Полулокальное выравнивание с использованием внутрипроцессорного параллелизма

Дмитрий Орехов

Институт биоинформатики
Научный руководитель: Александр Тискин, The University of Warwick

25.05.2019

Задача полулокального выравнивания

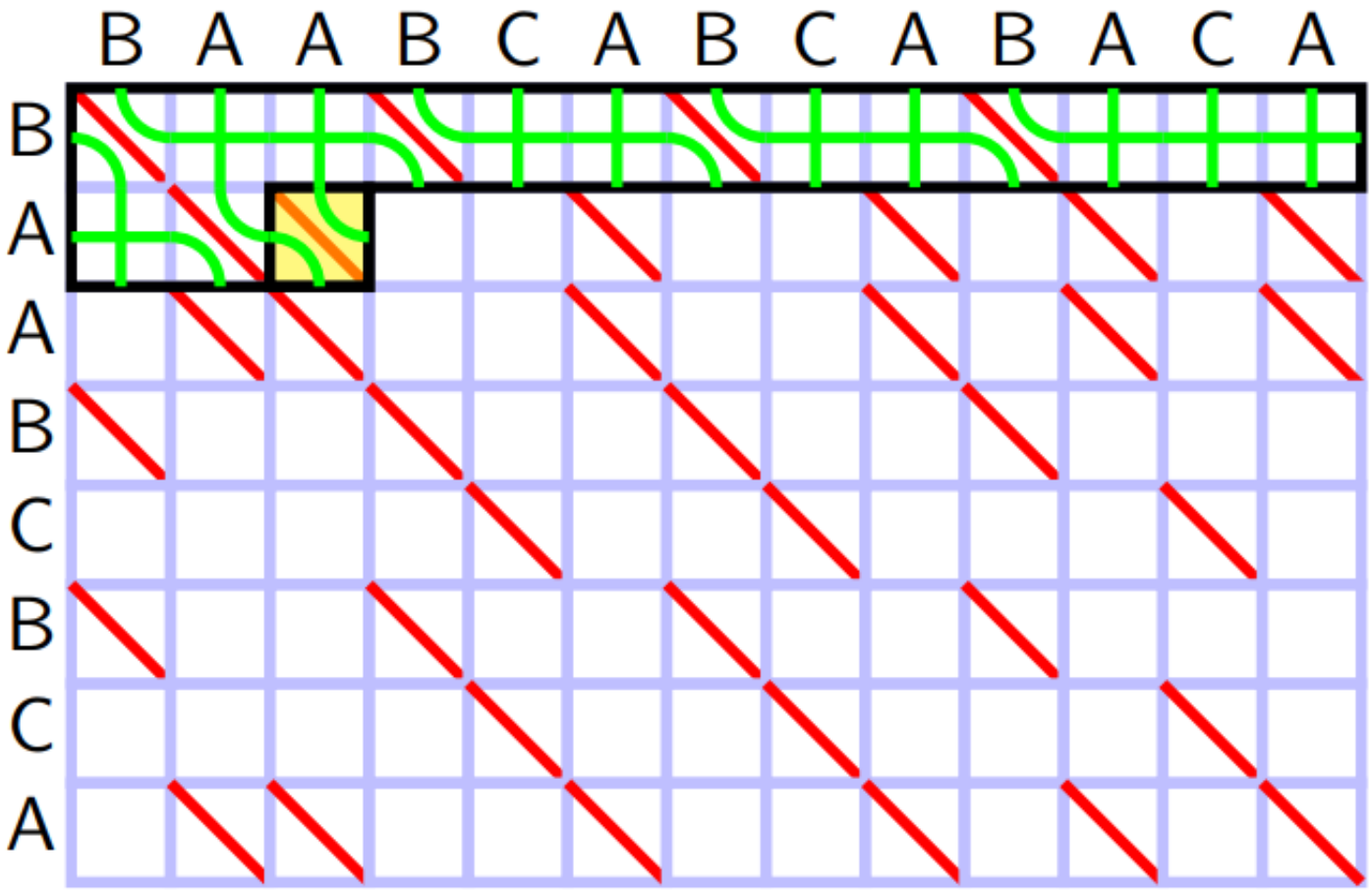
Получение выравниваний *Pattern* на *Text* для всех возможных окон фиксированной ширины w.

Где может использоваться:

- Поиск ДНК или аминокислотных последовательностей.
- Выравнивание ридов на геном.

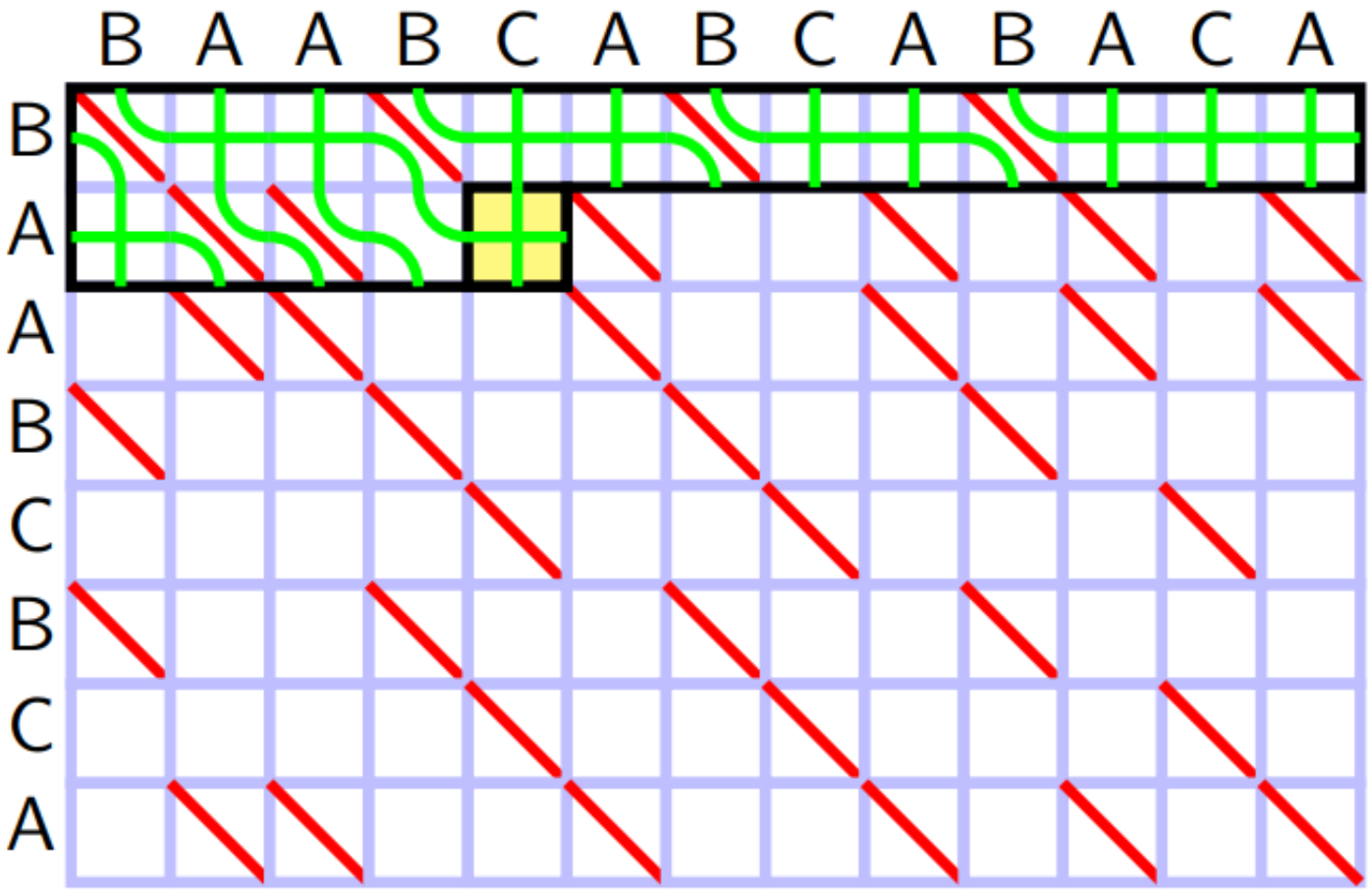
Алгоритм Seaweed

Match:



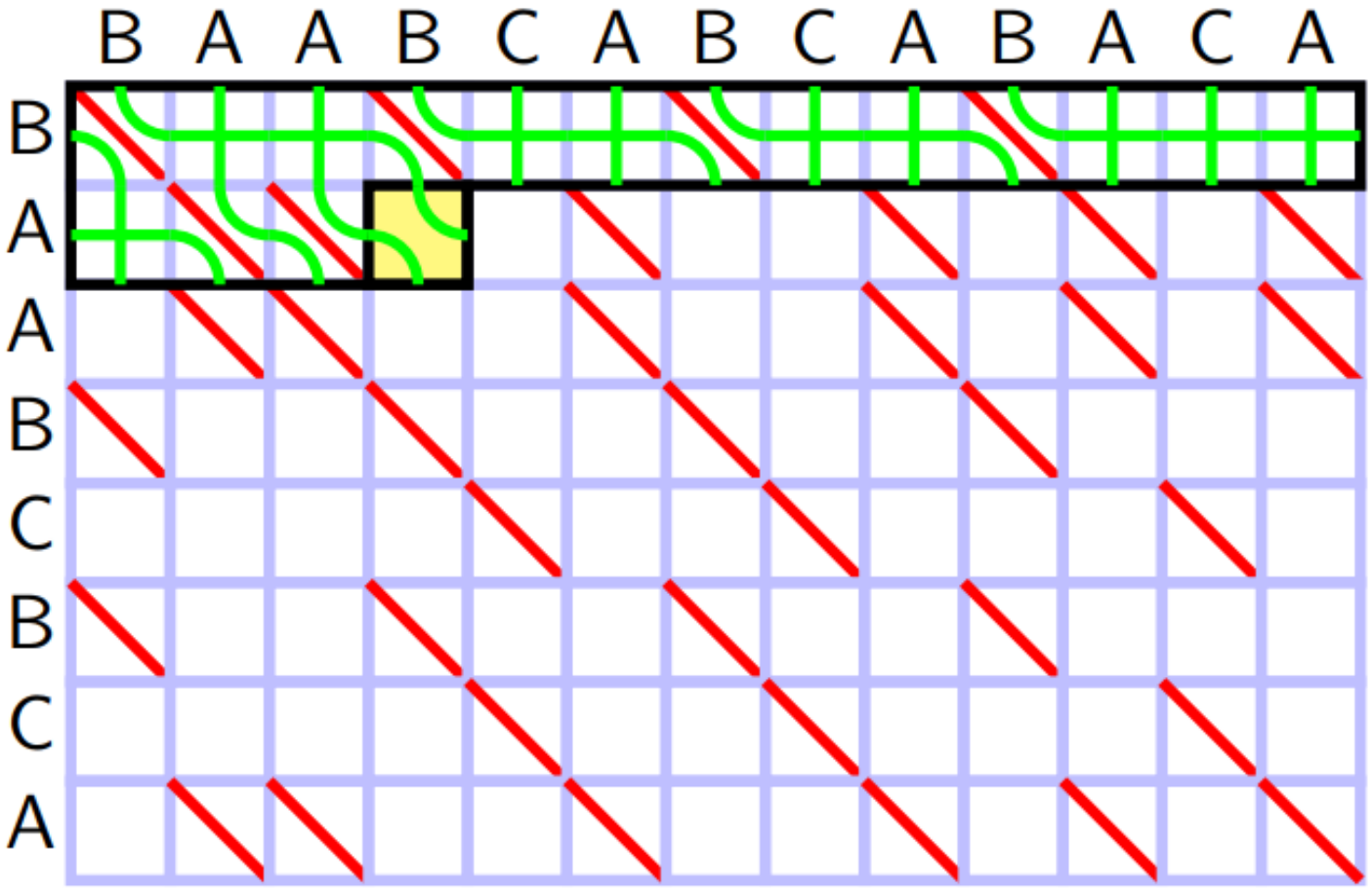
Алгоритм Seaweed

Mismatch:



Алгоритм Seaweed

Ранее пересекались:



Алгоритм Seaweed

Score выравнивания на окне ширины w равен разнице w и числа водорослей, начавшихся в данном окне и не вышедших за его пределы.

Алгоритм Seaweed поддерживает рациональные веса с небольшим знаменателем.

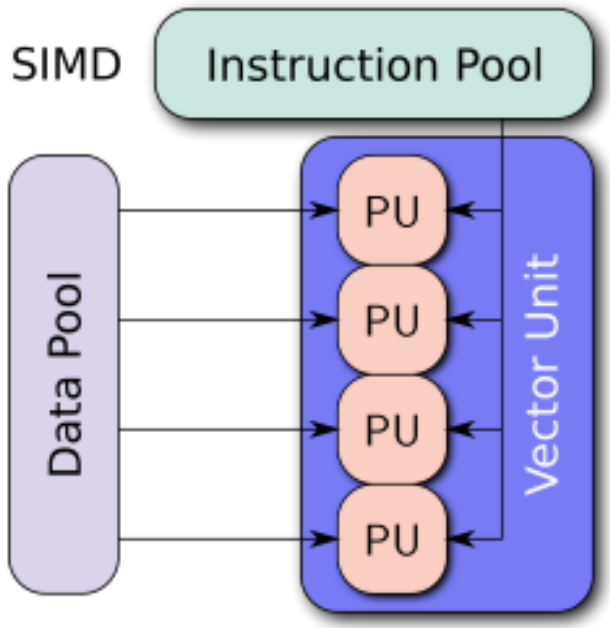
Преимущества Seaweed

- Позволяет решать задачу выравнивания в парадигме Divide-and-conque.
- Широкие возможности для параллелизма.
- Результат алгоритма - точное выравнивание.
- За алгоритмом стоит глубокая алгебраическая теория - разработка в этом направлении может позволить узнать что-то новое об алгоритмах на строках в целом.

SIMD и AVX-512

Single instruction multiple data (SIMD): параллельное применение одной и той же операции к набору данных.

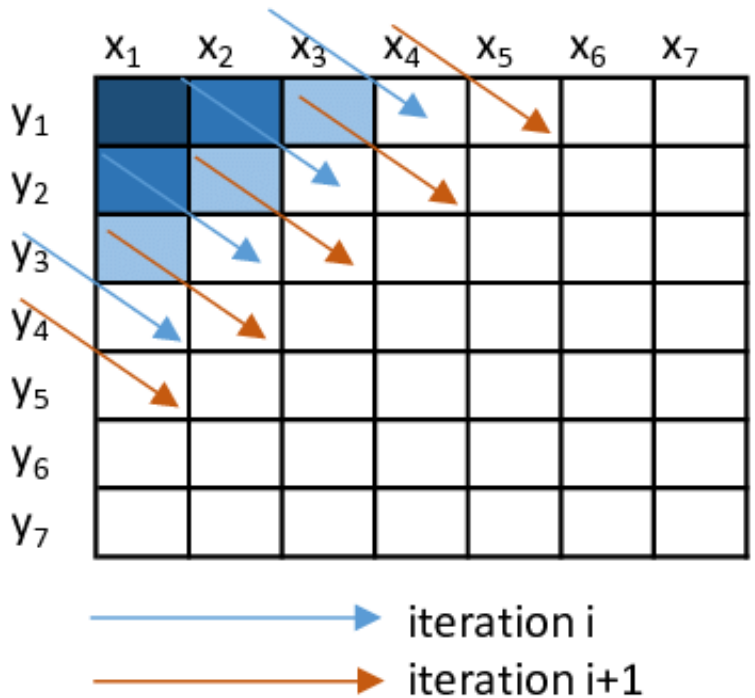
Advanced Vector Instruction (AVX): система команд для процессоров Intel и AMD, intrinsics функции в C и других языках - удобный способ для работы с ними.



Регистр 512 бит

Современные процессоры с регистром 512 бит позволяют параллельно считать антидиагонали в матрице выравнивания для строк длиной до 64 символов.

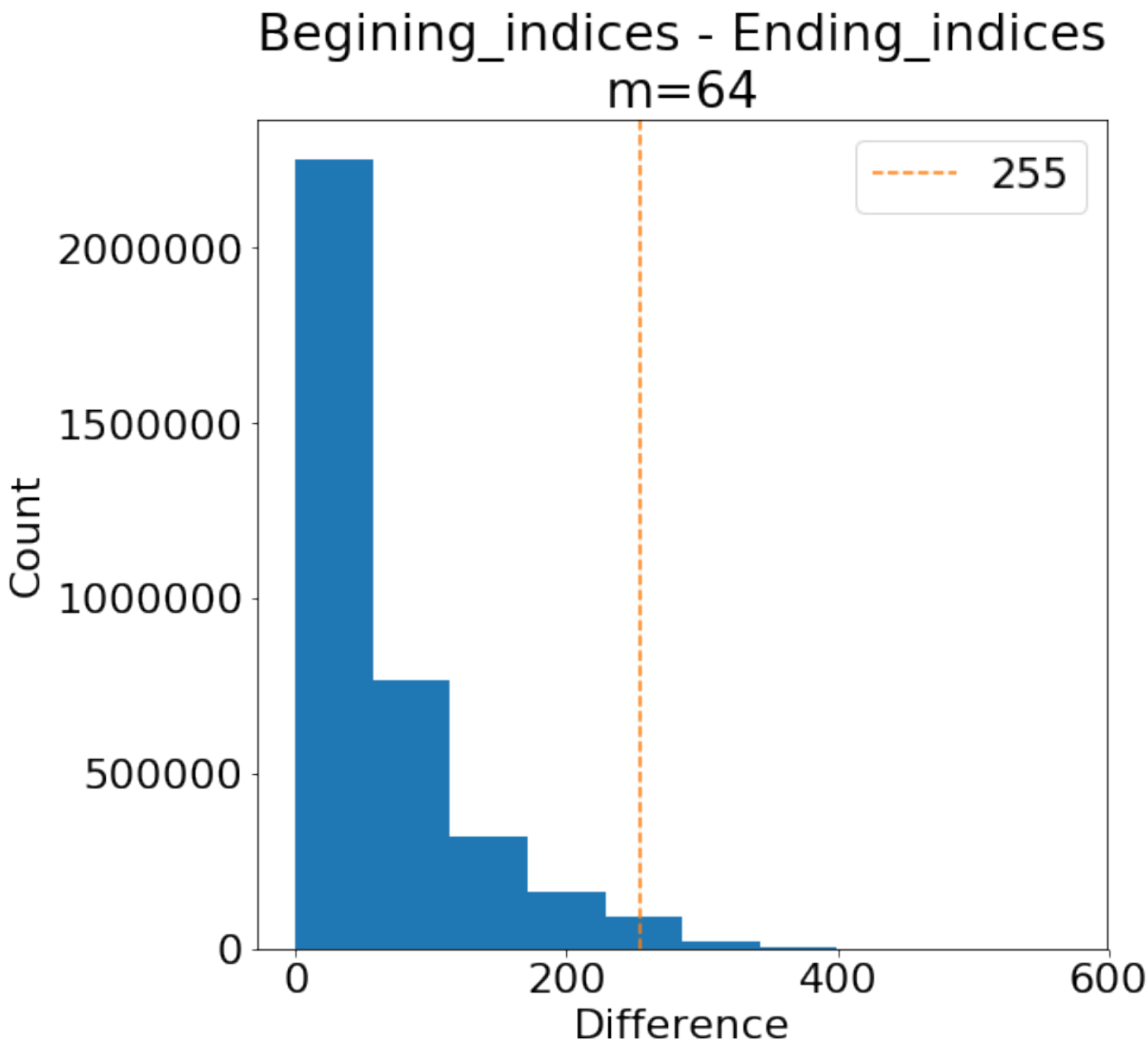
Работа над проектом ведется с использованием Intel Software Development Emulator.



Первые результаты

- Был реализован прототип Seaweed на Python3 с векторизацией в numpy.
- Реализован Seaweed на C с импользованием AVX-512, данная реализация работает с короткими последовательностями из стандартного ввода.

Проблема неразличимых водорослей



Алгоритм на 16-битных числах

- Работает с файлами .fasta и .fastq
- Возможность выравнивать последовательности любой длины
- Time complexity: $O(\frac{mN}{32})$
- Space complexity: $O(N)$

Детали реализации

- Приложение для командной строки на Python3 считывает аргументы и делает необходимый пэддинг
- В памяти хранится текст и два массива длины N, хранящие начала и концы водорослей
- Минимизируется число обращений к памяти, считывание новых данных происходит каждые 32 антидиагонали

Проверка алгоритма

```
>0 <unknown description>
POZDRAVLAJU_ALGORITM_RABOTAET_KAK_ZHE_ETO_PREKRASNO
```

```
Computing leaves
Computing score
Sorting score
The pattern is: ##############ONSARKERP_OTE_EHZ_KAK_TEATOBAR_MTIROGLA_UJALVARDZO
Window_size = 64
GGATACATGTGTTCPOZDRAVLAJU_ALGORITM_RABOTAET_KAK_ZHE_ETO_PREKRASN: 20
GATACATGTGTTCPOZDRAVLAJU_ALGORITM_RABOTAET_KAK_ZHE_ETO_PREKRASNO: 20
ATACATGTGTTCPOZDRAVLAJU_ALGORITM_RABOTAET_KAK_ZHE_ETO_PREKRASNOC: 20
TACATGTGTTCPOZDRAVLAJU_ALGORITM_RABOTAET_KAK_ZHE_ETO_PREKRASNOCG: 20
ACATGTGTTCPOZDRAVLAJU_ALGORITM_RABOTAET_KAK_ZHE_ETO_PREKRASNOCGG: 20
CATGTGTTCPOZDRAVLAJU_ALGORITM_RABOTAET_KAK_ZHE_ETO_PREKRASNOCGGG: 20
ATGTGTTCPOZDRAVLAJU_ALGORITM_RABOTAET_KAK_ZHE_ETO_PREKRASNOCGGGC: 20
TGTGTTCPOZDRAVLAJU_ALGORITM_RABOTAET_KAK_ZHE_ETO_PREKRASNOCGGGCC: 20
GTGTTCPOZDRAVLAJU_ALGORITM_RABOTAET_KAK_ZHE_ETO_PREKRASNOCGGGCCC: 20
TGTTCPOZDRAVLAJU_ALGORITM_RABOTAET_KAK_ZHE_ETO_PREKRASNOCGGGCCCA: 20
```

Спасибо за внимание!

GitHub: `https://github.com/DimaOrekhov/Seaweed_AVX512`

Материалы

1. A. Tiskin, Semi-local longest common subsequences: A superglue for string comparison, URL:https://www.dcs.warwick.ac.uk/~tiskin/pub/talks/semi_talk.pdf
2. Ozsoy A., Chauhan A., Swany M. Achieving teraCUPS on longest common subsequence problem using GPGPUs //2013 International Conference on Parallel and Distributed Systems. – IEEE, 2013. – C. 69-77.
3. Wikipedia contributors. (2019, March 18). SIMD. In Wikipedia, The Free Encyclopedia. Retrieved 20:57, April 4, 2019, from https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=SIMD&oldid=888335694