



Москва, 23–24 сентября 2024 г.

Russian Supercomputing Days

Применение параллельных вычислений при реализации метода выборки переходных поверхностей

Полюян Сергей Владимирович



старший преподаватель
Университета «Дубна»
poluyan@uni-dubna.ru

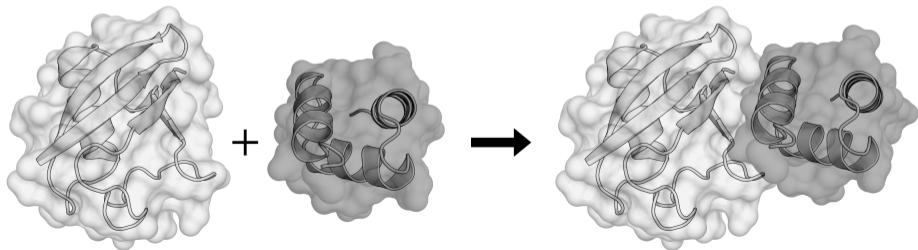
Ершов Николай Михайлович



к.ф.-м.н., с.н.с. ВМК МГУ
имени М.В. Ломоносова
ershov@cs.msu.ru

Объект исследования

- ▶ комплекс вида белок-белок
- ▶ модель «ключ-замок»: $A+B \rightarrow AB$
- ▶ Protein Data Bank ID: 2O0B



Ограничения

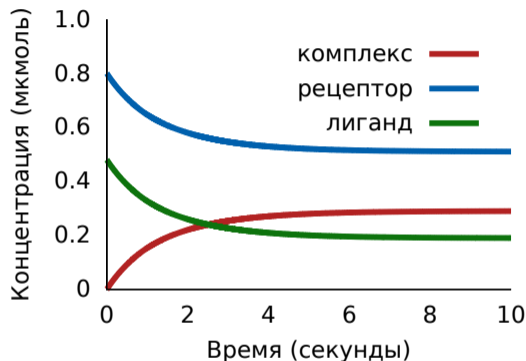
- ▶ компоненты в виде «твёрдых» тел
- ▶ без структурных изменений
- ▶ только поступательные и вращательные движения

Модель «ключ-замок»

- ▶ R, L, C – молярные концентрации рецептора, лиганда и комплекса

$$\begin{cases} \frac{dC}{dt} = k_{\text{on}} RL - k_{\text{off}} C, & C(0) = C_0 \\ \frac{dR}{dt} = -k_{\text{on}} RL + k_{\text{off}} C, & R(0) = R_0 \\ \frac{dL}{dt} = -k_{\text{on}} RL + k_{\text{off}} C, & L(0) = L_0 \end{cases}$$

- ▶ $k_{\text{on}} (\text{M}^{-1}\text{s}^{-1})$ – константа скорости ассоциации



$$C_0 = 0 \mu\text{M}, R_0 = 0.8 \mu\text{M}, L_0 = 0.48 \mu\text{M}$$
$$k_{\text{on}} = 0.6 \mu\text{M}^{-1}\text{s}^{-1}, k_{\text{off}} = 0.2 \text{s}^{-1}$$

Постановка задачи

Численная оценка константы скорости ассоциации

- ▶ метод молекулярной динамики
- ▶ кинетический метод Монте-Карло
- ▶ метод TransComp (transient-complex theory)
- ▶ метод выборки переходных поверхностей

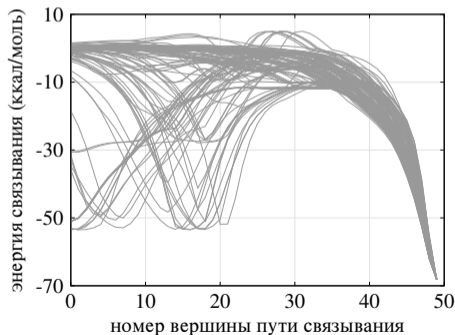
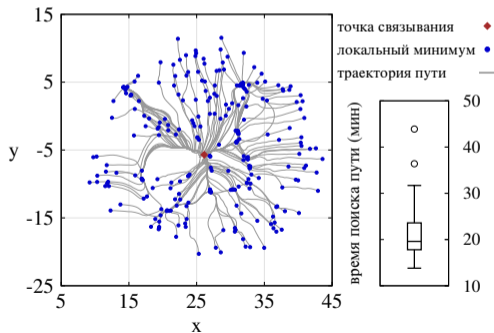
Цель исследования

- ▶ реализация метода выборки переходных поверхностей
- ▶ тестирование на двух вычислительных системах
 - служебный сервер университета «Дубна»
 - гетерогенная платформа «HybriLIT» ОИЯИ

Метод выборки переходных поверхностей

Основные шаги метода

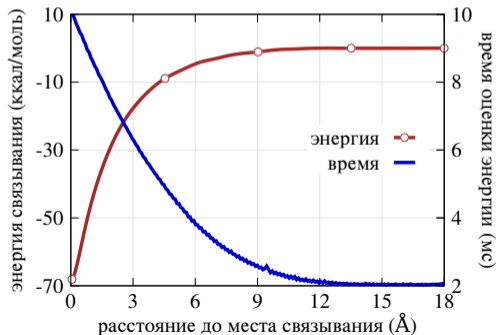
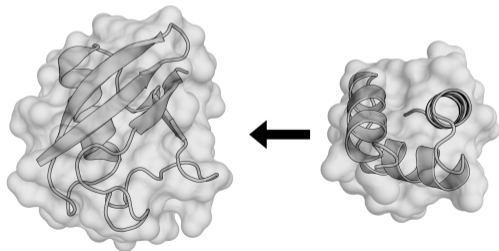
- ▶ построение различных путей с минимальным перепадом энергии
- ▶ определение состояний и создание интерфейсов
- ▶ численная оценка константы скорости ассоциации



Оценочная функция

Этапы выполнения оценки энергии связывания

- ▶ поиск взаимодействующих атомов (k-d-дерево)
- ▶ потенциал Кулона и потенциал Леннарда-Джонса
- ▶ неявный растворитель EFF1 (Effective Energy Function 1)



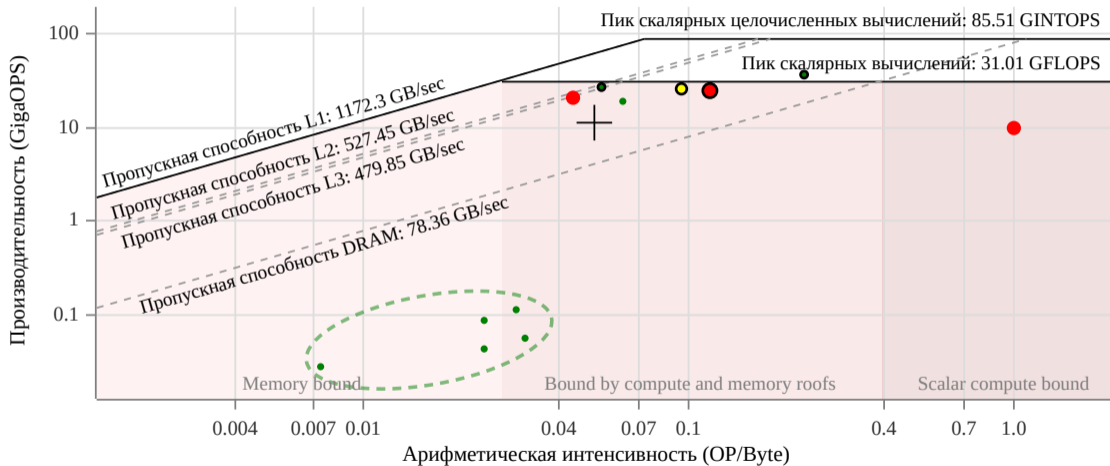
Организация вычислений

- ▶ в рамках одного вычислительного узла: паттерн «пул потоков» (thread pool)
- ▶ при нескольких узлах: парадигма «ведущий–ведомый» (master-slave)

Реализация паттерна «пул потоков»

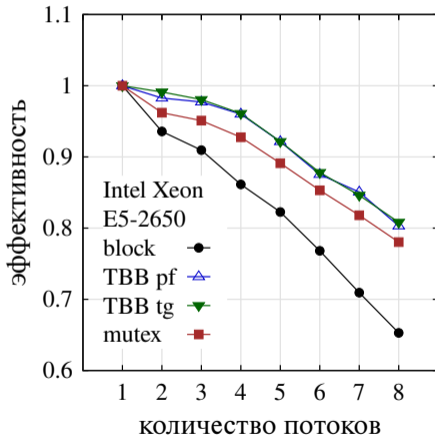
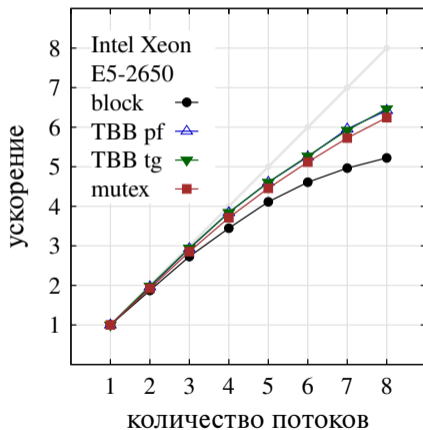
- ▶ при использовании встроенных средств языка программирования C++
 - рассмотрены различные примитивы синхронизации
 - выбрана синхронизация с применением `std::mutex`
- ▶ при использовании библиотеки Intel oneTBB
 - создавался потокобезопасный контейнер `tbb::concurrent_queue`
 - применялись шаблоны `tbb::parallel_for` и `tbb::task_group`

Intel Advisor Roofline-модель



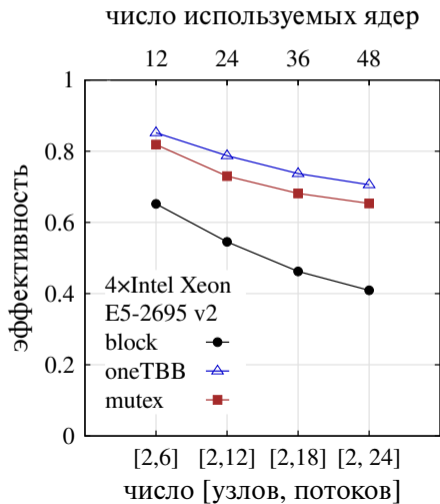
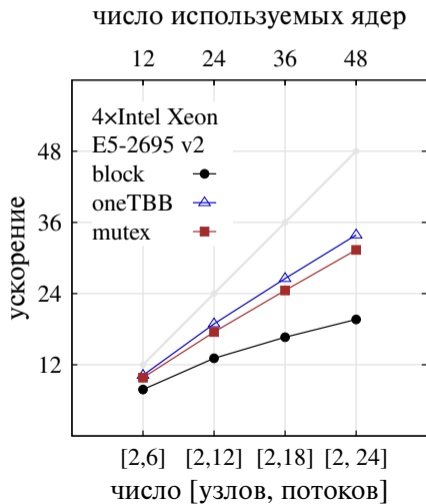
Результаты экспериментов (сервер Университета «Дубна»)

- ▶ компилятор Clang 17.0 (библиотека oneTBB 2021.12)
- ▶ один вычислительный узел



Результаты экспериментов (платформа «HybriLIT» ОИЯИ)

- ▶ компилятор GCC 12.3 (библиотека oneTBB 2021.12)
- ▶ два вычислительных узла



Результаты экспериментов

- ▶ достигнута эффективность приблизительно в 70%
- ▶ показаны преимущества применения библиотеки oneTBV

Метод выборки переходных поверхностей

- ▶ применим для комплексов вида белок-пептид и белок-ДНК
- ▶ эффективен для выделения множества редких событий
- ▶ требует незначительных вычислительных ресурсов

Темы дальнейших исследований

- ▶ расширение тестового набора белковых комплексов (SKEMPI 2.0)
- ▶ сравнение результатов с методом TransComp
- ▶ применение графических ускорителей

***Структура белкового комплекса**

Введите PDB ID комплекса. Например, 2vln.

2vln

Загрузите PDB файл.

Обзор... Файл не выбран.

Укажите идентификаторы взаимодействующих цепей.
Например, A:B, AB:C, AB:CD и т.п.

Доступные идентификаторы цепей : AB

A:B

Показать

Скрыть

***Информация о задаче**

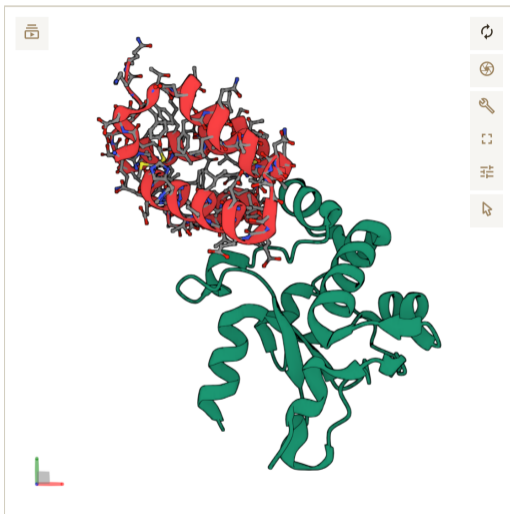
Введите произвольный идентификатор задачи

тема электронного письма

Введите почту для отправки результатов оценки

example@email.com

Отправить



Спасибо за
внимание!