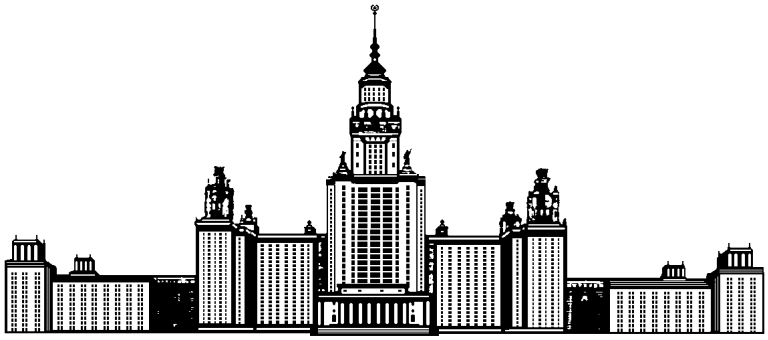


Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова
Факультет вычислительной математики и кибернетики
Кафедра суперкомпьютеров и квантовой информатики

ТОЙГИЛЬДИН Владислав Петрович

Разработка и исследование параллельного алгоритма поиска неточных повторов в геноме.

ДИПЛОМНАЯ РАБОТА

Научный руководитель
к.ф.-м.н., доцент
Н.Н. Попова

Москва, 2015

Содержание

Введение

С появлением в начале XXI века новых методов секвенирования (расшифровки биологических последовательностей) резко увеличился объем генетической информации. Рост банков данных носит экспоненциальный характер и есть все основания предполагать, что в ближайшее время этот процесс только усилится. Увеличивающийся объем данных открывает возможности для проведения полномасштабных исследований на уровне целых геномов, однако это требует новых подходов. Дело в том, что почти все существующие алгоритмы обработки биологических последовательностей - это адаптированные алгоритмы обработки текстовых строк, т.к. биологические данные в расшифрованном виде представляют собой последовательности символов. Однако данные алгоритмы изначально не учитывают мутационных процессов, таких как вставка, замена, делеция. Учет же таких точечных мутаций является дорогой с вычислительной точки зрения операцией, вносящей существенную нелинейность в подобные алгоритмы, что значительно увеличивает время их выполнения и делает непригодными для практических целей.

Все это привело к тому, что существующие вычислительные мощности не удовлетворяют потребностям биологов. Становится актуальной разработка программных средств, позволяющих быстро обрабатывать большие биологические данные. Данная дипломная работа посвящена параллельным методам анализа и обработки биологических последовательностей на суперкомпьютерах с целью сокращения времени обработки и увеличения объёма обрабатываемых данных.

Одной из частных задач молекулярной генетики является поиск повторяющихся элементов, изучение их структуры и распределения в биологических последовательностях. Повторы играют важную роль в функционировании организма, т.к. составляют значительную часть генома, возможно участвуют в его реорганизации и при попадании в кодирующие области повторы могут быть причиной нарушения функций этих геномов, что ведет к развитию заболеваний. Таким образом повторы могут использоваться для диагностики генетических заболеваний и определения родства организмов.

Существует масса алгоритмов, ориентированных на поиск относительно точных или коротких (до 500 н.п.) повторов. Однако именно протяженные (от 1000 н.п.) повторы могут служить источником для фундаментальных исследований при решении эволюционных и филогенетических задач - определении родства групп организмов на генном уровне. Для полногеномного сравнения на практике часто применяется ДНК-ДНК гибридизация - биохимическая реакция, протекающая с участием ДНК двух организмов, проводимая для получения количественной оценки их схожести. Однако данный метод очень дорогостоящий, долгий и недостаточно точный.

В данной работе рассматривается метод поиска протяженных неточных повторов, разработанный коллективом кафедры математических методов прогнозирования и института математических проблем в биологии Российской академии наук (Пущино). Данный метод позволяет эффективно решать задачу поиска неточных протяженных повторяющихся структур в генетических текстах. Основное отличие данного метода состоит в переходе от дискретного анализа к непрерывному анализу. Таким образом для задачи дискретной по своей природе, применяется континуальный подход, основанный на приближении непрерывных функций с помощью

ортогональных многочленов. Благодаря этому метод решает недостатки дискретного подхода и обладает следующими свойствами:

- Линейная сложность алгоритма
- Высокая степень устойчивости к мутациям
- Возможность распараллеливания алгоритма на кластерных системах

Для выполнения дипломной работы необходимо было решить следующие задачи:

- Разработать и реализовать параллельный алгоритм поиска повторов, ориентированного на суперкомпьютерную реализацию: большой объем обрабатываемых данных (размер данных порядка 1 ГБ), время обработки в пределах 1 часа.
- Исследовать эффективность использования графических процессоров для решения поставленной задачи.
- Анализировать масштабируемость разработанного алгоритма на примере задачи сравнения конкретных геномов
- Разработать графический интерфейс для работы пользователя на локальной и удаленных системах.

Глава 1

Исследование и построение решения

1.1 Математическая модель поиска повторов в биологических последовательностях

Формально **биологическая последовательность**:

$$X = (x_n)_{n=1}^{N},\ N \in \mathbb{N},\ x_n \in \{A, T, G, C\},$$

где N - длина последовательности, A, T, G, C - озбоначения нуклеотидов.

Введем обозначение. **Подпоследовательностью** $X|_i^k$ последовательности X называется часть последовательности X с элемента с номером i длиной k при условии $i + k < |X|$:

$$X|_i^k = \{x_i, x_{i+1}, ..., x_{i+k-1}\}$$

Под **повтором** будем понимать пару последовательностей (X_1,X_2) для которых справедливо неравенство:

$$\rho(X_1, X_2) \leq \varepsilon,\ |X_2| = |X_2| = K$$

где:

- $\rho(X_1, X_2)$ - расстояние редактирования, оценка близости последовательностей, Конкретный вид функции расстояния редактирования $\rho(X_1, X_2)$ **определяется алгоритмом**
- ε - задаваемая точность поиска, значение которой будет **зависеть от задаваемой функции растояния редактирования**
- K - длина последовательностей

Пусть есть две последовательности $X = (x_n)_{n=1}^{N_x}$ и $Y = (y_n)_{n=1}^{Nk_y}$.
Под **задачей поиска повторов** будем понимать нахождение всех троек $\{i_x, i_y, k\},\ i_x, i_y, k \in \mathbb{N}$, таких что:

$$i_x + k \leq N_x$$
$$i_y + k \leq N_y$$
$$(X|_{i_x}^k, Y|_{i_y}^k) \text{ - повтор длины k}$$

То есть задача найти все такие подпоследовательности последовательностей X и Y, что эти подпоследовательности будут повторами.

1.2 Спектрально-аналитический метод поиска повторов

В работе исследуется спектральный метод поиска повторов в биологических последовательностях предложенный и разработанный коллективом кафедры математических методов прогнозирования и института математических проблем в биологии Российской академии наук (Пущино).

Метод разбивается на четыре основных этапа:

1. Получение профилей биологических последовательностей
2. Спектральное индексирование полученных профилей
3. Сравнение коэффициентов спектрального разложения и построение гомологической матрицы
4. Анализ гомологической матрицы

1.2.1 Профили биологических последовательностей

Одной из главных особенностей рассматриваемого метода поиска повторов является то, что на первом этапе последовательность преобразуется из дискретной в непрерывную область. Это достигается построением т.н. профилей.

Под GC-профилем последовательности $X = (x_n)_{n=1}^{N_x}$ с окном w в дальнейшем будем понимать такую последовательность $P_{GC}(X, w) = (p_n^{GC})_{n=1}^{N_p}, N_p = N_x - w + 1$, что

$$p_i^{GC} = \sum_{k=i}^{i+w} I^{GC}(x_k), i = \overline{1, N_p}$$

где

$$I^{GC} = \begin{cases} 1, & x_n \in \{G, C\} \\ 0, & \text{иначе} \end{cases}, n = \overline{1, N_x}$$

Понятие GA-профиля определяется аналогично:

$$P_{GA}(X, w) = (p_n^{GA})_{n=1}^{N_p} : p_i^{GA} = \sum_{k=i}^{i+w} I^{GA}(x_k), i = \overline{1, N_p},$$

где

$$I^{GA} = \begin{cases} 1, & x_n \in \{G, C\} \\ 0, & \text{иначе} \end{cases}, n = \overline{1, N_x}$$

1.2.2 Спектральное индексирование профилей

На этом этапе профили переводятся в спектральное представление с использованием в качестве базиса полиномов Чебышева дискретного аргумента или функций Фурье.

Под спектральным представлением сигнала $P = (p_n)_{n=1}^{N_p}$ будем понимать вектор $\overline{C} = C_m(P) = (c_0, ..., c_{m-1})$, где $c_0, ..., c_{m-1}$ - первые m коэффициентов разложения сигнала P по некоторой системе ортогональных функций $u_0(x), ..., u_{m-1}(x), ...$

Полиномы Чебышева определяются при помощи рекуррентного соотношения:

$$u_0(x) = 1$$
$$u_1(x) = x$$
$$...$$
$$u_{n+1}(x) = 2xu_n(x) - u_{n-1}(x)$$

Вычисление коэффициентов разложения в обоих случаях выполняется по рекуррентным соотношениям.

1.2.3 Спектральное сравнение профилей

На этой стадии спектральное представление профилей используется для производства сравнения на основе некоторого специально разработанного критерия.

Теперь можно ввести понятие расстояния редактирования для рассматриваемого метода поиска повторов.

Пусть X_1, X_2 - две биологические последовательности, такие что $|X_1| = |X_2| = K \geq w$. Будем понимать под GC- и GA-расстоянием редактирования для X_1 и X_2:

$$\rho^{GC}(X_1, X_2) = \left\| \overline{C_1^{GC}} - \overline{C_2^{GC}} \right\|,$$
$$\rho^{GA}(X_1, X_2) = \left\| \overline{C_1^{GA}} - \overline{C_2^{GA}} \right\|,$$
$$\left\| \overline{C} \right\| = \sum_{i=0}^{m-1} c_i^2$$

Под повтором будем понимать пару последовательностей X_1, X_2, удовлетворяющих системе:

$$\begin{cases} \rho^{GC}(X_1, X_2) < \varepsilon \\ \rho^{GA}(X_1, X_2) < \varepsilon \end{cases}$$

Под матрицей гомологии окном профилей w, окном аппроксимации a и шагом аппроксимации s для последовательностей X_1, X_2 будем понимать матрицу

$$M(X, Y, w, s, a) = (m_{ij})^{L_x \times L_y},$$

$$L_x = [\tfrac{N_x - a - w + 1}{s}], L_y = [\tfrac{N_y - a - w + 1}{s}]$$

$$m_{ij} = \begin{cases} 1, \ x_n \in \{G, C\} \\ 0, \text{ иначе} \end{cases}$$

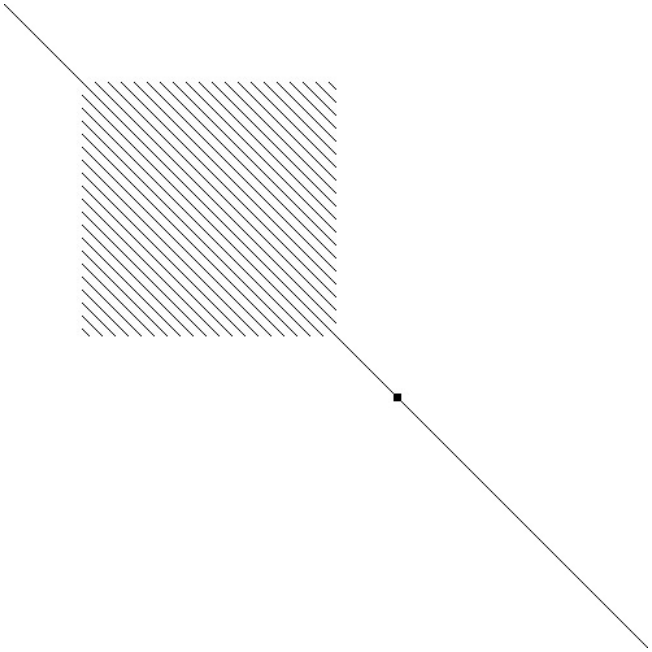


Рисунок 1.1: Пример гомологической матрицы

На рисунке 1.1 приведена гомологическая матрица, образованная в результате сравнения последовательности с самой собой. Матрица имеет симметричный вид.

1.2.4 Анализ гомологической матрицы

Рассмотрим все диагонали гомологической матрицы параллельные главной диагонали, включая ее саму. Фиксируем диагональ D_l. Назовем диагональным элементом $R(x, y, k)$ такое множество элементов m_{ij} гомологической матрицы $M^{L_x \times L_y}$, что:

$$m_{ij} \in D_l$$

$$m_{ij} = 1, \quad i = \overline{y, y+k-1}, \quad j = \overline{x, x+k-1}, k \in \mathbb{N}$$

$$m_{x-1,y-1} = 0, \text{если } x > 0, y > 0$$

$$m_{x+k,y+k} = 0, \text{если } x + k < L_x, y + k < L_y$$

На последнем этапе анализа гомологической матрицы нужно найти все диагональные элементы этой матрицы. Зная параметры алгоритма по диагональным элементам можно восстановить искомые повторы.

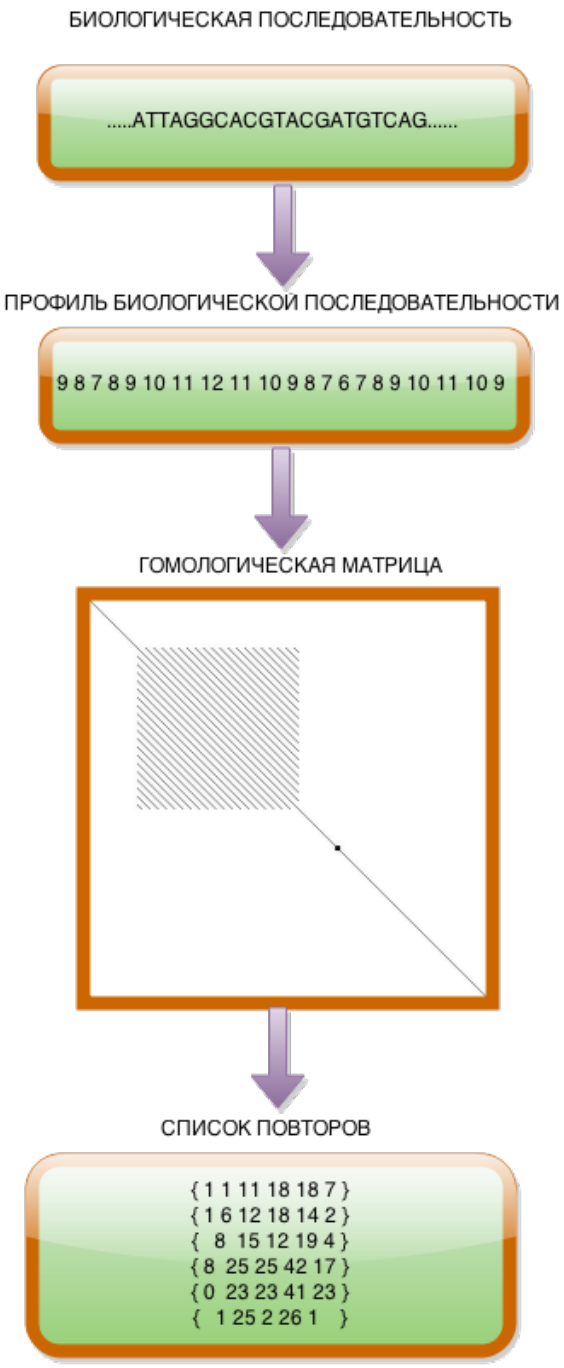


Рисунок 1.2: Схема работы спектрально-аналитического метода поиска повторов

1.3 Параллельный метод поиска повторов

Основная идея параллллельного алгоритма поиска повторов заключается в равномерном распределении входных данных по процессам и их независимой обработке, запрашивая недостающие элементы у соседних процессов.

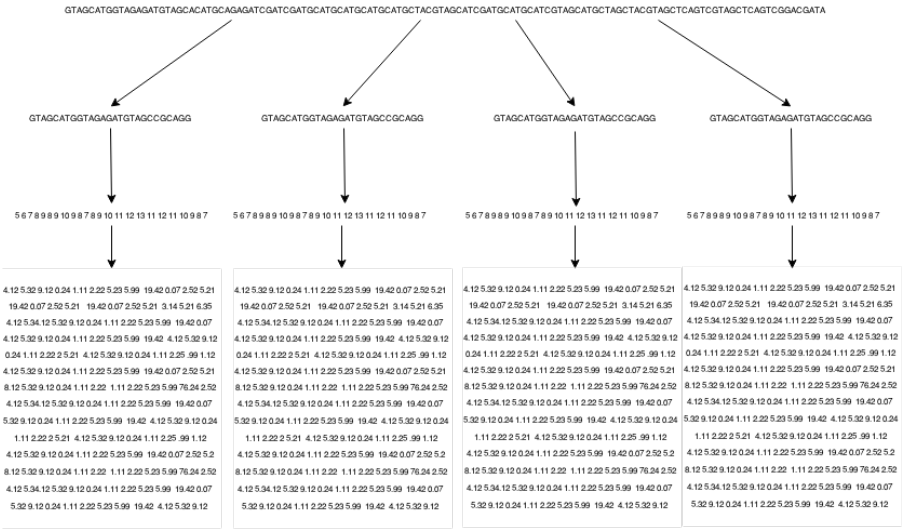


Рисунок 1.3: Параллельная схема работы этапа профилирования и спектрального индексирования

На рисунке 1.3 представлена схема выполнения первых двух этапов: получения профиля биологической последовательности и спектрального индексирования.

На каждом этапе процесс получает недостающие элементы у соседнего процесса и выполняет обработку данных. Причем каждый процесс может начинать работу не дожидаясь завершения приема данных, т.к. они понадобятся только в конце работы. Таким образом можно скрыть передчу данных на фоне выполнения полезной работы и добиться ситуации, когда процессор не будет простаивать на фоне ожидания данных.

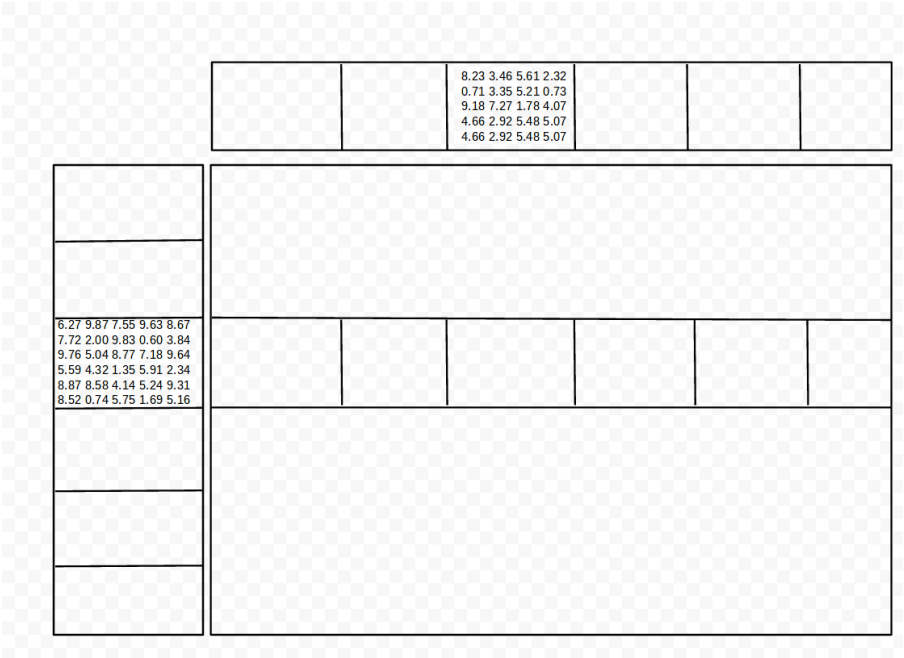


Рисунок 1.4: Этапы 1 и 2

Иначе обстоит дело с этапом спектрального сравнения. Здесь каждый процесс будет отвечать за построение набора строк гомологической матрицы, которые соответствуют спектрам из набора первой последовательности. (см рис)

Для выполнения данного этапа процессу требуются данные со всех процессов. Однако и здесь можно добиться отсутствия простоя вычислительных платформ, если не дожидаться получения всех данных, а начинать работу по возможности - как только придут данные хотя бы с одного процесса. Таким образом можно скрыть большую часть пересылок данных за полезными вычислениями и добиться хорошей масштабируемости алгоритма.

На последнем этапе каждый процесс анализирует имеющуюся часть гомологической матрицы на наличие диагональных элементов. Однако следует учитывать, что найденный диагональный элемент может иметь свое начало или окончание на другом процессе, поэтому нужно "склеить"диагональные элементы с разных процессов.

Здесь будем действовать по следующему принципу: процесс "склеивает"диагональный элемент (т.е. ищет его целиком), только если диагональный элемент принадлежит нашему процессу. Диагональный элемент $R(x, y, k)$ принадлежит процессу i, если начало этого повтора находится на процессе i, т.е.:

$m_{xy} \in M_i^{L_x \times L_y}$, где $M_i^{L_x \times L_y}$ – гомологическая матрица, вычесленная на процессе i

Таким образом алгоритм анализа будет работать следующим образом:

1. Найти все диагональные элементы
2. Удалить диагональные элементы, не принадлежащие нашему процессу
3. Найти конец всех диагональных элементов

Глава 2

Структура программной реализации

Параллельная реализация программы выполнена на C++ с использованием технологии параллельного программирования MPI и технологии CUDA-C для использования графических ускорителей Nvidia.

Параллельный алгоритм разрабатывался таким способом, чтобы выполнялись следующие условия:

- автономность каждого этапа вычислений
- возможность загрузки/сохранения данных на каждом этапе
- унифицированный доступ к ресурсам системы

В результате была разработана следующая структура классов:

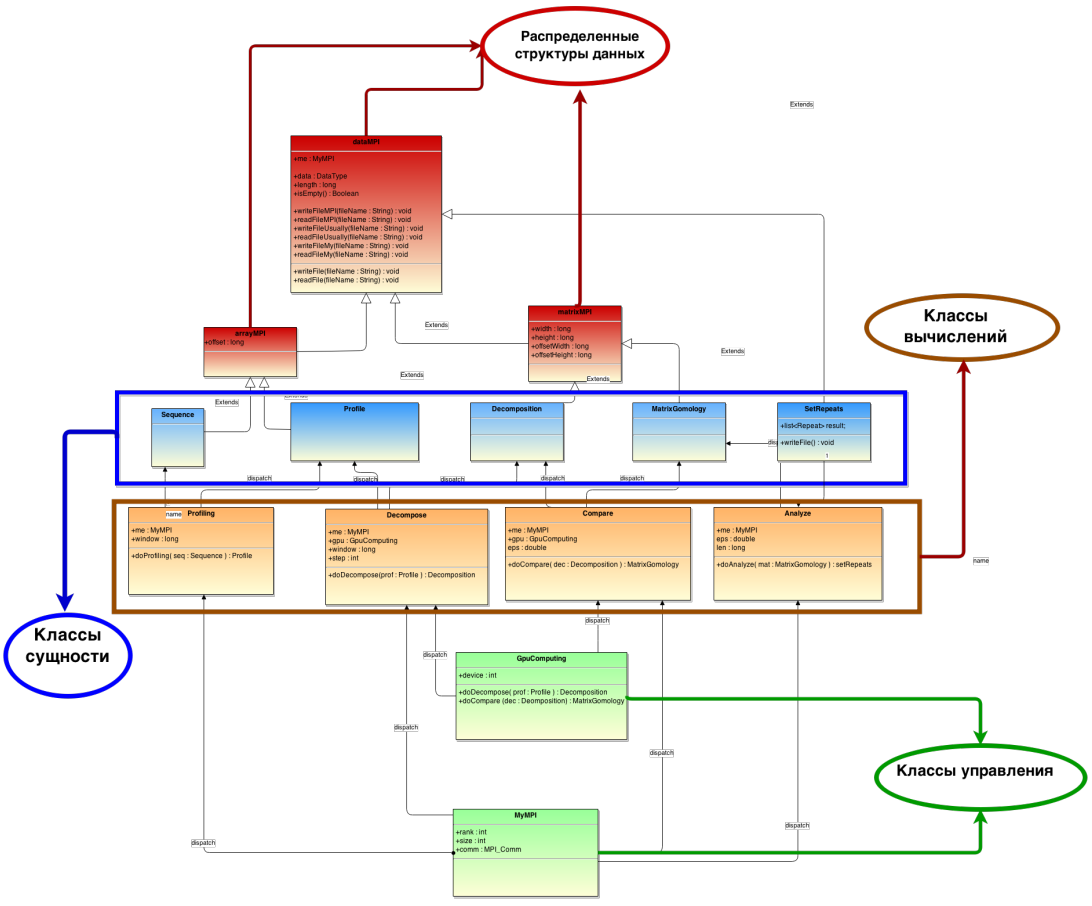


Рисунок 2.1: Диаграмма классов

Общая структура классов разбивается на следующие части:

1. Классы-сущности, описывающие распределенные структуры данных.
2. Классы-вычислители, преобразующие классы-сущности в другие классы-сущности.
3. Управляющие классы MyMpi и GpuComputing, через которые осуществляется взаимодействие с mpi и cuda.

Общая схема работы программы выглядит следующим образом:

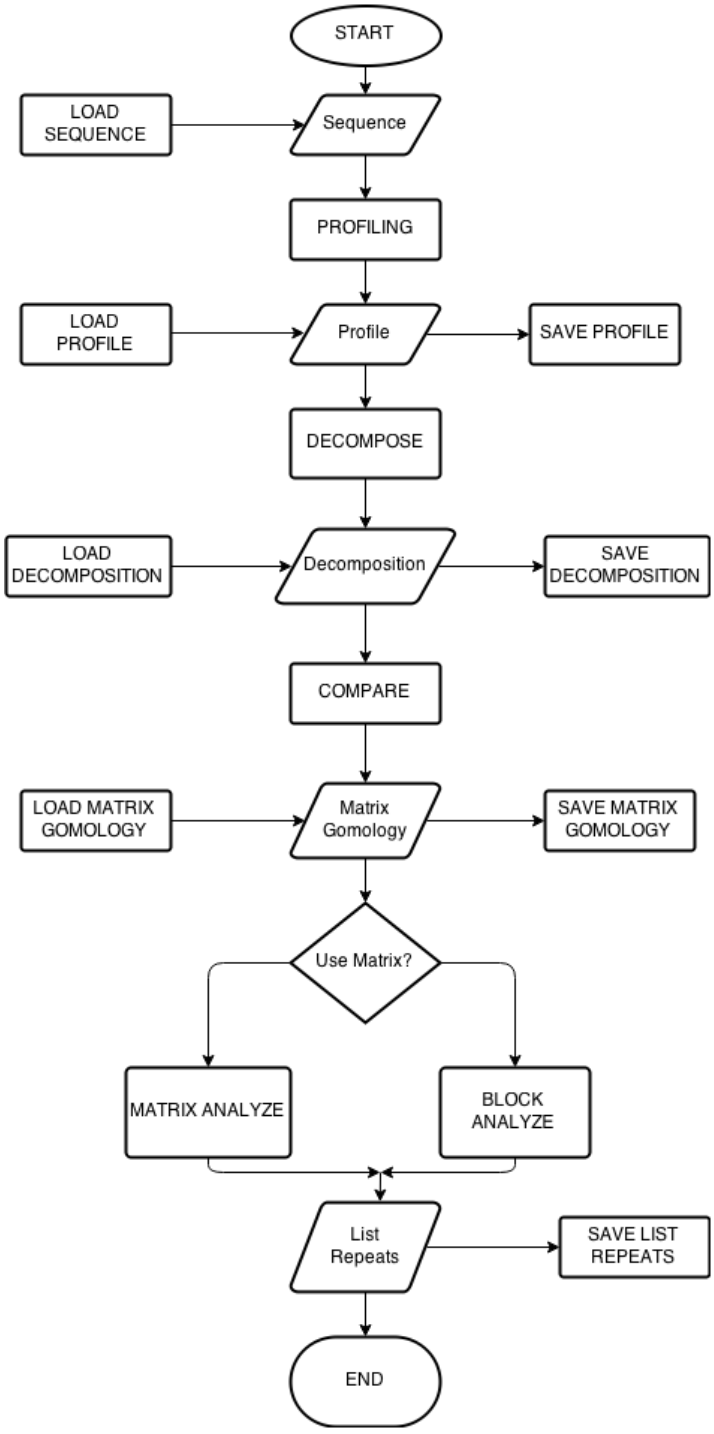


Рисунок 2.2: Блок-схема программы

Данная схема работы позволяет начать и завершить работу на любом этапе, ограничившись выполнением только нескольких этапов. Такая гибкость программы может быть очень полезна в случае, когда пользователь захочет посмотреть на результат работы программы при разных параметрах. Например, если интересно посмотреть на поведение программы при разном значении ε, то достаточно один раз сохранить спектры и в дальнейшем запускать программу сразу с этапа построения гомологической матрицы.

В целом программа выполнена в виде набора библиотечных функций, поэтому если пользователю потребуется специфичная версия программы, то относительно просто и в кротчайшие сроки такая версия может быть реализована.

Для работы с вводом/выводом файлов использовался архитектурно-независимый интерфейс стандарта MPI-2. Архитектура приложения позволяет использовать множество форматов ввода/вывода. В частности, для загрузки/сохранения гомологической матрицы предусмотрено два формата: бинарный файл и bmp изображение.

Для повышения масштабируемости алгоритма использовались только асинхронные операции передачи данных. Это позволило значительно снизить коммуникационные издержки, особенно на этапе построения гомологической матрицы где использовалась схема взаимодействия "all-to-all".

Для реализации этапа "склейки" повторов использовались односторонние коммуникации. Данная технология MPI позволяет задавать все параметры, относящиеся к пересылке данных, только на одной стороне, что значительно упростило его реализацию и повысило эффективность.

Выделение в отдельные классы взаимодействия с mpi и GPU устройством позволило при компиляции отключить возможности эти классов и иметь следующие варианты сборки:

- последовательная программа
- последовательная программа, использующая графические процессоры
- параллельная программа без использования графических процессоров
- параллельная программа с использованием графических процессоров

Данная возможность позволяет существенно расширить список вычислительных платформ на которых может работать программа.

Для эффективной работы графических ускорителей использовались механизм общей памяти и "набивка"данных. С помощью профилировщика было достигнуто такое разбиение задачи на блоки, что было достигнуто оптимальное соотношение между occupancy (загруженность устройства) и размером используемой общей памяти. Все эти меры позволили значительно ускорить этап построения гомологической матрицы.

Для удобства работы с программой был разработан ряд графических интерфейсов. Стоит отметить, что так как работа программы не предполагает диалога с пользователем, то данные интерфейсы работают в пакетном режиме, т.е. задают параметры алгоритма, запускают выполнение основной программы и ждут результатов. Поэтому все графические интерфейсы базируются на мощном Command Line Interface, реализованном в основной программе. CLI следует стандарту Posix, поддерживает разбор коротких и длинных опций. Таким образом графические интерфейсы правильно формируют строку аргументов и запускают основную программу.

Реализованы следующие виды интерфейсов:

- графический интерфейс на основе кроссплатформенной библиотеки Qt. Данный вариант очень если программа будет работать на локальной машине. (рисунок)

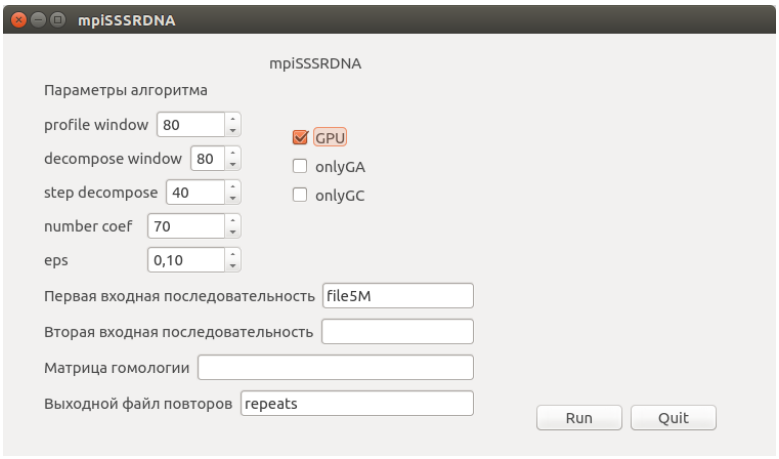


Рисунок 2.3: Блок-схема программы

- графический интерфейс на основе кроссплатформенной библиотеки Qt и кроссплатворменной библиотеки libssh2. Данный вариант позволяет запускать программу графического интерфейса на локальном компьютере пользователя и запускать основную программу на удаленном сервере. (рисунок)

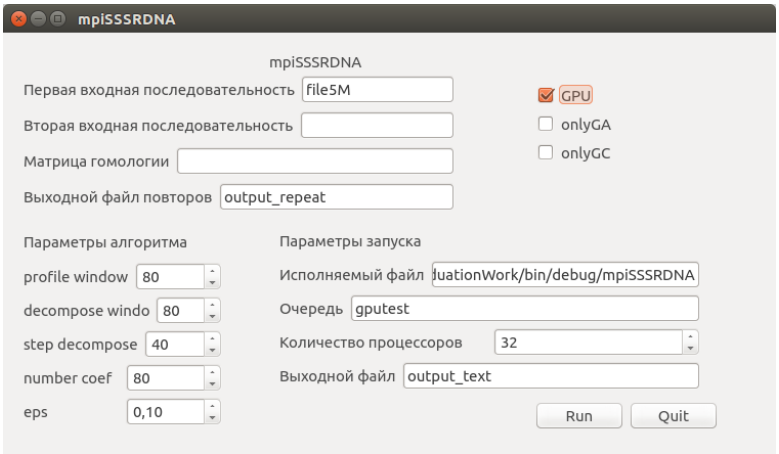


Рисунок 2.4: Блок-схема программы

Общий объем кода (программа + GUI) составляет 6 тыс. строк.

Глава 3

Результаты вычислительных экспериментов

Все последующие эксперименты, за редким исключением, выполнялись на суперкомпьютере Ломоносов на базе Intel® Xeon 5570 и графических процессоров Tesla X2070 (поколение Fermi). Если запуск производился с использованием графических процессров, то на каждое устройство приходилось по одному mpi-процессу, если не оговорено обратного.

В дальнейшем программа с использованием графических процессоров будет называться GPU-программой, а без использования - HOST-программой. Программа с построением матрицы гомологии и ее последующим анализом - матричной программой, а программу, использующую блочный метод (одновременное построение блока матрицы и его анализ), будем называть блочной программой.

В качестве входных данных использовалась искусственно сгенерированная тестовая биологическая последовательность длинной 5 млн. символов, содержащая в себе 2 протяженных повтора. Данная биологическая последовательность сравнивалась сама с собой.

В качестве параметров алгоритма использовались следующие значения:

- Длина окна профилирования: 250
- Длина окна спектрального индексирования: 250
- Шаг окна спектрального индексирования: 100
- Количество коэффициентов разложения: 75
- Точность поиска ε: 0.01

3.1 Сравнение блочной программы с матричной

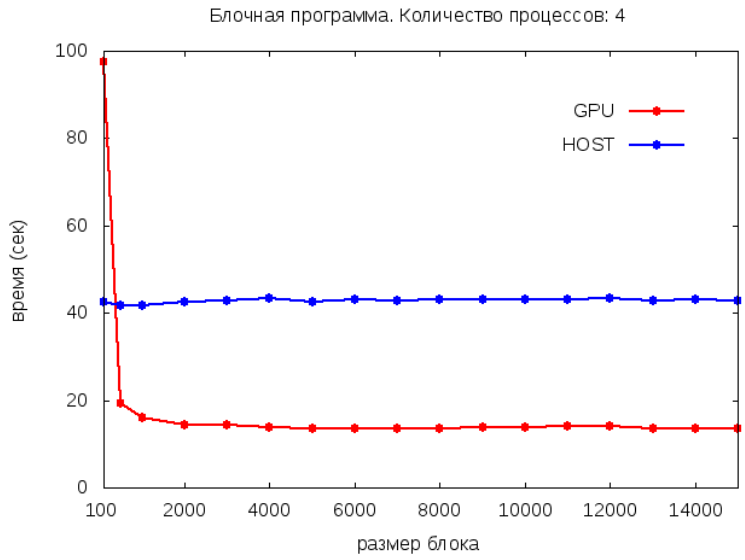


Рисунок 3.1: Зависимость времени работы блочной программы от размера блока

Как видно из графика 3.1 для блочной HOST-программы не имеет значения размер вычисляемого блока. Однако для GPU-программы размер блока имеет принципиальное значение - именно размер блока определяет загруженность устройства работой. Для эффективной работы GPU-программы нужен достаточно большой размер блока - такой, чтобы устройство заработало в полную силу. В тоже время не стоит увлекаться с увеличением размера блока, т.к. на устройстве может попросту не хватить памяти.

Во всех последующих экспериментах мы будем использовать блоки размером 10000x10000.

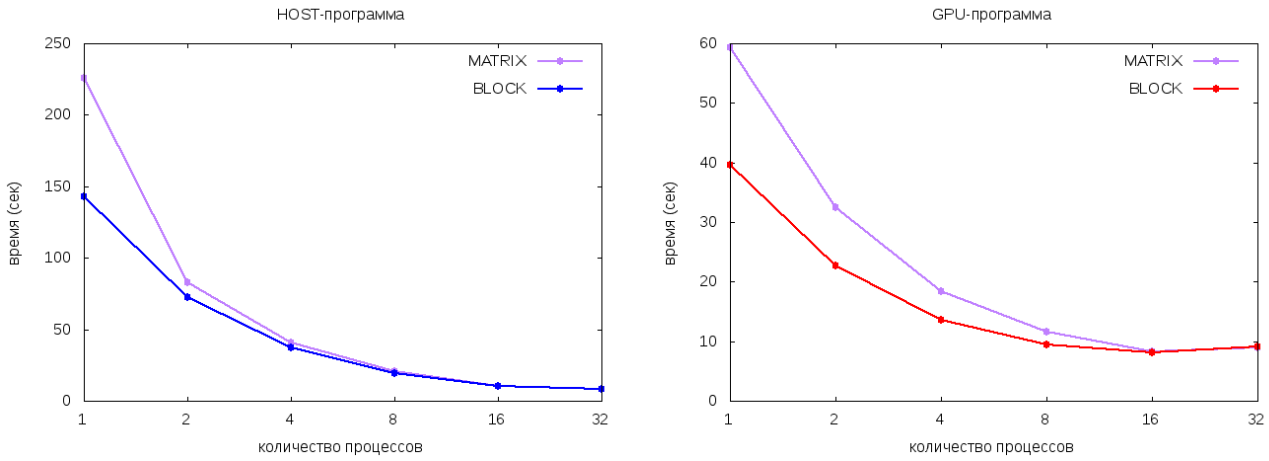


Рисунок 3.2: Сравнение времени работы блочного и матричного метода

Изначально предполагалось, что блочная программа будем дополнением к матричной, чтобы можно было использовать программу на системах с небольшим объемом оперативной памяти. Однако по результатам работы двух программ стало ясно, что и для GPU-программы, и для HOST-программы во всех случаях предпочтительнее использовать блочный вариант.

Стоит заранее оговорить, что использование блочного метода в GPU-программе дает лучшие результаты по сравнению с матричным методом, если использовать конфигурацию при которой на одно GPU устройство приходится больше одного mpi-процесса (см. рис. **??**б).

Также теоретически блочная программа будет лучше масштабироваться на системах со слабой коммуникационной средой, т.к. имеет больше времени на ассинхнонную передачу спектров (такое увеличение времени стало возможным за счет объединения этапа построения гомологической матрицы и её анализа).

Во всех последующих экспериментах мы будем использовать блочную программу.

3.2 Использование графических процессоров

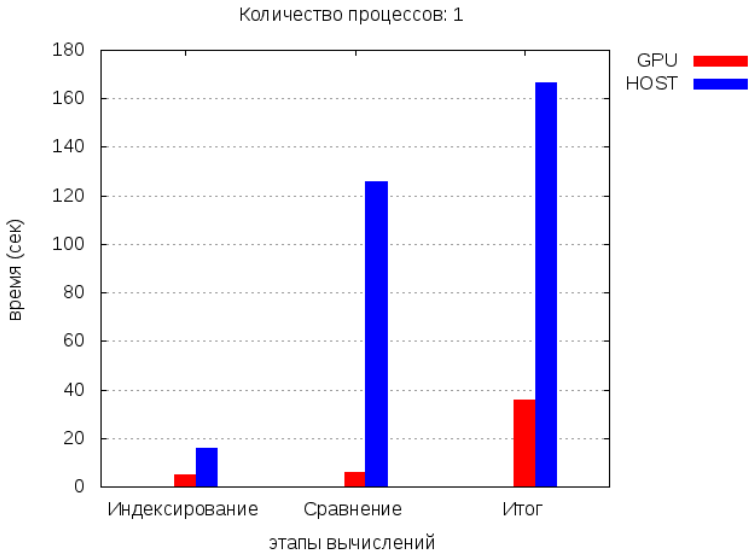


Рисунок 3.3: Сравнение HOST-программы и GPU-программы

На диаграмме 3.3 мы видим результат сравнения GPU-программы и HOST-программы, запущенных на одном процессе. Этап спектрального индексирования ускорился в 3 раза, этап спектрального сравнения в 22 раза, программа в целом ускорилась в 5 раз. Такие результаты ускорений значительно снизили долю этапов спектрального индексирования и спектрального сравнения в программе.

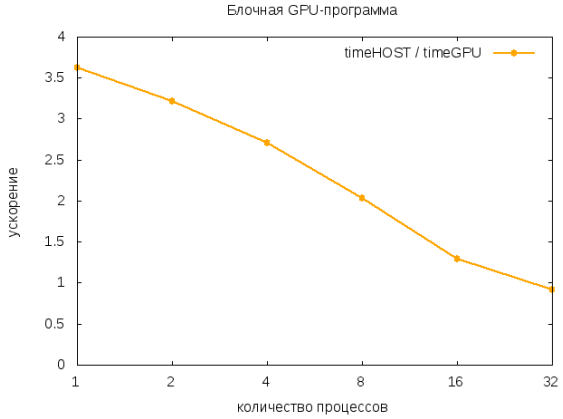
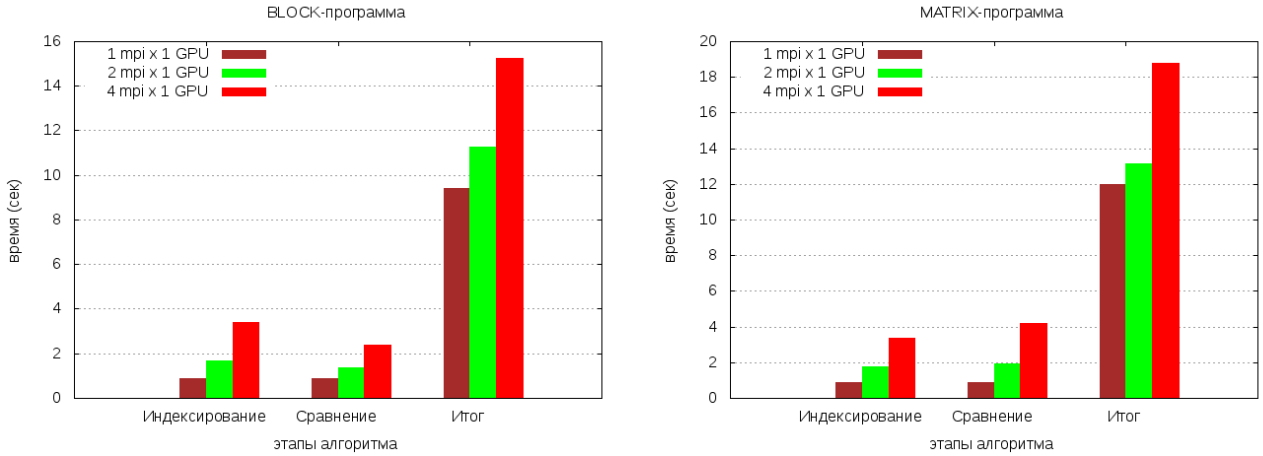


Рисунок 3.4: Масштабируемость ускорения GPU-программы

На графике 3.4 мы видим изменение ускорения GPU-программы по сравнению с HOST-программой в зависимости от числа процессов. Как и ожидалось - с ростом числа процессов ускорение падает. Это объясняется уменьшением в вычислениях доли этапа спектрального сравнения, а в последующем и недостаточной загруженностью графических процессоров.



а б

Рисунок 3.5: Изменение времени выполнения этапов программы от количества процессов на устройство GPU

Рассмотрим поведение GPU-программы, если на каждое GPU устройство будет приходиться больше одного mpi-процесса. Так как каждый процесс занимает устройство на короткое время, а не блокирует его на время выполнения всей программы, то эффективность использования GPU падает совсем незначительно. Это даст хорошие результаты на практике, т.к. большинство кластеров имеют в своем распоряжении большое число обычных процессоров и незначительное количество графических плат. Даже на таких системах можно будет запускать программу в конфигурации сильного разделения устройства (8 mpi x 1 GPU, 16 mpi x 1 GPU) и все равно время выполнения GPU-программы будет меньше времени выполнения HOST-программы. Результаты матричной программы хоть и не намного, но оказались хуже результатов блочной программы.

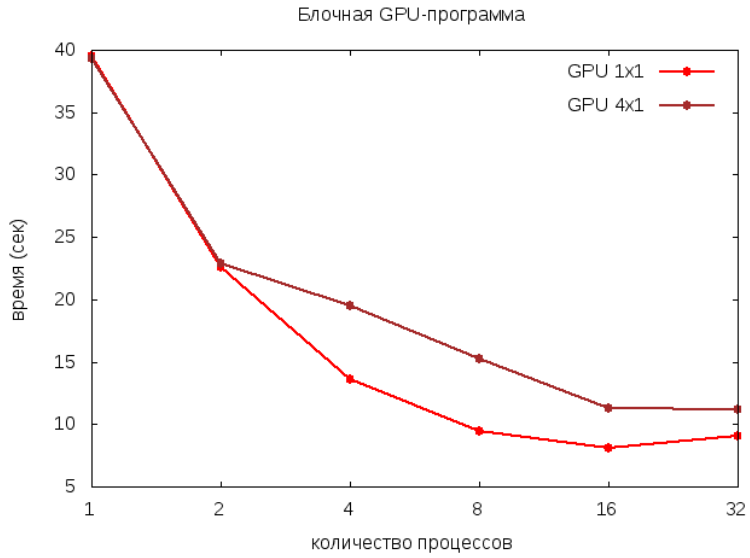


Рисунок 3.6: Масштабируемость алгоритма при использовании нескольких процессов на одно устройство

Разделение устройства между несколькими процессами не оказывает влияния на масштабируемость.

3.3 Масштабируемость параллельного алгоритма

Для следующих запусков использовалась искусственно сгенерированная биологическая последовательность длинной 20 млн.

Кроме Ломоносова вычисления производились на суперкомпьютере Blue Gene/P (4xPowerPC 450).

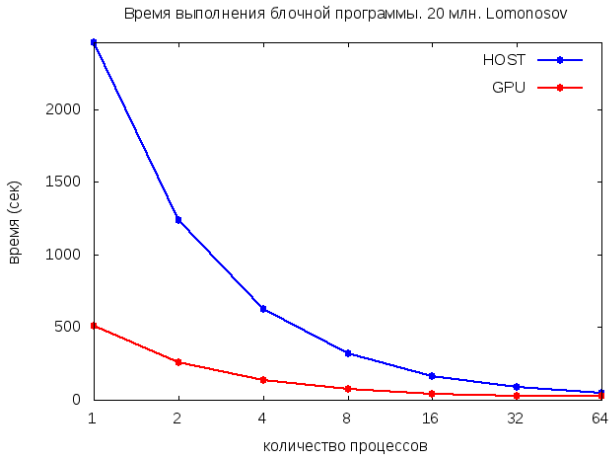


Рисунок 3.7: Сильная масштабируемость GPU- и HOST-программы

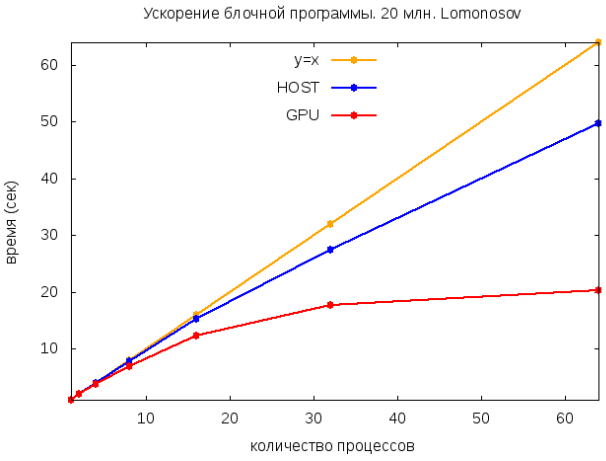


Рисунок 3.8: Ускорение GPU- и HOST-программы

GPU-программа показала чуть меньшую масштабируемость. Это объясняется уменьшением доли GPU-вычислений с уменьшением входных данных.

Программа показала очень хорошую масштабируемость на системе BlueGene/P. Во многом это произошло благодаря архитектуре системы, а так же отсутствию в программе блокирующих операций.

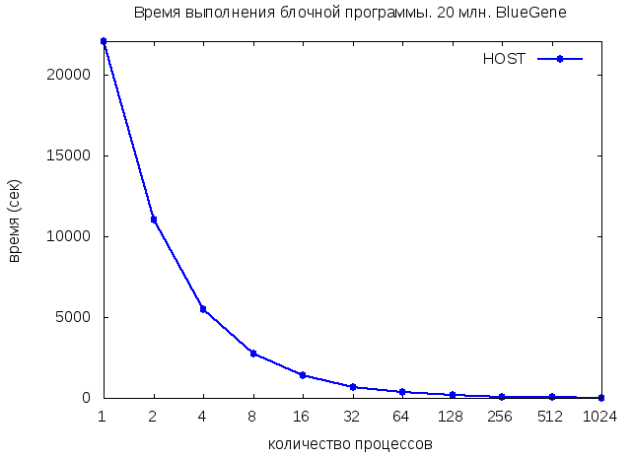


Рисунок 3.9: Сильная масштабируемость HOST-программы

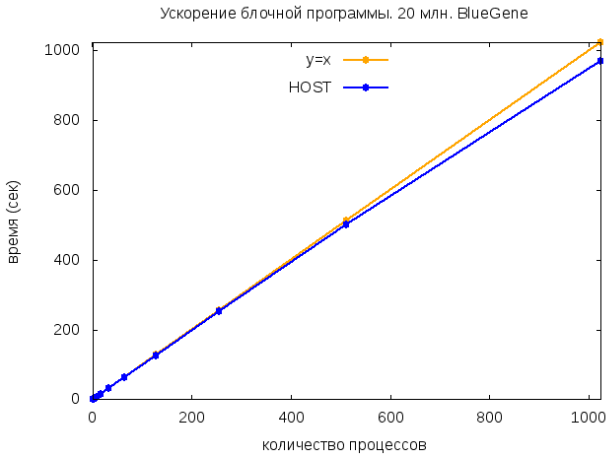


Рисунок 3.10: Ускорение HOST-программы

На рисунках ниже представлены результаты работы системы для анализа поведения параллельных программ, разрабатываемой Матвеевым Владимиром в рамках спецсеминара “Суперкомпьютерная обработка данных с использованием нейросетей и эволюционных вычислений” под руководством Л.Н.Королева и Н.Н.Поповой. Система позволяет визуализировать трассу параллельной программы, на которой отображается появление коммуникационных событий исследуемой программы во времени. Также система позволяет просматривать различные коммуникационные матрицы, в данном случае, по суммарному размеру сообщений и суммарному времени передачи сообщений между процессами.

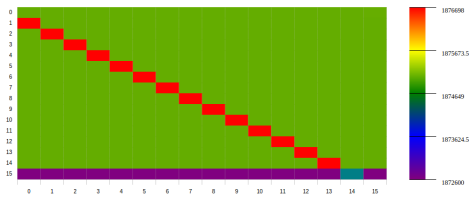


Рисунок 3.11: Коммуникационная матрица взаимодействия по размеру передаваемых данных

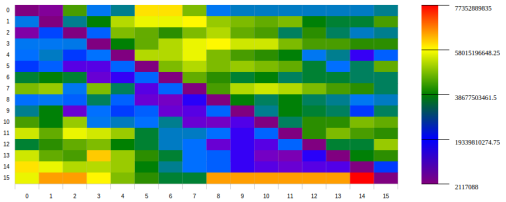


Рисунок 3.12: Коммуникационная матрица взаимодействия по времени

Из рисунка 3.11 видно, что все процессы обмениваются почти одинаковым количеством данных.

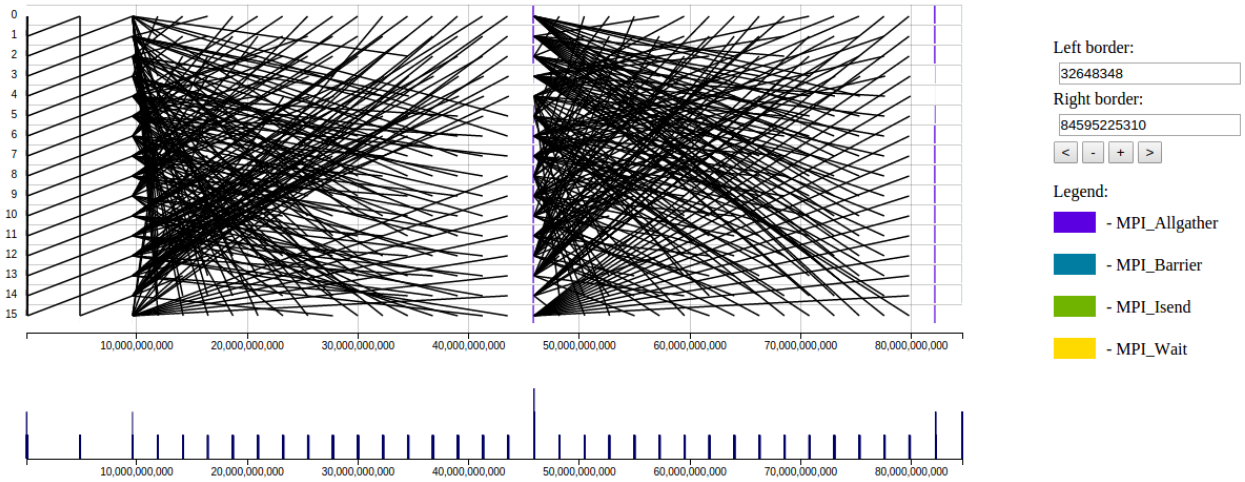


Рисунок 3.13: Трасса программы

Трасса из рисунка 3.13 очень хорошо отображает общую структуру программы:

- Обмен по топологии кольца (два этапа профилирования можно разглядеть в самом начале)
- Асинхронный обмен "каждый-с-каждым который выполняется при анализе два раза для GC и GA профилей.

Заключение

В ходе выполнения дипломной работы были получены следующие основные результаты:

- Разработан и реализован на суперкопьютерах Ломоносов и BlueGene/P параллельный алгоритм поиска повторов в биологических последовательностях. Алгоритм реализует парные сравнения последовательностей большого размера. Параллельная реализация алгоритма выполнена с использованием технологии MPI с возможностью подключения cuda-модулей для использования графических ускорителей.
- Проведено исследование эффективности и масштабируемости разработанной параллельной программы.
- Показано, что использование графических процессоров позволяет ускорить алгоритм в 5 раз.
- Разработан графический интерфейс для параллельной программы, позволяющий пользователю запускать программу как на локальной, так и на удаленной системе. Интерфейс реализован с использованием кроссплатформенной библиотекой Qt, что позволяет использовать программу в различных операционных средах.

Часть работы с использованием графических процессоров была представлена на конкурсе студенческих работ CUDA Center of Excellence МГУ и была поддержана компанией Nvidia. Результаты работы опубликованы в CUDA АЛЬМАНАХе [link].

В качестве перспектив развития данной работы стоит рассмотреть возможность асинхронной работы между CPU и GPU в блочной программе на этапе построения гомологической матрицы и анализа результатов. Построение блока гомологической матрицы на GPU устройстве и асинхронный анализ этой матрицы на центральном процессоре могли бы снизить время выполнения этапа анализа (последнего весомого этапа программы, который не перенесен на GPU) и показать еще большее ускорение по сравнению с HOST-программой.