

TSUBAMEが加速する 疾病マーカー探索と創薬標的探索

東工大の独自手法 と マルチGPU計算 の融合

東京工業大学 情報理工学院 教授

秋山 泰



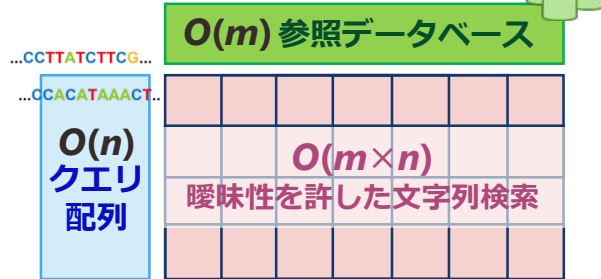
東京工業大学

微生物集団のゲノムを丸ごと調べて
微生物と環境の関係を明らかにする

メタゲノム解析



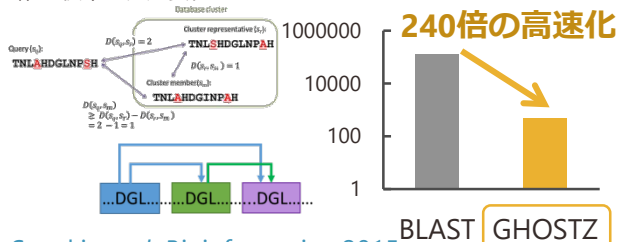
得られた大量のゲノム配列を
データベース中から検索
(相同性検索)



GHOSTZ 高速相同性検索技術

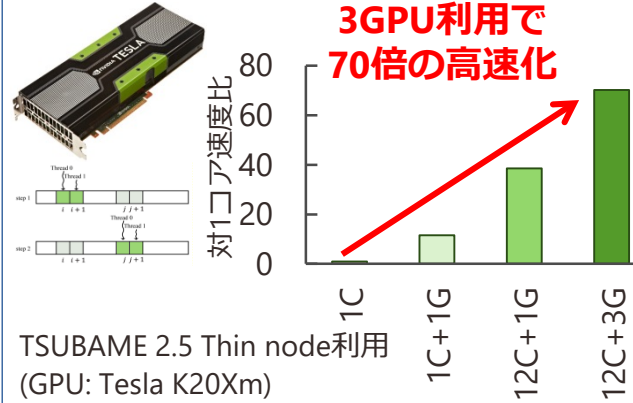
DBクラスタリングによる
配列検索の非冗長化

1万本の配列の計算時間 (秒)
(3.9 GB DB利用、1CPUコア)



GHOSTZ-GPU

GPUによる計算加速

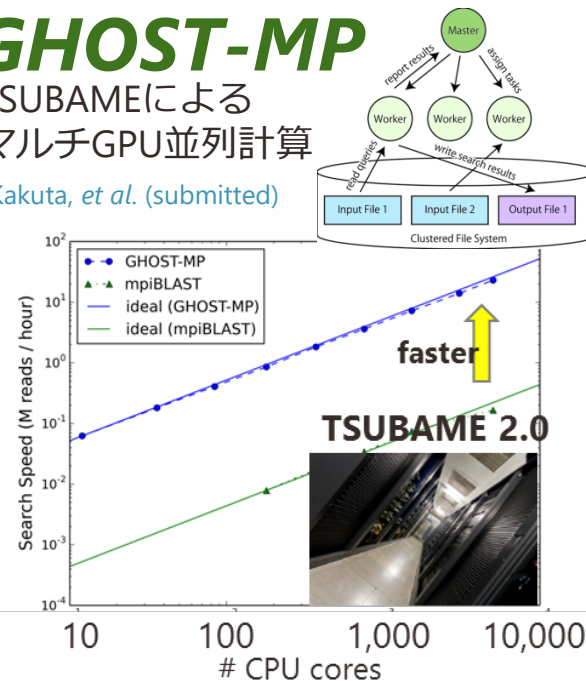


TSUBAME 2.5 Thin node利用
(GPU: Tesla K20Xm)
Suzuki, et al. PLOS ONE, 2016.

GHOST-MP

TSUBAMEによる
マルチGPU並列計算

Kakuta, et al. (submitted)

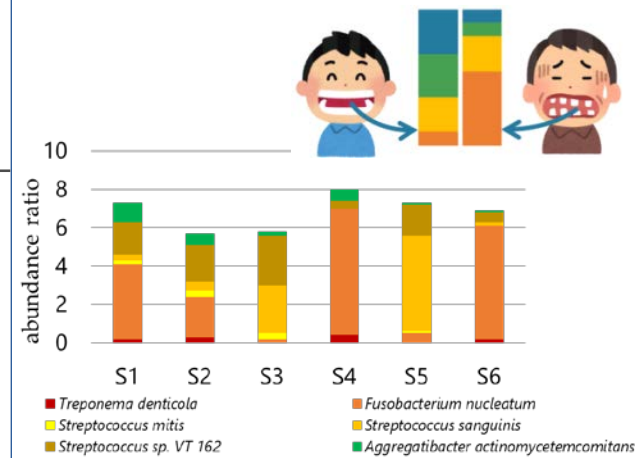


10000コア級まで良好な強スケーリングを維持

ヒト口腔内細菌叢解析

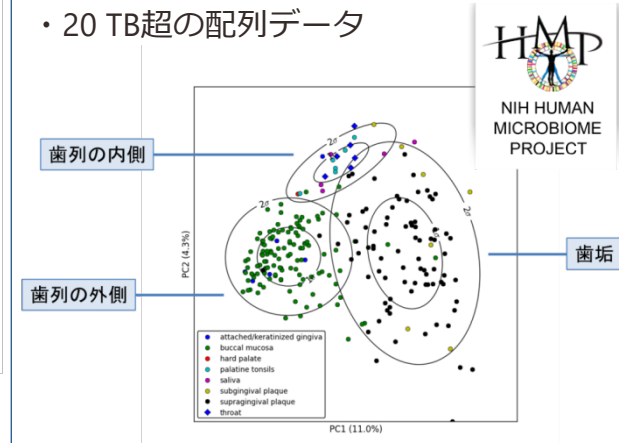
歯周病関連細菌の分布

- 東京歯科大 石原和幸教授との共同研究
- 健康者と歯周病患者の比較



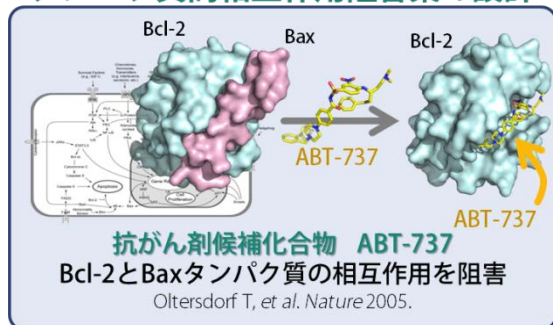
公共メタゲノムDBの網羅的解析

- HMPの口腔内422サンプルを利用
- 20 TB超の配列データ

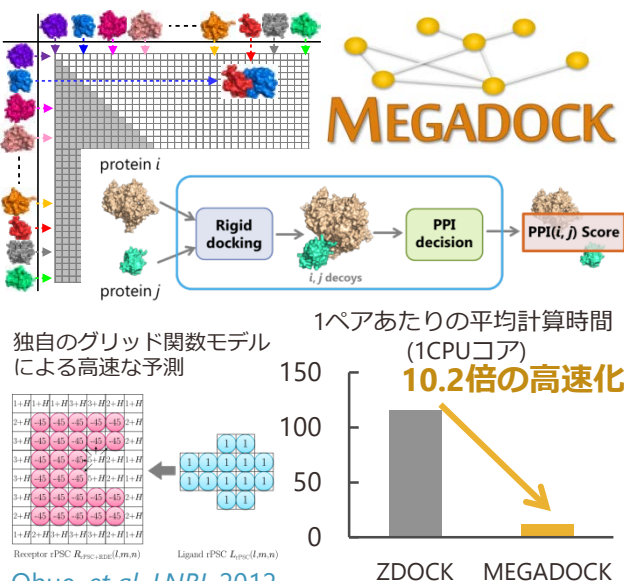


タンパク質間相互作用 疾病の要因の解明や薬剤開発に において重要な生命現象

タンパク質間相互作用阻害薬の設計

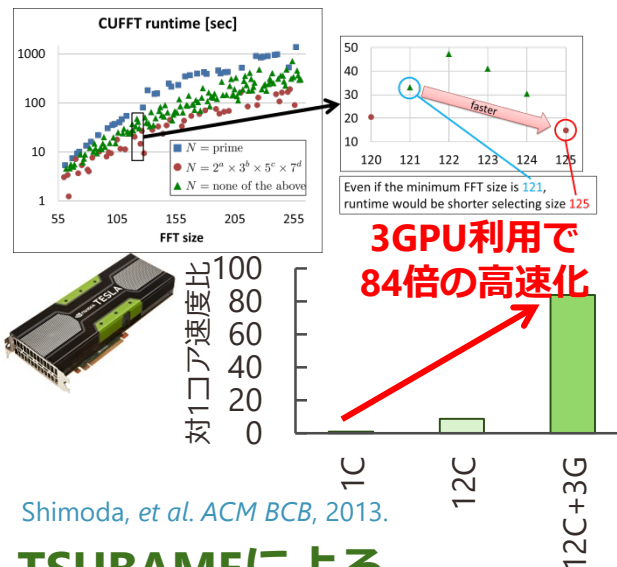


ヒトのタンパク質は約10万種。近年大量に
得られている立体構造情報を手がかりに、
タンパク質間相互作用を予測する。

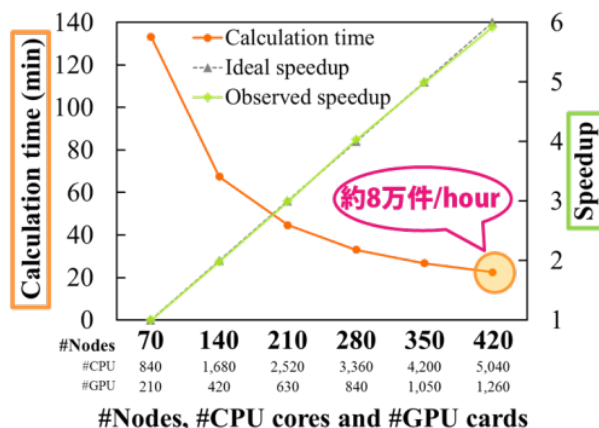


GPUによる高速化

タンパク質サイズに応じた最適なCUFFT基底選択

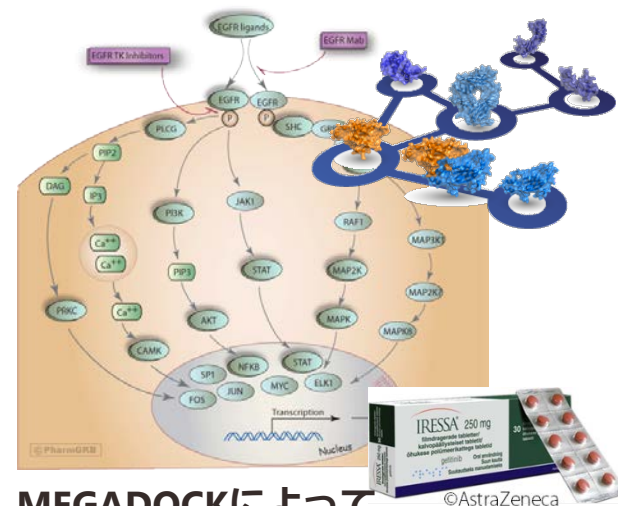


TSUBAMEによる マルチGPU 大規模並列計算

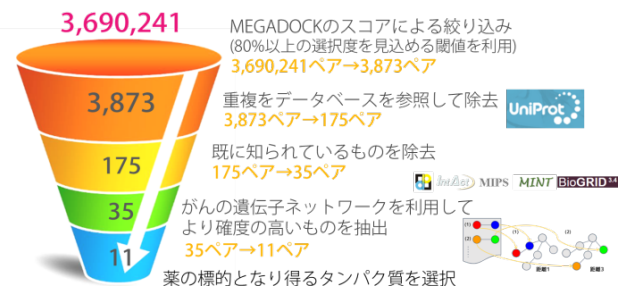


**TSUBAME 420ノードを使用した大規模計算で
強スケーリング98%を達成**
Ohue, et al. Bioinformatics, 2014.

肺ガン関連パスウェイ解析



MEGADOCKによって 約360万ペアの相互作用を予測



新規に予測された7ペアのうち、 6ペアで実験的に相互作用を確認

