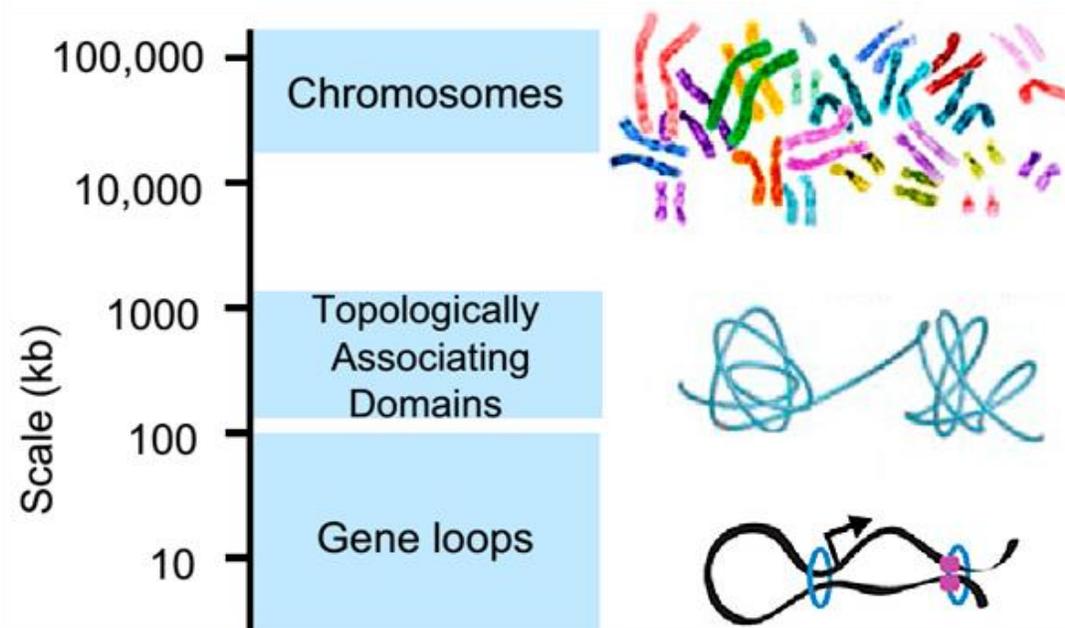
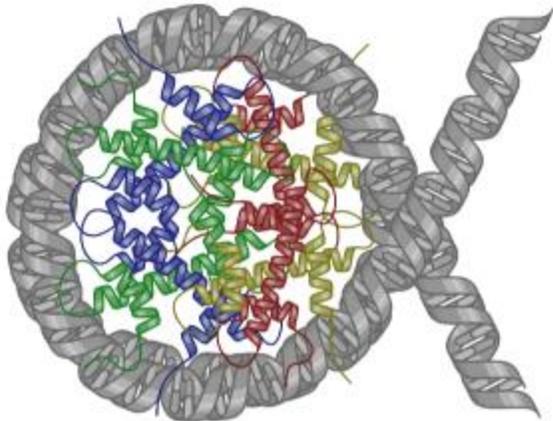


Анализатор DPD-
моделирования
гомополимера с
насыщающимися
взаимодействиями

Петров Артём

Обзор: глобальная цель

Нуклеосома: комплекс ДНК и октамера гистонов



TAD – Topologically Associating Domain

- Построение модели хроматина в ядре клетки: выяснение механизма образования TAD-ов

Обзор: текущая цель

- **Простейшая модель хроматина:** гомополимер, каждое звено которого с фиксированной вероятностью образует связь с другим звеном (игнорируем присутствие активного хроматина)
- *Зависимость размера цепи от количества образованных связей?*
- *Является ли переход клубок-глобула в такой системе фазовым?*
- *Являются ли такие взаимодействия эквивалентными объёмным?*

Обзор: метод DPD

- Законы Ньютона $\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \mathbf{v}_i, \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \mathbf{f}_i$.
- Сила состоит из **консервативной** (мягкое отталкивание), **диссипативной** и **случайной** сил:

$$\mathbf{f}_i = \sum_{j \neq i} (\mathbf{F}_{ij}^C + \mathbf{F}_{ij}^D + \mathbf{F}_{ij}^R)$$

- Корректно воспроизводит **гидродинамические** взаимодействия
- Мягкий потенциал для более быстрого моделирования **мезоскопических** масштабов (мономер – нуклеосома):

$$\mathbf{F}_{ij}^C = \begin{cases} a_{ij}(1-r_{ij})\hat{\mathbf{r}}_{ij} & (r_{ij} < 1) \\ 0 & (r_{ij} \geq 1) \end{cases}$$

Схема программы

Каждый процессор берёт по Procs/Files + 1 файлов

Обработка файлов, структурирование информации о координатах и связях в системе

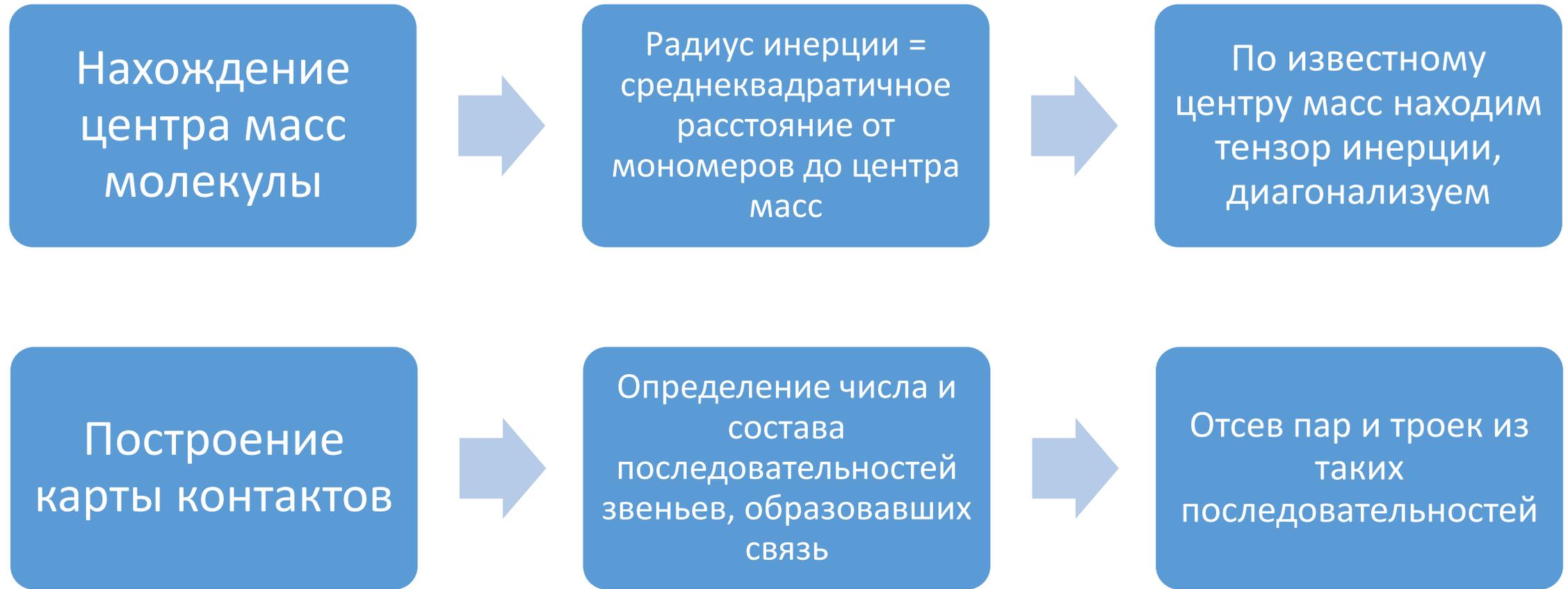


Расчёт среднеквадратичного радиуса полимера и главных компонент тензора инерции

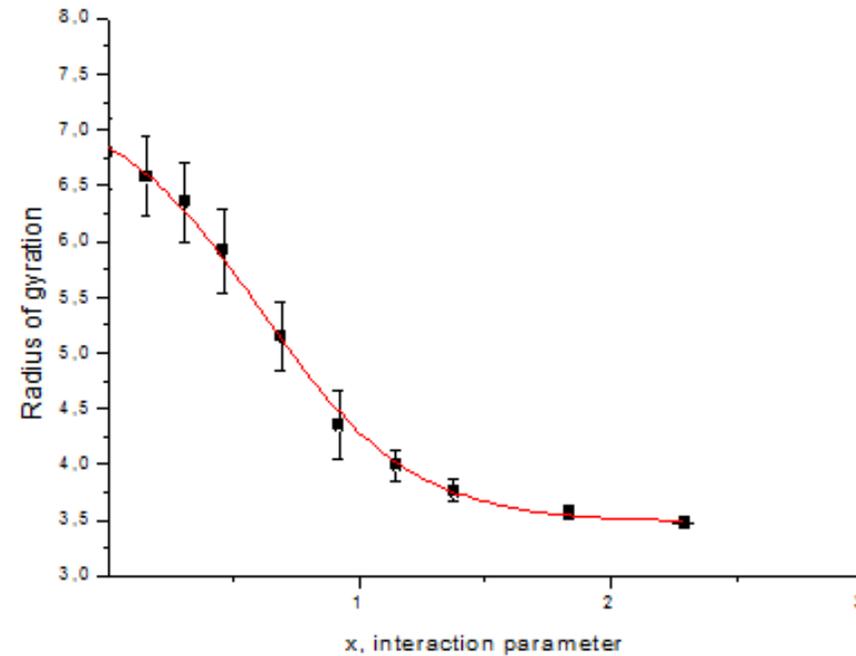
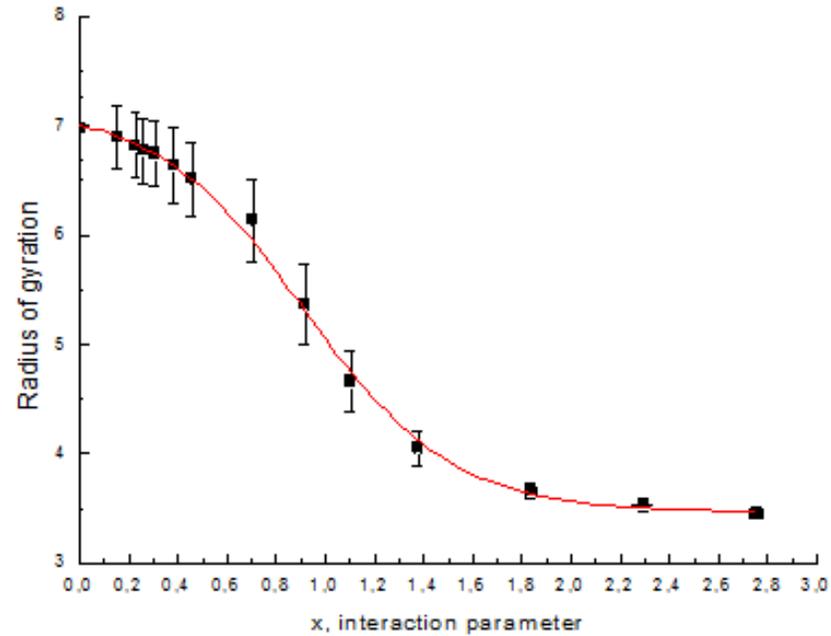


Расчёт двух корреляционных функций

Алгоритмы модулей программы

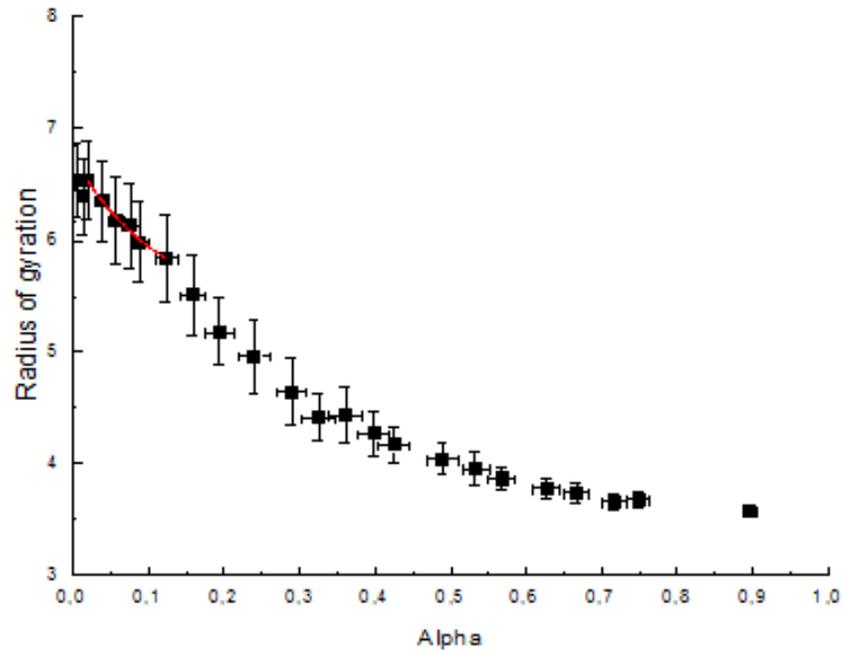


Проверка работоспособности: объёмные взаимодействия

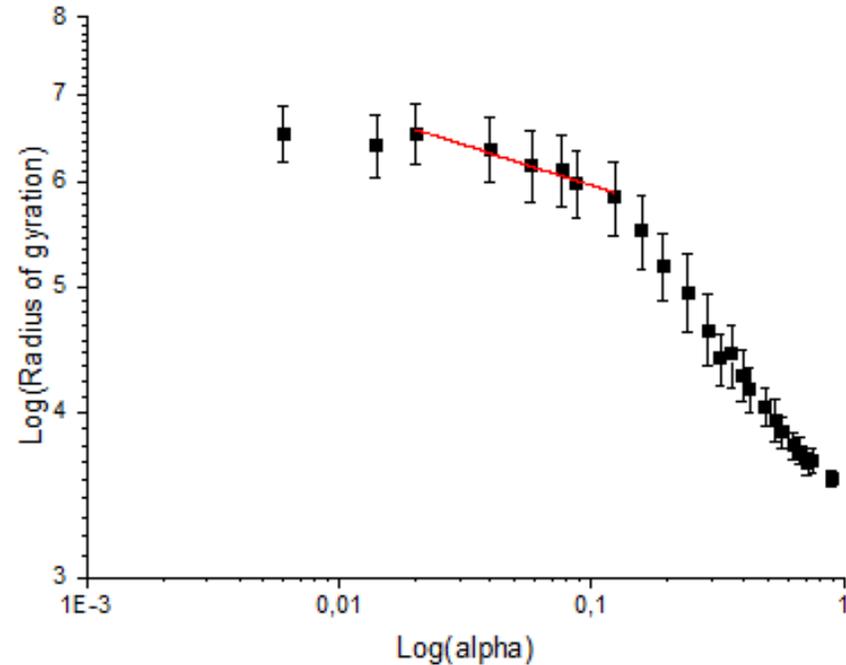


Фиттинг сигмоидой $y = A2 + (A1-A2)/(1 + \exp((x-x0)/dx))$, корреляция 0,9989

Пример полученной зависимости в помощью программы

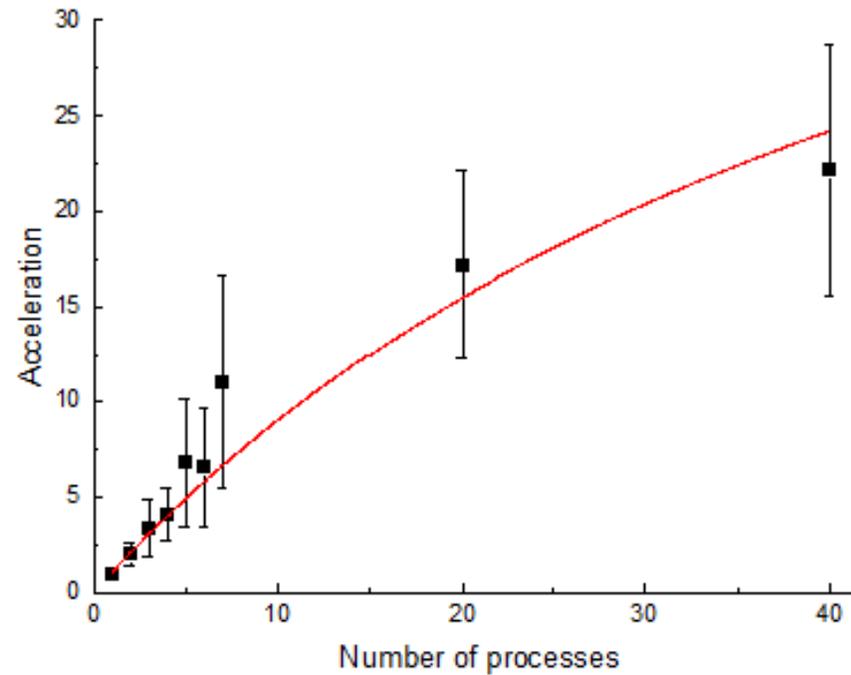


$$y = 1.381e^{-\frac{\alpha}{0.113}} + 5.381 \quad R = 0.993$$



$$\text{Log}(y) = (-0.060)\text{Log}(\alpha) + 0.716 \quad R = 0.977$$

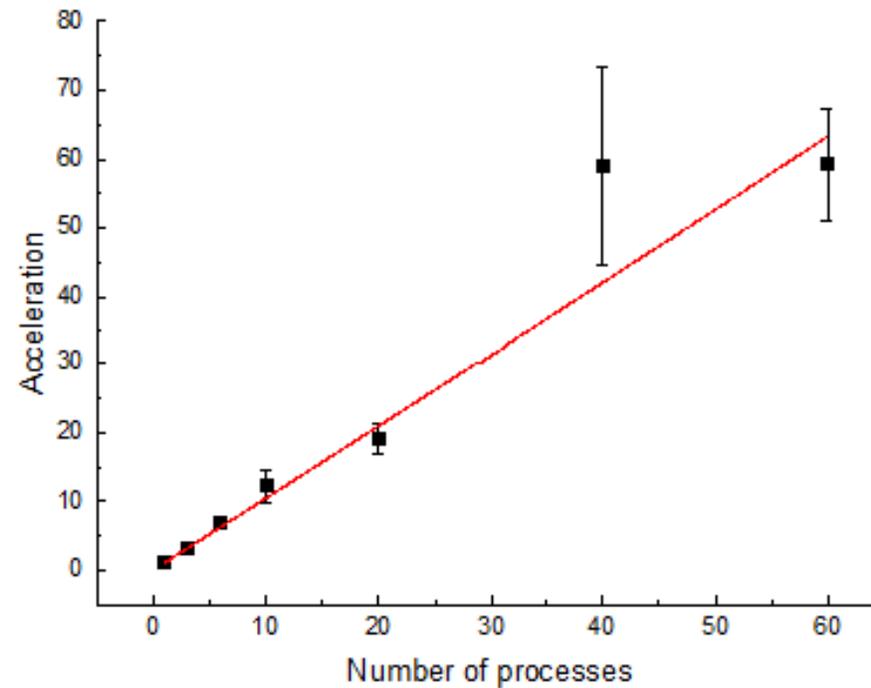
Результаты обработки: цепь N=1000, 100 файлов



$$y = \frac{1}{(0.018 + \frac{0.92}{N})}$$

$$R = 0.98$$

Результаты обработки: цепь N=1000, 1000 файлов



$$y = \frac{1}{(0.00042 + \frac{0.96}{N})}$$

$$R = 0.98$$

Выводы

- Написана параллельная программа, обрабатывающая результаты DPD-моделирования
- Достигнут линейный рост ускорения при большом числе обрабатываемых файлов
- С помощью программы эффективно решаются задачи физики

Спасибо за внимание!