

Querétaro
2013
cudi

REUNIÓN DE PRIMAVERA
15, 16 Y 17 DE ABRIL

Análisis de Estabilidad Estructural en Sistemas Proteicos

M. en C. Ericka García Blanquel
egarciab10@sagitario.cic.ipn.mx

Centro de Investigación en Computación – IPN



Contenido



Reunión de Primavera ♦ Abril 15, 16 y 17

- Introducción
- Antecedentes
- Planteamiento del problema
- Modelo matemático
- Diseño del algoritmo paralelo
- Implementación
- Resultados
- Conclusiones y trabajo por realizar

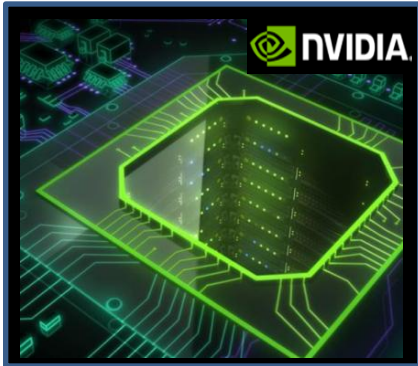


Introducción



Reunión de Primavera ♦ Abril 15, 16 y 17

HPCC



$$\begin{cases} \text{minimizar } f(x) \\ \text{sujeto a} \\ g_i(x) \leq 0 & i = 1, \dots, m \\ x \in S \subset \mathbb{R}^n. \end{cases}$$

GP GPU



Antecedentes



Reunión de Primavera ♦ Abril 15, 16 y 17

Aplicaciones de dinámica molecular

GROMACS	Simulación de moléculas bioquímicas con enlaces de interacción complicados.
NAMD	Diseño y simulación de alto rendimiento de grandes sistemas moleculares.
AMBER	Conjunto de programas para simulación de dinámica molecular de biomoléculas.
ABALONE	Modelos de dinámica molecular de biopolímeros para simulación de proteínas.
ACEMD	Simulación de campos de fuerza mecánicos con solvente explícito e implícito
DL-POLY	Simulador de macromoléculas, polímeros, sistemas iónicos, con cómputo en paralelo.
HOOMD-Blue	Paquete de partículas dinámicas escrito para GPUs.
LAMMPS	Paquete de dinámica molecular clásica.
VMD	Aplicación de dinámica molecular que analiza grandes sistemas biomoleculares.
PYMOL	Análisis de trayectoria de dinámica molecular



Planteamiento del problema



Reunión de Primavera ♦ Abril 15, 16 y 17

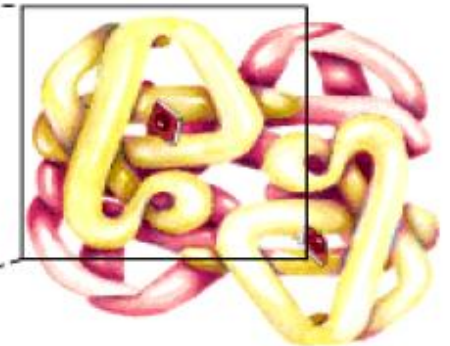
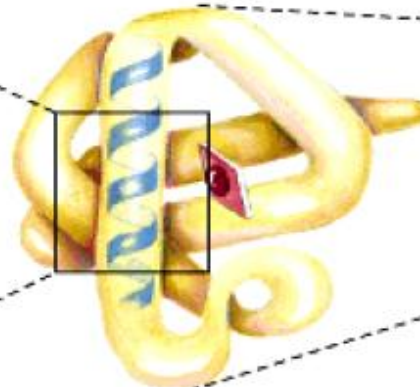
Estructuras de una proteína

Estruct. primaria

Estruct. secundaria

Estruct. terciaria

Estruct. cuaternaria



Aminoácidos

Hélice alfa

Cadena polipeptídica

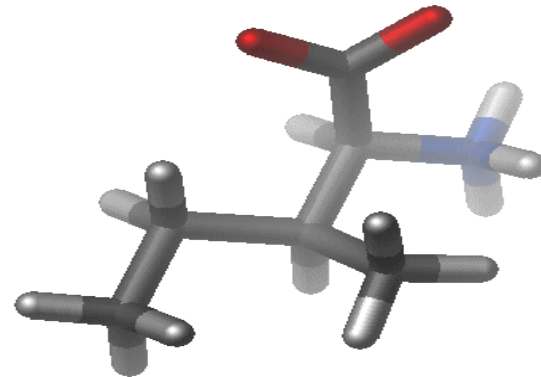
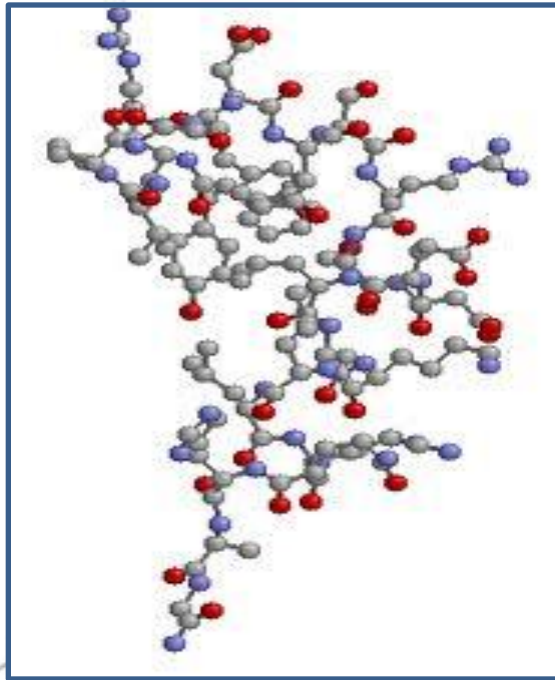
Subunidades ensambladas



Planteamiento del problema



Reunión de Primavera ♦ Abril 15, 16 y 17

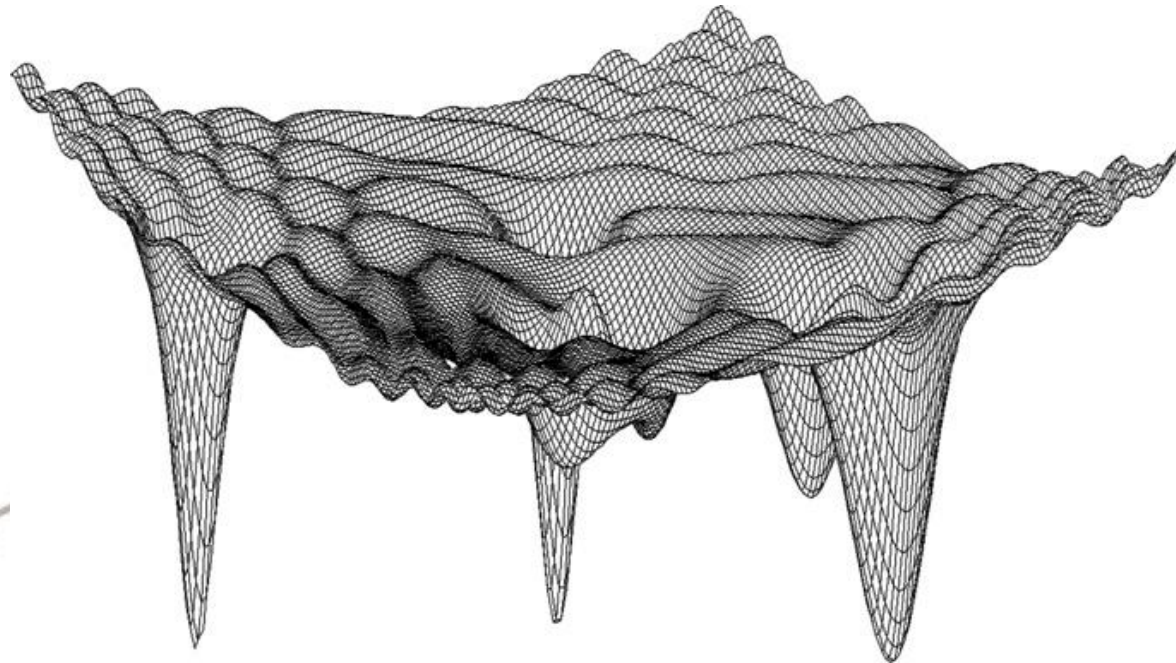


Planteamiento del problema



Reunión de Primavera ♦ Abril 15, 16 y 17

Superficie de energía potencial

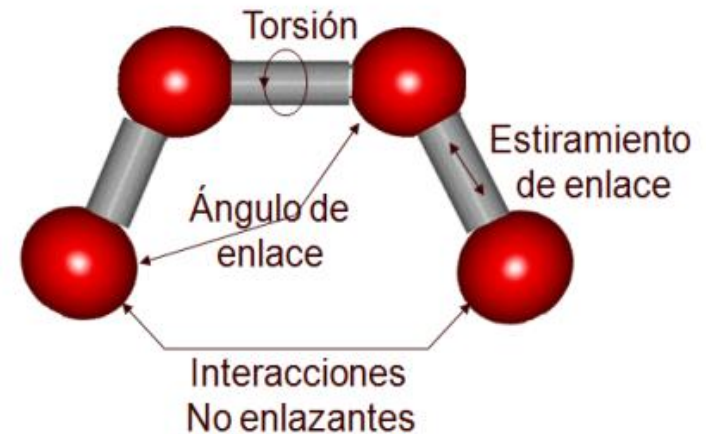


Planteamiento del problema

Reunión de Primavera ♦ Abril 15, 16 y 17

Energía potencial de una proteína

La energía potencial molecular, es la suma de energías relacionadas con: la desviación del largo de los enlaces, los ángulos de enlace, los ángulos de torsión fuera de los valores de equilibrio y fuerzas de Van der Waals.



Modelo matemático

Reunión de Primavera ♦ Abril 15, 16 y 17

Las ecuaciones de mecánica clásica, describen las superficies de energía potencial y propiedades físicas de las moléculas.

constante de fuerza K

LEY de HOOKE

compresión

estiramiento

Dx Dx

x_0 x_1

fuerza recuperación $= -F = K(Dx)$

Modelo matemático



Reunión de Primavera ♦ Abril 15, 16 y 17

$$E_{total} = E_{enlaces} + E_{ángulos} + E_{diedros} + E_{VdW}$$

$$\begin{aligned} E_{potencial} &= E_{total} \\ &= \sum_{enlaces} k_b (b_0 - b)^2 + \sum_{ángulos} k_\theta (\theta_0 - \theta)^2 + \\ &\quad \sum_{diedros} k_\varphi (1 - \cos(n\varphi - \delta)) + \\ &\quad \sum_{VdW} \left(\frac{A}{r_{ij}} + \frac{B}{r_{ij}^2} + \frac{Q_i Q_j}{r_{ij}} \right) \end{aligned}$$

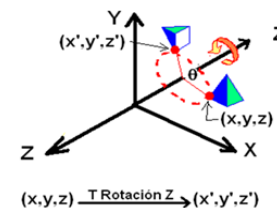
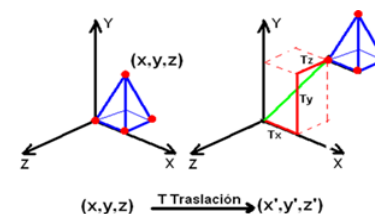
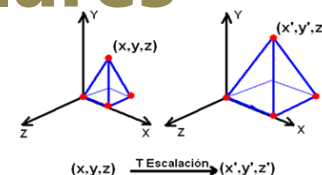
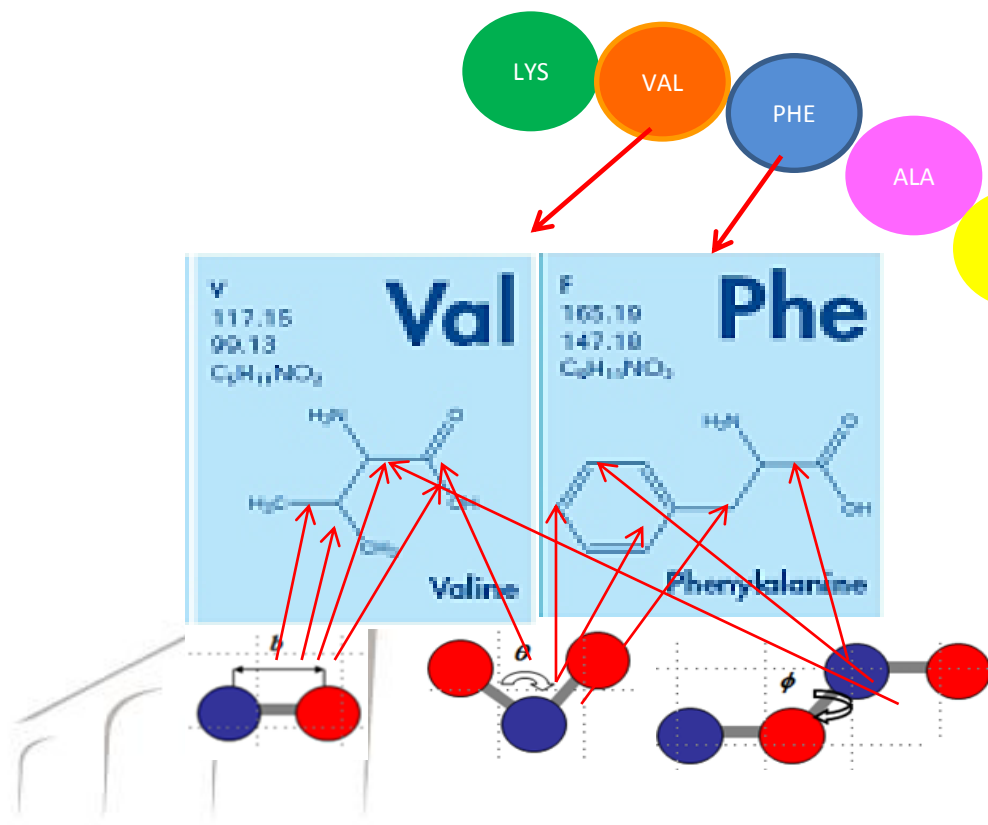


Diseño del algoritmo paralelo



Reunión de Primavera ♦ Abril 15, 16 y 17

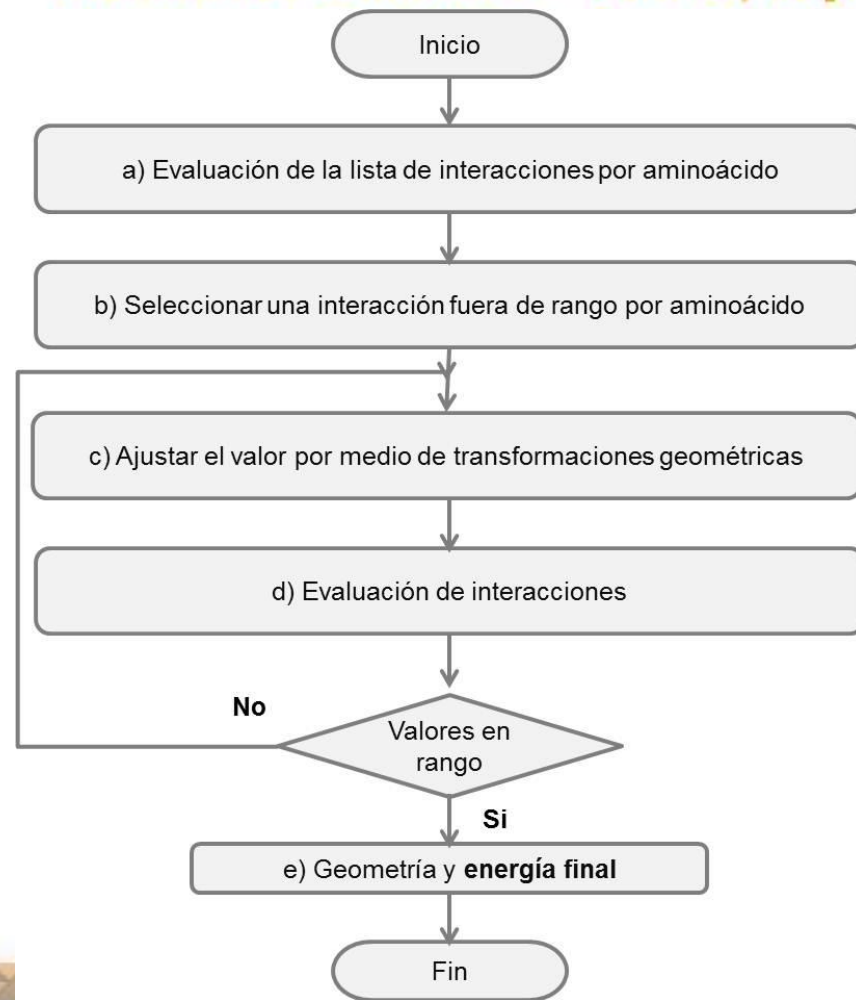
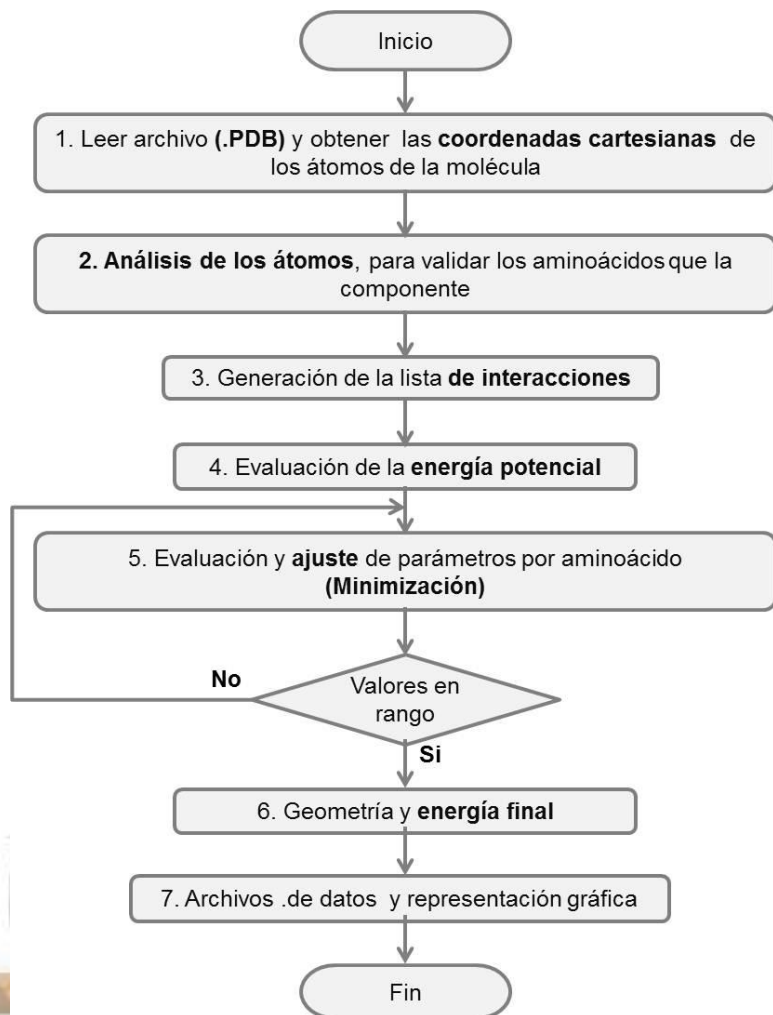
Interacciones moleculares



Diseño del algoritmo paralelo



Reunión de Primavera ♦ Abril 15, 16 y 17



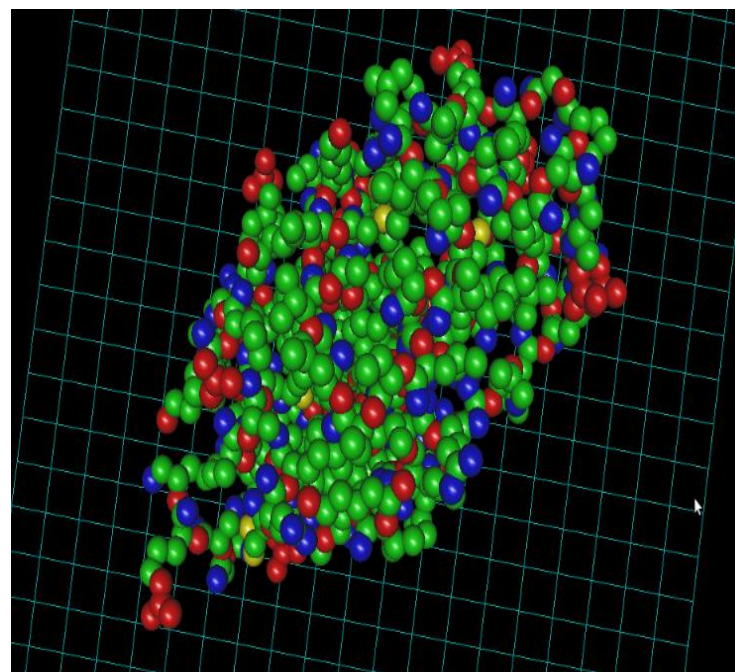
Resultados



Reunión de Primavera ♦ Abril 15, 16 y 17



OpenGL

The OpenGL logo is displayed in a blue, 3D-style font. It consists of the word 'OpenGL' in a bold, sans-serif typeface, with a blue oval shape behind the 'O' and 'G'.

Conclusiones y trabajo por realizar



Reunión de Primavera ♦ Abril 15, 16 y 17

- El uso de las GPU acelera en un 80% con respecto a un algoritmo secuencial, el proceso de generación de estructuras estables debido al número de interacciones que se obtiene por cada conformero.
- En la segunda etapa se pretende mejorar el modelo de campo de fuerzas para que sea más preciso que el de mecánica molecular.
- Diseño e implementación de una heurística, para determinar la estructura molecular de mínima energía o bien el conformero más estable.
- Es posible tener una herramienta a un menor costo y hecha a la medida.



Querétaro
2013
cudi

REUNIÓN DE PRIMAVERA
15, 16 Y 17 DE ABRIL

Gracias

egarciab10@sagitario.cic.ipn.mx

