

RESUMO

BOIANI, M. **Um algoritmo jDE híbrido baseado em GPU aplicado ao problema de predição de estrutura de proteínas com modelo AB *off-lattice***. Orientador: Rafael Stubbs Parpinelli. 2019. 117 f. Dissertação (Mestrado em Computação Aplicada) – Programa de Pós-Graduação em Computação Aplicada, Universidade de Santa Catarina, Joinville, 2019.

O problema da Predição da Estrutura de Proteína (PSP) é um dos problemas mais significativos em bioinformática. Como a estrutura da proteína está diretamente relacionada à sua função, resolver o PSP implica em ajudar a entender e tratar adequadamente as proteinopatias e projetar drogas inteligentes. O modelo AB *off-lattice* é um modelo para prever a conformação da proteína a partir de um baixo nível de detalhes, guiado por uma função de energia baseada nas propriedades hidrofóbicas e polares e sua sequência de aminoácidos. Dessa forma, o principal objetivo deste trabalho é fornecer um método para abordar o modelo AB *off-lattice* em ambas as instâncias, 2D e 3D, usando computação de alto desempenho através de Unidades de Processamento Gráfico (GPUs). Assim, este trabalho tem como objetivo verificar se a arquitetura da GPU é capaz ou não de escalar o problema PSP AB *off-lattice*. Com base nisso, este trabalho propõe dois algoritmos híbridos baseados em GPU, denominados cuHjDE-2D e cuHjDE-3D, para lidar com instâncias de problemas do problema PSP fora da rede 2D e 3D-AB, respectivamente. O algoritmo híbrido é uma Evolução Diferencial (DE) auto-adaptativa que usa o mecanismo jDE para auto-adaptar os parâmetros do DE e emprega a Busca Direta Hooke-Jeeves (HJDS) como a rotina de exploração. Além disso, a arquitetura da GPU é explorada através da plataforma NVIDIA CUDA. A fim de avaliar o desempenho dos métodos propostos, eles foram comparados com os algoritmos estado-da-arte da literatura relacionada. Além disso, o impacto do uso da GPU é analisado. No que diz respeito ao cuHjDE-2D, os resultados experimentais indicam que o nosso método é altamente competitivo, apresentando melhores resultados globais em todas as quatro sequências proteicas reais. Em relação ao cuHjDE-3D, os resultados obtidos evidenciam o potencial de otimização do método proposto, obtendo melhores resultados globais na maioria das proteínas. No entanto, o algoritmo estado-da-arte da literatura ainda apresenta melhores médias. Em ambos os cenários, a análise de tempo de execução da GPU relatou o impacto positivo do uso de uma arquitetura massivamente paralela, promovendo a escalabilidade necessária com acelerações de até $277\times$.

Palavras-chaves: Computação em GPU. Bioinformática Estrutural. Algoritmos Evolutivos. Algoritmos Híbridos. Computação de Alta Desempenho.