Высокопроизводительные вычисления в биоинформатике

Особенности предметной области

1. Большой темп накопления знаний. Появление новых высокопроизводительных экспериментальных установок.
2. Большой темп роста числа гетерогенных источников данных - баз данных.
3. Тенденция к усложнению моделей предметной области.
4. Расширение области применения молекулярно-генетических знаний: биомедицина, фармакология, нанобиоинженерия и т. д.
5. Необходимость решать задачи, требующие больших вычислительных ресурсов.
6. Необходимость решать задачи, требующие интеграции больших объемов гетерогенных источников данных.

Системная биология

Цель - изучение организации и механизмов развития и функционирования живых систем на основе информации, закодированной в их геномах, в ходе их взаимодействия с окружающей средой.

Описание в базах данных и интеграция огромных объемов гетерогенной экспериментальной информации, характеризующей живые системы на различных уровнях их структурно-функциональной организации

Крупномасштабный анализ экспериментальных данных

Построение математических моделей организации и функционирования живых систем

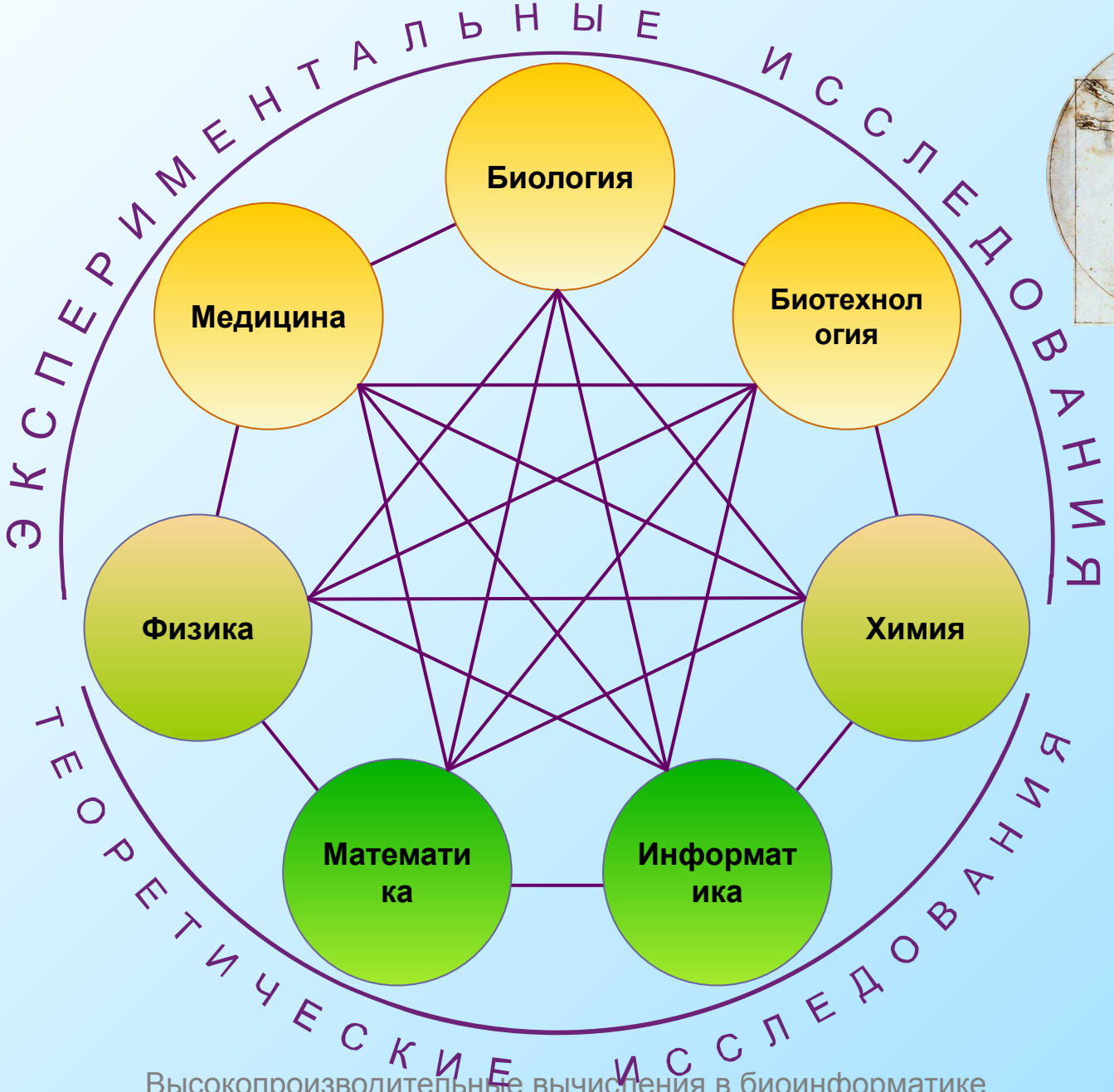
Предсказание новых особенностей организации и функционирования живых систем

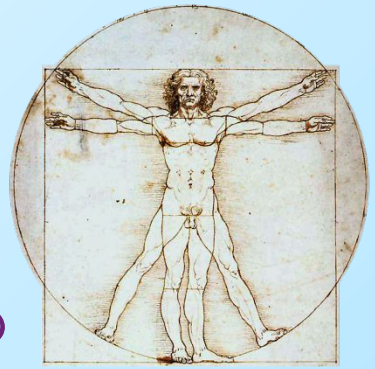
Планирование экспериментов по проверке результатов предсказания

Проведение экспериментов и получение новых данных и знаний

СИСТЕМНАЯ БИОЛОГИЯ ВОЗНИКЛА, КОГДА ОНА СТАЛА ПРЕДСКАЗАТЕЛЬНОЙ НАУКОЙ

Системная биология – интегративная наука





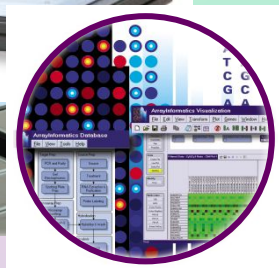
Экспериментально-вычислительная база системной биологии

Кластер «Системная биология» Новосибирского научного центра СО РАН

Геномика: автоматический секвенатор

Протеомика: массовый анализ белков и метаболитов

ТРАНСКРИПТОМИКА: производство биочипов высокой плотности и анализ профилей экспрессии генов



Клеточная биология: лазерный сканирующий микроскоп LSM510 META

Высокопроизводительные вычислительные

Прижизненная томография экспериментальных животных

Объемы молекулярно-биологических данных и комбинаторная сложность задач биоинформатики

Источник данных	Объем данных	Задачи
Секвенированные последовательности ДНК	**~40 млн**. последовательностей, **10^{12}** пар оснований	Функциональная аннотация
Белковые последовательности	**~5.5 10^{6}** последовательностей (~300 аминокислот каждая)	Сравнительный анализ. Выявление консервативных мотивов
Структуры макромолекул	**50000** структур (**~3000** атомных координат каждая)	Предсказание, выравнивание, измерение геометрии, докинг
Геномы	Около **1200** геномов прокариот, более **160** геномов эукариот	Сборка полных геномов; Функциональная аннотация; Сравнительный анализ
Экспрессия генов в различных тканях, стадиях развития, состояний организма и т.д.	Сотни тысяч образцов с тысячами вариантов измерений для десятков тысяч генов. **~10^{13}** измерений.	Анализ механизмов регуляции коэкспрессирующихся генов. Связь с последовательностями, структурными и биохимическими данными.
SNP (однонуклеотидные мутации в ДНК)	Только одна база данных dbSNP содержит информацию о **10^{8}** мутациях в 23 геномах.	Анализ связи с заболеваниями
Молекулярные взаимодействия, метаболические пути и генные сети	Более **10^{6}** молекулярных взаимодействий описано в публикациях. Более ста тысяч метаболических путей и генных сетей представлено в базах данных.	Моделирование молекулярно-генетических процессов и систем
Публикации	Десятки миллионов публикаций	Поиск и извлечение знаний

Список некоторых наиболее затратных задач биоинформатики и потребности в вычислительных и информационных ресурсах

Ассемблирование полных геномов	Реконструкция последовательности полного генома человека, животных или растений.	10 TFlops	30 TB of trace files per genome
Анализ полных геномов	Сравнительный анализ полных геномов	10 TFlops	5 TB
Предсказание структуры белка	Анализ всех белков бактериального генома за одни сутки	100 TFlops	10 TB
Молекулярная динамика	Моделирование ДНК-белковых взаимодействий (20000 атомов, до 1 мс)	100 TFlops	30 TB of trace files
Молекулярная динамика (с учетом квантовомеханических взаимодействий)	Моделирование реакции для фермент активного сайта (200 атомов, 1 нс) за одни сутки.	1000 TFlops	100s TB of trace files
Докинг белковых молекул	Моделирование взаимодействия белок-леганд. Предсказание функции белка. Поиск новых лекарственных средств.	>10 TFlops	5 TB

Анализ потребности в Супервычислениях

Уровни описания биосистем

Экологические процессы

Клеточные сообщества

Клеточные процессы

Метаболические пути

Молекулярная машина

Макромолекулы

Макромоделирование экосистем

Макромоделирование микробных сообществ

Моделирование генных сетей

Моделирование метаболических путей

Сравнительный анализ белков

Сравнение геномов

Асемблирование генома

Предсказание структуры белка

Молекулярный докинг и моделирование взаимодействия

Моделирование динамики белковых комплексов

Моделирование клетки

Моделирование органа

Моделирование динамики паразитарной инфекции на молекулярно-генетическом уровне

Широкомасштабное моделирование экосистем

Моделирование эволюционных процессов

1 10 100 1000 Tflops

Необходимые вычислительные ресурсы

Технологии ускорения решения задач

1. Использование высокопроизводительных вычислительных кластеров или суперкомпьютеров:

- Распараллеливание по данным
- Распараллеливание по процессам

2. Использование специальных процессоров:

- **FPGA** (Field Programmable Gate Array)
- **MPPA** (Massively Parallel Processor Array)
- **GPU** (Graphics Processing Unit)

3. Использование гибридных вычислительных систем, объединяющих в вычислительных узлах CPU вместе со спецпроцессорами, GPU или FPGA.

Пример: IBM Roadrunner. Процессор PowerXCell 8i.

Когда эффективно GPU?

GPU демонстрируют хорошие результаты при:

1. **Параллельной обработке данных**
   - **Когда одна и та же последовательность действий, применяется к большому объёму данных**
2. **Расчетах с высокой плотностью арифметики**
   - **Когда велико отношение числа арифметических инструкций к числу обращений к памяти**

Одни и те же вычисления означают меньшие требования к управлению исполнением (flow control)

Высокая плотность арифметики и большой объём данных означают возможность покрытия латентности памяти вычислениями (вместо больших кэшей на CPU)

CUDA Zone -- The resource for CUDA developers - Mozilla Firefox

File Edit View History Bookmarks Tools Help

http://www.nvidia.com/object/cuda_home.html#state=filterOpen;filter=Life%20Sciences

NVIDIA CUDA ZONE

USA - United States

Search NVIDIA

DOWNLOADS WHAT IS CUDA CUDA U DEVELOPING WITH CUDA FORUMS NEWS AND EVENTS

LATEST CUDA NEWS NVIDIA And NEC Collaborate To Deliver GPU Computing Solutions To HPC Market

Accelerating Leukocyte Tracking using CUDA 29 x

Ultrasound goes GPU: real-time simulation using CUDA

Particle Swarm Optimization on GPU 270 x

Accelerated Image Registration With CUDA 100 x

Jacket: GPU Engine for MATLAB 50 x

Smith Waterman algorithm 3.5 x

Accelerating Molecular Dynamic Simulations on GPUs Using OpenMM 100 x

Manufacturing Computations Lab

GPUGRID.NET

Biomedical Image Analysis 13 x

3D Particle Boltzmann Solver 120 x

Creation parallel dotplots for suite of protein sequences

LISSOM 9 x

Silicon Informatics Protein Docking 20 x

Folding@home 100 x

Search

Sort by Release Date

Submit Your Work to CUDA Zone

Filter by Application Type

Reset

- Computatio...
- Digital Cont...
- Electronic D...
- Finance
- Imaging
- Numerics
- Life Sciences
- Libraries
- Science
- Signal Proce...
- Video & Audio
- Other

Filter by Content Type

- Application
- Code
- Multimedia
- Paper
- Presentation

Filter by Organization Type

Примеры приложений GPU CUDA и их эффективность

- Генетический алгоритм оптимизации. Монте-Карло (**300-1000**)
- Анализ текстов, поиск регулярных выражений. (**10-35**).
- Сравнительная геномика. Филогения (**15**)
- Smith Waterman, BLAST, ClustalW (**30-70**)
- Скрытые марковские процессы. HMMer (**25-30**)
- Множественное выравнивание (**30**).
- распознавание образов(**100**), К-ближайших соседей (**470**), SVM(**150**),
- Нейросети (**15**);
- Алгоритмы на графах (**20**)
- Дискретное моделирование биологических систем (**200**)
- Молекулярная динамика (**100-150**),
- Молекулярный докинг (**16**)
- Молекулярный фолдинг (**100**)
- Медицинская томография (**300**)
- Анализ изображений (**100**)
- Решение систем линейных уравнений (**50**)
- Сингулярная декомпозиция (**60**)

Благодарю за внимание!

Классы задач, решаемых в СО РАН

1. Компьютерный анализ результатов секвенирования и ассемблирование полноразмерных геномов.
2. Структурно-функциональная аннотация полногеномных последовательностей прокариот и эукариот.
3. Сравнительный анализ полногеномных последовательностей.
4. Молекулярная эволюция. Филогения.
5. Широкомасштабный компьютерный анализ протеомов.
6. Компьютерный анализ и моделирование структурно-функциональной организации ДНК, РНК, белков и их комплексов.
7. Функциональная аннотация белковых макромолекул. Молекулярный скрининг. Молекулярный докинг и молекулярный дизайн медицинских препаратов.
8. Дизайн самоорганизующихся ДНК/РНК наноструктур.
9. Молекулярная эпидемиология. Анализ полиморфизмов.
10. Компьютерное моделирование сложных молекулярно-генетических систем и процессов в норме и патологии.
11. Компьютерно-информационная поддержка экспериментального дизайна искусственных бактериальных молекулярно-генетических конструкций.
12. Компьютерный анализ изображений.

CUDA™ Toolkit – среда разработки для GPU, основанная на языке C

- **CUDA** (Compute Unified Device Architecture) -- это технология от компании NVidia, предназначенная для разработки приложений для массивно-параллельных вычислительных устройств (в первую очередь для GPU начиная с GeForce 8800, а текже Quadro и Tesla.
- Основными плюсами CUDA являются ее бесплатность (SDK для всех основных платформ свободно скачивается с developer.nvidia.com), простота (программирование ведется на "расширенном C") и гибкость.
- **GPU – сопроцессор для CPU** (хоста)
- **У GPU** есть **собственная память**
- GPU с CUDA работает либо как **гибкий потоковый процессор**, где тысячи вычислительных программ, называемых потоками, или ***threads*** , вместе решают сложные задачи, либо как потоковый процессор в специфических приложениях, например, для вывода изображения, где потоки не связаны между собой.
- GPU способен одновременно обрабатывать **множество потоков данных** одним и тем же алгоритмом
- Для осуществления расчётов при помощи GPU хост должен осуществить запуск вычислительного ядра, которое определяет конфигурацию GPU в вычислениях и способ алгоритм получения.
- Процессы GPU (в отличие от CPU) очень просты и многочисленны (~ 1000 для полной загрузки GPU)