



Efficient Abstraction and Execution of Stochastic Simulation Models

Dissertation
submitted for the academic degree of

Doktoringenieur (Dr.-Ing.)

Faculty of Computer Science and Electrical Engineering,
University of Rostock, Germany

submitted by

Till Köster,
born on December 14th 1993 in Flensburg

Rostock, June 30th 2024

ABSTRACT

Stochasticity is found throughout cell-biological models when describing phenomena such as diffusion and the resulting random interactions of entities. This thesis is concerned with the efficient execution of these models. We cover the fundamentals modeling from the bottom up. Reaction systems are a main topic, particularly those that use Stochastic Simulation Algorithms. We discuss efficient variations of these algorithms, including their parallel execution on CPUs and GPUs. Furthermore, the limitations of static reaction systems will be overcome by introducing dynamic compartmentalization, which is vital for many processes. The arising challenges in efficient execution (including of a spatial particle variant) are addressed through novel algorithms and implementations. Another focus will also be the technical realization of the simulation abstraction through domain-specific languages and their interplay with simulator efficiency. This includes an application of the cell-biological simulation methods to agent-based models. Finally, we consider the issues of replication and evaluation of simulator implementations, in particular, as they relate to the questions of stochasticity and determinism. These introductions lay the groundwork for the six publications that comprise this thesis's core. The articles present aspects of this thesis in more detail.

ZUSAMMENFASSUNG

Zellbiologische Modelle verwenden häufig stochastische Prozesse, um zum Beispiel Phänomene wie Diffusion und das daraus folgende zufällige Interagieren von Partikeln darzustellen. In dieser Arbeit behandeln wir die effiziente Beschreibung und Ausführung dieser Modelle. Insbesondere beschäftigen uns Reaktionssysteme, die von den Gillespie-Algorithmen simuliert werden. Wir beschäftigen uns hier mit effizienten Varianten dieser Algorithmen, einschließlich ihrer parallelen Ausführung auf CPUs und Grafikkarten. Einige methodische Einschränkungen dieser Reaktionssysteme werden durch das Einführen von dynamischer Kompartimentierung überwunden. Diese Kompartimentierung ist essentiell für viele zellbiologische Prozesse. Sie birgt aber auch Herausforderungen hinsichtlich ihrer effizienten Ausführung. Diese werden von uns (auch für eine räumliche Variante) durch neue Algorithmen und Implementierungen adressiert. Eng verwandt ist die Thematik der technischen Umsetzung domänenspezifischer Sprachen und ihr Einfluss auf effiziente Simulationen. Hier erweitern wir das Feld der behandelten Anwendungen auch auf Systeme interagierender Agenten. Zuletzt werden wir uns mit Problemen der Replikation und Evaluation der Implementierungen von Simulationsalgorithmen beschäftigen, auch in Bezug auf Stochastizität und Determinismus. Der erste Teil der Arbeit gibt allgemeinen Kontext zum behandelten Thema. Darauf folgen sechs Aufsätze, die den Kern dieser Arbeit bilden. Diese Aufsätze betrachten verschiedene Aspekte des Themas im Detail.