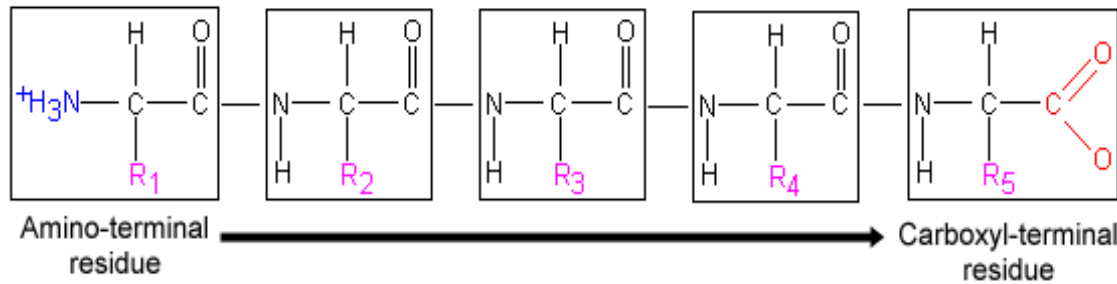


Aplicação Paralela de Otimização por Colônia de Formigas para Predição de Estruturas Protéicas Usando o Modelo HP

Rafael Stubs Parpinelli

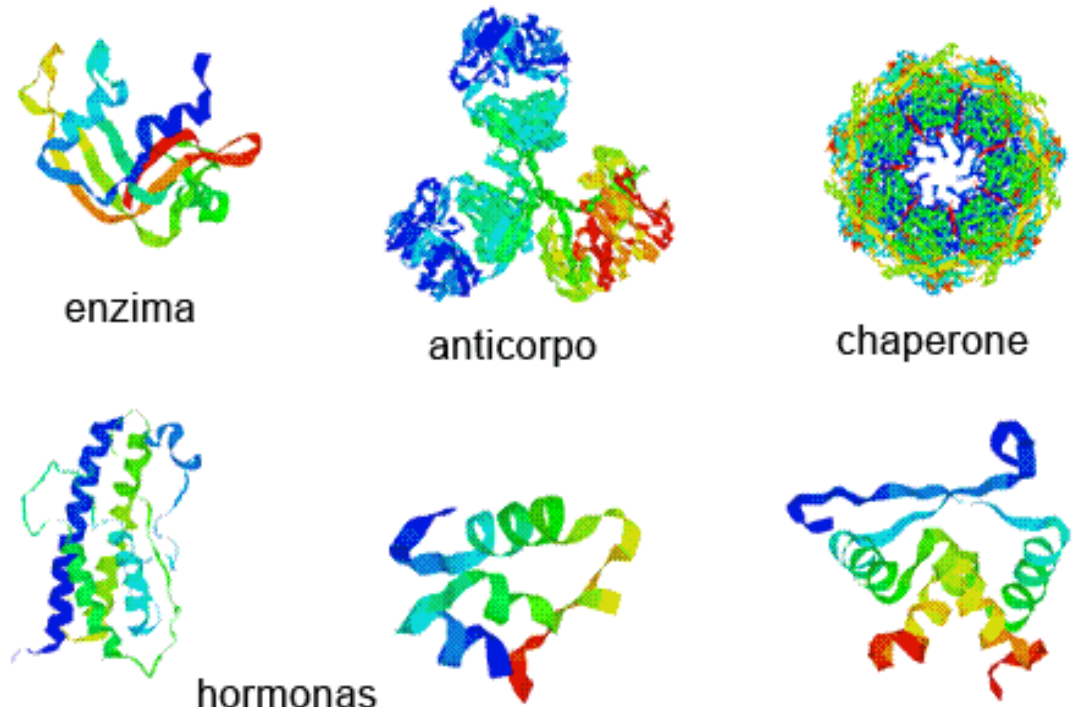
Estruturas Protéicas

Primary Structure of Protein

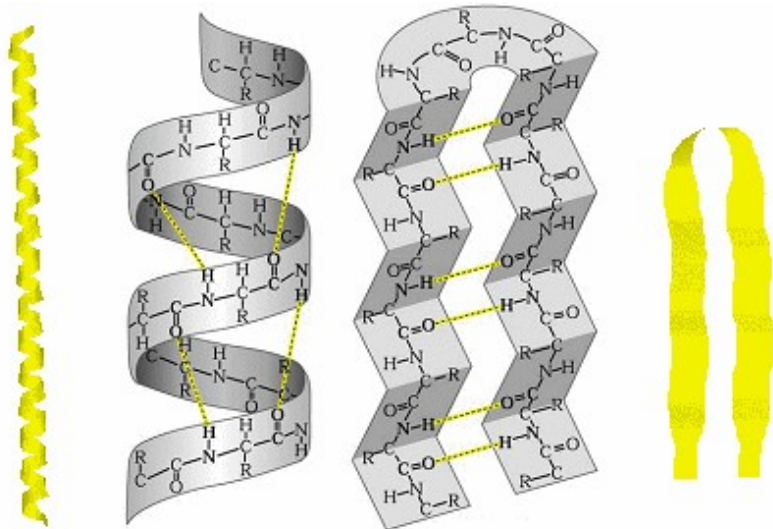


primary structure
(amino acid sequence)

Tertiary Structure



Secondary Structure



Sequência → **Estrutura** → **Função**

1D

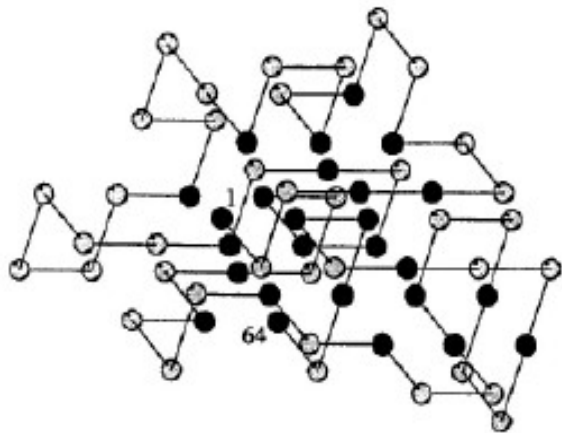
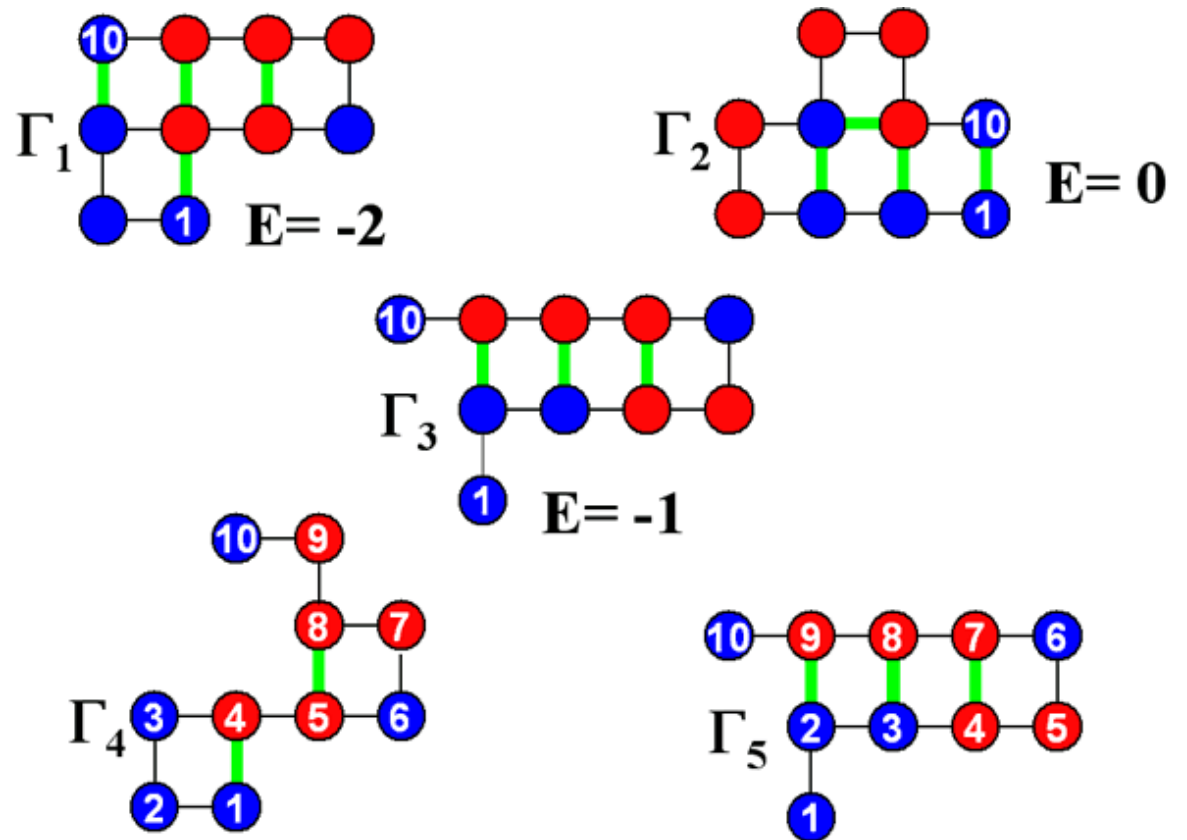
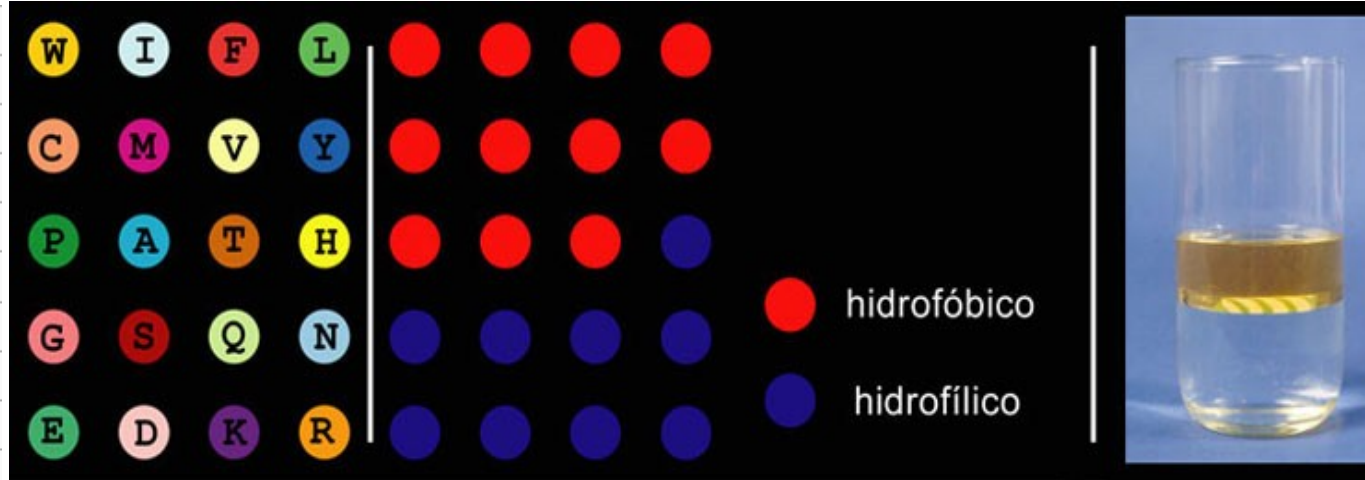
3D

regulação da
expressão do gene

- Predição de Estruturas Protéicas (ou *Protein Folding Problem*)
 - Estuda como as proteínas atingem seu estado nativo 3D, partindo de sua sequência primária
 - Apesar de inúmeras pesquisas, este problema ainda continua computacionalmente intratável para prever com precisão estruturas com cadeias grandes de proteínas
 - O modelo HP (Hidrofóbico - Polar) simplifica o problema mantendo uma relevância comportamental dos aminoácidos (hidropaticidade)

• Modelo HP

Glicina ou Glicocola	Gly	G
Alanina	Ala	A
Leucina	Leu	L
Valina	Val	V
Isoleucina	Ile	I
Prolina	Pro	P
Fenilalanina	Phe	F
Serina	Ser	S
Treonina	Thr	T
Cisteína	Cys	C
Tirosina	Tyr	Y
Asparagina	Asn	N
Glutamina	Gln	Q
Aspartato ou ácido aspártico	Asp	D
Glutamato ou ácido glutâmico	Glu	E
Arginina	Arg	R
Lisina	Lys	K
Histidina	His	H
Triptofano	Trp	W
Metionina	Met	M



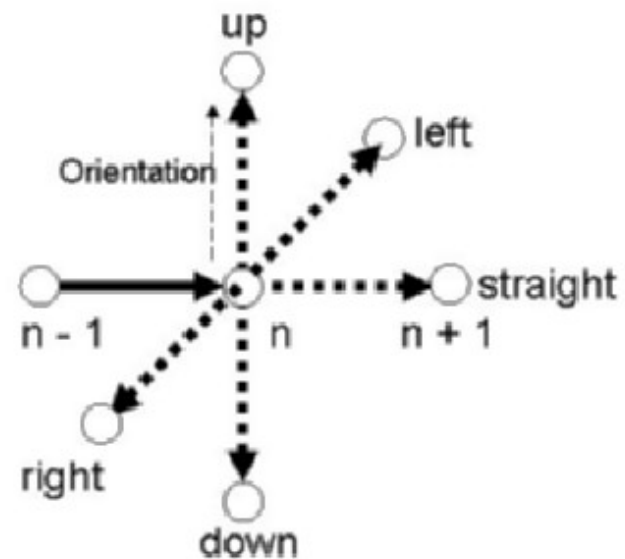
ACO para 3D-HP

Algorithm 9.1 Single process ant colony algorithm

1. initialize pheremone trails;
 2. while acceptable solution is not found do
 3. construct candidate solutions;
 4. perform local search;
 5. update pheremone trails;
 6. return best found solution;
-
- end.

Algorithm 9.2 ACO construction phase

1. for each ant do;
 2. randomly select starting positions;
 3. while candidate solution not complete do
 4. select next amino acid;
 5. calculate possible directions and heuristics;
 6. if no possible direction found do backtrack
 7. else select next direction;
 8. return candidate solution;
-
- end.



$$p_{i,d} = \frac{[\tau_{i,d}]^\alpha [\eta_{i,d}]^\beta}{\sum_{c \in \{L,R,S,U,D\}} [\tau_{i,c}]^\alpha [\eta_{i,c}]^\beta}$$

$$\tau_{i,d} = (1 - \rho)\tau_{i,d} + E(c)/E^*$$

ACO Paralelo para 3D-HP

- Colônia Única Distribuída
 - Master / Slave
 - Todos os *slaves* compartilham a mesma matriz de feromônio
 - *Master* recebe soluções dos *slaves*, atualiza a matriz de feromônio e a redistribui
- Multi Colony com Migração Circular
 - Cada processador é uma colônia independente
 - A cada n iterações existe uma troca de informação entre colônias vizinhas