



## Aceleradores para Redes Reguladoras de Genes

Mariana Rodrigues de Sant'ana, Ricardo do Santos Ferreira, Lucas Teixeira Reis

Universidade Federal de Viçosa, Departamento de Informática

Palavras-chave: Redes Reguladoras, CGRA, GPU

Categoria: Pesquisa, Instituição Universidade Federal de Viçosa

### Introdução

O modelo de redes booleanas (Boolean Networks -BNs), proposto por Stuart Kauffman [1], no ano de 1969, é um método que permite analisar interações entre genes utilizando uma modelagem matemática e simulação de redes *in silico*. Esse modelo se mostrou eficiente para o estudo de interações entre componentes biológicos a nível molecular, como nas Redes Reguladoras de Genes (GRNs), possibilitando a análise moléculas, células e outros organismos.

### Objetivos

Nosso objetivo é explorar técnicas de otimização computacional para reduzir o tempo para execução dos cálculos nas simulações dos modelos de BNs tendo em vista que o tempo de processamento cresce de forma exponencial com o número de genes ou agentes.

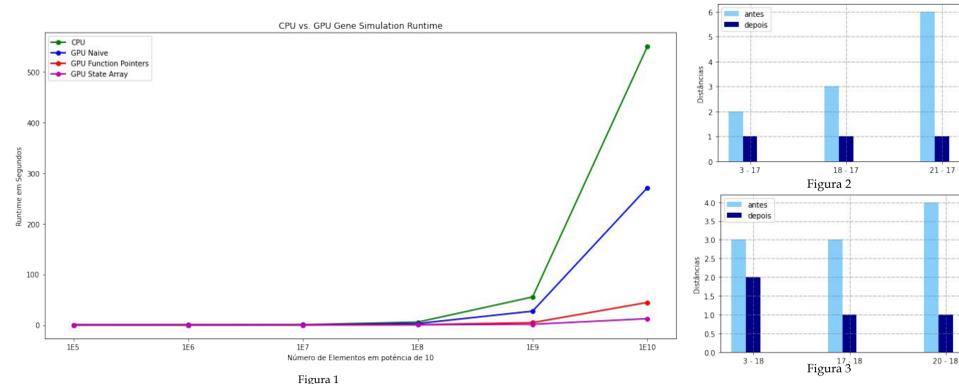
### Material e Métodos

Este problema se torna candidato a otimização utilizando computação paralela. Para isso, foram feitas simulações dessas operações em aceleradores usando as placas gráficas (*graphics processing unit* - GPU) para alcançar maior eficiência em comparação com os processadores tradicionais. Também foram avaliadas as arquiteturas com granularidade de palavras *Coarse grained reconfigurable array* (CGRA). Na implementação foram usadas as linguagens de programação: Python, *Compute Unified Device Architecture* CUDA e C++. Além delas, utilizamos ferramentas como BoolNet e BooleanNet. O algoritmo *Simulated Annealing* (SA) também foi utilizado no mapeamento dos CGRAs.

### Apoio Financeiro

PIBIC/Cnpq

### Resultados e Discussão



Comparamos a CPU (curva verde) com três versões usando GPU na Figura 1, quando menor é melhor. Observamos que a GPU versão *state array* (em roxo) acelerou o desempenho após  $10^8$  iterações. Em seguida temos as técnicas GPU *Naive* e *Function Pointers*. Apesar de serem piores que a GPU *State Array* são, respectivamente, 2x e 12x melhor que usar apenas CPU.

Em relação aos CGRAs, medimos a posição dos genes em relação aos seus vizinhos no início e no final do mapeamento. Quanto menor, melhor é o resultado. Destacamos nas Figuras 2 e 3 a posição relativa dos nós 17 e 18 em uma rede de genes. Estes nós possuem a maior incidência desta rede. O uso do algoritmo SA reduziu de 11 para 3 e de 10 para 4, a distância dos vizinhos para os nós 17 e 18, respectivamente.

### Conclusões

O mapeamento em CGRA com SA e as implementações em GPU das redes booleanas mostraram resultados com aceleração para possibilitar o estudo das redes com redução do tempo de execução dos cálculos.

### Bibliografia

[1] S. A. Kauffman, "Metabolic stability and epigenesis in randomly constructed genetic nets," J. Theoret. Biology, vol. 22, pp. 437-467, 1969.

### Agradecimentos

Agradecemos ao Programa Institucional de Bolsas de Iniciação Científica da UNIVERSIDADE FEDERAL DE VIÇOSA - PIBIC/UFV 2020-2021 financiado pelo CNPq.