

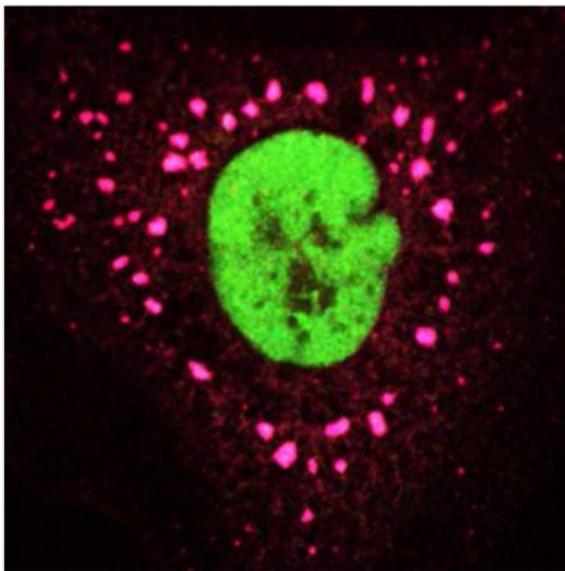
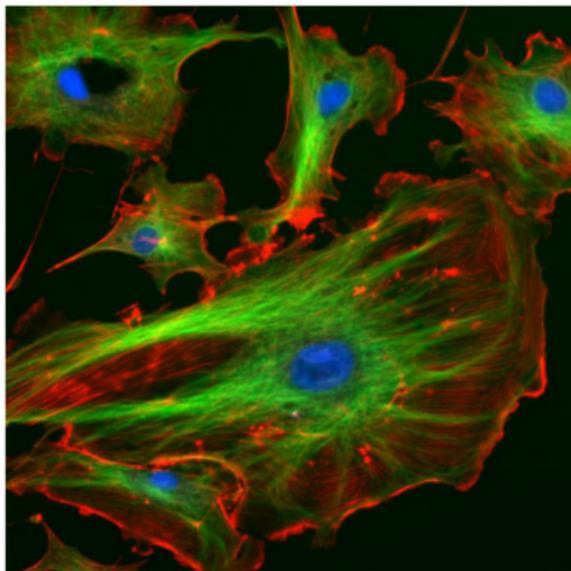
Разработка библиотеки для моделирования большого количества внутриклеточных частиц с использованием GPU

Федорова Анна Олеговна
научный руководитель: А.А. Шпильман

СПб АУ НОЦНТ РАН

20 февраля 2018 г.

- Микротрубочки – белковые линейные внутриклеточные структуры, основной компонент цитоскелета
- Частицы используют микротрубочки для передвижения внутри клетки
- Стрессовые гранулы – временные кластеры, состоящие из частиц, возникающие в клетке при стрессе (воздействие температуры, УФ излучения, энергетическое голодание)



- Экспериментально показано, что образование стрессовых гранул связано с наличием микротрубочек в клетке
- Не выяснен характер влияния микротрубочек, экспериментально выяснить его пока не удалось
- Для этой задачи необходима компьютерная модель

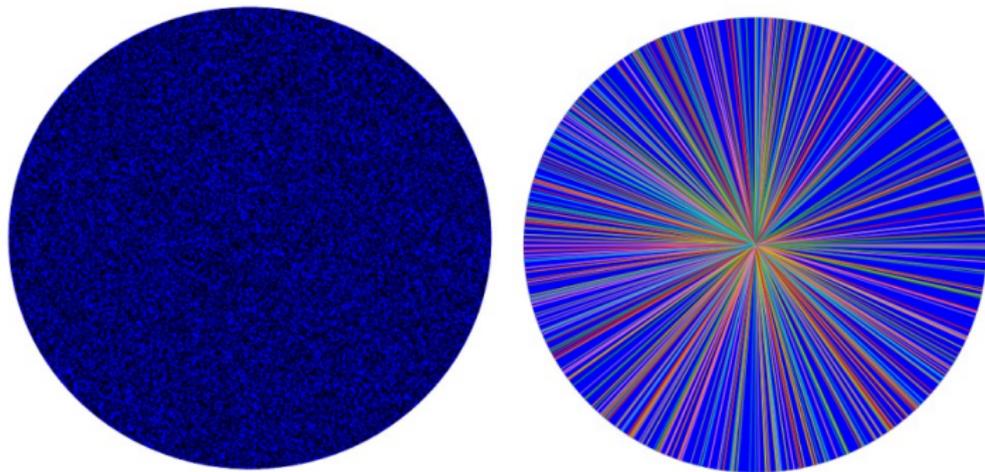
Недостатки существующих моделей:

- Рассматриваются маленькие обособленные фрагменты клетки (K. G. Chernov, 2009)
- Сильно упрощена модель клеточного пространства (Daisuke Ohshima, 2015)
- Нельзя воспроизвести результаты, наблюдаемые на практике

Создать библиотеку для моделирования поведения большого количества внутриклеточных частиц

- Реализовать открытую и понятную модель клетки (*Python*)
- Сделать её пригодной для моделирования большого количества частиц

- Основная проблема: большое количество частиц и малый временной шаг (50 мкс)
- Данные хранятся в объёмных массивах, которые обрабатываются одновременно. Для вычислений такого рода эффективнее использовать GPU.



- Клетка – плоский цилиндр с радиусом поперечного сечения 10 мкм и высотой 1.5 мкм
- Количество частиц: 100 000. Частицы – сферы с радиусом 10 нм
- Микротрубочки – прямые линии из центра клетки к периферии диаметром 25 нм

Один шаг алгоритма

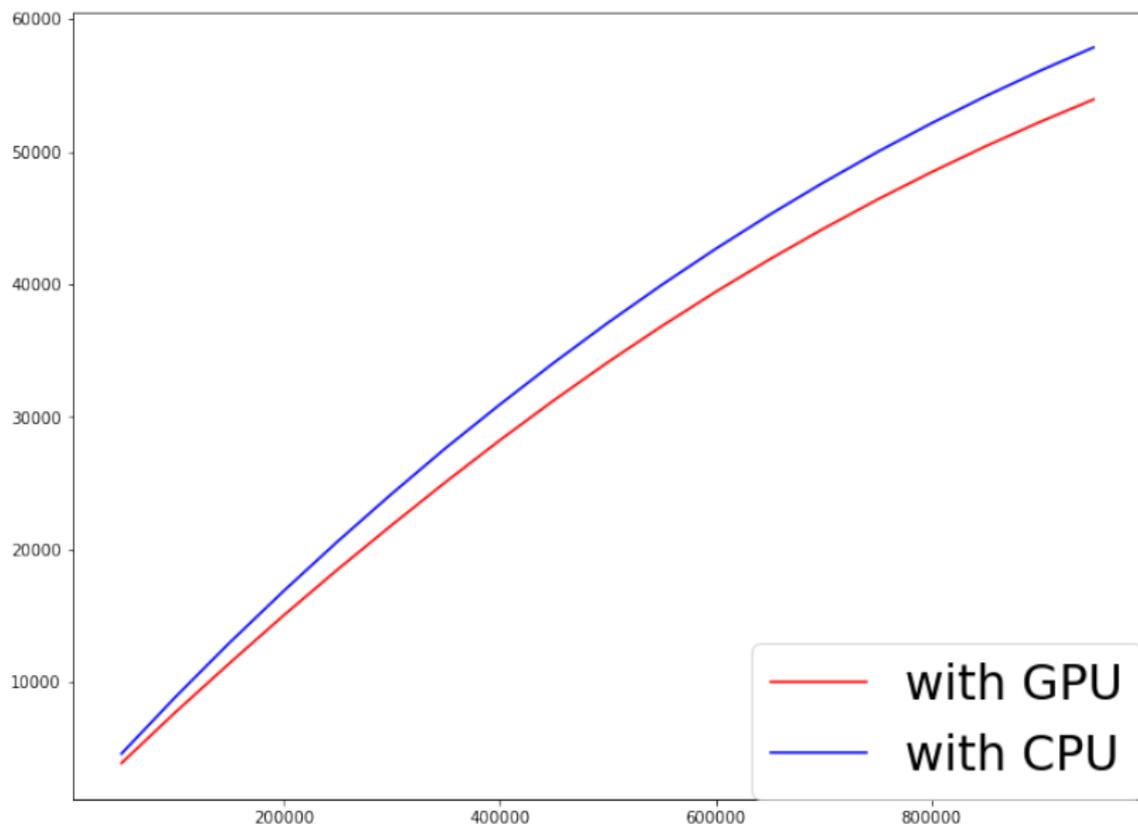
```
1 components = find_components_to_merge(particles)
2 new_particles = merge_components(components)

3 particles.delete(components)
4 particles.append(new_particles)

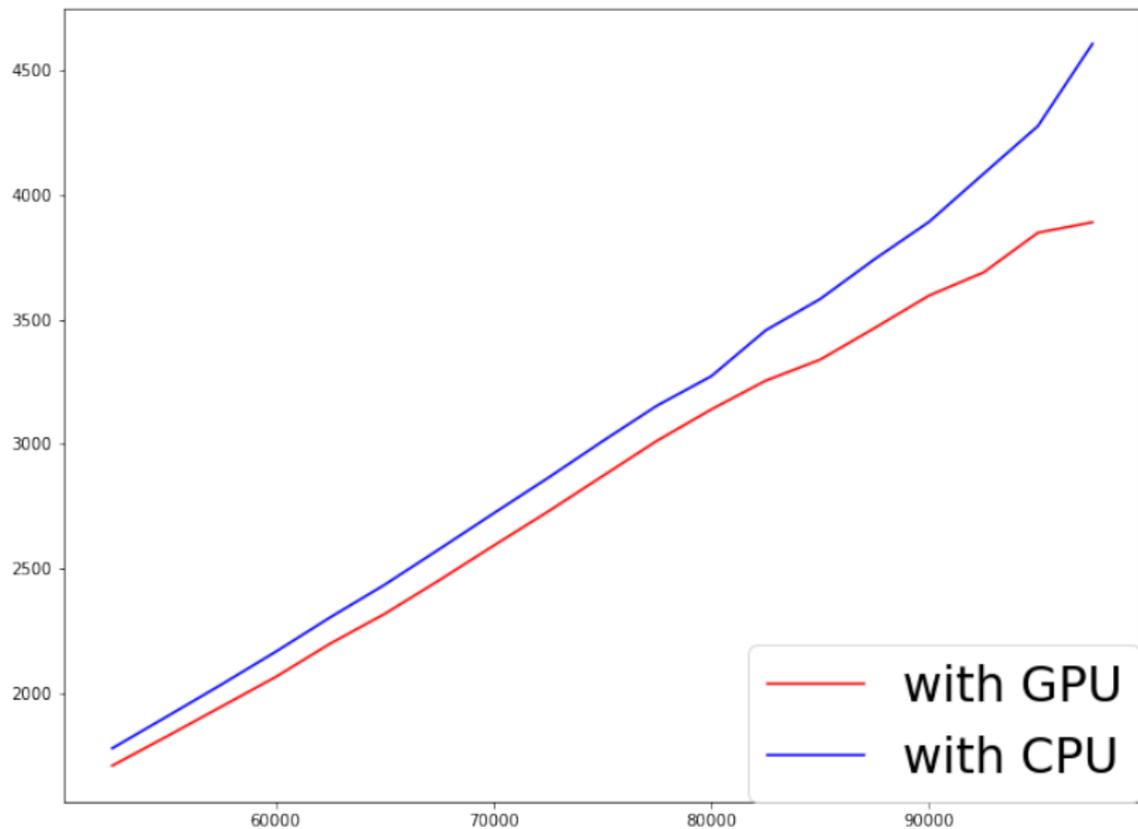
5 check_microtubule_meeting(particles)
6 step = generate_delta()
7 particles += delta

8 check_out_of_bounds(particles)
```

Результаты

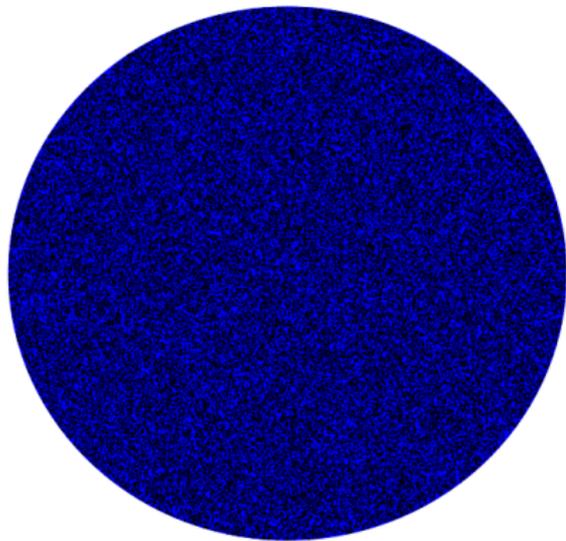


Результаты

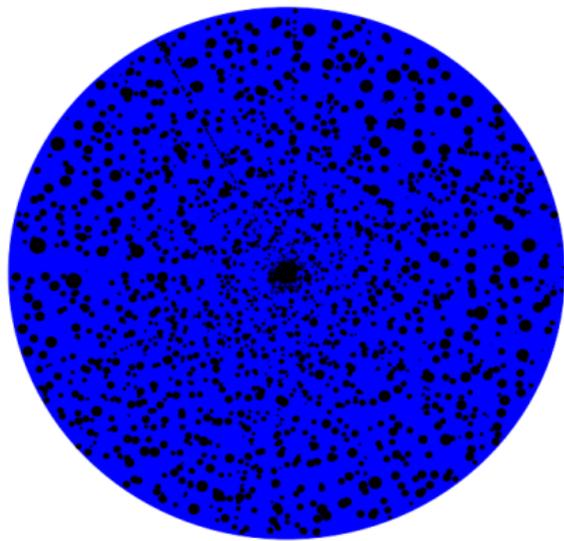


Кол-во итераций	with GPU	with CPU
500	32 с	50 с
$5 \cdot 10^4$	3890.21 с	4513.96 с
10^6	53932.52 с	57857.75 с

Работа модели ускорена на 10% при количестве частиц больше 50 тысяч и на 6% в среднем для количества частиц от 30 тысяч до 100 тысяч.



without microtubules



with microtubules

- Модель отображает приближение взаимодействий внутриклеточных частиц, наблюдаемых на практике

Дальнейшая работа будет направлена на настройку модели с помощью методов машинного обучения и дальнейшее сокращение времени работы.

Спасибо за внимание!