

FR550シリーズを128CPU搭載した バイオインフォマティクス向け高並列サーバシステム BioServer

8並列VLIWのFR550をコアエンジンとして採用した，ネットワーク結合の高並列処理サーバシステムです。蛋白質の分子動力学シミュレーションを高速に並列処理することを目的に開発しました。

概要

BioServer(BS00100JB)は，バイオインフォマティクス・プラットフォームとして，蛋白質の分子動力学シミュレーション(MDシミュレーション)を高速に並列処理することを目的に開発しました。2003年11月に実験機が稼動し，現在，実用化を検証中です。本システムは，新しいバイオ医療の実現に不可欠な蛋白質構造解析などを高精度かつ高速に実行し，ゲノム創薬研究の効率を飛躍的に向上させる可能性を提供します。

本システムは，コアとなる演算エンジンに，VLIWアーキテクチャのマイクロプロセッサであるFR-Vファミリの中から8並列VLIWのFR550を採用し，多数のFR550プロセッサをネットワーク結合した並列処理サーバです。FR550の低電力・高性能を活かしてコンパクトなラック搭載型筐体に収納し，高密度実装を実現しました。超高並列処理を低い運用コストで実現します。

応用分野

2003年4月にヒトゲノムの解読が完了し，現在ではゲノム情報を活かした創薬研究に加え，個人差を考慮した投薬・予防・根本的治療を可能とする，テーラーメイド医療の実現に向けた研究開発が精力的に進められています。

DNAには数万個の遺伝子が配置されています。解読されたゲノム情報を基に，遺伝子から作られる蛋白質の種類・形状・結合状態を知ることは，創薬研究にとって極めて重要です。研究現場では主に実験による解析が行われていますが，これには高価な試薬や装置が必要です。このため，コンピュータシミュレーションなどによって実験範囲を事前に絞り込むことが，費用削減と時間短縮には不可欠です。

しかし，蛋白質は数万から数百万個の原子から構成される大きな分子であり，構造や結合を計算するには膨大な時間が必要です。計算時間を短縮するため，対象分子の簡略化や部分計算などの工夫



写真1 1280PEを搭載したBioServer第2号機のラック

が試みられてきましたが，精度劣化を生み，実用に至っていません。

本システムは，超低消費電力・超高速計算・高密度実装を特長とする，新しい方式のゲノム創薬研究向けアプリケーションサーバです。個々のCPU上で，蛋白質の構造予測や結合予測を行うシミュレーションプログラムが並列動作します。それぞれ異なった条件で独立かつ並行に計算することで，高精度シミュレーションの高速実行が可能です。

BioServerの概要

●コアエンジン

本システムはCPUにFR550を用いています。FR550は当社のスーパーコンピュータ技術を用いて開発したVLIW型プロセッサで，汎用PCプロセッサの約1/50の電力で動作します。

図1にFR550のコアブロック図を示します。FR550は8並列VLIWアーキテクチャで、同時に最大8命令からなる長命令を実行します。同時実行可能な命令は整数演算、浮動小数点演算、メディア処理を含みます。本システムの高精度シミュレーションに不可欠な浮動小数点演算では、2つの乗算と2つの加減算を同時実行するため、演算性能はピークで1.33Gflopsに達します。

●ハードウェア構成

図2に本システムのハードウェア構成と諸元を示します。基本となるプロセッサエレメント(PE: Processor Element)は、FR550、256Mバイトの主記憶、イーサネットコントローラとOSや各種制御情報を格納するFlash ROMで構成する小さなシステムです。これらを4システム搭載するボード(PM: Processor Module [写真2])32枚を、コンパクトなラック搭載型筐体(PB: Processor Box [写真3])に収めました。PBIに搭載されるプロセッサの数は合計128個となります。PBIには電源装置、冷却装置、各PEのネットワークを集線するハブ装置、各PEを管理してシステムの運用を司るサービスピロセッサを内蔵しています。

各PEには外部との通信経路として、それぞれファストイーサネットを装備しています。各PEのネットワークはPB内で集線し、複数のGビットイーサネットにまとめて外部の制御システムに接続しています。5台のPB、1台のPCサーバ、1台のGビットハブで1つのグループを構成しており、3つのグループを1つのラックに搭載します。

FR550の低消費電力(約1ワット)を活かした高密度実装によって、本システムでは体積当たりのシステム性能が、一般の高性能システムと比べて非常に大きくなっています。1ラック当たりPBを最大15台(1920PE)まで収納でき、浮動小数点演算のピーク性能は2.5Tflops/ラックに達します。またPE間は独立性が高く、ネットワークを介して結合するので、システム全体の最大PE数は原理的には制限がありません。

本システムは、PEの独立性が高いうえに部品点数も少ないので、信頼性の高いシステムといえます。一部のPEが故障してもシステムは運用を継続でき、長時間を要する分子動力学シミュレーションを実行することができます。

●ソフトウェア構成

本システムのOSは、システムのサイズを極力小さく抑え、PE間の独立性を維持するために、各PE上のFlash ROMに内蔵しています。OSには(株)アックス製axLinuxを使用しています。axLinux上ではPEと制御システム間通信を制御し、各PEの動作を監視するミドルウェアと、分子動力学シミュレーションを実行するアプリケーションプログラムが実行されます。アプリケーションプログラムには、グローニンゲン大学で開発された世界最高速の分子動力学シミュレーションプログラムのGROMACSを、FR550用に最適化して使用しています。1ラック当たり1920コピーのGROMACSが分子動力学シミュレーションを実行します。

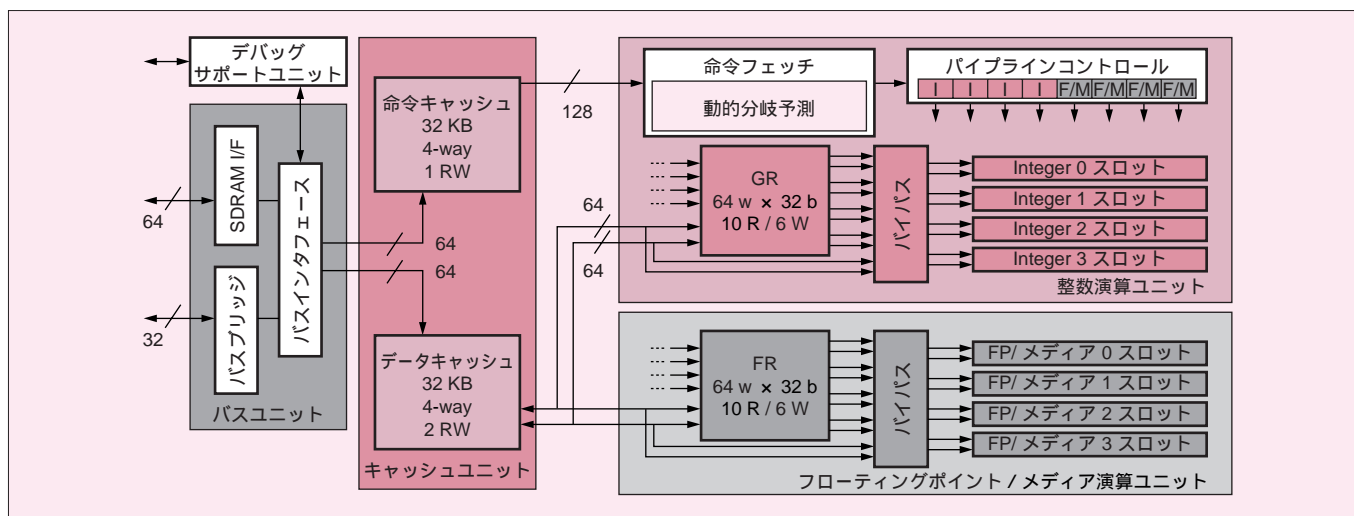


写真2 Processor Module



写真3 Processor Box

図1 FR550コアブロック図



●システムの全体構成

図3に本システムの全体構成を示します。本システムのラック外部に、制御システムと蛋白質分子動力学シミュレーションを行うための各種データベースを収容する大容量ストレージを接続します。制御システムは、本システムの各PEの並列実行制御、システムの全体制御、およびネットワークを介したシステムと外界とのインタフェースの役割を果たします。

お問い合わせ先

【BioServerについて】

先端科学ソリューション本部 計算科学技術センター
TEL(043)299-3241 FAX(043)299-3644

(注)BioServerは研究開発機であり、現在、製品化はしていません。

【FR550シリーズについて】

LSI事業本部 FR-Vソリューション事業部 ソリューション部
TEL(042)532-1494 FAX(042)532-2412

*文中に掲載の製品名、社名は各社の商標、登録商標または製品です。

図2 BioServerの構成とシステム諸元

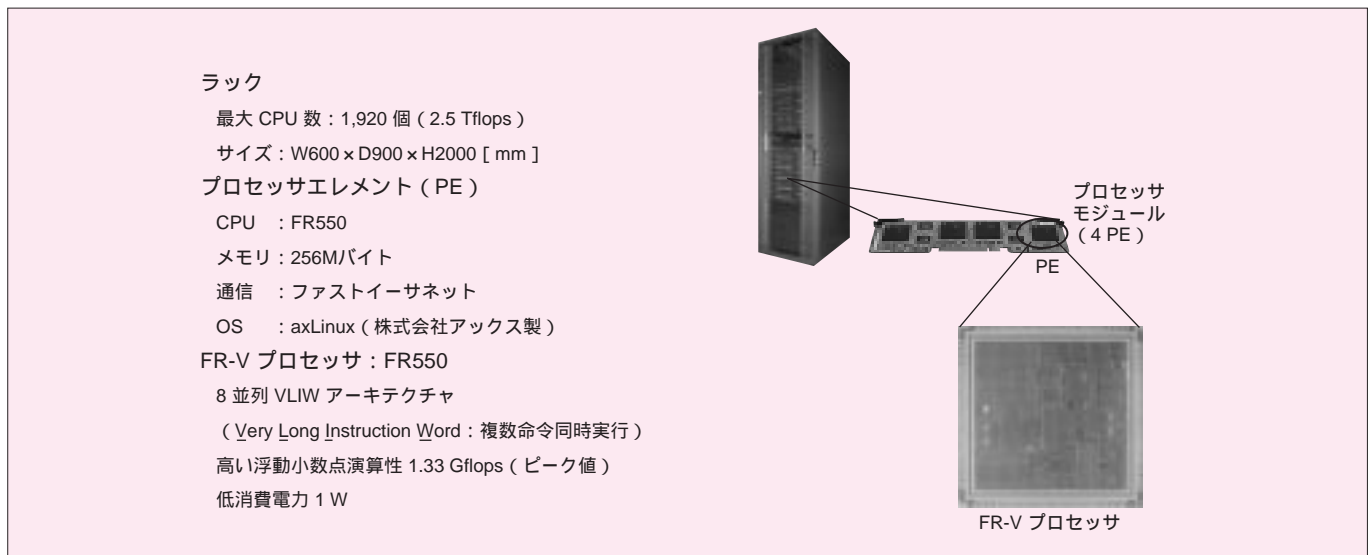


図3 BioServerシステムの全体構成

