

013

ACELERAÇÃO DA SIMULAÇÃO POR DINÂMICA MOLECULAR USANDO REDES NEURAIS ARTIFICIAIS. *Eduardo Schnurr Siqueira, Adelmo Cechin (orient.)* (UNISINOS).

A simulação por Dinâmica Molecular (DM) é uma poderosa ferramenta, tanto para a compreensão de fenômenos físicos e químicos, como para a obtenção de dados aplicados à biologia molecular. Ela consiste de um potencial definido pela sobreposição de um sistema composto por diversas partículas, descrevendo a interação entre as mesmas. Na simulação por DM, as forças atuantes sobre cada átomo são obtidas calculando-se a primeira derivada do potencial em relação às posições desse átomo. A partir dessas forças resolvem-se as equações do movimento de Newton para descrever como as posições atômicas variam com o tempo, ou seja, obtém-se a evolução temporal do sistema. A cada passo, as forças são reavaliadas. Esse processo exige grande poder computacional. Citamos a simulação da proteína orf1 composto por 10^3 átomos, onde a evolução de 1ns de sua vida pode custar 3 dias de processamento em uma máquina Xeon 2.8GHz. Assim, este trabalho realiza um estudo para viabilizar o uso de Redes Neurais Artificiais (RNAs), mais especificamente, Redes Neurais Recorrentes (RNR), para acelerar o processo de simulação por DM. As RNAs são treinadas a partir dos dados amostrados da DM. Desta forma, como parâmetros de treinamento para RNA, foram utilizadas as distâncias entre os aminoácidos pertencentes a regiões coil da molécula, estas representadas por treliça. Os dados para esta representação foram obtidos através das coordenadas cartesianas dos carbonos alpha destes aminoácidos. Estas coordenadas sofrem modificações sucessivas por tratar-se de uma evolução temporal. Através dos experimentos, observamos que uma RNR com 10 neurônios em sua camada oculta possui a capacidade de modelar o comportamento temporal dos dados, demonstrando ser uma abordagem promissora para acelerar o processo de DM. (PIBIC).