης λειτουργίας της αρχιτεκτονικής χρησιμοποιώντας το βιομοντέλο ASYN

Παράμετροι	$T_{sim} = 1$ w, $T_{sam} = 1$ h, $R = 16K, MIS = 10^6$ steps
Μοντέλο	Alpha-Synuclein – ASYN
Σύντομη Περιγραφή	Το βιομοντέλο ASYN μοντελοποιείται από $m = 134$ αντιδράσεις και $n = 90$ μοριακούς πληθυσμούς. Το μοντέλο είναι διαθέσιμο στον ακόλουθο σύνδεσμο [9]

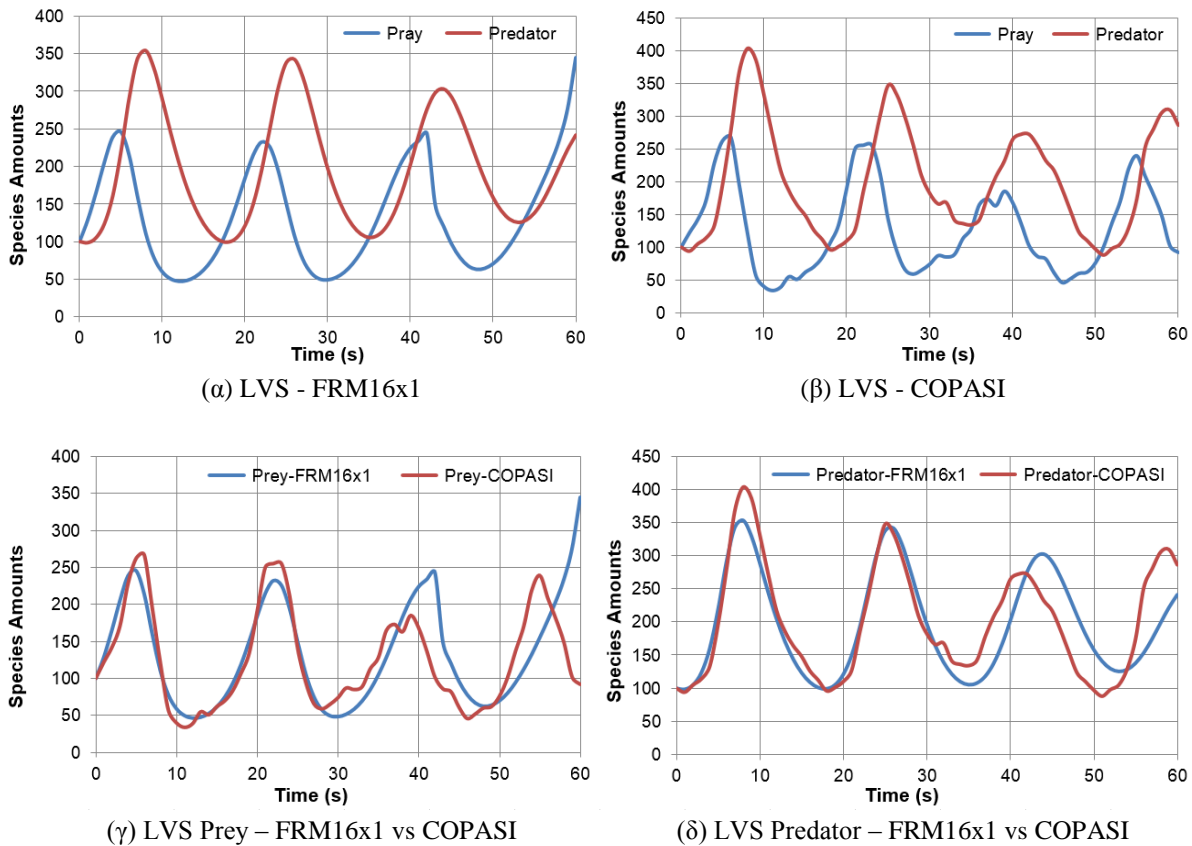
Το βιομοντέλο ASYN αναπτύχθηκε από την ομάδα μας για να μελετηθεί το πώς συμβάλει ο πολυμερισμός της πρωτεΐνης *αλφα-συνουκλεΐνη* (Alpha-Synuclein - ASYN) στην νόσο του Πάρκινσον. Το μοντέλο ASYN είναι διαθέσιμο στην βάση δεδομένων BioModel DB (EMBL-EBI) [9].

Στο τέταρτο και τελευταίο πείραμα χρησιμοποιήσαμε το βιομοντέλο **Spatially Inhomogeneous Diffusion Model - SIDM** το οποίο προτάθηκε από τους Shnerb et al [10] και μοντελοποιεί τη δυναμική μεταβολή των πληθυσμών των αντιδρώντων ενός 2-διάστατου τετραγωνικού πλέγματος κατά τη διαδικασία της διάχυσης αντιδρώντων στα κελιά του πλέγματος. Το μοντέλο αυτό εκτός από τη βιολογική του αξία μας επιτρέπει πολύ εύκολα να κλιμακώσουμε τον αριθμό των αντιδράσεων αλλάζοντας το μέγεθος του τετραγωνικού πλέγματος (για παράδειγμα 8x8, 10x10, 20x20 κτλ.).

Πίνακας 6: Πείραμα επικύρωσης λειτουργίας της αρχιτεκτονικής χρησιμοποιώντας το βιομοντέλο SIDM

Παράμετροι	$T_{sim} = 18$ s, $T_{sam} = 1$ s, $R = 16K, MIS = 10^6$ steps
Μοντέλο	Diffusion Bimodel – SIDM 15x15x20
Σύντομη Περιγραφή	Το βιομοντέλο SIDM 15x15 μοντελοποιείται από $m = 1160$ αντιδράσεις και $n = 260$ μοριακούς πληθυσμούς.

4.1.2 Σύγκριση Αποτελεσμάτων

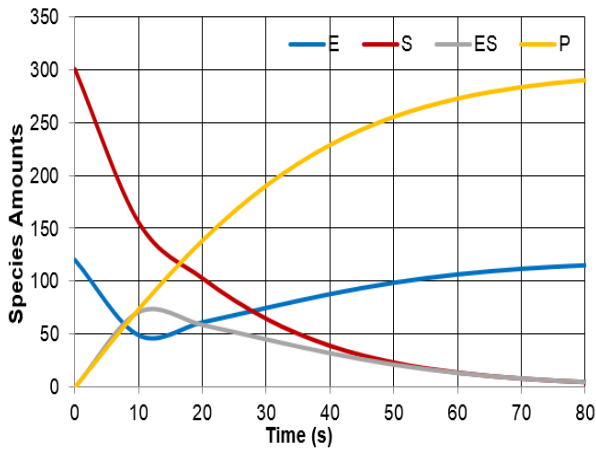


Εικόνα 5: Πρώτο πείραμα επικύρωσης της αρχιτεκτονικής FRM SoC. Αποτελέσματα προσομοίωσης του βιομοντέλου LVS και σύγκριση αποτελεσμάτων με τον προσομοιωτή COPASI.

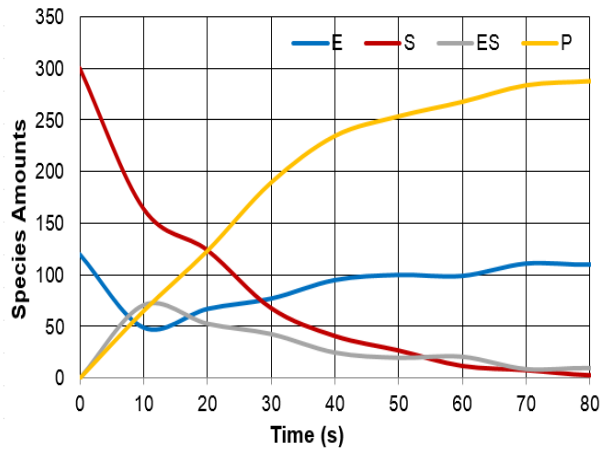
Η Εικόνα 5 παρουσιάζει τα αποτελέσματα της προσομοίωσης του βιομοντέλου LVS από το σύστημα FRM SoC και από τον προσομοιωτή COPASI. Στο γράφημα (α) της εικόνας παρατηρούμε τη δυναμική συμπεριφορά του βιομοντέλου LVS σύμφωνα με το σύστημα FRM SoC ενώ στο γράφημα (β) παρατηρούμε τη δυναμική συμπεριφορά του βιομοντέλου που προέκυψε από τον προσομοιωτή COPASI. Τα δύο επόμενα γραφήματα (γ και δ) δείχνουν τη σύγκριση των αποτελεσμάτων των δύο προσομοιωτών για κάθε μοριακό είδος ξεχωριστά.

Αντίστοιχα στην Εικόνα 6 δίνονται τα αποτελέσματα της προσομοίωσης του βιομοντέλου EK. Τα γραφήματα (α) και (β) μας δείχνουν τη δυναμική συμπεριφορά του βιομοντέλου σε κάθε προσομοιωτή ξεχωριστά. Στη συνέχεια τα υπόλοιπα γραφήματα (γ, δ, ε και στ) μας δείχνουν τη σύγκριση των αποτελεσμάτων των δύο προσομοιωτών για κάθε μοριακό είδος ξεχωριστά.

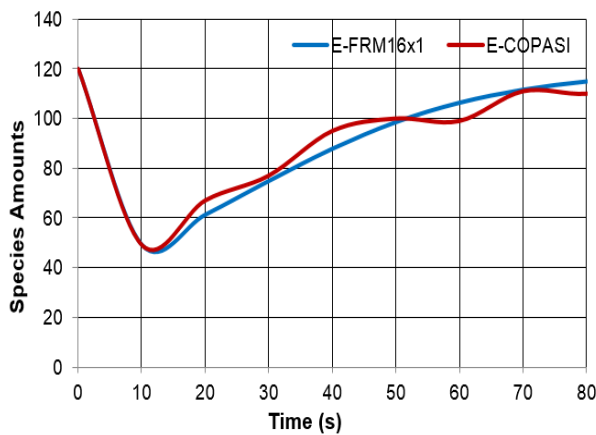
Συνεχίζοντας στην Εικόνα 7 βλέπουμε τα αποτελέσματα της προσομοίωσης του βιομοντέλου ASYN στους δύο προσομοιωτές. Τα γραφήματα (α) και (β) μας δείχνουν τη συνολική συμπεριφορά του βιομοντέλου σε κάθε προσομοιωτή για τα μοριακά είδη: Free Lamp2a, Total Cytosolic WT ASYN Dimer και Total Cytosolic WT ASYN Oligomeres. Το σύνολο των μονομερών της πρωτεΐνης ASYN στον κυτοσόλιο χώρο (Total Cytosolic WT ASYN Monomer) το παρουσιάζουμε σε ξεχωριστά γραφήματα (γ και δ για κάθε προσομοιωτή) λόγω της διαφορετικής τάξης μεγέθους των αποτελεσμάτων. Τέλος τα γραφήματα (δ) έως (στ) παρουσιάζουν τη σύγκριση



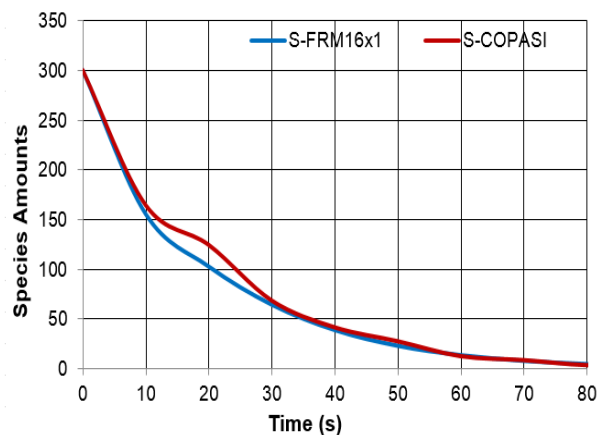
(α) EK – FRM16x1



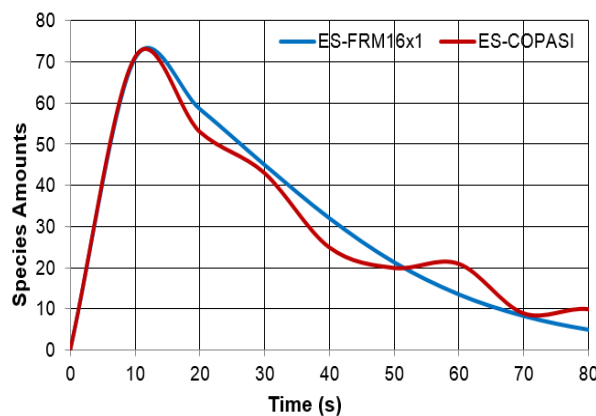
(β) EK - COPASI



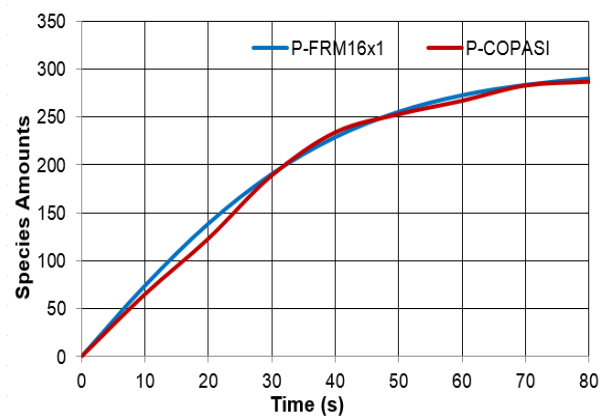
(γ) EK E – FRM16x1 vs COPASI



(δ) EK S – FRM16x1 vs COPASI



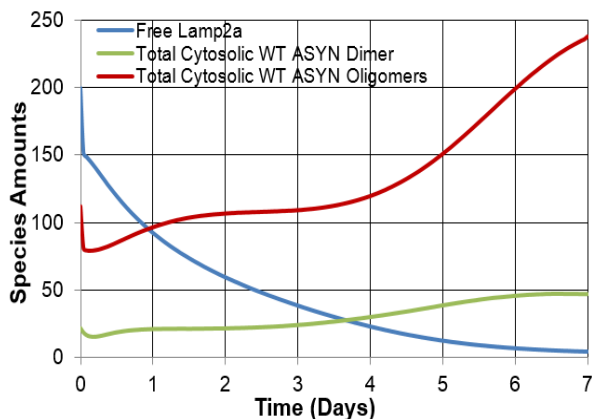
(ε) EK ES – FRM16x1 vs COPASI



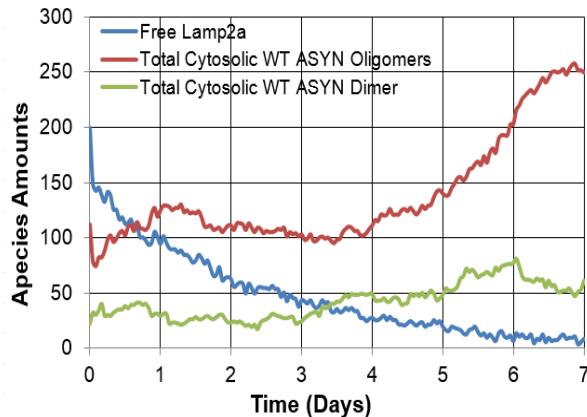
(στ) EK P – FRM16x1 vs COPASI

Εικόνα 6: Δεύτερο πείραμα επικύρωσης της αρχιτεκτονικής FRM SoC. Αποτελέσματα προσομοίωσης του βιομοντέλου EK και σύγκριση αποτελεσμάτων με τον προσομοιωτή COPASI.

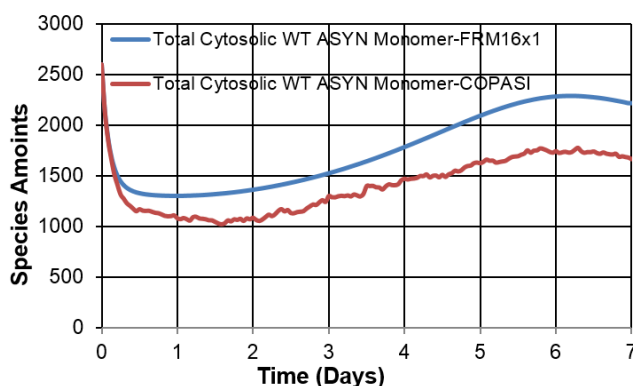
των αποτελεσμάτων των δύο προσομοιωτών για τα μοριακά είδη και αθροίσματα ειδών: Free Lamp2a, Total Cytosolic WT ASYN Dimer και Total Cytosolic WT ASYN Oligomeres.



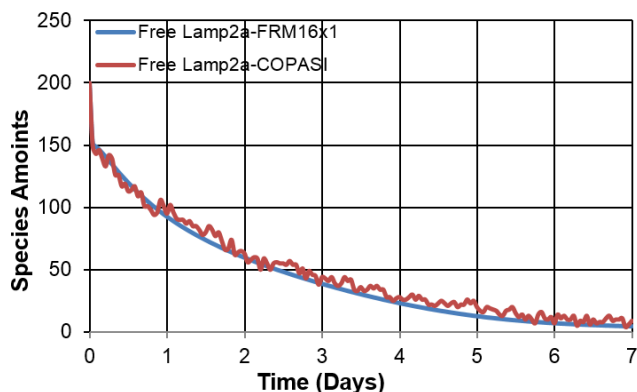
(α) ASYN – FRM16x1



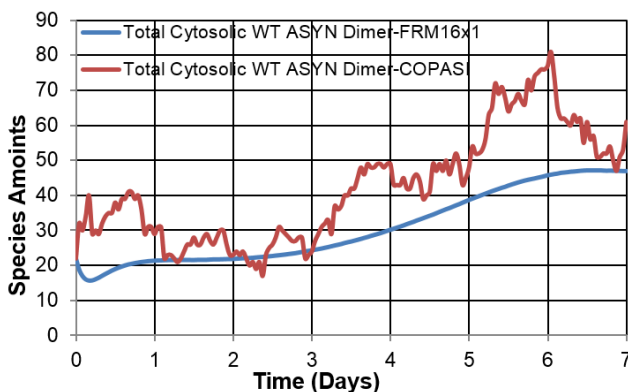
(β) ASYN -COPASI



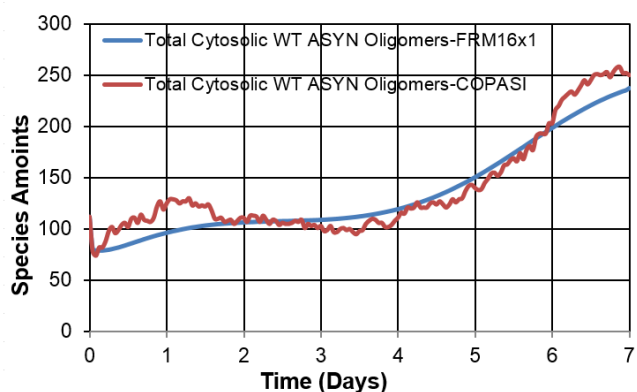
(γ) Total Cytosolic WT ASYN Monomer – FRM16x` vs COPASI



(δ) Free Lamp2a – FRM16x1 vs COPASI

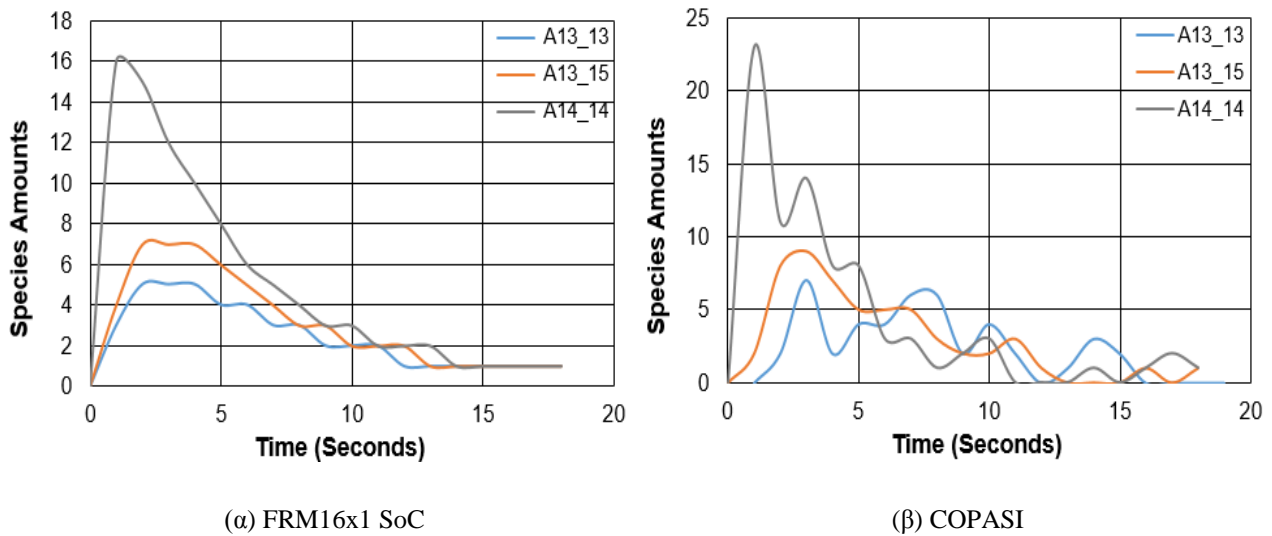


(ε) Total Cytosolic WT ASYN Dimer – FRM16x1 vs COPASI



(στ) Total Cytosolic WT ASYN Oligomers – FRM16x1 vs COPASI

Εικόνα 7: Τρίτο πείραμα επικύρωσης της αρχιτεκτονικής FRM SoC. Αποτελέσματα προσομοίωσης του βιομοντέλου ASYN και σύγκριση αποτελεσμάτων με τον προσομοιωτή COPASI.



Εικόνα 8: Τέταρτο πείραμα επικύρωσης της αρχιτεκτονικής FRM SoC. Αποτελέσματα προσομοίωσης των μοριακών ειδών A13_3, A13_15 και A14_14 του βιομοντέλου SIMD 15x15.

Όπως αναφέρθηκε στον Πίνακα 7 το βιομοντέλο SIMD 15x15 αποτελείται από ένα δισδιάστατο 15x15 τετραγωνικό πλέγμα με $m=1160$ αντιδράσεις και $n=260$ μοριακά είδη. Στην Εικόνα 8 παρουσιάζουμε ενδεικτικά τις μεταβολές των μοριακών ειδών A_13_13, A_13_15 και A_14_14 από τη προσομοίωση του βιομοντέλου στην αρχιτεκτονική FRM16x1 και στον προσομοιωτή COPASI. Παρότι τα μοριακά είδη και στα δύο πειράματα παρουσιάζουν παρόμοια τάση η σύγκριση των αποτελεσμάτων δείχνει μια μικρή διαφοροποίηση στη συμπεριφορά τους. Η διαφοροποίηση αυτή εξηγείται από το γεγονός ότι στο αριστερό γράφημα (α) της Εικόνας 8 παρουσιάζουμε τη μέση τιμή των μοριακών ειδών, ανά περίοδο δειγματοληψίας T_{sam} , για $R = 16K$ στοχαστικές επαναλήψεις που εκτελέστηκαν στην αρχιτεκτονική FRM16x1. Αντίθετα στο δεξιό γράφημα (β) παρουσιάζουμε τα αποτελέσματα μιας στοχαστικής επανάληψης ($R = 1$) στον προσομοιωτή COPASI.

4.1.3 Συμπεράσματα

Οι γραφικές παραστάσεις των αποτελεσμάτων του FRM SoC συστήματος προέκυψαν από την μέση τιμή των μοριακών πληθυσμών για $R=16K$ στοχαστικές επαναλήψεις του κάθε πειράματος. Ως εκ τούτου είναι αναμενόμενο τα αποτελέσματα των μοριακών πληθυσμών του FRM SoC συστήματος να παρουσιάζουν πιο ομαλές μεταβολές σε σύγκριση με τα αποτελέσματα του προσομοιωτή COPASI όπου το κάθε πείραμα επαναλήφθηκε μόνο μερικές δεκάδες φορές. Τέλος, παρατηρώντας τη σύγκλιση των αποτελεσμάτων των τεσσάρων πειραμάτων που προέκυψαν και από τους δύο προσομοιωτές καταλήγουμε στην επαλήθευση της ορθής λειτουργίας και συμπεριφοράς της αρχιτεκτονικής FRM SoC.

4.2 Ανάλυση Επιδόσεων

Ο στόχος της ανάλυσης επιδόσεων είναι να διερευνηθεί κατά πόσο οι πραγματικές επιδόσεις της αρχιτεκτονικής FRM SoC προσεγγίζουν τις αναμενόμενες επιδόσεις της θεωρητικής ανάλυσης που παρουσιάστηκε στην Ενότητα 2. Για το σκοπό αυτό χρησιμοποιήσαμε το μοντέλο LCSE (βλ. σχέσεις (3) έως (15)) και τον τρόπο λειτουργίας SSIP. Χρησιμοποιώντας έναν FRM πυρήνα διεξάγαμε 32 πειράματα με το μοντέλο LCSE 2^{ης} και 3^{ης} τάξης αυξάνοντας σταδιακά τον αριθμό των επεξεργαστικών μονάδων που χρησιμοποιούσε ο FRM πυρήνας. Ο Πίνακας 7 συνοψίζει τις παραμέτρους των πειραμάτων που εκτελέσαμε για την αξιολόγηση των επιδόσεων της αρχιτεκτονικής.

Πίνακας 7: Πειράματα αξιολόγησης των επιδόσεων της αρχιτεκτονικής FRM SoC με το μοντέλο LCSE

Αρχιτεκτονική	FRM1xN SoC, N = 1, 8, 16 και 32, συχνότητα λειτουργίας 175MHz
Παράμετροι Πειράματος	$T_{sim} = 1 \text{ s}$, $T_{sam} = 0.1 \text{ s}$, $R = 1$, $MIS = 10^9 \text{ steps}$
Περιπτώσεις πειραμάτων	Εξέταση όλων των συνδυασμών των τιμών m και N με το LCSE μοντέλο 2 ^{ης} και 3 ^{ης} τάξης όπου $m: 512, 1K, 2K$ και $4K$ και $N: 1, 8, 16$ και $32, 2x4x4=32$ πειράματα

4.2.1 Επικύρωση επιδόσεων

Οι Πίνακες 8 έως 15 παρουσιάζουν τα αποτελέσματα των 32 πειραμάτων που εκτελέστηκαν για την αξιολόγηση των επιδόσεων σχετικά της αρχιτεκτονικής FRM1xN για $N = 1, 8, 16, 32$. Επίσης στην τελευταία στήλη των πινάκων δίνονται τα αποτελέσματα των επιδόσεων του προσομοιωτή COPASI για τα αντίστοιχα πειράματα. Το σύστημα που χρησιμοποιήσαμε για την εκτέλεση του προσομοιωτή COPASI αποτελείται από τον επεξεργαστή της Intel i7 4790K, χρονισμένο στα 4.4GHz, σε συνδυασμό με 32GB μνήμης RAM.

Πίνακας 8: Αξιολόγηση επιδόσεων της αρχιτεκτονικής FRM SoC και του προσομοιωτή COPASI με το μοντέλο LCSE512 2^{ης} τάξης

	FRM1x1	FRM1x8	FRM1x16	FRM1x32	COPASI
Throughput MRC/sec	0.284	1.024	1.027	1.275	0.13
Performance MR/sec	145.2	524.1	525.76	652.99	66.30

Πίνακας 9: Αξιολόγηση επιδόσεων της αρχιτεκτονικής FRM SoC και του προσομοιωτή COPASI με το μοντέλο LCSE1K 2^{ης} τάξης

	FRM1x1	FRM1x8	FRM1x16	FRM1x32	COPASI
Throughput MRC/sec	0.155	0.731	1.026	1.278	0.10
Performance MR/sec	158.6	748.7	1050.7	1308.39	97.76

Πίνακας 10: Αξιολόγηση επιδόσεων της αρχιτεκτονικής FRM SoC και του προσομοιωτή COPASI με το μοντέλο LCSE2K 2^{ης} τάξης

	FRM1x1	FRM1x8	FRM1x16	FRM1x32	COPASI
Throughput MRC/sec	0.082	0.498	0.788	1.077	0.08
Performance MR/sec	167.52	1020.06	1614.61	2206.16	155.37

Πίνακας 11: Αξιολόγηση επιδόσεων της αρχιτεκτονικής FRM SoC και του προσομοιωτή COPASI με το μοντέλο LCSE4K 2^{ης} τάξης

	FRM1x1	FRM1x8	FRM1x16	FRM1x32	COPASI
Throughput MRC/sec	0.042	0.291	0.506	0.788	0.05
Performance MR/sec	171.36	1190.33	2072.53	3229.02	221.40

Πίνακας 12: Αξιολόγηση επιδόσεων της αρχιτεκτονικής FRM SoC και του προσομοιωτή COPASI με το μοντέλο LCSE512 3^{ης} τάξης

	FRM1x1	FRM1x8	FRM1x16	FRM1x32	COPASI
Throughput MRC/sec	0.294	1.148	1.453	1.667	0.11
Performance MR/sec	150.28	587.76	743.98	853.74	57.12

Πίνακας 13: Αξιολόγηση επιδόσεων της αρχιτεκτονικής FRM SoC και του προσομοιωτή COPASI με το μοντέλο LCSE1K 3^{ης} τάξης

	FRM1x1	FRM1x8	FRM1x16	FRM1x32	COPASI
Throughput MRC/sec	0.158	0.815	1.152	1.452	0.13
Performance MR/sec	161.82	834.96	1179.75	1486.56	136.38

Πίνακας 14: Αξιολόγηση επιδόσεων της αρχιτεκτονικής FRM SoC και του προσομοιωτή COPASI με το μοντέλο LCSE2K 3^{ης} τάξης

	FRM1x1	FRM1x8	FRM1x16	FRM1x32	COPASI
Throughput MRC/sec	0.082	0.511	0.813	1.119	0.09

	FRM1x1	FRM1x8	FRM1x16	FRM1x32	COPASI
Performance MR/sec	168.16	1046.92	1665.33	2353.5	177.68

Πίνακας 15: Αξιολόγηση επιδόσεων της αρχιτεκτονικής FRM SoC και του προσομοιωτή COPASI με το μοντέλο LCSE4K 3^{ης} τάξης

	FRM1x1	FRM1x8	FRM1x16	FRM1x32	COPASI
Throughput MRC/sec	0.042	0.293	0.51	0.81	0.07
Performance MR/sec	171.52	1198.32	2088.97	3316.7	269.86

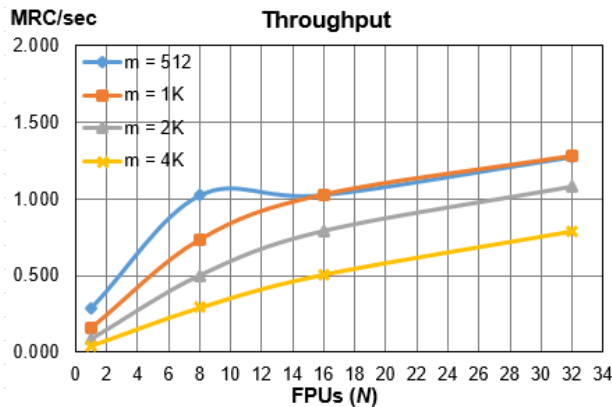
Στην Εικόνα 9 δίνονται τέσσερα γραφήματα με τις πραγματικές επιδόσεις (throughput και performance) της αρχιτεκτονικής FRM1xN όπως προέκυψαν από τα 32 πειράματα που εκτελέστηκαν. Τα γραφήματα (α) και (β) συνοψίζουν τα αποτελέσματα των επιδόσεων χρησιμοποιώντας το μοντέλο LCSE 2^{ης} τάξης ενώ τα γραφήματα (γ) και (δ) χρησιμοποιώντας το μοντέλο LCSE 3^{ης} τάξης.

Το πρώτο συμπέρασμα που προκύπτει παρατηρώντας τα γραφήματα της Εικόνας 9 είναι ότι επιβεβαιώνεται ότι οι επιδόσεις της αρχιτεκτονικής δεν εξαρτώνται από την τάξη των αντιδράσεων του εκάστοτε βιομοντέλου. Το δεύτερο συμπέρασμα είναι ότι επιβεβαιώνονται οι αναμενόμενες επιδόσεις της αρχιτεκτονικής που παρουσιάστηκαν στην θεωρητική ανάλυση των επιδόσεων (βλ. Ενότητα 3.1). Συνεπώς αποδεικνύεται και πειραματικά η αποδοτική κλιμάκωση της αρχιτεκτονικής διπλασιάζοντας τις επεξεργαστικές της μονάδες προκειμένου να αντιμετωπίσει βιομοντέλα αυξανόμενης πολυπλοκότητας.

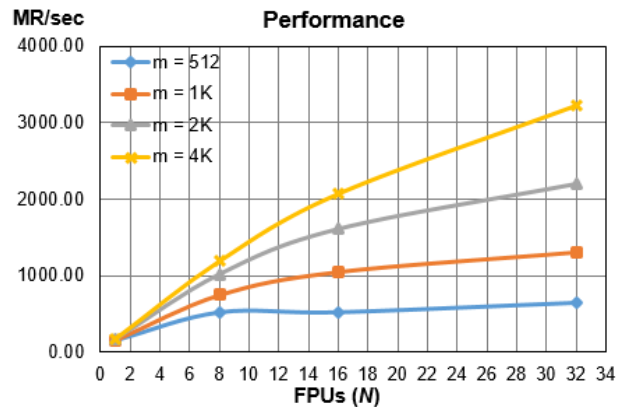
Σχετικά με την απότομη μείωση της διεκπαιρευτικής ικανότητας που παρατηρείται στην περίπτωση του μοντέλου LCSE 2^{ης} τάξης για $m=512$ εξηγείται από το γεγονός ότι παρότι διπλασιάζεται ο αριθμός των επεξεργαστικών μονάδων ο συνολικός χρόνος προσομοίωσης παύει να μειώνεται όταν χρησιμοποιηθούν περισσότερες από 8 επεξεργαστικές μονάδες. Η συμπεριφορά αυτή ισχύει ανεξαρτήτου αριθμού αντιδράσεων (m) και οφείλεται σε ένα κατώτατο χρονικό όριο που απαιτείται για την αρχικοποίηση αλλά και την διακοπή της επικοινωνίας του συστήματος με τον υπολογιστή (Host PC). Ο χρόνος αυτός υπολογίζεται στα 300 ms και αποτελεί τον φραγμό της συνεχής αύξησης των επεξεργαστικών μονάδων καθότι πέρα από αυτό το όριο δεν δύναται να συμβάλουν στην περαιτέρω μείωση του συνολικού χρόνου προσομοίωσης.

4.2.2 Σύγκριση με COPASI

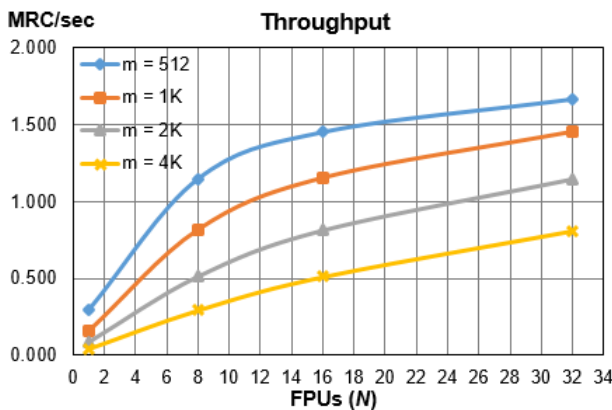
Στους Πίνακες 8 έως 15 παρουσιάστηκαν οι επιδόσεις της αρχιτεκτονικής FRM SoC κατά εκτέλεση των πειραμάτων με τον μοντέλο LCSE 2^{ης} και 3^{ης} τάξης. Στην τελευταία στήλη των πινάκων δόθηκαν και επιδόσεις του προσομοιωτή COPASI κατά την εκτέλεση των αντίστοιχων πειραμάτων. Όπως προαναφέρθηκε για την εκτέλεση του προσομοιωτή COPASI χρησιμοποιήθηκε επεξεργαστής της Intel i7 4790K, χρονισμένος στα 4.4GHz, σε συνδυασμό με 32GB μνήμης RAM. Η Εικόνα 10 παρουσιάζει τη σύγκριση των επιδόσεων της αρχιτεκτονικής FRM SoC με τις επιδόσεις του προσομοιωτή COPASI. Το αριστερό γράφημα (α) παρουσιάζει τα αποτελέσματα της σύγκρισης στη περίπτωση του μοντέλο LCSE 2^{ης} τάξης ενώ το δεξιό γράφημα (β) παρουσιάζει



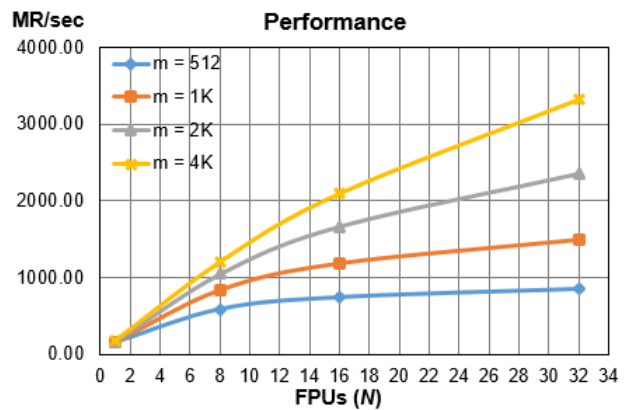
(α) Διεκπαιρευτική ικανότητα (throughput) της αρχιτεκτονικής FRM1xN με το μοντέλο LCSE 2^{ης} τάξης



(β) Επιδόσεις (performance) της αρχιτεκτονικής FRM1xN με το μοντέλο LCSE 2^{ης} τάξης



(γ) Διεκπαιρευτική ικανότητα (throughput) της αρχιτεκτονικής FRM1xN με το μοντέλο LCSE 3^{ης} τάξης



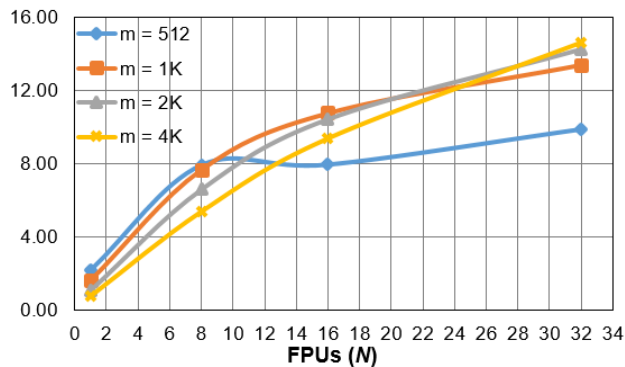
(δ) Επιδόσεις (performance) της αρχιτεκτονικής FRM1xN με το μοντέλο LCSE 3^{ης} τάξης

Εικόνα 9: Αποτελέσματα των πραγματικών επιδόσεων της αρχιτεκτονικής FRM1xN για $N=1, 8, 16$ και 32 (συχρότητα λειτουργίας 175MHz) χρησιμοποιώντας τα μοντέλα LCSE 2^{ης} και 3^{ης} τάξης για $m=2^9..12$.

τα αποτελέσματα της σύγκρισης στη περίπτωση του μοντέλου LCSE 3^{ης} τάξης. Η συμπεριφορά του συστήματος στη περίπτωση του μοντέλου LCSE δευτέρας τάξης για $m = 512$ εξηγήθηκε στην προηγούμενη ενότητα.

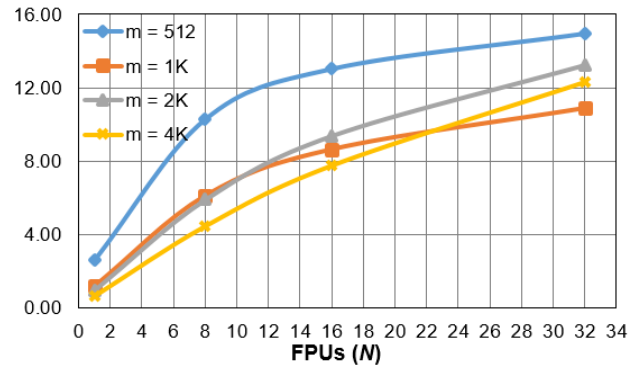
Παρατηρώντας τα δύο γραφήματα αρχικά βλέπουμε ότι η αρχιτεκτονική FRM SoC επιτυγχάνει παρόμοιες επιδόσεις με τον προσομοιωτή COPASI χρησιμοποιώντας μόλις μια επεξεργαστική μονάδα ($N = 1$). Έπειτα η αρχιτεκτονική κατορθώνει κατά μέσο όρο να παρουσιάζει, τουλάχιστον κατά 50% καλύτερες επιδόσεις σε σύγκριση με τον προσομοιωτή COPASI, κάθε φορά που διπλασιάζονται οι επεξεργαστικές της μονάδες. Η συμπεριφορά αυτή παρουσιάζει μια καμπή, ανεξαρτήτου αριθμού αντιδράσεων (m), στο σημείο όπου ο αριθμός των επεξεργαστικών μονάδων (N) αυξάνει τόσο ώστε ο χρόνος της προσομοίωσης να μειώνεται κάτω από το όριο της καθυστέρησης λόγω της επικοινωνίας του συστήματος με τον υπολογιστή (Host PC), όπως αναφέρθηκε και στο τέλος της προηγούμενης ενότητας.

Speedup Factor Performance - LCSE 2 Order FRM1xN Vs COPASI



(α) Σύγκριση των επιδόσεων της αρχιτεκτονικής FRM SoC με τις επιδόσεις του προσομοιωτή COPASI για το μοντέλο LCSE 2^{ης} τάξης

Speedup Factor Performance - LCSE 3 Order FRM1xN Vs COPASI



(β) Σύγκριση των επιδόσεων της αρχιτεκτονικής FRM SoC με τις επιδόσεις του προσομοιωτή COPASI για το μοντέλο LCSE 3^{ης} τάξης

Εικόνα 10: Σύγκριση των επιδόσεων της αρχιτεκτονικής FRM SoC (συχνότητα λειτουργίας 175MHz) με τις επιδόσεις του προσομοιωτή COPASI.

4.2.3 Συμπεράσματα

Για την επικύρωση της λειτουργίας της αρχιτεκτονικής FRM SoC διεξαγάγαμε 4 πειράματα με τα πραγματικά βιομοντέλα LVS, EK, ASYN και SIDM των οποίων οι περιγραφές τους δόθηκαν στους Πίνακες 3 έως 6. Τα αποτελέσματα και των τεσσάρων πειραμάτων επιβεβαιώνουν την ορθή λειτουργία και συμπεριφορά του συστήματος έπειτα από την διασταύρωσή τους με τα αποτελέσματα της προσομοίωσης των αντίστοιχων πειραμάτων στον προσομοιωτή COPASI.

Για την αξιολόγηση των επιδόσεων της αρχιτεκτονικής εκτελέσαμε 32 πειράματα με το συνθετικό βιομοντέλο LCSE 2^{ης} και 3^{ης} τάξης εξετάζοντας όλους του συνδυασμούς των m, N για $m=512, 1K, 2K$ και $4K$ για $N=1, 8, 16$ και 32 . Τα πειράματα αυτά απέδειξαν και πειραματικά την αποδοτική κλιμάκωση της αρχιτεκτονικής κατά τον διπλασιασμό των επεξεργαστικών μονάδων για την αντιμετώπιση βιομοντέλων αυξανόμενης πολυπλοκότητας επαληθεύοντας έτσι την θεωρητική ανάλυση των αναμενόμενων επιδόσεων (βλ. Ενότητα 3.1). Η αρχιτεκτονική αξιοποιώντας τις διαθέσιμες μονάδες επιτυγχάνει επιδόσεις της τάξεως έως και 3.3 MR/sec ανεξαρτήτου της τάξεως των αντιδράσεων παρουσιάζοντας έως και 10 φορές καλύτερη επίδοση σε σύγκριση με την σειριακή εκτέλεση της προσομοίωσης από τον προσομοιωτή COPASI.

5. Επικύρωση NRM SoC

Στην ενότητα που ακολουθεί αρχικά παρουσιάζονται τα αποτελέσματα που σχετίζονται με την επικύρωση της λειτουργίας της αρχιτεκτονικής NRM SoC [3]. Έπειτα παρουσιάζονται τα αποτελέσματα της αξιολόγησης των επιδόσεων της. Για την εκτέλεση όλων των πειραμάτων αξιολόγησης χρησιμοποιήσαμε την αναπτυξιακή κάρτα KC705 της εταιρίας Xilinx η οποία φέρει το FPGA XC7K325T της οικογένειας Kintex 7 επίσης της ίδιας εταιρείας.

5.1 Επικύρωση Λειτουργίας

Για την επικύρωση της αρχιτεκτονικής NRM SoC επαναλάβαμε τα πειράματα που διεξάγαμε κατά την επικύρωση της αρχιτεκτονικής FRM SoC. Επιπλέον εκτελέσαμε τα ίδια πειράματα στον προσομοιωτή COPASI χρησιμοποιώντας τον αλγόριθμο NRM-SSA με σκοπό την επαλήθευση των αποτελεσμάτων. Για κάθε πείραμα εκτελέσαμε $R = 16K$ στοχαστικές επαναλήψεις ώστε να προσεγγίσουμε στατιστικά με όσο το δυνατόν μεγαλύτερη ακρίβεια τη δυναμική συμπεριφορά των βιολογικών συστημάτων. Για την εκτέλεση των πειραμάτων χρησιμοποιήσαμε τον τρόπο λειτουργίας MSIP προκειμένου να παραλληλοποιήσουμε την εκτέλεση των 16K επαναλήψεων (R/C). Πιο συγκεκριμένα, χρησιμοποιήσαμε $C = 16$ NRM πυρήνες (NRM16x1) όπου κάθε πυρήνας ήταν υπεύθυνος για την εκτέλεση $R = 1K$ στοχαστικών επαναλήψεων. Η αρχιτεκτονική NRM16x1 δύναται να λειτουργήσει στη συχνότητα των 220 MHz.

5.1.1 Εκτέλεση Πειραμάτων

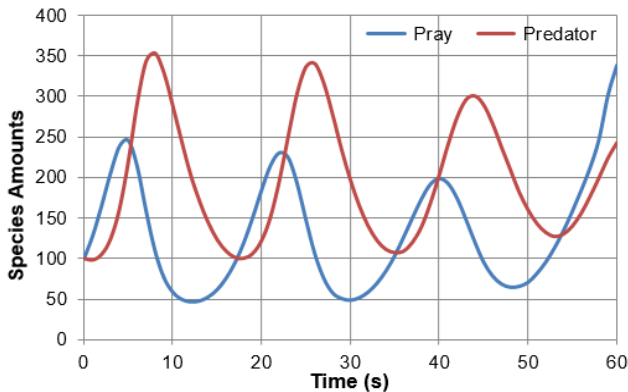
Για την επαλήθευση της ορθής λειτουργίας της αρχιτεκτονικής NRM SoC επαναλάβαμε τα τέσσερα in-silico πειράματα (LVS, EK, ASYN και Diffusion Biomodel) που εκτελέσαμε κατά την επικύρωση της αρχιτεκτονικής FRM SoC. Τα πειράματα αυτά περιγράφονται στην Ενότητα 4.1.1 ενώ περαιτέρω πληροφορίες δίνονται στους Πίνακες 3, 4, 5 και 6.

5.1.2 Σύγκριση Αποτελεσμάτων

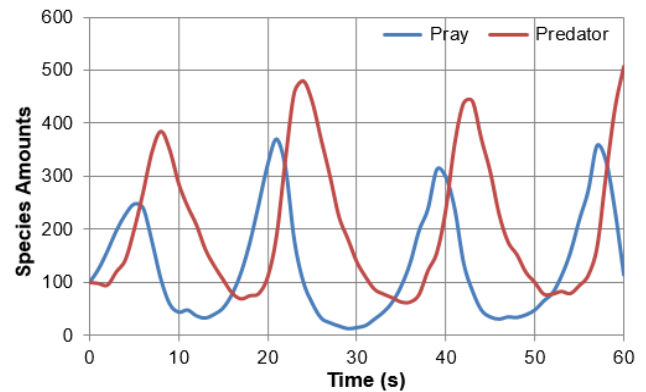
Η Εικόνα 11 παρουσιάζει τα αποτελέσματα της προσομοίωσης του βιομοντέλου LVS από το σύστημα NRM SoC και από τον προσομοιωτή COPASI. Τα γράφημα (α) παρουσιάζει τα αποτελέσματα της προσομοίωσης του βιομοντέλου LVS από την αρχιτεκτονική NRM SoC ενώ το γράφημα (β) παρουσιάζει τα αντίστοιχα αποτελέσματα που προέκυψαν από τον προσομοιωτή COPASI. Στα γραφήματα (γ) και (δ) παρατηρούμε τη σύγκριση των μοριακών πληθυσμών του θηρευτή και του θηράματος ξεχωριστά.

Αντίστοιχα στις Εικόνες 12 και 13 δίνονται τα αποτελέσματα της προσομοίωσης του βιομοντέλου EK. Ξανά τα δύο πρώτα γραφήματα (α) και (β) παρουσιάζουν την συνολική συμπεριφορά του βιομοντέλου σε κάθε προσομοιωτή. Στη συνέχεια στα επόμενα τέσσερα γραφήματα (γ, δ, ε και στ) παρουσιάζονται ξεχωριστά τα αποτελέσματα των τεσσάρων μοριακών πληθυσμών των ειδών E , S , ES και P όπως προέκυψαν από τους δύο προσομοιωτές.

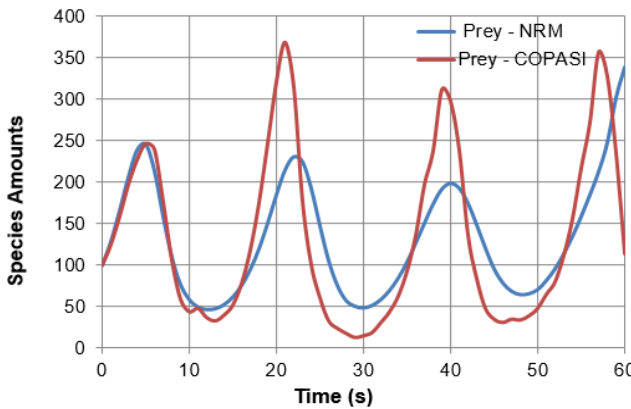
Συνεχίζοντας, στις Εικόνες 14 και 15 παρουσιάζονται τα αποτελέσματα της προσομοίωσης του βιομοντέλου ASYN στους δύο προσομοιωτές. Η συνολική συμπεριφορά των μοριακών ειδών *Free Lamp2a*, *Total Cytosolic WT ASYN Dimer* και *Total Cytosolic WT ASYN Oligomeres* στους δύο προσομοιωτές παρουσιάζεται στα γραφήματα (α) και (β). Το σύνολο των μονομερών της πρωτεΐνης ASYN στον κυτταρικό χώρο (*Total Cytosolic WT ASYN Monomer*) παρουσιάζεται σε ξεχωριστά γραφήματα (γ και δ για κάθε προσομοιωτή) λόγω της διαφορετικής τάξης μεγέθους των αποτελεσμάτων. Στα εναπομένοντα γραφήματα γίνεται η σύγκριση των



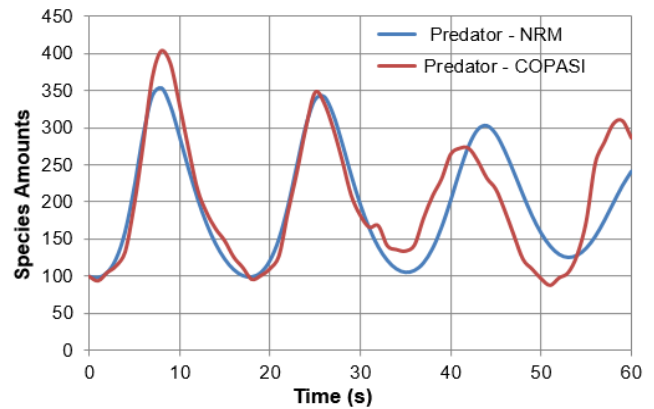
(α) LVS - NRM16x1



(β) LVS - COPASI

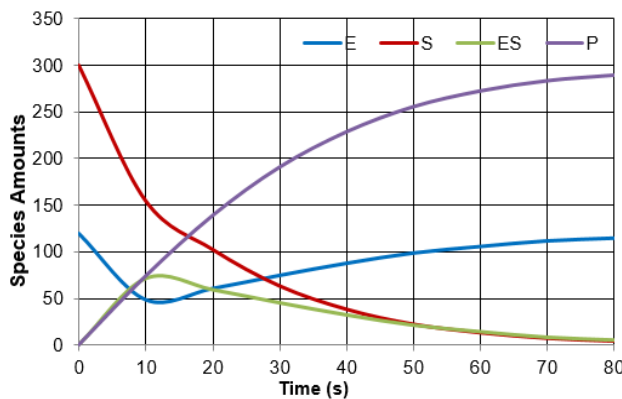


(γ) LVS Prey - NRM16x1 vs COPASI

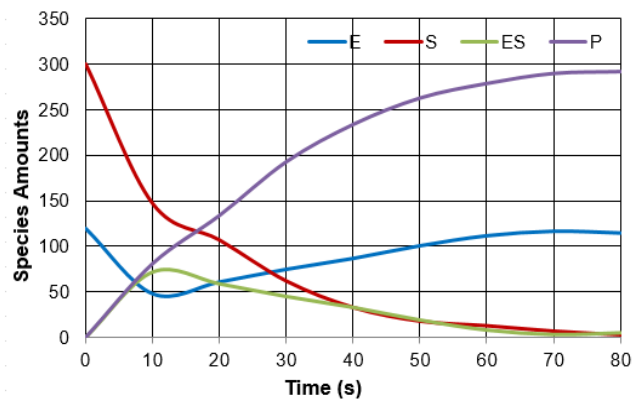


(δ) LVS Predator - NRM16x1 vs COPASI

Εικόνα 11: Πρώτο πείραμα επικύρωσης της αρχιτεκτονικής NRM SoC. Αποτελέσματα προσομοίωσης του βιομοντέλου LVS και σύγκριση αποτελεσμάτων με τον προσομοιωτή COPASI.



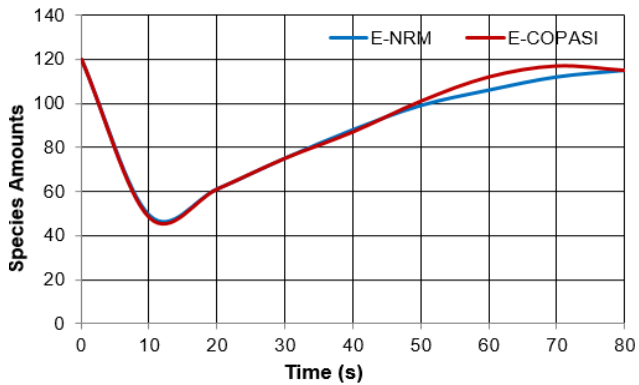
(α) EK - NRM16x1



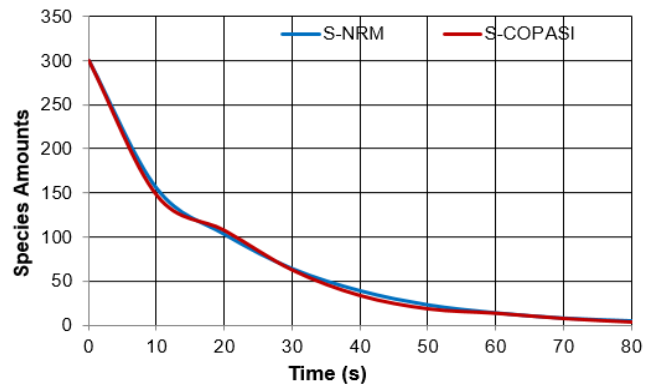
(β) EK - COPASI

Εικόνα 12: Δεύτερο πείραμα επικύρωσης της αρχιτεκτονικής NRM SoC. Αποτελέσματα προσομοίωσης του βιομοντέλου EK και σύγκριση αποτελεσμάτων με τον προσομοιωτή COPASI.

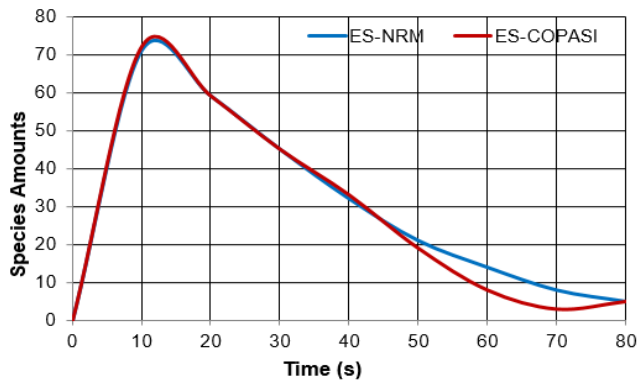
αποτελεσμάτων της προσομοίωσης των δύο συστημάτων για τα μοριακά είδη Free Lamp2a, Total Cytosolic WT ASYN Dimer και Total Cytosolic WT ASYN Oligomers.



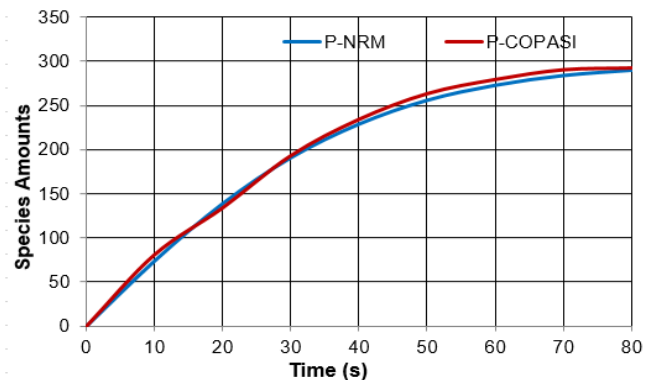
(γ) EK E – NRM16x1 vs COPASI



(δ) EK S – NRM16x1 vs COPASI

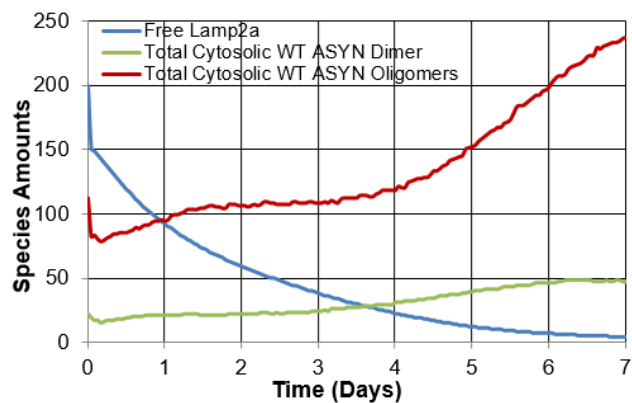


(ε) EK ES – NRM16x1 vs COPASI

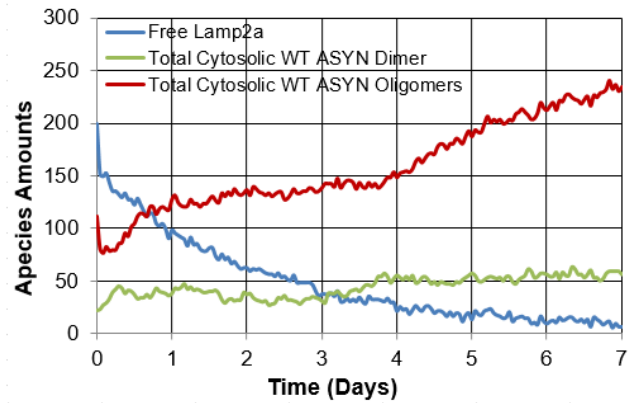


(στ) EK P – NRM16x1 vs COPASI

Εικόνα 13: Δεύτερο πείραμα επικύρωσης της αρχιτεκτονικής NRM SoC. Αποτελέσματα προσομοίωσης του βιομοντέλου EK και σύγκριση αποτελεσμάτων με τον προσομοιωτή COPASI.

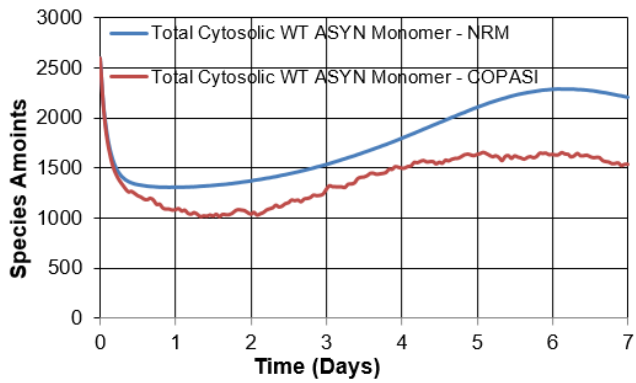


(α) ASYN – NRM16x1

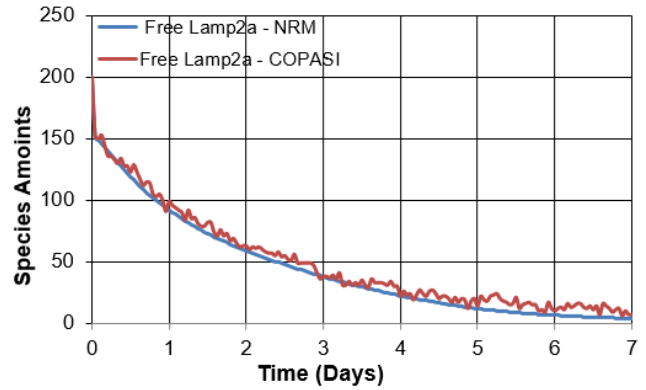


(β) ASYN -COPASI

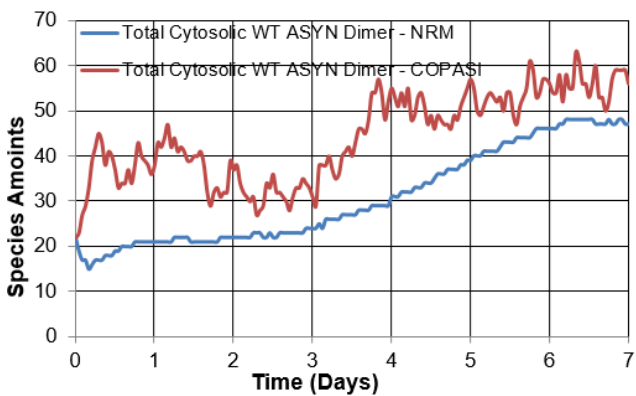
Εικόνα 14: Τρίτο πείραμα επικύρωσης της αρχιτεκτονικής NRM SoC. Αποτελέσματα προσομοίωσης του βιομοντέλου ASYN και σύγκριση αποτελεσμάτων με τον προσομοιωτή COPASI.



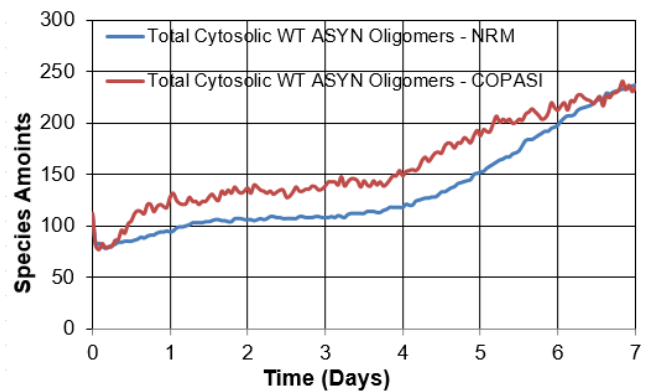
(γ) Total Cytosolic WT ASYN Monomer – NRM16x1 vs COPASI



(δ) Free Lamp2a – NRM16x1 vs COPASI

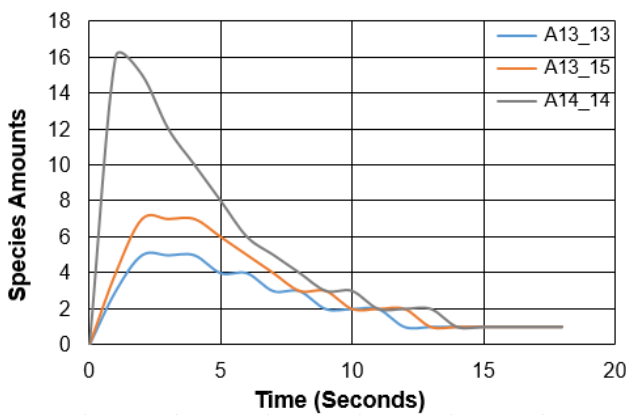


(ε) Total Cytosolic WT ASYN Dimer – NRM16x1 vs COPASI

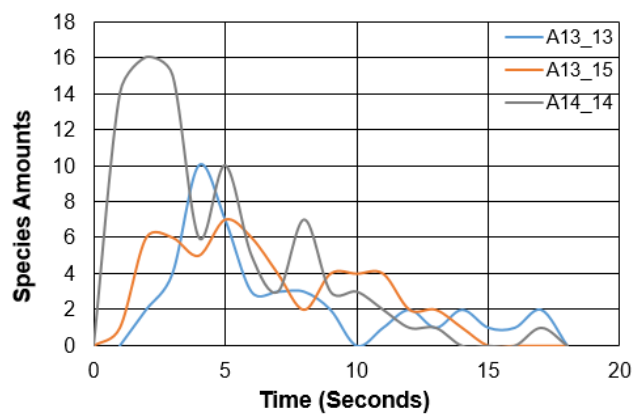


(στ) Total Cytosolic WT ASYN Oligomers – NRM16x1 vs COPASI

Εικόνα 15: Τρίτο πείραμα επικύρωσης της αρχιτεκτονικής NRM SoC. Αποτελέσματα προσομοίωσης του βιομοντέλου ASYN και σύγκριση αποτελεσμάτων με τον προσομοιωτή COPASI.



(α) NRM16x1



(β) COPASI

Εικόνα 16: Τέταρτο πείραμα επικύρωσης της αρχιτεκτονικής NRM SoC. Αποτελέσματα προσομοίωσης των μοριακών ειδών A13_3, A13_15 και A14_14 του βιομοντέλου SIMD 15x15.

Στην Εικόνα 16 παρουσιάζουμε ενδεικτικά τις μεταβολές των μοριακών ειδών A_13_13, A_13_15 και A_14_14 από τη προσομοίωση του βιομοντέλου SIMD 15x15 στην αρχιτεκτονική NRM16x1 και στον προσομοιωτή COPASI. Όπως παρατηρούμε και στα αποτελέσματα της εκτέλεσης του βιομοντέλου στην αρχιτεκτονική FRM16x1 (βλ. Εικόνα 8), τα αποτελέσματα της αρχιτεκτονικής NRM16x1 και COPASI παρουσιάζουν παρόμοιες τάσεις ωστόσο με αρκετές διαφοροποιήσεις. Και σε αυτήν την περίπτωση οι διαφοροποιήσεις αυτές εξηγούνται τις $R=16K$ στοχαστικές επαναλήψεις που εκτελέστηκε το πείραμα αυτό στην αρχιτεκτονική NRM16x1 σε αντίθεση με την μια στοχαστική επανάληψη ($R=1$) που εκτελέστηκε στον προσομοιωτή COPASI.

5.1.3 Συμπεράσματα

Επαναλαμβάνοντας ακριβώς την ίδια διαδικασία που ακολουθήσαμε για την επικύρωση της λειτουργίας του συστήματος FRM SoC εκτελέσαμε $R=16K$ στοχαστικές επαναλήψεις κάθε πειράματος χρησιμοποιώντας το σύστημα NRM SoC. Όπως είναι αναμενόμενο, και οι γραφικές παραστάσεις των αποτελεσμάτων των μοριακών ειδών που προέκυψαν από το σύστημα NRM SoC παρουσιάζουν ομαλές μεταβολές σε σύγκριση με τα αποτελέσματα του προσομοιωτή COPASI όπου το κάθε πείραμα επαναλήφθηκε μόνο μερικές δεκάδες φορές. Εξετάζοντας διεξοδικά όλα τα αποτελέσματα του NRM SoC συστήματος και παρατηρώντας την σύγκλιση τους με τα αποτελέσματα του προσομοιωτή COPASI, οδηγούμαστε στην επαλήθευση της ορθής λειτουργίας και συμπεριφοράς και της αρχιτεκτονικής NRM SoC.

5.2 Ανάλυση Επιδόσεων

Για την ανάλυση των επιδόσεων της αρχιτεκτονικής NRM SoC εκτελέσαμε 16 πειράματα με το μοντέλο LCSE 2^{ης} και 3^{ης} τάξης. Διεξάγαμε δύο κατηγορίες in-silico πειραμάτων όπου στη πρώτη κατηγορία εκτελέσαμε πειράματα κρατώντας σταθερό τον αριθμό των αντιδράσεων ($m=2K$) ενώ αυξάναμε σταδιακά τον αριθμό των επηρεαζόμενων αντιδράσεων ($D_{aver}=17, 20, 33, 36, 65, 68, 94, 96$). Έπειτα στην δεύτερη κατηγορία αυξάναμε σταδιακά τον αριθμό των αντιδράσεων ($m=512, 1K, 2K, 4K$) κρατώντας σταθερό τον αριθμό των επηρεαζόμενων αντιδράσεων ($D_{aver}=33$). Ο Πίνακας 16 συνοψίζει τα πειράματα που εκτελέσαμε για την αξιολόγηση των επιδόσεων της αρχιτεκτονικής NRM SoC.

5.2.1 Επικύρωση Επιδόσεων

Οι πίνακες 17 έως 20 παρουσιάζουν τα αποτελέσματα των 16 πειραμάτων που εκτελέσαμε για την αξιολόγηση των επιδόσεων (throughput) της αρχιτεκτονικής NRM SoC με το μοντέλο LCSE 2^{ης} και 3^{ης} για τους συνδυασμούς των τιμών D_{aver} και m . Επίσης παρουσιάζονται τα αποτελέσματα των επιδόσεων του προσομοιωτή COPASI για τα αντίστοιχα πειράματα. Όπως και στην περίπτωση των πειραμάτων επικύρωσης της αρχιτεκτονικής FRM SoC, ο προσομοιωτής COPASI εκτελέστηκε χρησιμοποιώντας τον επεξεργαστή της επεξεργαστής της Intel i7 4790K, χρονισμένος στα 4.4GHz, σε συνδυασμό με 32GB μνήμης RAM.

Πίνακας 16: Αξιολόγηση των επιδόσεων της αρχιτεκτονικής NRM SoC με το μοντέλο LSCE

Αρχιτεκτονική	NRM1x1 SoC $D_{aver}= 16, 32, 64, 92$, συχνότητα λειτουργίας 160 MHz
Παράμετροι Πειράματος	$T_{sim} = 1 \text{ s}$, $T_{sam} = 0.1 \text{ s}$, $R = 1$, $MIS = 10^9 \text{ steps}$
Περιπτώσεις για σταθερό $m=2K$	LCSE 2 ^{ης} τάξης $D_{aver} = 17, 33, 65, 94$ και LCSE 3 ^{ης} τάξης για $D_{aver} = 20, 36, 68, 97$
Περιπτώσεις για σταθερό $D_{aver}=33$	LCSE 2 ^{ης} και 3 ^{ης} τάξης για $m = 512, 1K, 2K, 4K$

Πίνακας 17: Αξιολόγηση επιδόσεων της αρχιτεκτονικής NRM SoC και του προσομοιωτή COPASI με το μοντέλο LCSE 2^{ης} τάξης με σταθερό $m=2K$ για $D_{aver}=17, 33, 65$ και 94

D_{aver}	17	33	65	94
NRM SoC - Throughput MRC/sec	1.46	1.36	0.97	0.82
COPASI - Throughput MRC/sec	0.181	0.106	0.053	0.036

Πίνακας 18: Αξιολόγηση επιδόσεων της αρχιτεκτονικής NRM SoC και του προσομοιωτή COPASI με το μοντέλο LCSE 3^{ης} τάξης με σταθερό $m=2K$ για $D_{aver}=20, 36, 68$ και 97

D_{aver}	20	36	68	97
NRM SoC - Throughput MRC/sec	1.59	1.24	0.99	0.84
COPASI - Throughput MRC/sec	0.158	0.09	0.045	0.031

Πίνακας 19: Αξιολόγηση επιδόσεων της αρχιτεκτονικής NRM SoC και του προσομοιωτή COPASI με το μοντέλο LCSE 2^{ης} τάξης με σταθερό $D_{aver}=33$ για $m=512, 1K, 2K$ και 4K

m	512	1K	2K	4K
NRM SoC - Throughput MRC/sec	1.27	1.28	1.36	1.27
COPASI - Throughput MRC/sec	0.128	0.133	0.106	0.099

Πίνακας 20: Αξιολόγηση επιδόσεων της αρχιτεκτονικής NRM SoC και του προσομοιωτή COPASI με το μοντέλο LCSE 3^{ης} τάξης με σταθερό $D_{aver}=36$ για $m=512, 1K, 2K$ και $4K$

m	512	1K	2K	4K
NRM SoC - Throughput MRC/sec	1.33	1.32	1.24	1.23
COPASI - Throughput MRC/sec	0.091	0.099	0.09	0.095

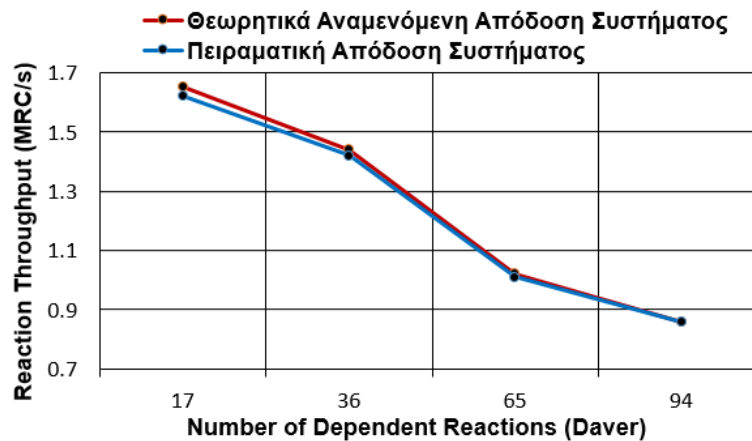
Στις Εικόνες 17 και 18 συνοψίζονται οι επιδόσεις της αρχιτεκτονικής NRM SoC και του προσομοιωτή COPASI για τα πειράματα με το LCSE μοντέλο (Πίνακες 17 και 18) όπου ο αριθμός των αντιδράσεων παρέμενε σταθερός $m=2K$ ενώ σταδιακά αυξανόταν ο αριθμός των επηρεαζόμενων αντιδράσεων (D_{aver}). Στα υπόλοιπα πειράματα όπου ο αριθμός των επηρεαζόμενων αντιδράσεων (D_{aver}) παρέμενε σταθερός ενώ σταδιακά αυξανόταν ο αριθμός των αντιδράσεων (m) παρατηρούμε από τους Πίνακες 19 και 20 ότι οι επιδόσεις της αρχιτεκτονικής NRM SoC και το COPASI παρουσιάζουν πολύ μικρές διακυμάνσεις. Η Εικόνα 17 παρουσιάζει τη σύγκριση των πειραματικών επιδόσεων με τις αναμενόμενες επιδόσεις όπως προέκυψαν από την θεωρητική ανάλυση επιδόσεων (βλ. Ενότητα 3.2). Η σύγκλιση των αποτελεσμάτων στην Εικόνα 17 δείχνει ότι η αρχιτεκτονική NRM SoC επιτυγχάνει να προσεγγίσει τις αναμενόμενες επιδόσεις επιβιώνοντας απόλυτα την θεωρητική ανάλυση. Το γράφημα (α) της Εικόνας 18 επιβεβαιώνει επίσης τις επιδόσεις της αρχιτεκτονικής είναι ανεξάρτητες από την τάξη των αντιδράσεων ενός βιομοντέλου. Η διεκπαιρευτική ικανότητα της αρχιτεκτονικής κυμαίνεται στα 1.5 MRC/sec στην περίπτωση ενός βιομοντέλου με έως 20 επηρεαζόμενες αντιδράσεις (D_{aver}) ενώ μειώνεται στα 0.9 MRC/sec στην περίπτωση ενός βιομοντέλου με 96 επηρεαζόμενες αντιδράσεις (D_{aver}). Οι επιδόσεις του προσομοιωτή COPASI είναι επίσης ανεξάρτητες από την τάξη των αντιδράσεων ενός βιομοντέλου ενώ δεν ξεπερνούν τα 0.18 MRC/sec.

5.2.2 Σύγκριση με COPASI

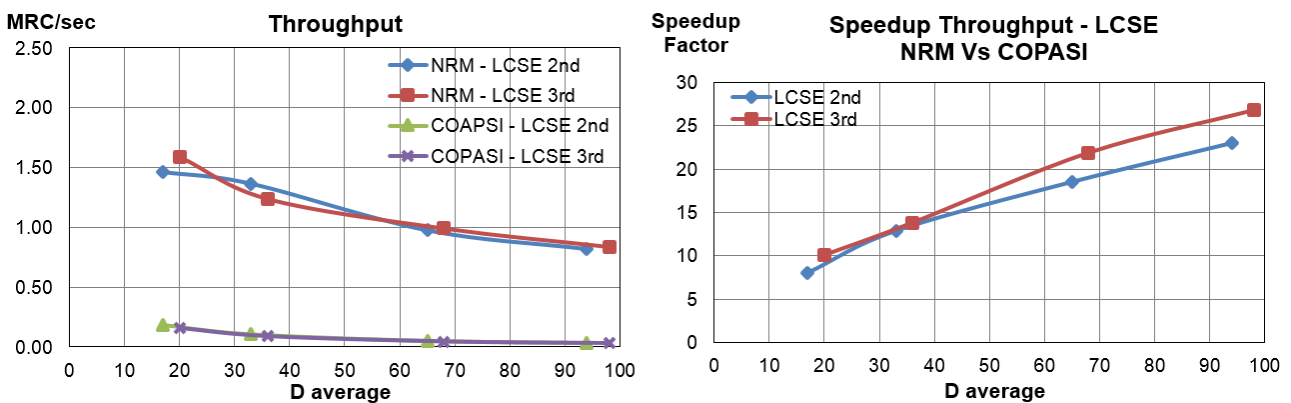
Το γράφημα (β) της Εικόνας 18 παρουσιάζει την σύγκριση των επιδόσεων της αρχιτεκτονικής NRM SoC με τις επιδόσεις του προσομοιωτή COPASI (βλ. Πίνακες 17 και 18) όσον αφορά την διεκπαιρευτική ικανότητα (throughput) των δύο συστημάτων. Παρατηρώντας το γράφημα βλέπουμε ότι η αρχιτεκτονική NRM SoC επιτυγχάνει έως και 10 φορές καλύτερη επίδοση στην περίπτωση βιομοντέλων που περιέχει έως και 20 επηρεαζόμενες αντιδράσεις ανεξαρτήτου τάξης. Ενώ στην περίπτωση ενός πολύπλοκο βιομοντέλου το οποίο αποτελείται από έως και 100 επηρεαζόμενες αντιδράσεις οι επιδόσεις της αρχιτεκτονικής προκύπτουν έως και 25 φορές υψηλότερες από αυτές του προσομοιωτή COPASI. Το αποτέλεσμα αυτό οφείλεται στον βαθμό κατά τον οποίο η αύξηση των επηρεαζόμενων αντιδράσεων επηρεάζει το κάθε σύστημα. Παρατηρώντας ξανά τους Πίνακες 17 και 18 βλέπουμε οι επιδόσεις της αρχιτεκτονικής NRM SoC μειώνονται καθώς αυξάνει ο αριθμός των επηρεαζόμενων αντιδράσεων ωστόσο όχι με τον ίδιο ρυθμό με τον οποίο μειώνονται οι επιδόσεις του προσομοιωτή COPASI. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα η αρχιτεκτονική NRM SoC να παρουσιάζει καλύτερες επιδόσεις σε σύγκριση με αυτές του προσομοιωτή COPASI παρά το γεγονός ότι αριθμός των επηρεαζόμενων αντιδράσεων αυξάνεται.

5.2.3 Συμπεράσματα

Για την επικύρωση της λειτουργίας της αρχιτεκτονικής NRM SoC διεξάγαμε 4 πειράματα με πραγματικά βιομοντέλα. Τα αποτελέσματα και των τεσσάρων πειραμάτων επιβεβαιώνουν την ορθή λειτουργία και



Εικόνα 17: Σύγκριση πειραματικών και αναμενόμενων επιδόσεων με το βιομοντέλο LCSE 2^{ης} τάξης για $m=2K$ και $D_{aver}=17, 33, 65, 94$.



(α) Αποτελέσματα των επιδόσεων της NRM SoC αρχιτεκτονικής και του προσομοιωτή COPASI

(β) Σύγκριση των επιδόσεων της αρχιτεκτονικής NRM SoC με τις επιδόσεις του προσομοιωτή COPASI

Εικόνα 18: Επιδόσεις της αρχιτεκτονικής NRM SoC και σύγκριση των επιδόσεων με τον προσομοιωτή COPASI με μοντέλο LCSE 2^{ης} και 3^{ης} τάξης για σταθερό $m=2K$ και κλιμακούμενο D_{aver} .

συμπεριφορά του συστήματος έπεται από την διασταύρωσή τους με τα αποτελέσματα της προσομοίωσης των αντίστοιχων πειραμάτων στον προσομοιωτή λογισμικού COPASI.

Για την αξιολόγηση των επιδόσεων της αρχιτεκτονικής εκτελέσαμε 16 in-silico πειράματα με το συνθετικό βιομοντέλο LCSE 2^{ης} και 3^{ης} τάξης το οποίο αναπτύξαμε εξετάζοντας περιπτώσεις όπου είτε ο αριθμός των επηρεαζόμενων αντιδράσεων παραμένει σταθερός (D_{aver}), ενώ αυξάνει ο αριθμός των αντιδράσεων (m), ή ο αριθμός των αντιδράσεων (m) παραμένει σταθερός, ενώ αυξάνει ο αριθμός των επηρεαζόμενων αντιδράσεων (D_{aver}). Στην πρώτη περίπτωση πειραμάτων επιβεβαιώθηκε ότι οι επιδόσεις της αρχιτεκτονικής είναι ανεξάρτητες της πολυπλοκότητας (m) ενός βιομοντέλου καθιστώντας εφικτή την προσομοίωση βιομοντέλων χιλιάδων αντιδράσεων. Η δεύτερη κατηγορία πειραμάτων έδειξε ότι οι επιδόσεις της αρχιτεκτονικής NRM SoC κυμαίνονται από 1 έως 1.5 MRC/sec ακόμη και στην περίπτωση πολύπλοκων βιοχημικών δικτύων με έως και 100 επηρεαζόμενες αντιδράσεις (D_{aver}). Επίσης αποδείχθηκε ότι αρχιτεκτονική NMR-SoC μπορεί να επιτύχει έως

και 25 φορές καλύτερη επίδοση σε σύγκριση με τις επιδόσεις του προσομοιωτή COPASI καθώς η πολυπλοκότητα του δικτύου ως προς τον αριθμό των επηρεαζόμενων αντιδράσεων αυξάνεται.



6. Σύγκριση FPGA SoCs

Στην ενότητα που ακολουθεί παρουσιάζουμε τα αποτελέσματα της σύγκρισης των δύο αρχιτεκτονικών, FRM SoC και NRM SoC [3], που υλοποιήθηκαν στο πλαίσιο του παρόντος έργου. Η εκτέλεση του αλγορίθμου NRM-SSA απαιτεί $\log(m)$ βήματα σε αντίθεση με τον αλγόριθμο FRM-SSA οποίος απαιτεί m βήματα εκτέλεσης όπου m ορίζουμε τον αριθμό των αντιδράσεων ενός βιομοντέλου. Από την άλλη πλευρά η φύση του αλγορίθμου FRM-SSA επιτρέπει την αποδοτική παραλληλοποίηση του προκειμένου να μειωθεί σημαντικά ο χρόνος εκτέλεσης της προσομοίωσης. Όσον αφορά τη μέθοδο NRM-SSA δεν είναι δυνατόν να επιτύχουμε την ίδια αποδοτική παραλληλοποίηση του αλγορίθμου καθώς στηρίζεται στη συντήρηση κεντροκοποιημένων δομών δεδομένων.

Σε αλγοριθμικό επίπεδο τα πλεονεκτήματα της μεθόδου NRM-SSA είναι ξεκάθαρα εφόσον η παραλληλοποίηση της μεθόδου FRM-SSA πάντα θα περιορίζεται από τους διαθέσιμους πόρους υλικού κάθε φορά που αυξάνει ο αριθμός των αντιδράσεων (m) ενός βιομοντέλου. Ωστόσο σε επίπεδο υλοποίησης υπάρχουν περιπτώσεις όπου ο αλγόριθμος NRM-SSA χάνει το αλγοριθμικό του πλεονέκτημα. Στη συνέχεια της παρούσας ενότητας εξετάζουμε περιπτώσεις όπου υπερिσχύει είτε η υλοποίηση NRM SoC είτε η υλοποίηση FRM SoC ενώ συγκρίνουμε και πόρους υλικού που απαιτούνται για την υλοποίησή τους.

6.1 Σύγκριση αρχιτεκτονικών

Για τη σύγκριση των δύο αρχιτεκτονικών χρησιμοποιήσαμε τα αποτελέσματα των πειραμάτων που διεξάγαμε για την επικύρωση των επιδόσεων (βλ. Ενότητες 4.2.1 και 5.2.1) με το συνθετικό βιομοντέλο LCSE. Σκοπός της σύγκρισης είναι να μελετηθούν οι περιπτώσεις όπου η αρχιτεκτονική NRM SoC παρουσιάζει καλύτερες επιδόσεις από την αρχιτεκτονική FRM SoC καθώς και οι περιπτώσεις όπου η αρχιτεκτονική FRM SoC κατορθώνει να προσεγγίσει τις επιδόσεις της αρχιτεκτονικής NRM SoC. Σύμφωνα με την Ενότητα 4.2.1 η αρχιτεκτονική FRM επιτυγχάνει υψηλότερες επιδόσεις στην περίπτωση όπου αξιοποιεί $N=32$ FRM επεξεργαστικές μονάδες για την παραλληλοποίηση του αλγορίθμου συνεπώς για τη σύγκριση των δύο αρχιτεκτονικών έχουμε χρησιμοποιήσει μόνο το αρχιτεκτονικό σχήμα FRM1x32, ($C=I$, $N=32$). Για τη σύγκριση των τρόπων λειτουργίας MSIP των δύο αρχιτεκτονικών χρησιμοποιήσαμε το βιομοντέλο ASYN αυξάνοντας σταδιακά τον αριθμό των στοχαστικών επαναλήψεων (R).

6.1.1 Σύγκριση επιδόσεων

Ο Πίνακας 21 παρουσιάζει τα αποτελέσματα από τα πειράματα που εκτελέστηκαν με το μοντέλο LCSE στις αρχιτεκτονικές FRM1x32 (ένας πυρήνας με 32 επεξεργαστικές μονάδες) και NRM1x1 (ένας πυρήνας με μια επεξεργαστική μονάδα). Στον πίνακα δίνονται οι χρόνοι εκτέλεσης του κάθε πειράματος, ο αριθμός των κύκλων αντιδράσεων (RCs) καθώς και οι επιδόσεις (Mega Reaction Cycles /second – MRC/sec) της κάθε αρχιτεκτονικής. Τα αποτελέσματα των επιδόσεων όσον αφορά τα πειράματα όπου κλιμακώνεται ο αριθμός των αντιδράσεων (m) επαληθεύουν το πλεονέκτημα της αρχιτεκτονικής NRM1x1 η οποία δεν επηρεάζεται από τον αριθμό των αντιδράσεων. Η αρχιτεκτονική NRM1x1 παρουσιάζει σταθερή επίδοση (1.33 MRC/sec – 1.23 MRC/Sec) καθώς αυξάνει ο αριθμός των αντιδράσεων (m) σε αντίθεση με την αρχιτεκτονική FRM1x32 (1.66 MRC/sec – 0.81 MRC/sec). Παρατηρούμε επίσης ότι οι χρόνοι ολοκλήρωσης των πειραμάτων στην αρχιτεκτονική NRM1x1 διπλασιάζονται με κάθε αύξηση του m . Ωστόσο κάτι τέτοιο είναι αναμενόμενο εφόσον διπλασιάζεται και ο αριθμός των κύκλων αντιδράσεων (RCs) οδηγώντας τελικά στη σταθερή επίδοση της αρχιτεκτονικής ανεξάρτητα από τον αριθμό των αντιδράσεων.

Πίνακας 21: Αποτελέσματα από τη σύγκριση των επιδόσεων των αρχιτεκτονικών FRM1x32 () και NRM1x1 με το μοντέλο LCSE για $m=512, 1K, 2K$ και $4K$ και $D_{aver}=20, 36, 68$ και 97

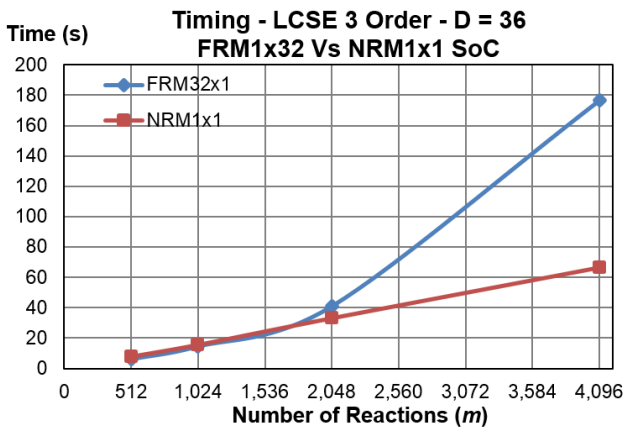
	Number of Reactions (m)				$D_{average}$			
	512	1K	2K	4K	20	36	68	97
FRM1x32 Time (sec)	6.2	14.62	41.05	176.39	40.95	40.94	41.04	41.34
NRM1x1 Time (sec)	7.71	15.52	33.14	66.69	25.83	33.14	41.35	48.86
FRM1x32 RCs	10.3M	21M	41M	142M	47M	47M	47M	47M
NRM1x1 RCs	10.2M	20.5M	40M	82M	40M	40M	41M	41M
FRM1x32 MRCs/sec	1.66	1.45	1.12	0.81	1.15	1.15	1.15	1.15
NRM1x1 MRCs/sec	1.33	1.32	1.24	1.23	1.59	1.24	0.99	0.84

Στα πειράματα όπου κλιμακώνεται ο αριθμός των επηρεαζόμενων αντιδράσεων (D_{aver}) η αρχιτεκτονική NRM1x1 παρουσιάζει αναμενόμενη (βλ. Εικόνα 17) σταδιακή μείωση των επιδόσεων της (1.59 MRC/sec – 0.84 MRC/sec) σε αντίθεση με την αρχιτεκτονική FRM1x32 η οποία δεν επηρεάζεται από την αύξηση του αριθμού των επηρεαζόμενων αντιδράσεων (D_{aver}).

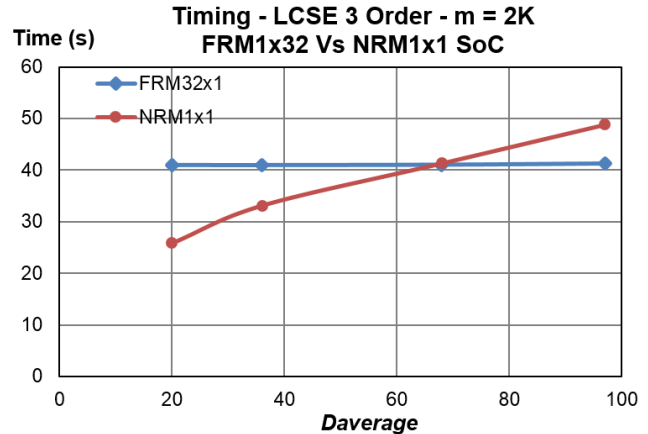
Η Εικόνα 19 παρουσιάζει τέσσερα γραφήματα στα οποία συγκρίνονται οι επιδόσεις του αρχιτεκτονικού σχήματος FRM1x32 με τις επιδόσεις της αρχιτεκτονικής NRM1x1. Στα δύο γραφήματα (α) και (γ) γίνεται η σύγκριση των επιδόσεων και χρόνων ολοκλήρωσης για την περίπτωση όπου ο αριθμός των επηρεαζόμενων αντιδράσεων (D_{aver}) παραμένει σταθερός ενώ αυξάνει ο αριθμός των αντιδράσεων (m). Ακολούθως στα γραφήματα (β) και (δ) παρουσιάζονται τα αποτελέσματα όπου παραμένει σταθερός ο αριθμός των αντιδράσεων (m) ενώ αυξάνει ο αριθμός των επηρεαζόμενων αντιδράσεων (D_{aver}).

Τα γραφήματα (α) και (β) της Εικόνας 19 παρουσιάζουν τη σύγκριση των χρόνων εκτέλεσης των πειραμάτων στις αρχιτεκτονικές FRM1x32 και NRM1x1 ενώ τα γραφήματα (γ) και (δ) παρουσιάζουν τη σύγκριση των επιδόσεων τους (MRC/sec). Σύμφωνα με το γράφημα (α), οι δύο αρχιτεκτονικές παρουσιάζουν παρόμοιους χρόνους εκτέλεσης για $m=512, 1K$ και $2K$. Για $m=4K$ η εικόνα αλλάζει καθώς η αρχιτεκτονική FRM1x32 πλέον απαιτεί τον τετραπλάσιο χρόνο προκειμένου να ολοκληρώσει το πείραμα αποκαλύπτοντας το πλεονέκτημα της αρχιτεκτονικής NRM1x1 στη προσομοίωση μεγάλων βιομοντέλων. Στο γράφημα (β) παρατηρούμε ότι η αρχιτεκτονική NRM1x1 ολοκληρώνει τα πειράματα για $D_{aver} = 20$ και 36 ενώ η αρχιτεκτονική FRM1x32 παρουσιάζει καλύτερους χρόνους για $D_{aver} = 68$ και 97 .

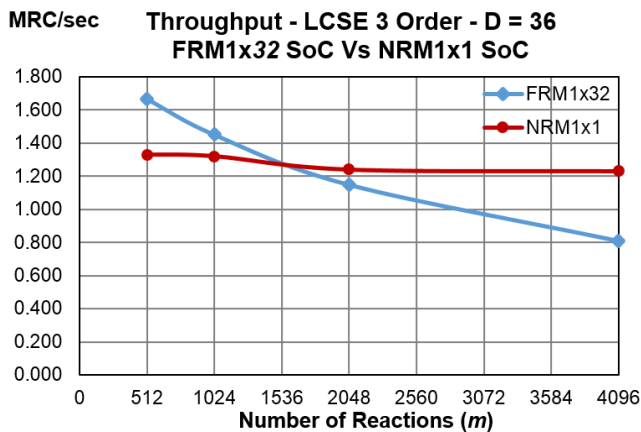
Τα γραφήματα (γ) και (δ) της Εικόνας 19 παρουσιάζουν τη σύγκριση των επιδόσεων (MRC/sec) των δύο αρχιτεκτονικών για τις δύο κατηγορίες πειραμάτων. Σύμφωνα με το γράφημα (γ) η αρχιτεκτονική FRM1x32 παρουσιάζει καλύτερες επιδόσεις για $m = 512$ και $1K$ ενώ για $m=2K$ τα δύο συστήματα παρουσιάζουν παρόμοιες επιδόσεις. Το θεωρητικό πλεονέκτημα της αρχιτεκτονικής NRM1x1 έναντι της αρχιτεκτονικής FRM1x32 εντοπίζεται στο σημείο όπου ο αριθμός των αντιδράσεων (m) που επεξεργάζεται η κάθε FRM επεξεργαστική



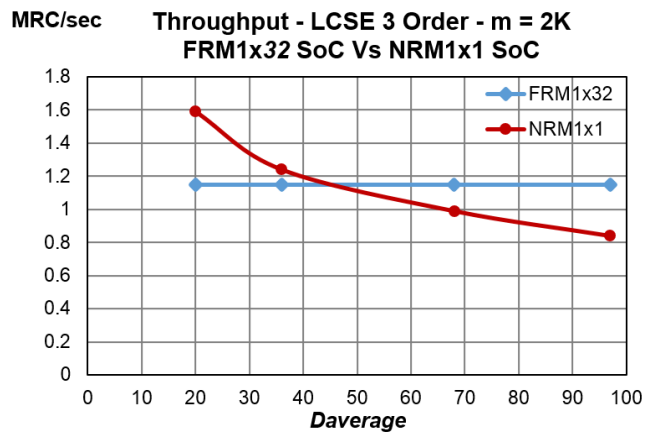
(α) Πειράματα με σταθερό αριθμό $D_{aver} = 36$ για $m = 512, 1K, 2K$ και $4K$



(β) Πειράματα με σταθερό αριθμό αντιδράσεων $m = 2K$ $D_{aver} = 20, 36, 68$ και 97



(γ) Πειράματα με σταθερό αριθμό $D_{aver} = 36$ για $m = 512, 1K, 2K$ και $4K$

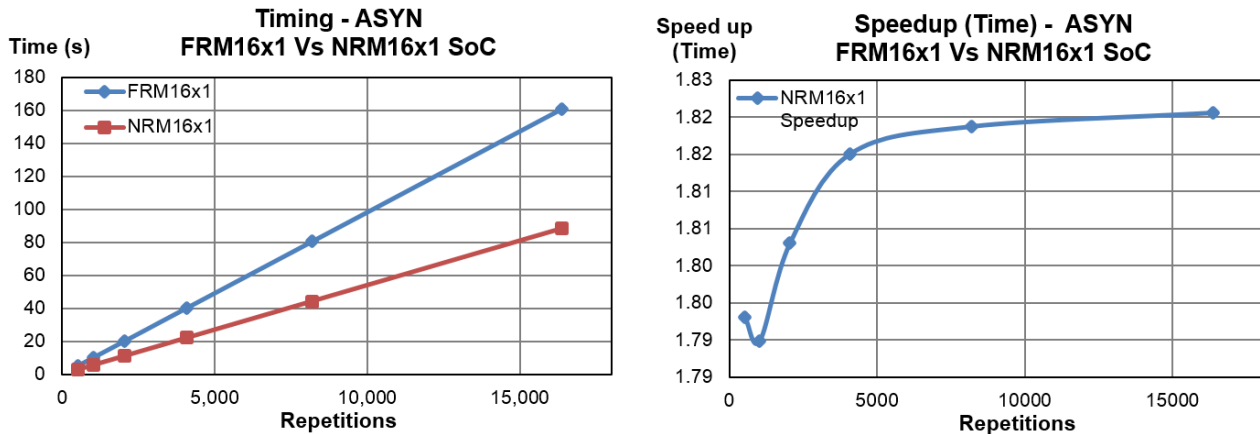


(δ) Πειράματα με σταθερό αριθμό αντιδράσεων $m = 2K$ $D_{aver} = 20, 36, 68$ και 97

Εικόνα 19: Σύγκριση αρχιτεκτονικών FRM1x32 SoC (συχνότητα λειτουργίας 175 MHz) και NRM1x1 SoC (συχνότητα λειτουργίας 160 MHz)

μονάδα (m/N) γίνει μεγαλύτερος από τον αριθμό των επηρεαζόμενων αντιδράσεων (D_{aver}) του εκάστοτε μοντέλου, δηλαδή για όσο ισχύει $m/N < D_{aver}$. Για την εκτέλεση των πειραμάτων με το μοντέλο LCSE ($D_{aver}=36$ και $m=512, 1K, 2K$ και $4K$) από την αρχιτεκτονική FRM1x32 ($N=32$) το σημείο αυτό εντοπίζεται στις 1152 αντιδράσεις. Ωστόσο όπως βλέπουμε από το γράφημα (γ) η αρχιτεκτονική FRM1x32 επιτυγχάνει παρόμοιες επιδόσεις με την αρχιτεκτονική NRM1x1 για m έως $2K$ κάτι το οποίο εξηγείται από την υψηλότερη συχνότητα λειτουργίας της (170 MHz). Στο γράφημα (δ) της Εικόνας 19 παρατηρούμε ότι η υλοποίηση της αρχιτεκτονικής NRM1x1 παρουσιάζει καλύτερες επιδόσεις από την αρχιτεκτονική FRM1x32 για $D_{aver} = 20$ και 36 ενώ η εικόνα αλλάζει για τις τιμές του $D_{aver} = 68$ και 97 .

Τα γραφήματα της Εικόνας 20 παρουσιάζουν τα αποτελέσματα των πειραμάτων με το βιομοντέλο ASYN στις αρχιτεκτονικές FRM16x1 και NRM16x1. Στο αριστερό γράφημα (α) βλέπουμε ότι και στις δύο αρχιτεκτονικές ο χρόνος εκτέλεσης των πειραμάτων αυξάνει γραμμικά κάθε φορά που διπλασιάζεται ο αριθμός των στοχαστικών επαναλήψεων (R). Στο δεξιό γράφημα (β) δίνεται ο παράγοντας επιτάχυνσης (speedup factor) της αρχιτεκτονικής NRM16x1 έναντι της αρχιτεκτονικής FRM16x1. Παρατηρώντας το διάγραμμα βλέπουμε ότι αρχιτεκτονική



Εικόνα 20: Σύγκριση αρχιτεκτονικών FRM16x1 (συχνότητα λειτουργίας 220 MHz) και NRM16x1 (συχνότητα λειτουργίας 180 MHz) με το βιομοντέλο ASYN για R=512, 1K, 2K, 4K 8K και 16K.

NRM16x1 είναι ταχύτερη κατά 79% - 82% από την αρχιτεκτονική FRM16x1 αφού χρειάζεται σχεδόν το μισό χρόνο για να ολοκληρώσει την εκτέλεση των πειραμάτων με το βιομοντέλο ASYN.

6.1.2 Σύγκριση σε επίπεδο κατανάλωσης πόρων υλικού

Ο Πίνακας 22 παρουσιάζει τα στατιστικά που σχετίζονται με την κατανάλωση πόρων για την υλοποίηση των αρχιτεκτονικών FRM1x32, FRM16x1, NRM1x1 και NRM16x1 χρησιμοποιώντας το FPGA XC7K325T. Η αρχιτεκτονική FRM1x32 χρησιμοποιεί $N=32$ FRM επεξεργαστικές μονάδες καταναλώνοντας το 69% των διαθέσιμων LUTs. Η αρχιτεκτονική NRM1x1 χρησιμοποιεί μια NRM επεξεργαστική μονάδα καταναλώνοντας μόλις το 11% των διαθέσιμων LUTs. Αντίστοιχα παρατηρούμε την ίδια αναλογία στον αριθμό των απαιτούμενων Flip-flops για την υλοποίηση των αρχιτεκτονικών FRM1x32 και NRM1x1. Όσον αφορά τον αριθμό των BRAMs οι αρχιτεκτονικές FRM1x32 και NRM1x1 παρουσιάζουν παρόμοιες απαιτήσεις ξεπερνώντας το 68% των διαθέσιμων BRAMs. Στην αρχιτεκτονική NRM1x1 ο αριθμός αυτός αποτελεί τον κύριο περιοριστικό παράγοντα και οφείλεται κυρίως στην υλοποίηση της μονάδας CoT (βλ. Παραδοτέο 1.2 “Σχεδίαση αρχιτεκτονικής SoC για τον NRM-SSA”). Σχετικά με τον αριθμό DSPs η αρχιτεκτονική FRM1x32 χρησιμοποιεί το 77% των διαθέσιμων πόρων λόγω των $N=32$ FRM επεξεργαστικών μονάδων σε αντίθεση με το 3% που απαιτεί η NRM1x1 υλοποίηση. Τέλος η αυξημένη πολυπλοκότητα της διόδου δεδομένων (datapath) της NRM1x1 υλοποίησης οδηγεί στη συχνότητα λειτουργίας των 160 MHz σε αντίθεση την αρχιτεκτονική FRM1x32 η οποία δύναται να λειτουργήσει στην υψηλότερη συχνότητα των 175 MHz.

Όσον αφορά τον MSIP τρόπο λειτουργίας η αρχιτεκτονική FRM16x1 χρειάζεται 48% των διαθέσιμων LUTs και το 23% των διαθέσιμων Flip-flops για την υλοποίηση των 16 FRM πυρήνων. Η αρχιτεκτονική NRM16x1 για την υλοποίηση των 16 πυρήνων της χρειάζεται το 74% των διαθέσιμων LUTs και το 39% των διαθέσιμων Flip-flops. Η κατανάλωση των BRAMs στις αρχιτεκτονικές FRM16x1 και NRM16x1 ξεπερνάει το 70% αποτελώντας τον περιοριστικό παράγοντα για τον διπλασιασμό των πυρήνων. Όσον αφορά την κατανάλωση των DSPs η αρχιτεκτονική FRM16x1 χρειάζεται 15% λιγότερες DSPs μονάδες σε σύγκριση με την αρχιτεκτονική NRM16x1. Και στον MSIP τρόπο η συχνότητα λειτουργίας της υλοποίησης NRM16x1 περιορίζεται στα 160 MHz λόγω της πολυπλοκότερης NRM διόδου δεδομένων σε αντίθεση με την υλοποίηση της FRM16x1 αρχιτεκτονικής η οποία δύναται να λειτουργήσει στα 220 MHz.

Πίνακας 22: Σύγκριση υλοποιήσεων σε επίπεδο κατανάλωσης πόρων υλικού χρησιμοποιώντας το FPGA XC7K325T

	LUTs	Flip-flops	BRAMs	DSPs	Freq. (MHz)
FRM1x32 (<i>m=4K</i>)	140,773 (69%)	132,883 (32%)	349 (78%)	738 (77%)	175
FRM16x1 (<i>m=2K</i>)	98,594 (48%)	95,277 (23%)	389 (87%)	400 (47%)	220
NRM1x1 (<i>m=4K, D_{aver}=128</i>)	24,437 (11%)	26,242 (6%)	301 (68%)	33 (3%)	160
NRM16x1 (<i>m=256, D_{aver}=15</i>)	151,021 (74%)	160,127 (39%)	309 (69%)	528 (62%)	180

6.2 Συμπεράσματα

Τα αποτελέσματα των πειραμάτων και η σύγκριση των υλοποιήσεων επιβεβαιώνουν τα πλεονεκτήματα της κάθε αρχιτεκτονικής. Αποδείχθηκε σε πειραματικό επίπεδο ότι υπάρχουν περιπτώσεις όπου οι επιδόσεις της αρχιτεκτονικής FRM SoC μπορεί να ξεπεράσουν τις επιδόσεις της αρχιτεκτονικής NRM SoC. Στις περιπτώσεις αυτές καθοριστικό ρόλο παίζει η συχνότητα λειτουργίας της κάθε αρχιτεκτονικής. Επιπλέον τα διαγράμματα της Εικόνας 19 απέδειξαν ότι οι επιδόσεις της αρχιτεκτονικής FRM SoC παρουσιάζουν σταδιακή μείωση καθώς αυξάνει ο αριθμός των αντιδράσεων (*m*) ενώ οι επιδόσεις της αρχιτεκτονικής NRM SoC επηρεάζονται μόνο από τον μέσο όρο του αριθμού των επηρεαζόμενων αντιδράσεων (*D_{aver}*). Η σύγκριση σε επίπεδο πόρων υλικού δείχνει ότι η υλοποίηση της αρχιτεκτονικής NRM SoC απαιτεί έως και το 1/7 των πόρων (LUTs/Flip-Flops) που απαιτεί η υλοποίηση του αρχιτεκτονικού σχήματος FRM1x32. Ωστόσο η υλοποίηση της αρχιτεκτονικής NRM SoC απαιτεί το 68% των BRAMs στην περίπτωση ενός μετρίου μεγέθους FPGA.

7. Τελικά Συμπεράσματα

Το έργο αυτό οδήγησε στην ανάπτυξη ενός καινοτόμου ευέλικτου συστήματος υψηλών επιδόσεων για την αποδοτική στοχαστική προσομοίωση μεγάλων βιοχημικών δικτύων. Μελετώντας τις ανάγκες και τις απαιτήσεις ενός τέτοιου συστήματος καταλήξαμε στη ανάπτυξη μιας πλατφόρμας η οποία χρησιμοποιεί έναν υπολογιστή γενικού σκοπού για την αλληλεπίδραση του χρήστη και ένα FPGA ως επιταχυντή υλικού (hardware accelerator) για την εκτέλεση στοχαστικών αλγορίθμων προσομοίωσης.

Σχεδιάσαμε και υλοποιήσαμε με FPGA δύο αρχιτεκτονικές για τη σημαντική επιτάχυνση της εκτέλεσης των αλγορίθμων FRM-SSA [1] και NRM-SSA [2]. Οι αρχιτεκτονικές έχουν τη μορφή “μαλακού πυρήνα” (soft IP core) και είναι παραμετρικές ως προς τα χαρακτηριστικά του βιομοντέλου, ενώ ο χρήστης μπορεί να συνδυάσει όπως επιθυμεί τον αριθμό των FRM/NRM πυρήνων είτε για την παράλληλη εκτέλεση διαφορετικών in-silico πειραμάτων είτε για την παραλληλοποίηση του αριθμού των στοχαστικών επαναλήψεων του ίδιου πειράματος. Στην περίπτωση της αρχιτεκτονικής FRM SoC ο χρήστης μπορεί να επιλέξει τον αριθμό FRM επεξεργαστικών μονάδων προκειμένου να επιτύχει τη βέλτιστη παράλληλη επεξεργασία των αντιδράσεων ενός βιομοντέλου. Επιπλέον μέσω της αποδοτικής αξιοποίησης των διαθέσιμων πόρων οι δύο υλοποιήσεις SoCs είναι σε θέση να αντιμετωπίσουν προβλήματα προσομοίωσης χιλιάδων αντιδράσεων δικτύων (έως $m = 4K$ σε ένα μεσαίου μεγέθους FPGA) και χιλιάδων στοχαστικών επαναλήψεων.

Για την επικύρωση της λειτουργίας των αρχιτεκτονικών SoCs διεξάγαμε μια σειρά πειραμάτων χρησιμοποιώντας πραγματικά βιομοντέλα SBML από τη διεθνή βιβλιογραφία (LVS, EK, ASYN, SIDM) και συγκρίναμε με επιτυχία τα αποτελέσματα των πειραμάτων με τα αποτελέσματα του δημοφιλούς προσομοιωτή βιοχημικών δικτύων COPASI. Για την αξιολόγηση των επιδόσεων της κάθε αρχιτεκτονικής SoC κατασκευάσαμε συνθετικά βιομοντέλα (benchmark biomodels) στα οποία ο αριθμός των αντιδράσεων (m) αλλά και ο αριθμός των επηρεαζόμενων αντιδράσεων (D_{aver}) μπορεί να καθοριστεί με ελεγχόμενο τρόπο. Μέσα από πληθώρα πειραμάτων διαφορετικών συνδυασμών m και D_{aver} δείξαμε ότι και οι δύο υλοποιήσεις, FRM SoC και NRM SoC [3], επιτυγχάνουν τις θεωρητικά αναμενόμενες επιδόσεις που παρουσιάσαμε (βλ. Ενότητες 3.1 και 3.2) οδηγώντας σε συστήματα που είναι σε θέση να εκτελούν εκατομμύρια βήματα προσομοίωσης το δευτερόλεπτο (MRC/sec). Επιπλέον εξετάσαμε πειραματικά το θεωρητικό αλγοριθμικό πλεονέκτημα της μεθόδου NRM-SSA έναντι της μεθόδου FRM-SSA συγκρίνοντας τις δύο αρχιτεκτονικές SoCs σε επίπεδο υλοποίησης. Αποδείξαμε ότι υπάρχουν περιπτώσεις όπου η υλοποίηση FRM SoC μπορεί να υπερिσχύσει της υλοποίησης NRM SoC με το ανάλογο κόστος σε κατανάλωση πόρων υλικού. Κλείνοντας το παρόν έργο πιστεύουμε ότι η έρευνα μας πέτυχε απολύτως τους στόχους της, συνεισφέροντας νέα αποδοτικά αλλά και ευέλικτα συστήματα υλικού για τη σημαντική επιτάχυνση στοχαστικών προσομοιώσεων βιολογικών δικτύων αυξανόμενης πολυπλοκότητας. Η δυνατότητα αυτή είναι απολύτως απαραίτητη για την επίτευξη του στόχου της αξιόπιστης στοχαστικής προσομοίωσης του κυττάρου, που αποτελεί μια από τις βασικότερες υπολογιστικές προκλήσεις της τρέχουσας δεκαετίας.

ΑΝΑΦΟΡΕΣ

- [1] D. T. Gillespie, "Stochastic simulation of chemical kinetics," *Annu. Rev. Phys. Chem.*, vol. 58, no. 1, pp. 35-55, 2007.
- [2] M. A. Gibson and J. Bruck, "Efficient exact stochastic simulation of chemical systems with many species and many channels," *The journal of physical chemistry A*, vol. 104, no. 9, pp. 1876--1889, 2000.
- [3] E. Koutsouradis, G. Provelengios, E. Kouskoumvekakis and E. S Manolakos, "Scalable FPGA accelerator of the NRM algorithm for efficient stochastic simulation of large-scale biochemical reaction networks," in *Digital System Design (DSD), 2015 Euromicro Conference on*, pp. 648-653, 2015.
- [4] Xilinx, "Xilinx," Xilinx Inc, [Online]. Available: <http://www.xilinx.com/>. [Accessed 01 Jun 2013].
- [5] S. Hoops, S. Sahle, R. Gauges, C. Lee, J. Pahle, S. Natalia, M. Singhal, L. Xu, P. Mendes and U. Kummer, "COPASI—A complex pathway simulator," *Bioinformatics*, vol. 22, no. 24, pp. 3067--3074, 2006.
- [6] Schneider and M. Victoria, "In Silico Systems Biology," Humana Press, 2013, pp. 182-185.
- [7] Y. Zhou, J. Liepe, X. Sheng, M. P. Stumpf and C. Barnes, "GPU accelerated biochemical network simulation," *Bioinformatics*, vol. 27, no. 6, pp. 874-876, 2011.
- [8] E. Ouzounoglou, D. Kalamatianos, E. Emmanouilidou, M. Xilouri, L. Stefanis, K. Vekrellis and E. S. Manolakos, "In silico modeling of the effects of alpha-synuclein oligomerization on dopaminergic neuronal homeostasis," *BMC systems biology*, vol. 8, no. 1, p. 54, 2014.
- [9] E. Ouzounoglou, D. Kalamatianos, E. Emmanouilidou, M. Xilouri, L. Stefanis, K. Vekrellis and E. S. Manolakos, "Bimodels Database (EMBL-EBI)," [Online]. Available: <https://www.ebi.ac.uk/biomodels-main/BIOMD0000000559>. [Accessed 01 May 2015].
- [10] N. M. Shnerb, Y. Louzoun, E. Bettelheim and S. Solomon, "The importance of being discrete: Life always wins on the surface," *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 97, no. 19, pp. 10322--10324, 2000.
- [11] B. Database, "BioModels Database," BioModels Database (EMBL-EBI), [Online]. Available: <https://www.ebi.ac.uk/biomodels-main/>. [Accessed 01 Jun 2013].
- [12] V. Chellaboina, S. P. Bhat, W. M. Haddad and D. S. Bernstein, "Modeling and analysis of mass-action kinetics," *Control Systems, IEEE*, vol. 29, no. 4, pp. 60--78, 2009.