

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

(κωδικός 3828 και Κ.Α. 70/3/12367)

ΠΑΡΑΔΟΤΕΟ 3.2

Πληροφοριακό υλικό για τη χρήση της υπηρεσίας ιστού

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 «Πληροφορικό υλικό για τη χρήση της υπηρεσίας ιστού» 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.....	6
2. ΛΟΓΑΡΙΑΣΜΟΙ ΧΡΗΣΤΗ.....	7
2.1 Δημιουργία Λογαριασμού Χρήστη	7
2.2 Σύνδεση Χρήστη	7
3. ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗ ΒΙΟΜΟΝΤΕΛΩΝ.....	9
3.1 Επισκόπηση Βιομοντέλων.....	9
3.2 Εισαγωγή Νέου Βιομοντέλου.....	11
3.3 Περιορισμοί Συστήματος.....	12
4. ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΩΝ	13
4.1 Επισκόπηση Προσομοιώσεων	13
4.2 Εισαγωγή Νέας Προσομοίωσης	14
4.3 Απεικόνιση Αποτελεσμάτων	17
5. ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ ΧΡΗΣΗΣ ΤΗΣ ΥΠΗΡΕΣΙΑΣ WEBSTOCH.....	18
ΑΝΑΦΟΡΕΣ.....	21



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην ποιότητα 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: Κεντρική σελίδα του WebStoch.	6
Εικόνα 2: Σελίδα εγγραφής νέου χρήστη.	7
Εικόνα 3: Σελίδα σύνδεσης του χρήστη στον λογαριασμό του.....	8
Εικόνα 4: Σύνδεσμος για την προβολή των αποθηκευμένων βιομοντέλων.	9
Εικόνα 5: Σελίδα των διαθέσιμων βιομοντέλων.	10
Εικόνα 6: Πληροφορίες σχετικά με την εισαγωγή ενός βιομοντέλου.	10
Εικόνα 7: Σύνδεσμος για την εισαγωγή νέων βιομοντέλων.	11
Εικόνα 8: Σελίδα εισαγωγής νέων βιομοντέλων.	12
Εικόνα 9: Σύνδεσμος για την προβολή των εισαχθέντων προσομοιώσεων.	13
Εικόνα 10: Σελίδα εισαχθέντων προσομοιώσεων.	14
Εικόνα 11: Σύνδεσμος για την εισαγωγή νέων προσομοιώσεων.	16
Εικόνα 12: Σελίδα εισαγωγής νέων προσομοιώσεων.....	16
Εικόνα 13: Εισαγωγή του βιομοντέλου ASYN στην υπηρεσία.	18
Εικόνα 14: Δημιουργία προσομοίωσης με το βιομοντέλο ASYN.....	19
Εικόνα 15: Γραφική απεικόνιση αποτελεσμάτων προσομοίωσης του βιομοντέλου ASYN με χρήση του προγράμματος Microsoft Excel.....	20



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: Παράμετροι Προσομοίωσης 14



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



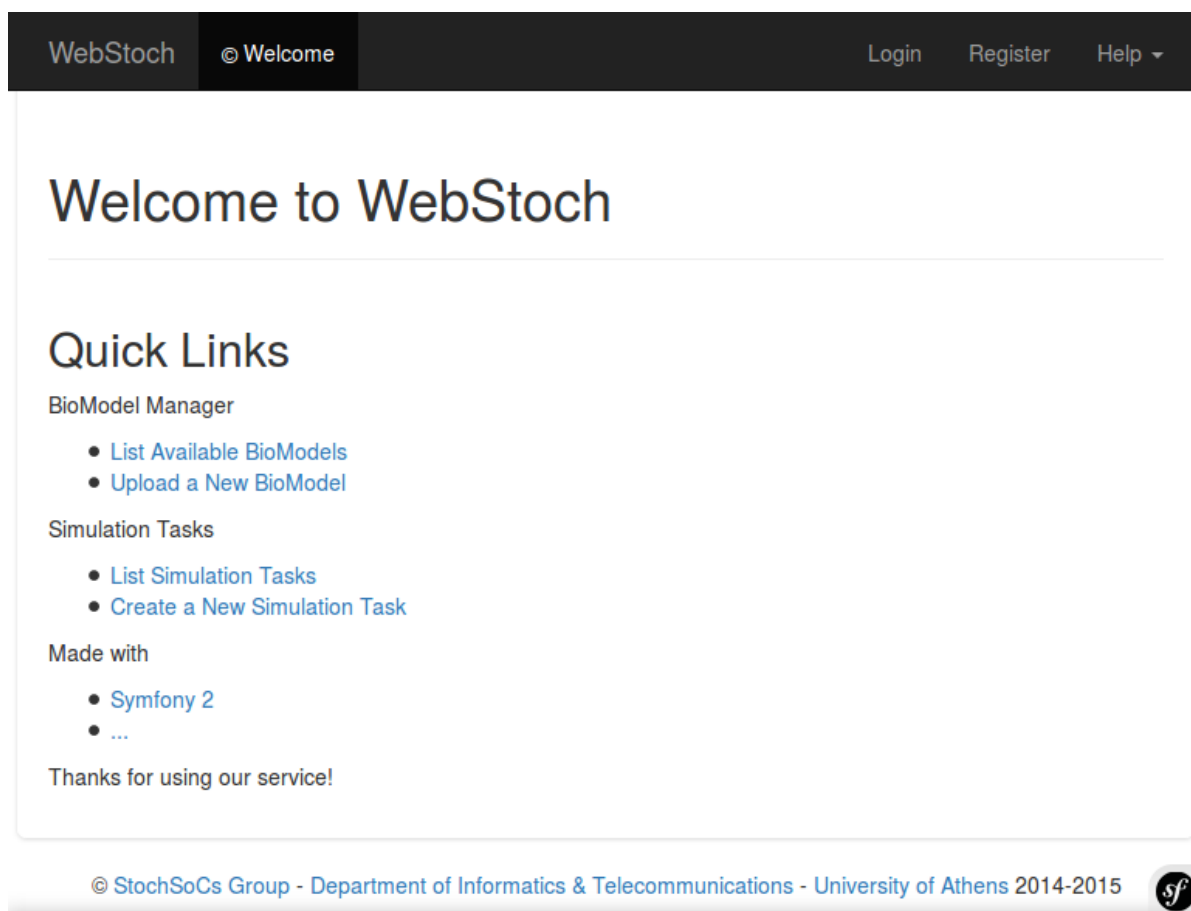
ΕΣΠΑ
2007-2013
Πρόγραμμα για την ανάπτυξη

ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

1. ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Το WebStoch είναι μια πιλοτική διαδικτυακή υπηρεσία για την αποδοτική στοχαστική προσομοίωση βιοχημικών δικτύων. Η υπηρεσία είναι διαθέσιμη στη διεύθυνση webstoch.ddns.net. Ο σκοπός του WebStoch είναι η παροχή μιας φιλικής υπηρεσίας προς τον χρήστη η οποία θα επιτρέπει στους επιστήμονες της βιολογίας συστημάτων να υποβάλλουν δίκτυα (σε μορφή SBML [1]) μέσω του διαδικτύου για ανάλυση και βέλτιστη παράλληλη στοχαστική προσομοίωση χωρίς να χρειάζεται να έχουν ειδική γνώση πληροφορικής.

Το παρόν εγχειρίδιο οδηγιών αρχικά έχει σκοπό την εξοικείωση του χρήστη με τη διαδικασία δημιουργίας λογαριασμού στην υπηρεσία για την σύνδεση του στον διακομιστή. Έπειτα δίνονται οδηγίες σχετικά με τις διαδικασίες εισαγωγής και διαγραφής βιομοντέλων στην υπηρεσία και τέλος παρουσιάζονται αναλυτικές οδηγίες για την προσομοίωση βιομοντέλων μέσω του WebStoch. Παράδειγμα της κεντρικής σελίδας του WebStoch δίνεται στην Εικόνα 1.



Εικόνα 1: Κεντρική σελίδα του WebStoch.

2. Λογαριασμοί Χρήστη

2.1 Δημιουργία Λογαριασμού Χρήστη

Για τη δημιουργία λογαριασμού ο χρήστης θα πρέπει να συμπληρώσει μέσω του WebStoch μια αίτηση εγγραφής. Η φόρμα εγγραφής εμφανίζεται κάνοντας ένα κλικ στο σύνδεσμο της σελίδας **Register** που βρίσκεται πάνω δεξιά στη κεντρική σελίδα του WebStoch. Κάνοντας κλικ ο χρήστης μεταβαίνει στη σελίδα εγγραφής **Register**, όπως απεικονίζεται στην Εικόνα 2.

Ο χρήστης υποβάλει τα στοιχεία του στον διακομιστή πατώντας το κουμπί **Register** το οποίο βρίσκεται κάτω αριστερά από τη φόρμα εγγραφής. Έπειτα, ο διαχειριστής της υπηρεσίας αφού ελέγξει τα στοιχεία του χρήστη δημιουργεί τον λογαριασμό του.

Εικόνα 2: Σελίδα εγγραφής νέου χρήστη.

2.2 Σύνδεση Χρήστη

Αφού δημιουργηθεί ο λογαριασμός του χρήστη είναι πλέον σε θέση να συνδεθεί στην υπηρεσία. Για να συνδεθεί στον λογαριασμό του θα πρέπει να κάνει ένα κλικ στον σύνδεσμο **Login** της κεντρικής σελίδας του WebStoch. Το κουμπί για τον σύνδεσμο **Login** βρίσκεται πάνω δεξιά στην κεντρική σελίδα του WebStoch. Παράδειγμα της σελίδας Login δίνεται στην Εικόνα 3. Ο χρήστης τικάροντας το κουτάκι **Remember me** μπορεί να επιλέξει την αυτόματη είσοδο στον λογαριασμό του, κάθε φορά που συνδέεται στο WebStoch, χωρίς να είναι απαραίτητη η εκ νέου εισαγωγή των στοιχείων του. Μετά το πάτημα του κουμπιού **Login** ο χρήστης μεταβαίνει αυτόματα στην κεντρική σελίδα του WebStoch.

WebStoch © Welcome Login Register Help

Login

Log in

Username Password Remember me

© StochSoCs Group - Department of Informatics & Telecommunications - University of Athens 2014-2015

Εικόνα 3: Σελίδα σύνδεσης του χρήστη στον λογαριασμό του.

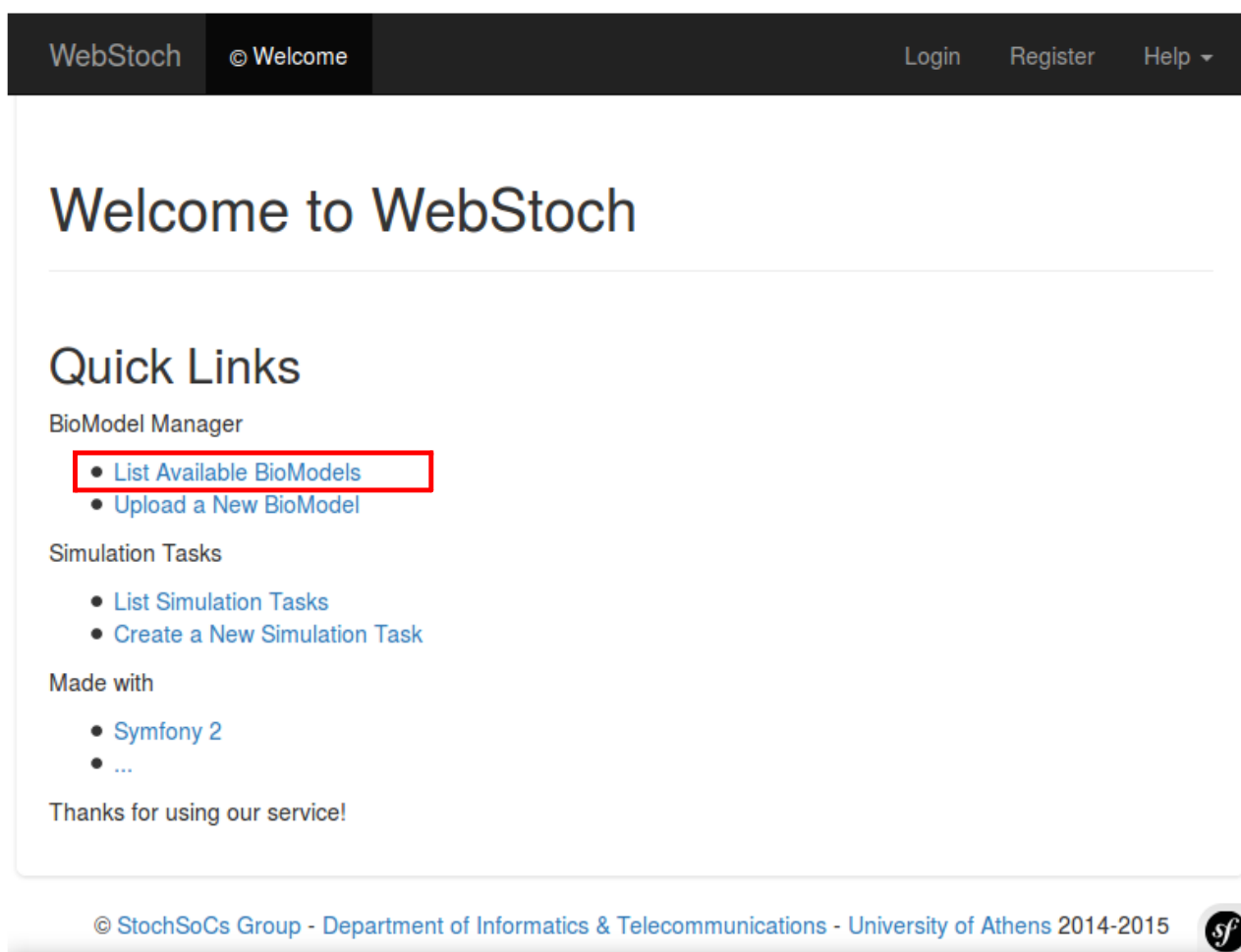
Ο χρήστης μπορεί να αποσυνδεθεί από τον λογαριασμό κάνοντας ένα κλικ πάνω στο username του στην κεντρική σελίδα του WebStoch όπου μεταξύ άλλων θα του εμφανιστεί η επιλογή **Logout**.

3. Διαχείριση Βιομοντέλων

Με τη δημιουργία λογαριασμού, ο χρήστης αποκτά αποθηκευτικό χώρο στον διακομιστή για την αποθήκευση βιομοντέλων. Συνεπώς έχει τη δυνατότητα να εισάγει βιομοντέλα στην υπηρεσία τα οποία θα αποθηκεύονται αυτόματα στον χώρο που του έχει διατεθεί. Τα βιομοντέλα αυτά μπορεί να τα επαναχρησιμοποιήσει σε μεταγενέστερα πειράματα χωρίς να είναι απαραίτητη η εκ νέου εισαγωγή τους. Επίσης έχει τη δυνατότητα να διαγράψει τα βιομοντέλα που δεν επιθυμεί πλέον.

3.1 Επισκόπηση Βιομοντέλων

Ο χρήστης προκειμένου να δει τα βιομοντέλα που έχει εισάγει μέχρι στιγμής στην υπηρεσία μπορεί να κάνει ένα κλικ στον σύνδεσμο **List Available BioModels** ο οποίος βρίσκεται στην κεντρική σελίδα του WebStoch, όπως απεικονίζεται στην Εικόνα 4. Αφού κάνει κλικ στον σύνδεσμο αυτό θα μεταβεί στην σελίδα των αποθηκευμένων βιομοντέλων **List BioModels**. Παράδειγμα της σελίδας των διαθέσιμων βιομοντέλων δίνεται



Εικόνα 4: Σύνδεσμος για την προβολή των αποθηκευμένων βιομοντέλων.

στην Εικόνα 5.

BioModel	User	Status	Actions
AlphaSynuclein	admin	Enabled	[Show] [Remove]
ASYN	admin	Enabled	[Show] [Remove]
EColi	admin	Enabled	[Show] [Remove]

© StochSoCs Group - Department of Informatics & Telecommunications - University of Athens 2014-2015

Εικόνα 5: Σελίδα των διαθέσιμων βιομοντέλων.

BioModel Name: AlphaSynuclein
File URL: webstoch.ddns.net/files/workspace/admin/biomodel/5621270ed2a8d_ASYN.xml
Created: October 16, 2015 19:34
Updated: October 16, 2015 19:34
Creator: admin
Status: Enabled

[Return to BioModels List](#)

© StochSoCs Group - Department of Informatics & Telecommunications - University of Athens 2014-2015

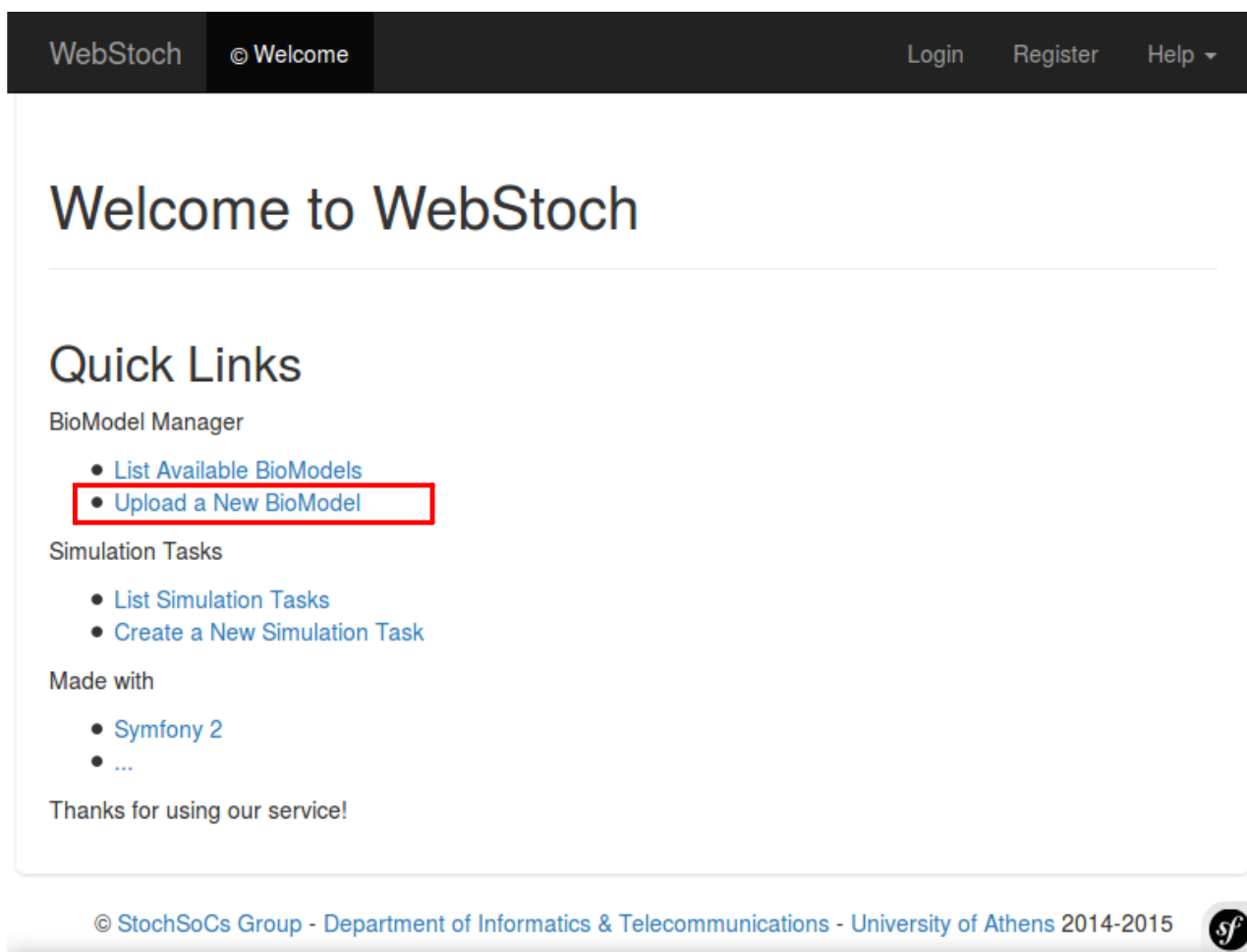
Εικόνα 6: Πληροφορίες σχετικά με την εισαγωγή ενός βιομοντέλου.

Στο παράδειγμα της εικόνας φαίνονται τέσσερα βιομοντέλα. Ο χρήστης σε αυτή τη σελίδα έχει τη δυνατότητα είτε να δει πληροφορίες σχετικά με την εισαγωγή ενός βιομοντέλου ή να διαγράψει το βιομοντέλο από την υπηρεσία. Οι ενέργειες αυτές (**Actions**) εκτελούνται κάνοντας ένα κλικ στους αντίστοιχους συνδέσμους **Show** και **Remove**. Ο χρήστης κάνοντας κλικ σε ένα βιομοντέλο ή στην επιλογή **Show** μεταβαίνει στην σελίδα **Show BioModel**. Στην σελίδα αυτή ο χρήστης βλέπει περαιτέρω πληροφορίες σχετικά με την ημερομηνία εισαγωγής και ανανέωσης του βιομοντέλου, όπως απεικονίζονται στην Εικόνα 6.

3.2 Εισαγωγή Νέου Βιομοντέλου

Για να εισάγει ο χρήστης ένα νέο βιομοντέλο στην υπηρεσία θα πρέπει να κάνει ένα κλικ στον σύνδεσμο της σελίδας **Upload a New BioModel**, ο οποίος βρίσκεται στην κεντρική σελίδα του WebStoch (βλ. Εικόνα 7). Κάνοντας κλικ στον σύνδεσμο αυτό μεταβαίνει στην σελίδα εισαγωγής νέων βιομοντέλων **Upload BioModel**, όπως φαίνεται στην Εικόνα 8.

Στη σελίδα αυτή ο χρήστης εντοπίζει το βιομοντέλο που επιθυμεί να εισάγει στην υπηρεσία, μέσω του κουμπιού **Browse**, και συμπληρώνει το όνομα του βιομοντέλου (**BioModel Name**). Το βιομοντέλο θα πρέπει να έχει τη μορφή SBML αρχείου [1]. Τέλος, υποβάλει το βιομοντέλο κάνοντας ένα κλικ στο κουμπί **Submit**.



Εικόνα 7: Σύνδεσμος για την εισαγωγή νέων βιομοντέλων.

WebStoch © Welcome BioModel Manager Simulation Tasks admin ▾ Help ▾

Upload BioModel


Bio Model Upload

Please upload your SBML biomodel. We currently only support mass action kinetics in SBML biomodels.

Bio Model Details

BioModel Name	<input type="text" value="AlphaSynuclein"/>
BioModel File	<input type="button" value="Browse..."/> ASYN.xml
<input type="button" value="Submit"/>	

© StochSoCs Group - Department of Informatics & Telecommunications - University of Athens 2014-2015



Εικόνα 8: Σελίδα εισαγωγής νέων βιομοντέλων.

3.3 Περιορισμοί Συστήματος

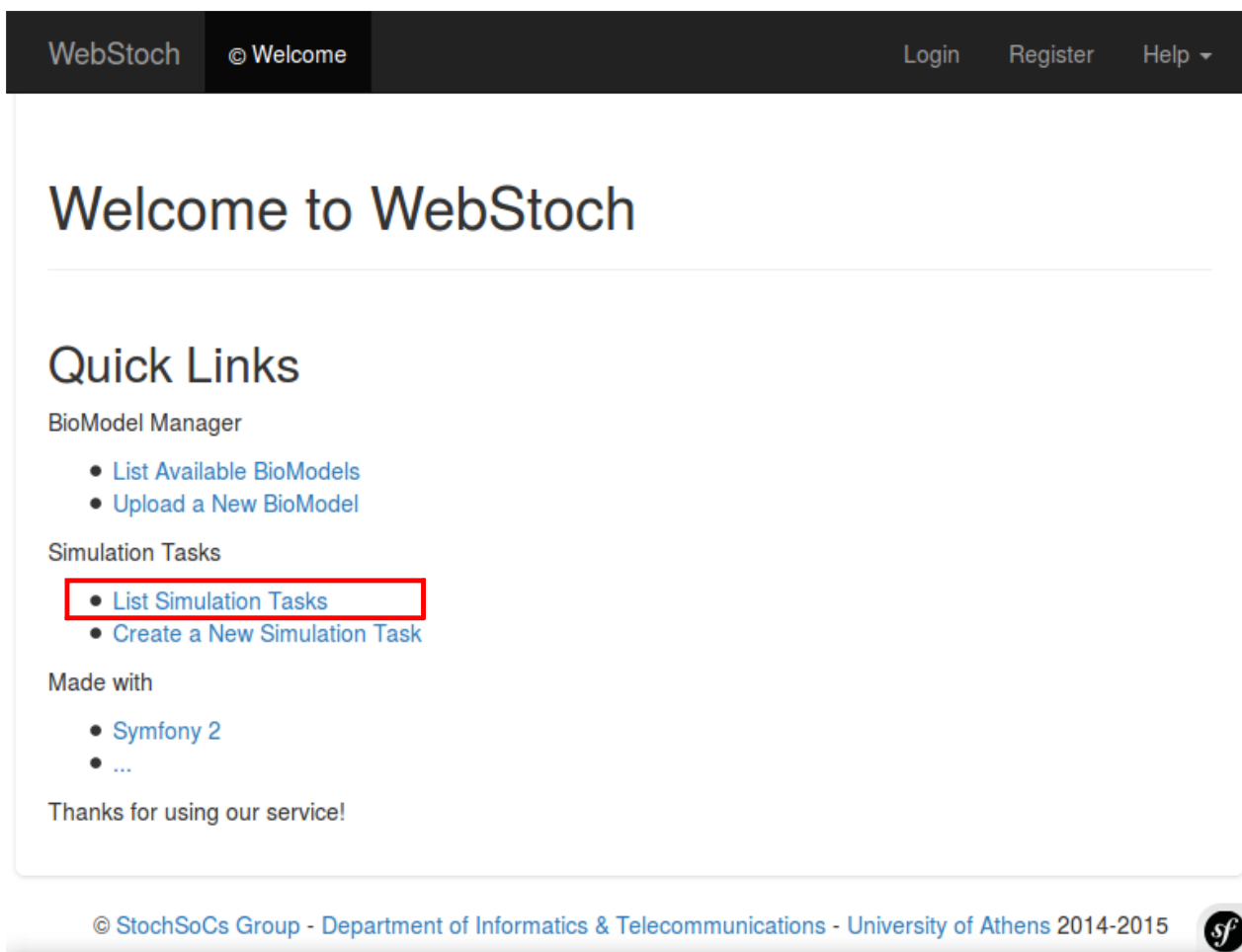
Το WebStoch μπορεί να προσομοιώσει δίκτυα βιομοριακών αντιδράσεων μέχρι και 3^{ης} τάξης [2] με μέχρι 5 προϊόντα. Οι αντιδράσεις πρέπει να μην είναι αναστρέψιμες και να ακολουθούν τους νόμους της κινητικής Mass Action [3]. Το σύστημα δεν υποστηρίζει SBML συμβάντα (events) όπως άλλωστε και τα περισσότερα προγράμματα στοχαστικής προσομοίωσης δικτύων βιοχημικών αντιδράσεων. Σε περίπτωση που κάποιο SBML βιομοντέλο δεν πληροί τους παραπάνω περιορισμούς η προσομοίωση τερματίζεται κατά την ανάλυση του και ενημερώνεται ο χρήστης.

4. Διαχείριση Προσομοιώσεων

Ο χρήστης μετά τη δημιουργία του λογαριασμού του στην υπηρεσία μπορεί να προχωρήσει στην εκτέλεση πειραμάτων στοχαστικής προσομοίωσης. Για να το κάνει αυτό αρχικά θα πρέπει να δημιουργήσει μια νέα προσομοίωση στο σύστημα. Κάθε νέα προσομοίωση που δημιουργείται στο WebStoch εισέρχεται σε μια ουρά εργασιών. Εάν τη στιγμή της εισαγωγής μιας νέας προσομοίωσης υπάρχουν διαθέσιμοι υπολογιστικοί πόροι τότε το σύστημα ξεκινά άμεσα την εκτέλεση της προσομοίωσης του χρήστη. Διαφορετικά η προσομοίωση παραμένει στην ουρά εργασιών έως ότου απελευθερωθεί κάποιος υπολογιστικός πόρος.

4.1 Επισκόπηση Προσομοιώσεων

Ο χρήστης προκειμένου να δει τις προσομοιώσεις που έχει εισάγει στο σύστημα μπορεί να κάνει ένα κλικ στον σύνδεσμο **List Simulation Tasks** ο οποίος υπάρχει στην κεντρική σελίδα, όπως απεικονίζεται στην Εικόνα 9. Αφού πατήσει τον σύνδεσμο θα μεταβεί στην σελίδα των εισαχθέντων προσομοιώσεων **List Existing Simulation Tasks**. Παράδειγμα της σελίδας των εισαχθέντων προσομοιώσεων δίνεται στην Εικόνα 10.



Εικόνα 9: Σύνδεσμος για την προβολή των εισαχθέντων προσομοιώσεων.

Simulation Task	BioModel	Created	Updated	Results	Actions
SimTask.EColi	EColi	October 16, 2015 13:09	October 16, 2015 13:10	Unavailable (Failed)	[Show] [Edit] [Remove]
SimTask.ASYN	ASYN	October 16, 2015 13:05	October 16, 2015 13:09	Unavailable (Failed)	[Show] [Edit] [Remove]

© StochSoCs Group - Department of Informatics & Telecommunications - University of Athens 2014-2015

Εικόνα 10: Σελίδα εισαχθέντων προσομοιώσεων.

Στο παράδειγμα της εικόνας φαίνονται δυο προσομοιώσεις. Ο χρήστης από αυτή τη σελίδα μπορεί να δει το αναγνωριστικό της προσομοίωσης (**Simulation Task**), το όνομα του βιομοντέλου (**BioModel**) της προσομοίωσης καθώς και τις ημερομηνίες δημιουργίας και ανανέωσης της κάθε προσομοίωσης (**Created, Updated**). Επιπλέον μπορεί να παρακολουθήσει την εξέλιξη και την κατάσταση της προσομοίωσης από το πεδίο **Results**. Ο χρήστης επίσης από τη σελίδα **List Existing Simulation** μπορεί να πραγματοποιήσει τις εξής ενέργειες: να δει πληροφορίες σχετικά με τις αρχικές παραμέτρους του πειράματος που έχει εισάγει, να τροποποιήσει τις παραμέτρους αυτές καθώς και να διαγράψει την προσομοίωση από το σύστημα. Οι ενέργειες αυτές εκτελούνται κάνοντας ένα κλικ στους αντίστοιχους συνδέσμους **Show**, **Edit** και **Remove**. Οι δύο τελευταίες ενέργειες μπορούν να πραγματοποιηθούν μόνο στην περίπτωση που η εκάστοτε προσομοίωση δεν έχει ξεκινήσει να εκτελείται.

4.2 Εισαγωγή Νέας Προσομοίωσης

Ο χρήστης προκειμένου να εισάγει μια νέα προσομοίωση στο σύστημα κάνει ένα κλικ στον σύνδεσμο **Create a New Simulation Task** ο οποίος υπάρχει στην κεντρική σελίδα του WebStoch, όπως απεικονίζεται στην Εικόνα 11. Κάνοντας κλικ στον σύνδεσμο ο χρήστης μεταβαίνει στη σελίδα δημιουργίας προσομοιώσεων **Create New Simulation Task**, όπως απεικονίζεται στην Εικόνα 12. Στο σημείο αυτό ο χρήστης καλείται να συμπληρώσει μια φόρμα με τις παραμέτρους της προσομοίωσης που επιθυμεί. Ο Πίνακας 1 που ακολουθεί συνοψίζει τις παραμέτρους της προσομοίωσης. Μετά την συμπλήρωση των παραμέτρων ο χρήστης μπορεί να υποβάλει την προσομοίωση του κάνοντας ένα κλικ στο κουμπί **Create**.

Πίνακας 1: Παράμετροι Προσομοίωσης

Παράμετροι	Περιγραφή Παραμέτρων
Name	Στο πεδίο αυτό ο χρήστης συμπληρώνει το όνομα της προσομοίωσης. Με το όνομα αυτό θα εμφανίζεται η προσομοίωση στη σελίδα επισκόπησης προσομοιώσεων.
BioModel	Στο σημείο αυτό ο χρήστης επιλέγει το βιομοντέλο που επιθυμεί να προσομοιώσει. Η λίστα που εμφανίζεται περιέχει όλα τα βιομοντέλα που έχει εισάγει μέχρι στιγμής στο σύστημα.

Παράμετροι	Περιγραφή Παραμέτρων
Stochastic Algorithm	Στο πεδίο αυτό ο χρήστης επιλέγει τον αλγόριθμο στοχαστικής προσομοίωσης που επιθυμεί. Προς το παρόν ο χρήστης μπορεί να επιλέξει μεταξύ των αλγορίθμων FRM-SSA [4] και NRM-SSA [5].
Simulation Mode	Στο πεδίο αυτό ο χρήστης επιλέγει την παραλληλοποίηση που επιθυμεί. Μπορεί να διαλέξει παραλληλοποίηση είτε σε επίπεδο αντιδράσεων (<i>Single Simulation in Parallel - SSIP</i>) είτε σε επίπεδο στοχαστικών επαναλήψεων (<i>Multiple Simulations in Parallel - MSIP</i>). Στην περίπτωση μιας στοχαστικής επανάληψης προτείνεται ο τρόπος λειτουργίας SSIP ενώ εάν ο χρήστης επιθυμεί περισσότερες από μια στοχαστικές επαναλήψεις συστήνεται ο MSIP τρόπος λειτουργίας.
Repetitions (power of 2)	Στο πεδίο αυτό ο χρήστης συμπληρώνει τον αριθμό των στοχαστικών επαναλήψεων που επιθυμεί. Ο αριθμός αυτός πρέπει να είναι δύναμη του δύο.
Simulation time (sec)	Στο πεδίο αυτό ο χρήστης συμπληρώνει τον χρόνο προσομοίωσης T_{sim} (wall clock), σε δευτερόλεπτα, της κάθε στοχαστικής επανάληψης.
Sampling Period (sec)	Στο πεδίο αυτό ο χρήστης συμπληρώνει την περίοδο δειγματοληψίας T_{sam} των αποτελεσμάτων σε δευτερόλεπτα. Η παράμετρος αυτή και κατ' επέκταση ο αριθμός των δειγμάτων μιας προσομοίωσης επηρεάζει άμεσα τον όγκο δεδομένων που θα λάβει ο χρήστης μετά την ολοκλήρωση της προσομοίωσης.
Max Internal Steps - MIS	Στο πεδίο MIS ο χρήστης καθορίζει τον μέγιστο αριθμό αντιδράσεων που μπορούν να μεσολαβήσουν μεταξύ δύο διαδοχικών περιόδων δειγματοληψίας. Ο χρήστης έχει τη δυνατότητα να επιλέξει μεταξύ των διαβαθμίσεων Low, Medium και High. Η παράμετρος αυτή αποσκοπεί στον τερματισμό μιας στοχαστικής επανάληψης στην περίπτωση όπου τα χρονικά διαστήματα διαδοχικών αντιδράσεων που παράγονται από το σύστημα που προσομοιώνεται είναι πάρα πολύ μικρά με αποτέλεσμα να μεταβάλλεται ελάχιστα (πρακτικά καθόλου) ο συνολικός χρόνος της προσομοίωσης.

WebStoch © Welcome Login Register Help

Welcome to WebStoch

Quick Links

BioModel Manager

- List Available BioModels
- Upload a New BioModel

Simulation Tasks

- List Simulation Tasks
- Create a New Simulation Task

Made with

- Symfony 2
- ...

Thanks for using our service!

© StochSoCs Group - Department of Informatics & Telecommunications - University of Athens 2014-2015

Εικόνα 11: Σύνδεσμος για την εισαγωγή νέων προσομοιώσεων.

WebStoch © Welcome BioModel Manager Simulation Tasks admin Help

Create New Simulation Task

Simulation Task

Name	SimTask
BioModel	AlphaSynuclein
Stochastic Algorithm	[FRM] - First Reaction Method
Simulation Mode	[SSIP] - Single Simulation in Parallel
Repetitions (power of 2)	128
Simulation time (sec)	100.0
Sampling period (sec)	1.000
Max Internal Steps	High

Create

© StochSoCs Group - Department of Informatics & Telecommunications - University of Athens 2014-2015

Εικόνα 12: Σελίδα εισαγωγής νέων προσομοιώσεων.

10

4.3 Απεικόνιση Αποτελεσμάτων

Μετά την ολοκλήρωση μιας προσομοίωσης ο χρήστης μπορεί να κατεβάσει τα αποτελέσματα της μέσω του συνδέσμου που θα εμφανιστεί στην σελίδα των εισαχθέντων προσομοιώσεων (**List Existing Simulation Tasks**). Κάνοντας ένα κλικ στον σύνδεσμο αυτό εμφανίζεται ένα παράθυρο διαλόγου στο οποίο ο χρήστης ερωτάται που επιθυμεί να αποθηκεύσει το .zip αρχείο που περιέχει τα αποτελέσματα της προσομοίωσης που εκτέλεσε. Το .zip αρχείο περιέχει τους τρεις παρακάτω φακέλους:

- **Aggregates:** Ο φάκελος αυτό περιέχει τα τρία ακόλουθα .csv αρχεία:
 - **SimulationName_average.csv:** Το αρχείο αυτό έχει την εξής δομή πίνακα: οι γραμμές του αντιστοιχούν στις περιόδους δειγματοληψίας που εκτελέστηκαν ενώ οι στήλες αντιστοιχούν στα μοριακά είδη του βιομοντέλου. Κάθε κελί περιέχει την μέση τιμή ενός μοριακού είδους για μια συγκεκριμένη περίοδο δειγματοληψίας για τις στοχαστικές επαναλήψεις που εκτελέστηκαν.
 - **SimulationName_max.csv:** Το αρχείο αυτό διαθέτει παρόμοια δομή με το παραπάνω αλλά στα κελιά του περιέχονται οι μέγιστες τιμές των μοριακών ειδών για τις στοχαστικές επαναλήψεις που εκτελέστηκαν,
 - **SimulationName_min.csv:** Το αρχείο αυτό αντίστοιχα διαθέτει παρόμοια δομή με το παραπάνω αλλά στα κελιά του περιέχονται οι ελάχιστες τιμές των μοριακών ειδών για τις στοχαστικές επαναλήψεις που εκτελέστηκαν.
- **Repetitions:** Ο φάκελος αυτός περιέχει .csv αρχεία (όσα και οι επαναλήψεις) με τις τιμές δειγμάτων όλων των μοριακών ειδών του βιομοντέλου για κάθε στοχαστική επανάληψη ξεχωριστά.
- **Statistics:** Ο φάκελος αυτός περιέχει ένα .csv αρχείο με στατιστικά στοιχεία σχετικά με την εκτέλεση του πειράματος προσομοίωσης. Τα στατιστικά αυτά δίνονται για κάθε στοχαστική επανάληψη ξεχωριστά και αφορούν τον αριθμό κύκλων αντίδρασης, τον αριθμό περιόδων δειγματοληψίας που ολοκληρωθήκαν, καθώς και τον χρόνο προσομοίωσης στον οποίο έφτασε το σύστημα. Επισημαίνεται ότι λόγω της παραμέτρου *MIS* δεν είναι απαραίτητο ότι μια στοχαστική επανάληψη θα φτάσει πάντα τον καθορισμένο από το χρήστη χρόνο προσομοίωσης.

Τέλος, ο χρήστης, εάν το επιθυμεί, μπορεί να ανοίξει τα .csv αρχεία που περιέχουν τις τιμές των μοριακών ειδών με ένα εργαλείο της επιλογής του προκειμένου να προχωρήσει στην γραφική απεικόνιση ή περεταίρω επεξεργασία των αποτελεσμάτων.

5. Παράδειγμα χρήσης της υπηρεσίας WebStoch

Στη συνέχεια ακολουθεί ένα παράδειγμα προσομοίωσης του γνωστού βιομοντέλου ASYN [6] [7] στην υπηρεσία WebStoch. Το ASYN βιομοντέλο αναπτύχθηκε από την ομάδα μας για να μελετηθεί το πώς συμβάλει ο πολυμερισμός της πρωτεΐνης *άλφα-συνουκλεΐνη* (Alpha-Synuclein - ASYN) στον νόσο του Πάρκινσον. Αφού συνδεθούμε στο λογαριασμό μας μεταφερόμαστε στη σελίδα εισαγωγής νέου βιομοντέλου **Upload BioModel** μέσω του συνδέσμου **Upload a New BioModel** που βρίσκεται στην κεντρική σελίδα του WebStoch. Στη συνέχεια εντοπίζουμε το SBML αρχείο του βιομοντέλου που θέλουμε να εισάγουμε και συμπληρώνουμε το όνομα του βιομοντέλου όπως φαίνεται στην Εικόνα 13.

Εικόνα 13: Εισαγωγή του βιομοντέλου ASYN στην υπηρεσία.

Έπειτα επιστρέφουμε στην κεντρική σελίδα του WebStoch. Από εκεί μεταβαίνουμε στη σελίδα εισαγωγής μιας νέας προσομοίωσης **Create New Simulation Task** μέσω του συνδέσμου **Create a New Simulation Task**. Στο πεδίο **Name** πληκτρολογούμε ένα ενδεικτικό όνομα για την προσομοίωση, **SimTask.ASYN**, ενώ στο πεδίο **BioModel** επιλέγουμε το βιομοντέλο με το όνομα **ASYN**. Έπειτα επιλέγουμε τον αλγόριθμο **FRM-SSA** για την προσομοίωση του βιομοντέλου. Επειδή επιθυμούμε να τρέξουμε χιλιάδες επαναλήψεις ώστε να προσεγγίσουμε στατιστικά τη δυναμική συμπεριφορά του βιομοντέλου επιλέγουμε τον τρόπο λειτουργίας **MSIP** στο πεδίο **Simulation Mode** (βλ. Πίνακα 1).

WebStoch
© Welcome
BioModel Manager
Simulation Tasks
admin ▾
Help ▾

Create New Simulation Task

Simulation Task

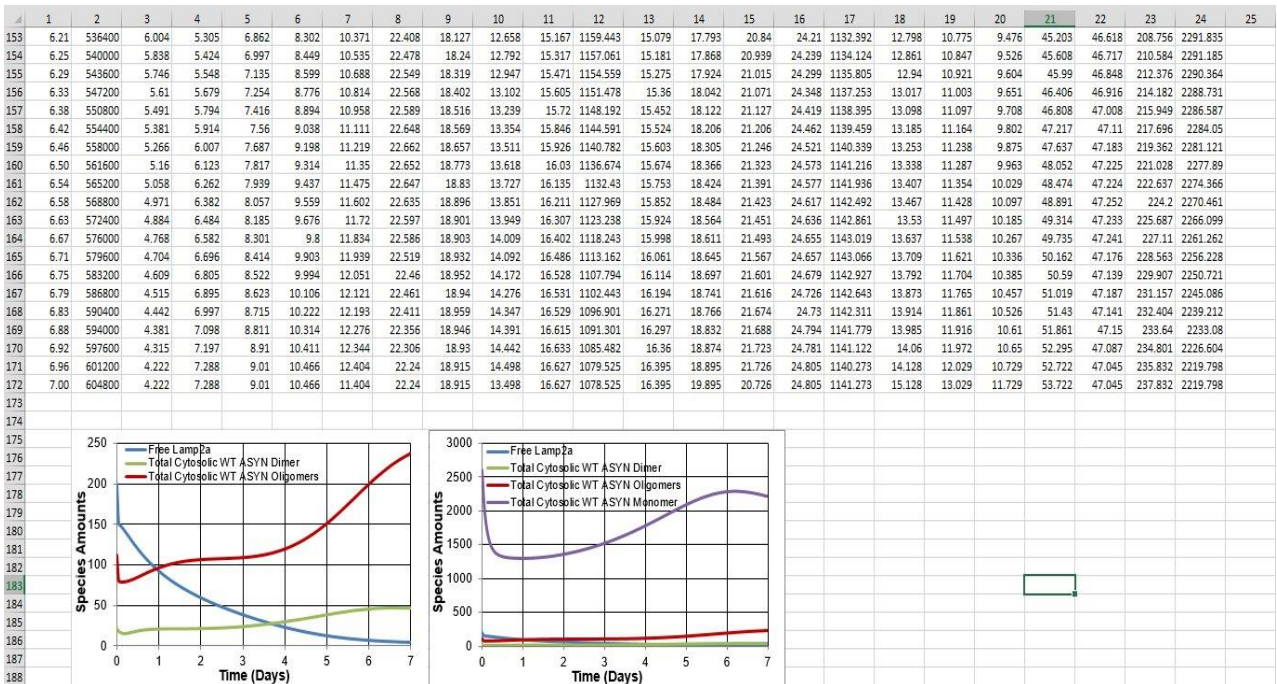
Name	<input type="text" value="SimTask.ASYN"/>
BioModel	<input type="text" value="AlphaSynuclein"/>
Stochastic Algorithm	<input type="text" value=" FRM - First Reaction Method"/>
Simulation Mode	<input type="text" value=" MSIP - Multiple Simulations in Parallel"/>
Repetitions (power of 2)	<input type="text" value="16384"/>
Simulation time (sec)	<input type="text" value="604800"/>
Sampling period (sec)	<input type="text" value="3600"/>
Max Internal Steps	<input type="text" value="High"/>

© StochSoCs Group - Department of Informatics & Telecommunications - University of Athens 2014-2015

Εικόνα 14: Δημιουργία προσομοίωσης με το βιομοντέλο ASYN.

Τα υπόλοιπα πεδία αφορούν τις παραμέτρους του πειράματος που επιθυμούμε να εκτελέσουμε. Στο παράδειγμα μας θέλουμε να τρέξουμε 16K στοχαστικές επαναλήψεις με διάρκεια προσομοίωσης τη μια εβδομάδα. Συνεπώς στο πεδίο **Repetitions** πληκτρολογούμε την πλησιέστερη δύναμη του δύο ενώ στο πεδίο **Simulation time** πληκτρολογούμε τον αριθμό των δευτερολέπτων που αντιστοιχούν στη μια εβδομάδα. Ως περίοδο δειγματοληψίας επιθυμούμε τη μια ώρα για να περιορίσουμε τον όγκο των παραγόμενων δεδομένων. Συνεπώς στο πεδίο **Simulation period** πληκτρολογούμε τον αριθμό των δευτερολέπτων που αντιστοιχούν στη μια ώρα. Με τις παραμέτρους αυτές αναμένουμε 168 δείγματα (604800/3600) ανά στοχαστική επανάληψη. Τέλος επειδή δε γνωρίζουμε εξ αρχής τη δυναμική συμπεριφορά του μοντέλου επιλέγουμε τη διαβάθμιση High στο πεδίο Max Internal Steps (βλ. Πίνακα 1).

Αφού ολοκληρωθεί η προσομοίωση στην σελίδα αυτή θα εμφανιστεί ένας σύνδεσμος προκειμένου να κατεβάσουμε στον υπολογιστή μας το SimTask.ASYN.zip αρχείο το οποίο θα περιέχει τα .csv αρχεία που περιγράφηκαν στην Ενότητα 4.3. Έχοντας τα αρχεία των αποτελεσμάτων στον υπολογιστή μας μπορούμε να προχωρήσουμε στην ανάλυση τους με ευρέως διαθέσιμα λογισμικά (π.χ. Microsoft Excel) καθώς και στην γραφική απεικόνισή τους, όπως φαίνεται στην Εικόνα 15.



Εικόνα 15: Γραφική απεικόνιση αποτελεσμάτων προσομοίωσης του βιομοντέλου ASYN με χρήση του προγράμματος Microsoft Excel.

ΑΝΑΦΟΡΕΣ

- [1] M. Hucka, A. Finney, H. M. Sauro, H. Bolouri, J. Doyle, H. Kitano, A. Arkin, B. Bornstein, D. Bray and A. Cornish-Bowden, "The systems biology markup language (SBML): a medium for representation and exchange of biochemical network models," *Bioinformatics*, vol. 19, no. 4, pp. 524--531, 2003.
- [2] C. J. Myers, *Engineering genetic circuits*, CRC Press, 2009.
- [3] 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.
- [4] D. T. Gillespie, "Stochastic simulation of chemical kinetics," *Annu. Rev. Phys. Chem.*, vol. 58, no. 1, pp. 35--55, 2007.
- [5] 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.
- [6] E. Ouzounoglou, D. Kalamatianos, E. Emmanouilidou, M. Xilouri, L. Stefanis, K. Vekrellis and E. S. Manolakas, "In silico modeling of the effects of alpha-synuclein oligomerization on dopaminergic neuronal homeostasis," *BMC systems biology*, vol. 8, no. 1, p. 54, 2014.
- [7] E. Ouzounoglou, D. Kalamatianos, E. Emmanouilidou, M. Xilouri, L. Stefanis, K. Vekrellis and E. S. Manolakas, "Bimodels Database (EMBL-EBI)," [Online]. Available: <https://www.ebi.ac.uk/biomodels-main/BIOMD0000000559>. [Accessed 01 Feb 2015].

