

# スーパーコンピューティングが 生体高分子に架ける夢

— 大規模生体分子シミュレーションが可能にすること —

東京工業大学 学術国際情報センター  
大規模データ情報処理分野

関嶋政和

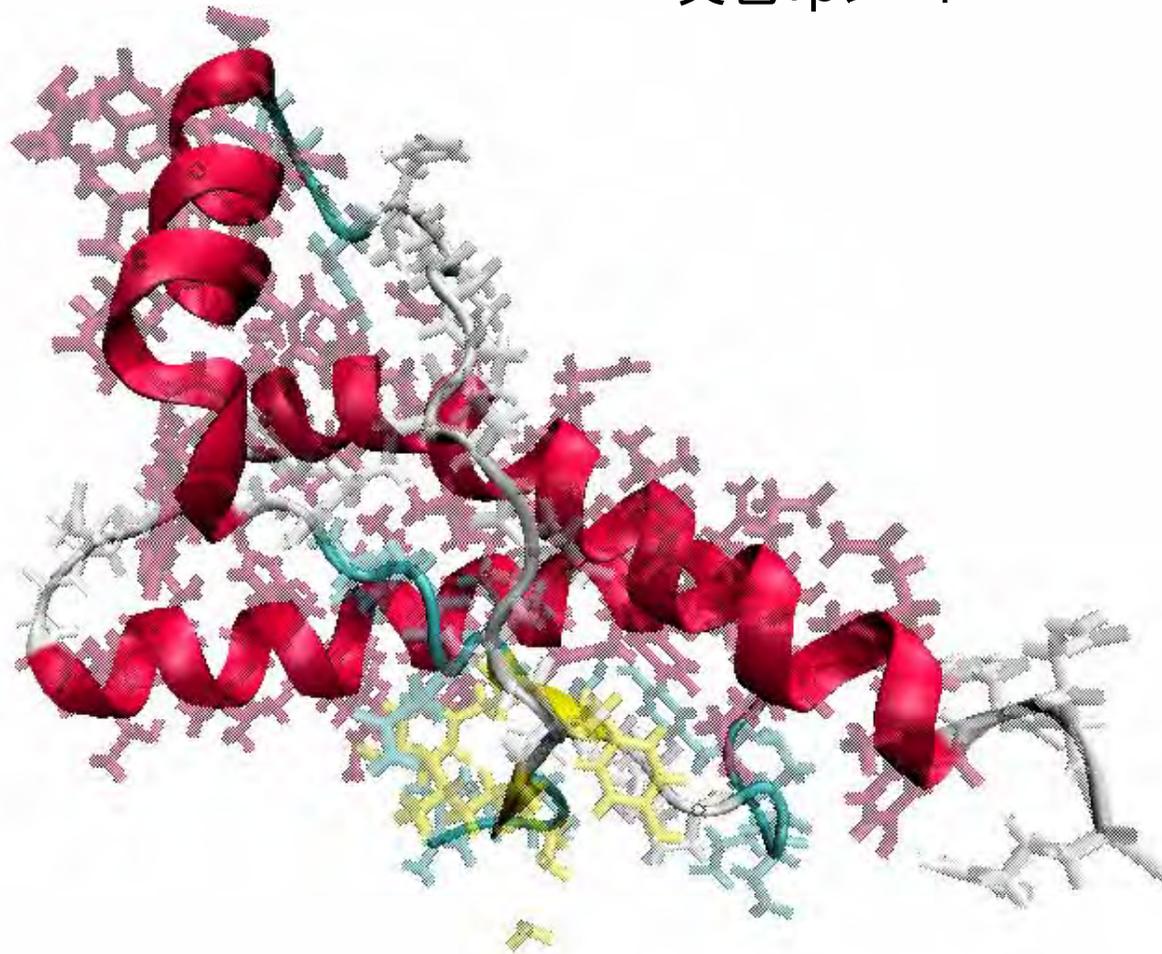
# 分子動力学法

- 生体分子の構造, ダイナミクス, 物理化学的特性の解析
  - フォールディング原理の解明
  - NMR, X線結晶解析で得た立体構造の精密化など
- 生体分子の機能予測・解析
  - タンパク質の残基置換による安定性の変化の解析
  - 機能に関するダイナミクス

# 生体分子の熱揺らぎ

赤:  $\alpha$ ヘリックス

黄色:  $\beta$ シート



# 分子動力学法の歴史

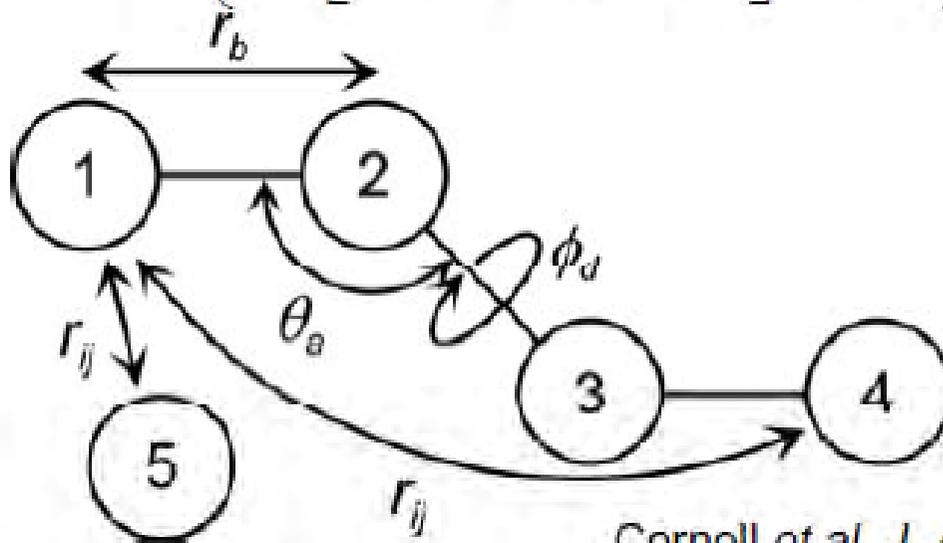
- 1957年 : 剛体球の分子動力学法 (Alder and Wainwright←最初のMD)
- 1964年 : 質点系への拡張(Rahman)
- 1971年 : 剛体系への拡張(Rahman and Stillinger)
- 1977年 : 拘束系への拡張 (Ryckaert等)  
BPTIによる最初のタンパク質のシミュレーション
- 1980年 : 定圧条件の導入 (Andersenの方法、Parrinello-Rahman法)
- 1983年 : 非平衡系への拡張(Gillan and Dixon)
- 1984年 : 定温条件の導入 (能勢 - フーバーの方法)
- 1985年 : 第一原理分子動力学法 (→カー・パリネロ法)
- 1991年 : グランドカノニカル系への拡張(Cagin and Pettit)

# 生体分子のポテンシャル関数

- 系内の各原子間にかかる力を、モデルで表現する
  - bond length (結合長)に関する力: Hookeのバネの法則で代用
  - bond angle (結合角)に関する力: Hookeのバネの法則で代用
  - torsion angle (二面角)に関する力: 好まれる角が底になるcosineカーブで代用
  - uncharged atom間の力: Van der Waals力 (L-Jポテンシャル等で表現)
  - charged atom間の力: Coulomb 力

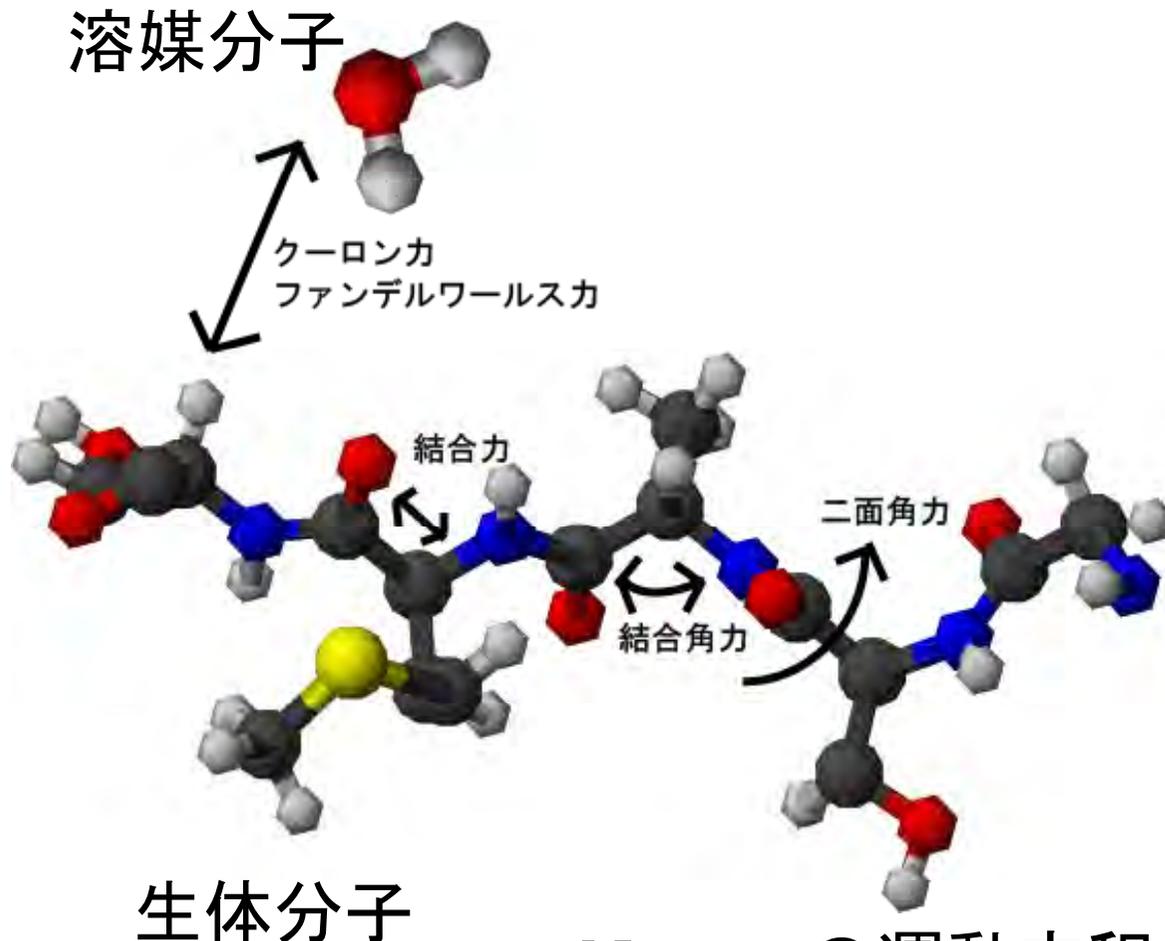
# AMBERのポテンシャル関数

$$\begin{aligned}
 E(\mathbf{r}) = & \sum_b k_b (r_b - r_b^0)^2 + \sum_a k_a (\theta_a - \theta_a^0)^2 + \sum_d k_d [1 + \cos(n_d \phi_d - \delta_d^0)] \\
 & + \sum_{ij} \left\{ 4\varepsilon_{ij} \left[ \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] + \frac{q_i q_j}{r_{ij}} \right\}
 \end{aligned}$$

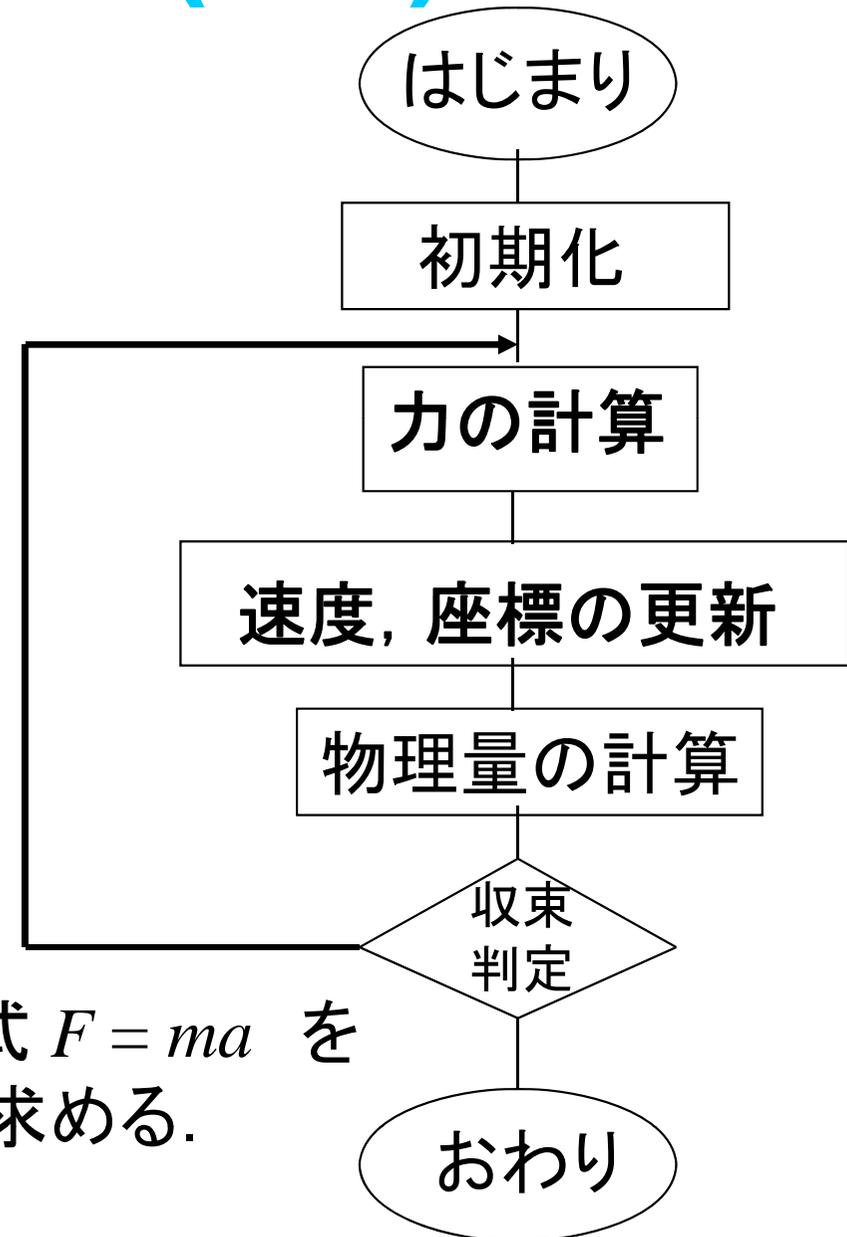


Cornell et al. J. Am. Chem. Soc. 117, 5179 (1995)

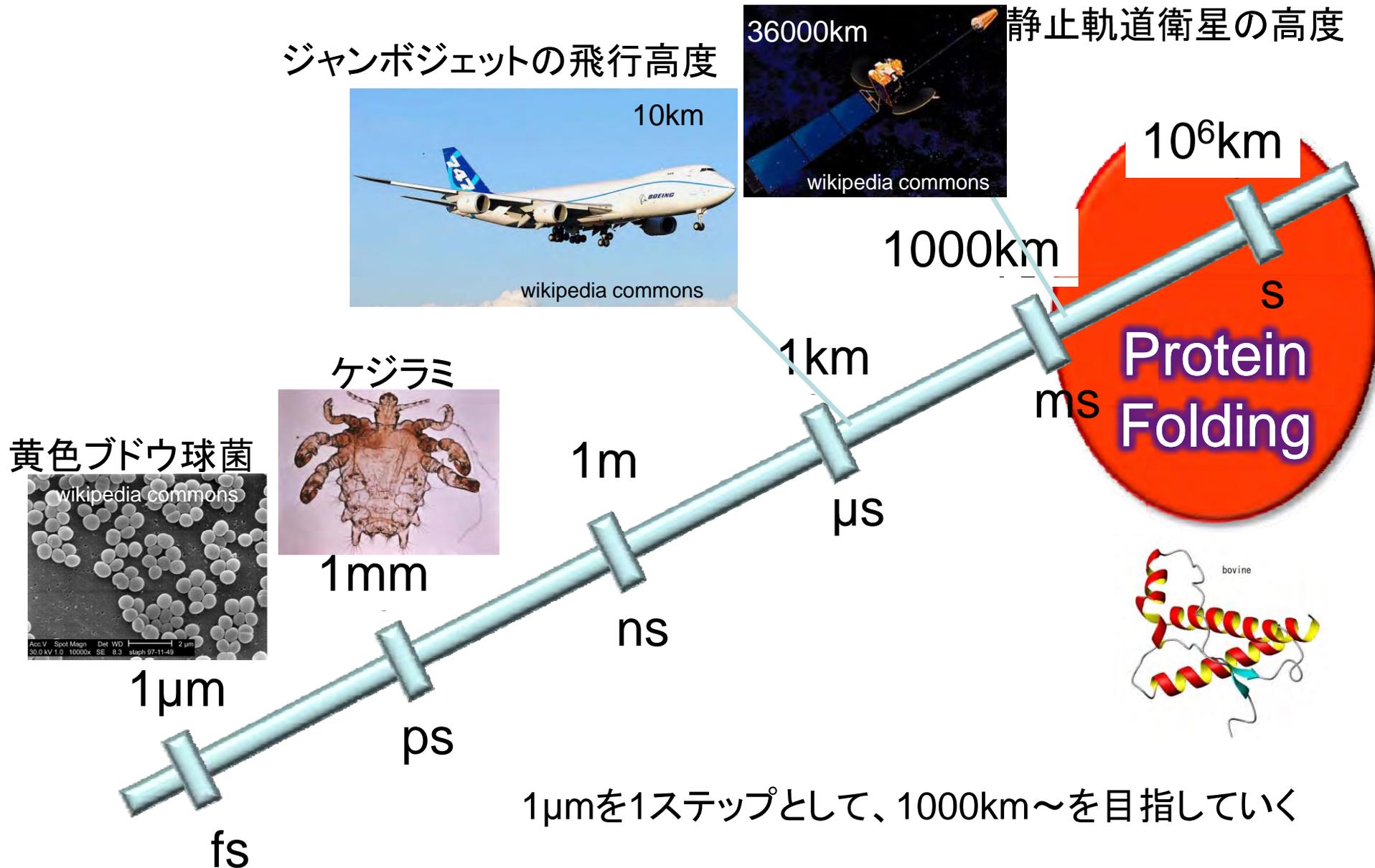
# 分子動力学法 (MD) の手順



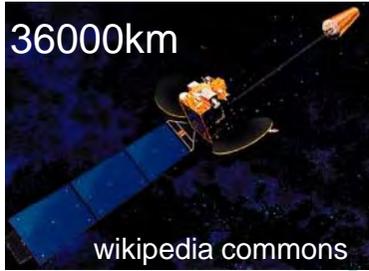
Newtonの運動方程式  $F = ma$  を  
数値積分により力を求める。



# MDの目指す計算ステップ数

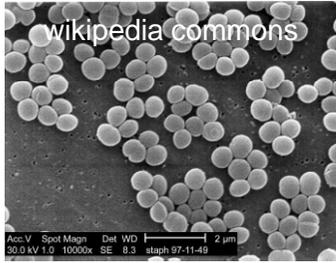


ジャンボジェットの飛行高度



静止軌道衛星の高度

黄色ブドウ球菌

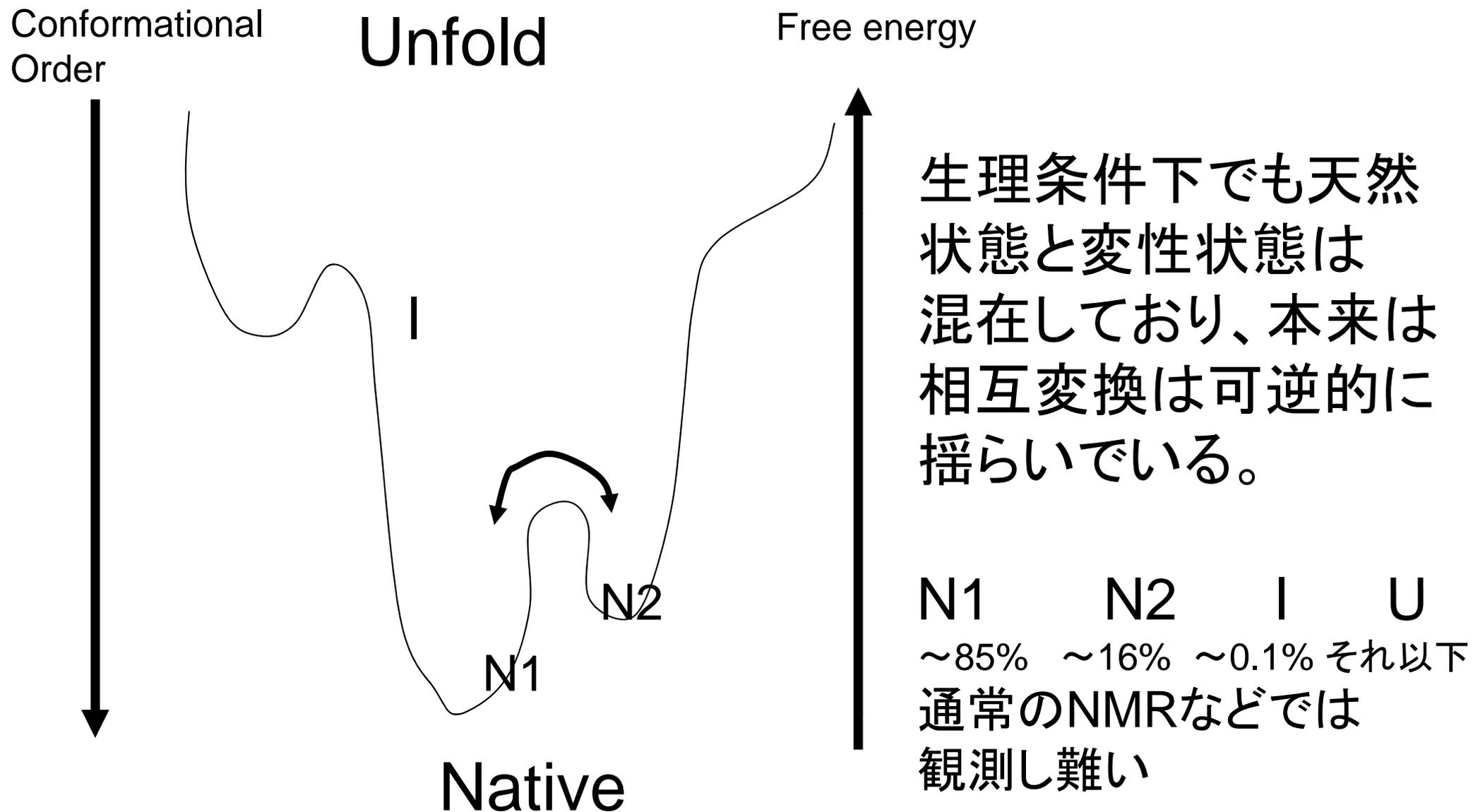


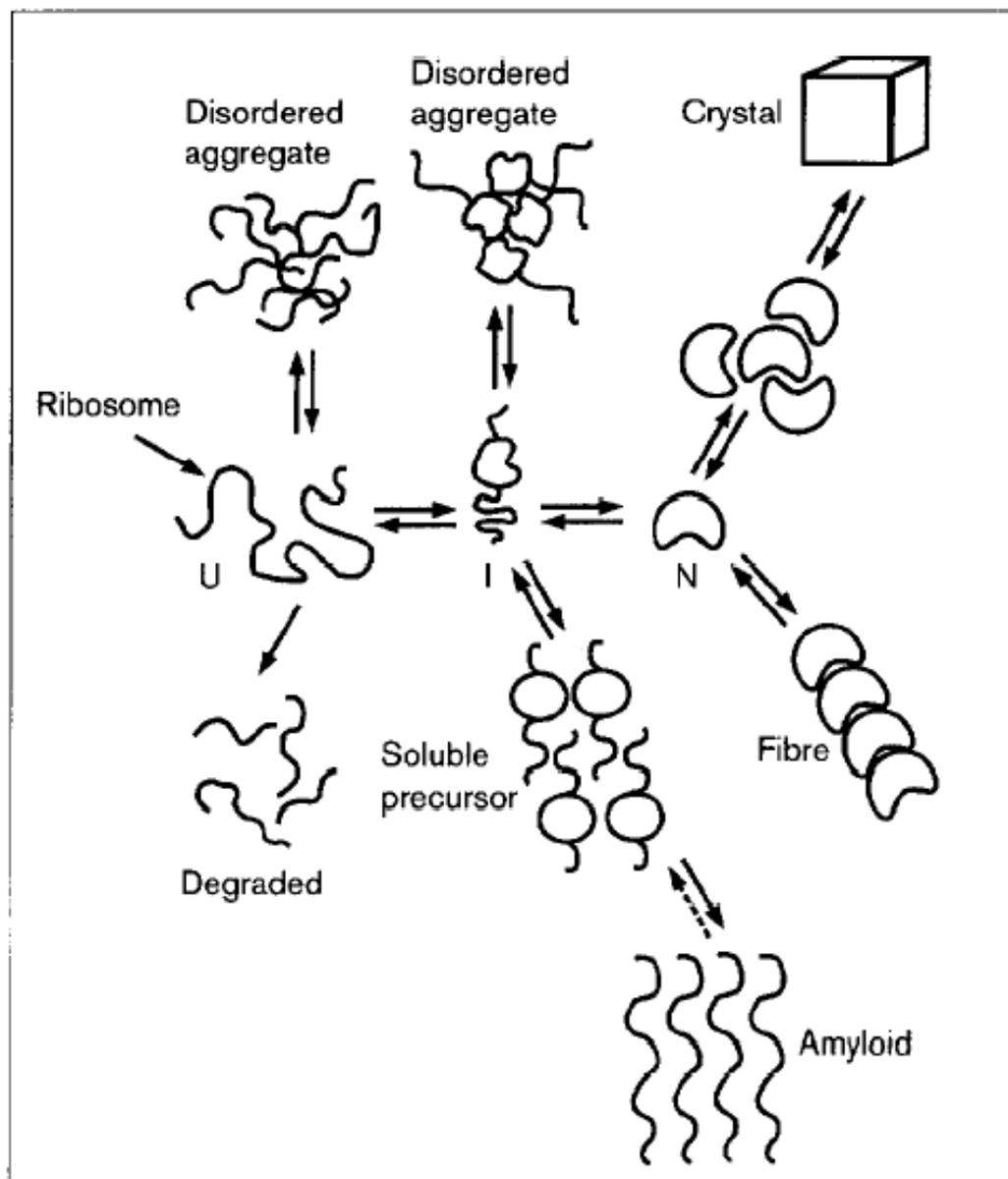
ケジラミ



1  $\mu$ mを1ステップとして、1000km~を目指していく

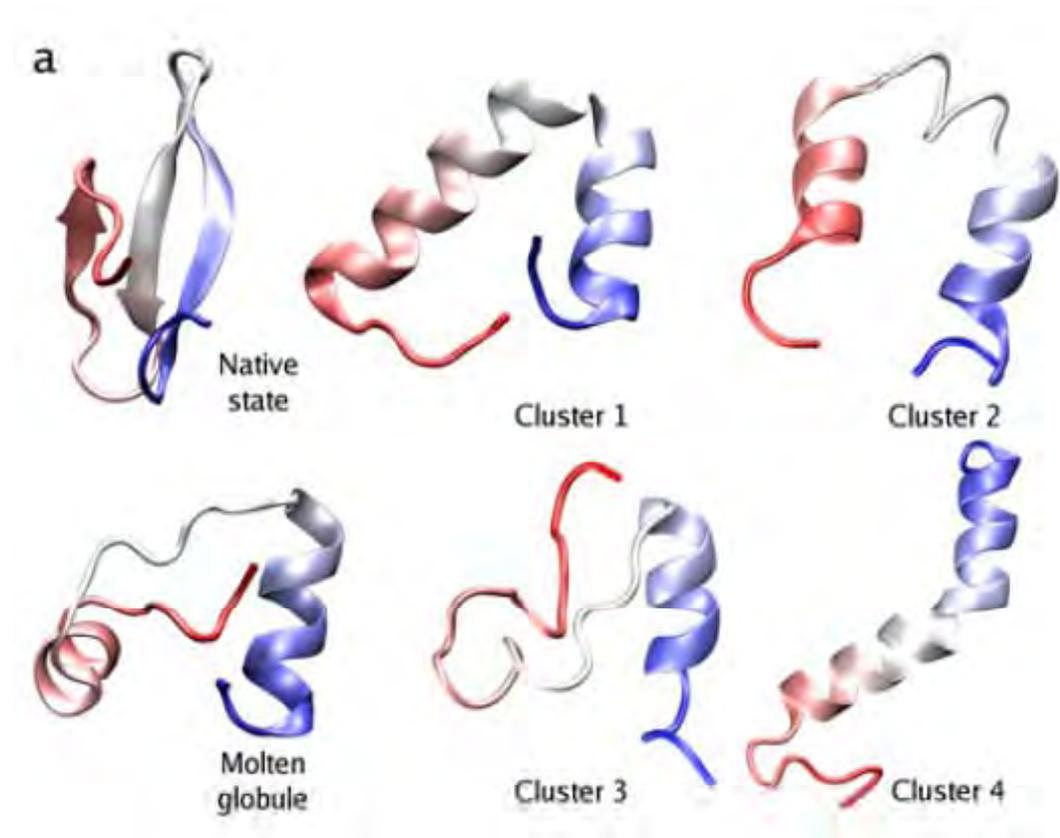
# コンフォメーションの存在状態





# 2008年に記録された生体分子 の最長MDシミュレーション

- 10 $\mu$ 秒
- WW domain (35残基)
- Extended 状態  
からのシミュレーション
- 最初に $\alpha$ ヘリックスが  
形成され、それが破壊  
されるプロセスを観測
- NAMMD
- NCSAの329CPUを用いて  
3ヶ月で達成
- 111n秒/日

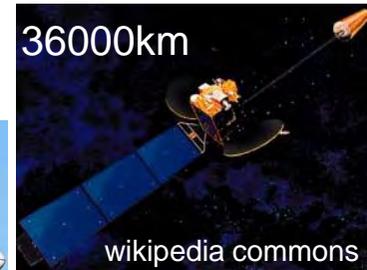


P. L. Freddolino et al., 2008  
(Schulten group)

# MDの目指す計算ステップ数

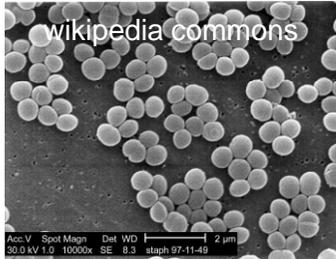
2008年、  
ジャンボジェット  
の飛行高度に  
到達

ジャンボジェットの飛行高度



静止軌道衛星の高度

黄色ブドウ球菌

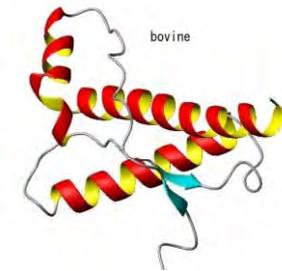


1mm

1 $\mu$ m



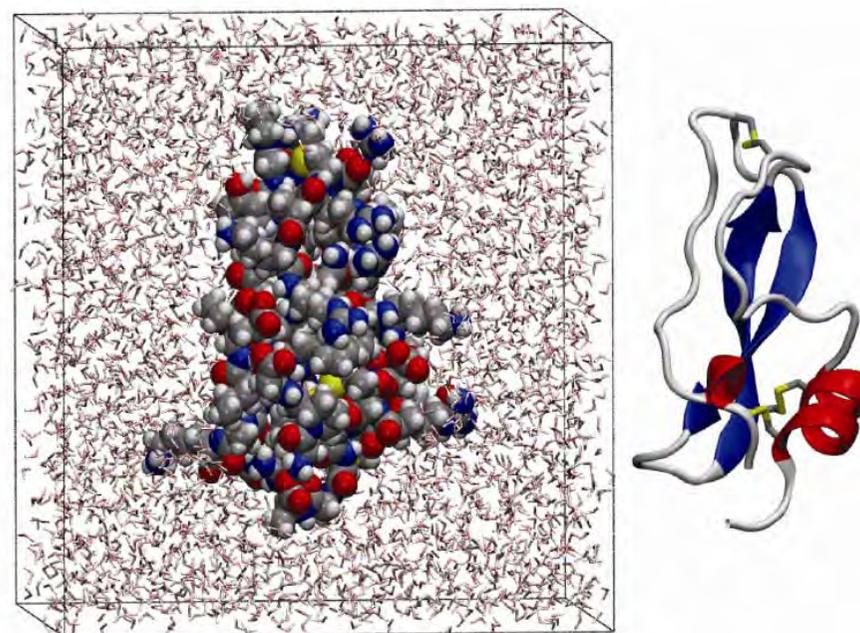
Protein Folding



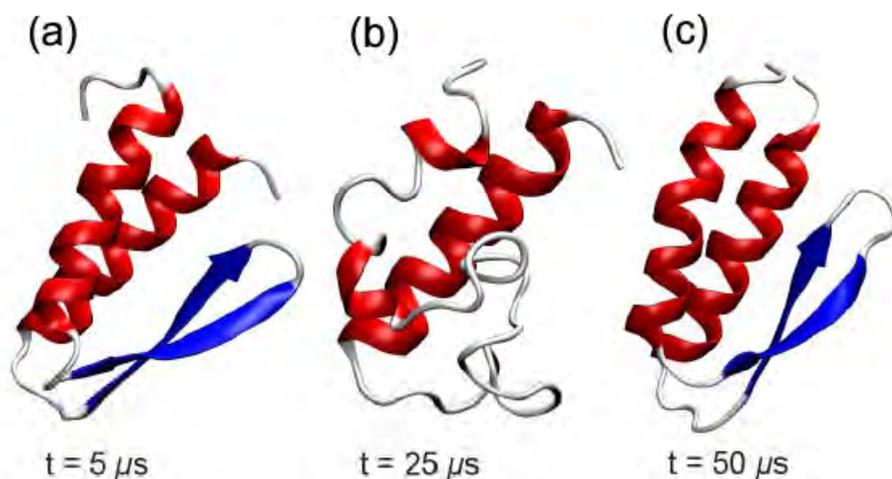
1 $\mu$ mを1ステップとして、1000km~を目指していく

# 2009年生体分子のMDシミュレーションはミリ秒の世界へ

Length ( $\mu$ s)	Protein	Hardware	Software	Citation
1031	BPTI	Anton	[native]	Here
236	gpW	Anton	[native]	Here
10	WW domain	x86 cluster	NAMD	[10]
2	villin HP-35	x86	GROMACS	[6]
2	rhodopsin	Blue Gene/L	Blue Matter	[25]
2	rhodopsin	Blue Gene/L	Blue Matter	[12]
2	$\beta_2$ AR	x86 cluster	Desmond	[5]



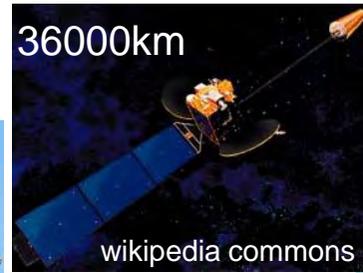
D. E. Shaw et al., 2009



9.8 $\mu$ 秒/日=2008年の最長記録/日

# MDの目指す計算ステップ数

ジャンボジェットの飛行高度



静止軌道衛星の高度

$10^6$ km

1000km

1km

ms

Protein Folding

$\mu$ s

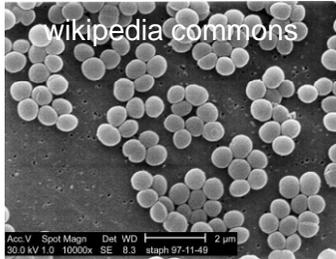
1m

ns

1mm



黄色ブドウ球菌

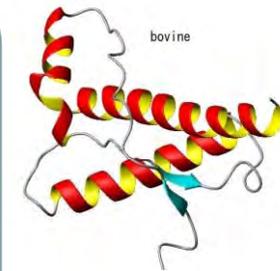


$1\mu$ m

ps

fs

2009年、Antonは高度1000kmに到達。しかも、毎日2008年の世界記録の高さを進む



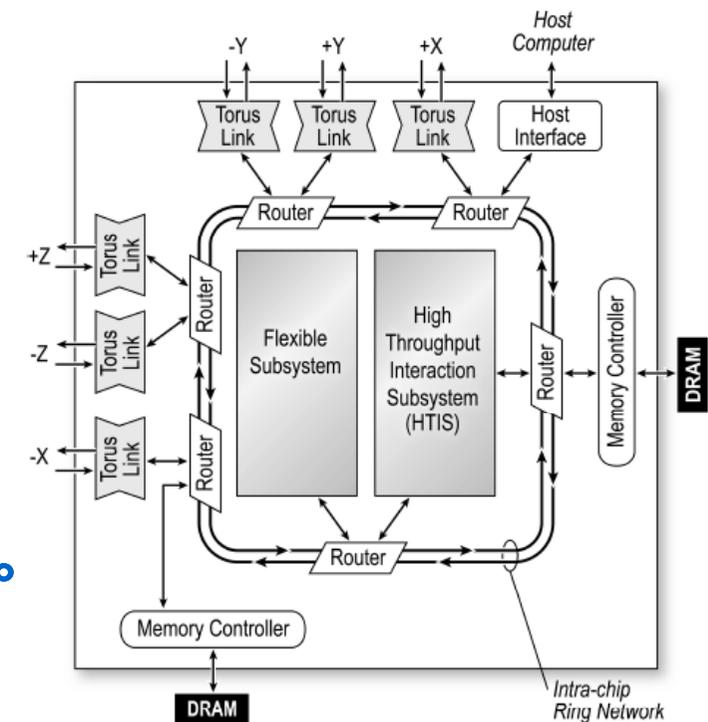
$1\mu$ mを1ステップとして、1000km~を目指していく

# D. E. Shaw

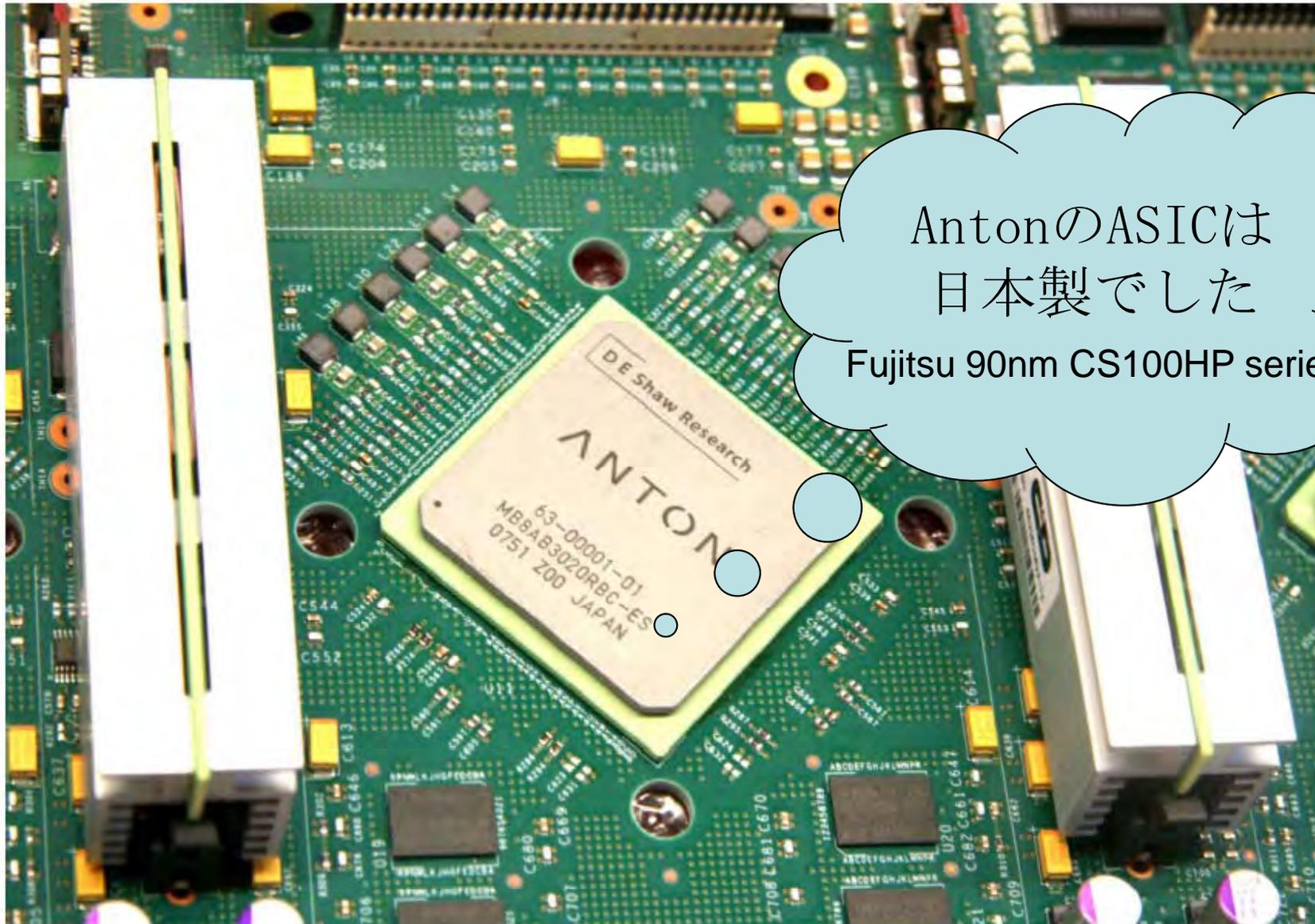
- D. E. Shaw Researchのチーフサイエンティスト
- D. E. ShawはStanford Univ.でComputer Scienceの分野でPh.D.を1980年に取得後、1986年までColumbia Univ.でShaw groupを率いた後、1988年にD. E. Shaw & Co., L.P.を設立。D. E. Shaw groupは計量投資の分野で有名。1996年にはShawはFortune誌で” King Quant”と呼ばれた。グループ全体で1500名の従業員、運用資産額は約390億ドルで世界最大級のヘッジファンドとして有名。
- D. E. Shaw Researchはそこで得た資産を元に設立。
- 現在は、D. E. Shaw Researchにおける研究開発をフルタイムで行っている。

# Anton

- 512ノードで構成されるMassively Parallel Supercomputer
- application-specific integrated circuits (ASICs, エーシック : 特定用途集積回路)が3Dトーラスネットワークで結合
- ASIC内は2つのsub systemにより構成
  - ある距離内の直接計算を行う  
High Throughput Interaction Subsystem(HTIS)
  - それ以外の計算等を行うsub system
    - 高速な数値計算の為の8つのgeometry cores
    - データの流れをコントロールする4つのTensilica LX cores
    - 計算の陰で通信を行う4つのデータ転送エンジン
  - その他にも、隣接ノードへ50.6Gb/s
  - ASICは90nmテクノロジーで製作され、HTIS内でペア計算をするPPIPが970MHzで動作する他は485MHzで動作している。
- このシステムにより、例えば直接計算についてx86上のGROMACSで実行時間の89%だったものが、Antonでは12%になっている。



# AntonのASIC



AntonのASICは  
日本製でした  
Fujitsu 90nm CS100HP series

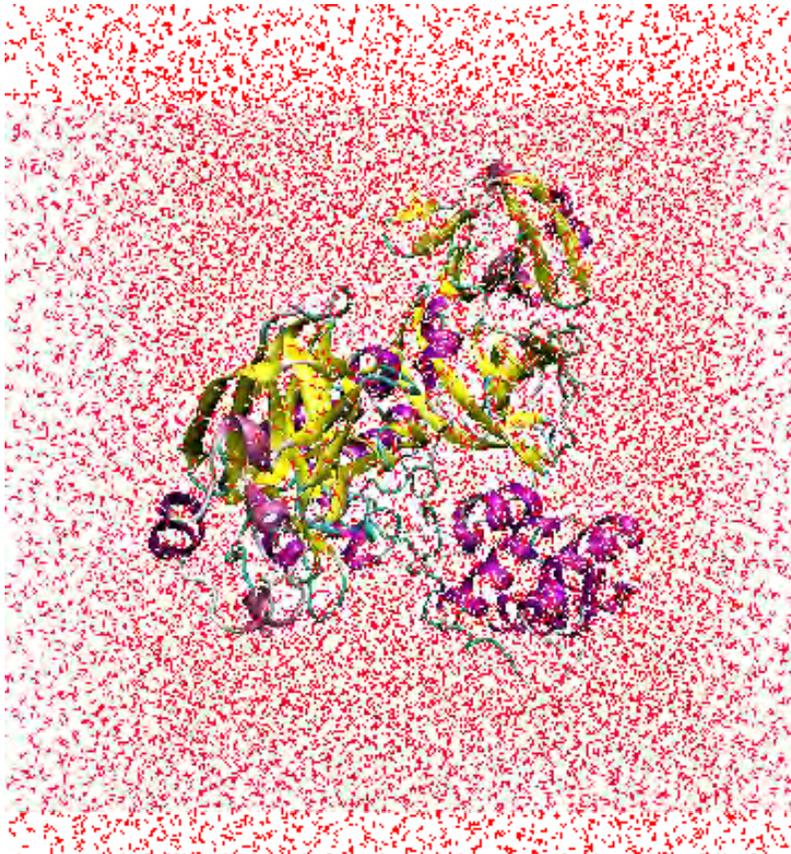
# GPUは別の道を示せるか？

- MD計算へのGPU(Graphics Processing Unit)の利用
  - 高い計算能力
  - コストパフォーマンスが高い
  - **電力効率**が高い
  - 近年スーパーコンピュータへの導入も盛んに行われている



TSUBAME2.0

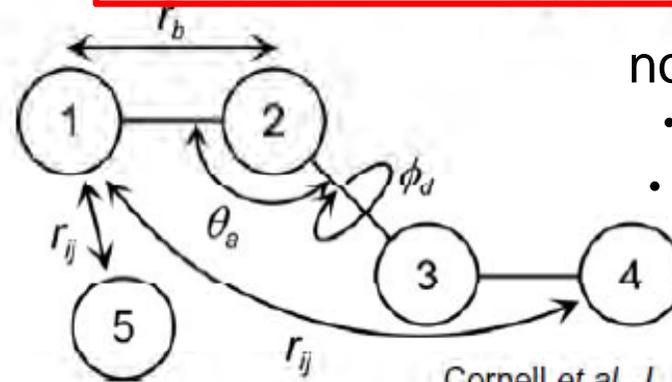
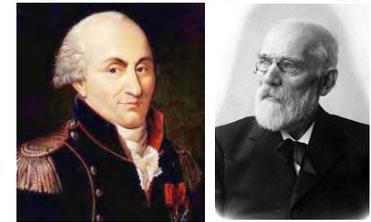
# MDプログラムのGPU化



Protein and water molecules

$$E(\mathbf{r}) = \sum_b k_b (r_b - r_b^0)^2 + \sum_a k_a (\theta_a - \theta_a^0)^2 + \sum_d k_d [1 + \cos(n_d \phi_d - \delta_d^0)]$$

$$+ \sum_{ij} \left\{ 4\epsilon_{ij} \left[ \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] + \frac{q_i q_j}{r_{ij}} \right\}$$



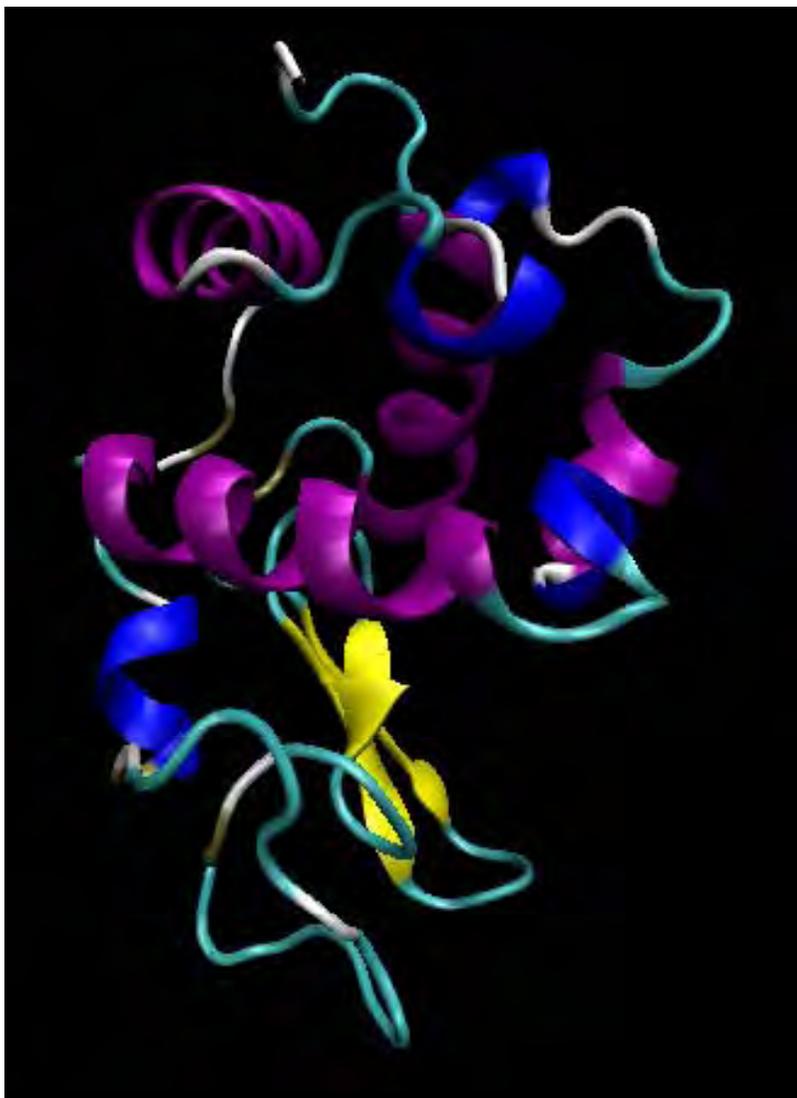
- non bonded interaction
- Coulomb force
  - Van Der Waals force

Cornell et al. *J. Am. Chem. Soc.* 117, 5179 (1995)

In our work, all of non bonded interactions are directly calculated by GPUs.

(bonded interactions are limited inter protein)

# GPU化の効率



Lysozyme

130 residues (2023 原子)  
5685 水分子(17055 atoms)

$N = 19078$

$N*N = 19078*19078 = 3.6397008 * 10^8$

CPU:Core-i7 920 D0 2.66GHz

GPU: nVIDIA GeForce GTX295 1.792GB

DDR3 576 MHz

OS: Linux(Fedora10 64bit)

memory: 3GB



1CPU 4.18127 G FLOPS

2GPU 430.6 G FLOPS

おおよそ100倍！

# GPUの省電力性に関して

## 実行環境

CPU	Intel Core i7-860	2.80GHz×4 core 256KB×4 L2 caches 8MB L3 cache
GPU	GT240	1.34GHz×96 CUDA core 512MB GDDR5
RAM	DDR3 SDRAM 6GB	
OS	Ubuntu 9.04	
CUDA toolkit	バージョン3.0	

# 実験に用いたMD

- 原子間の相互作用の計算には  
レナード・ジョーンズポテンシャルを利用

$$\phi(r_{ij}) = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right]$$

$r_{ij}$ : 原子ij間の距離  
 $\varepsilon, \sigma$ はパラメータ

- Verlet法**で次のステップの座標と現在の速度を

**計算**  $r(t_+) = 2r(t) - r(t_-) + a(t)(\Delta t)^2$

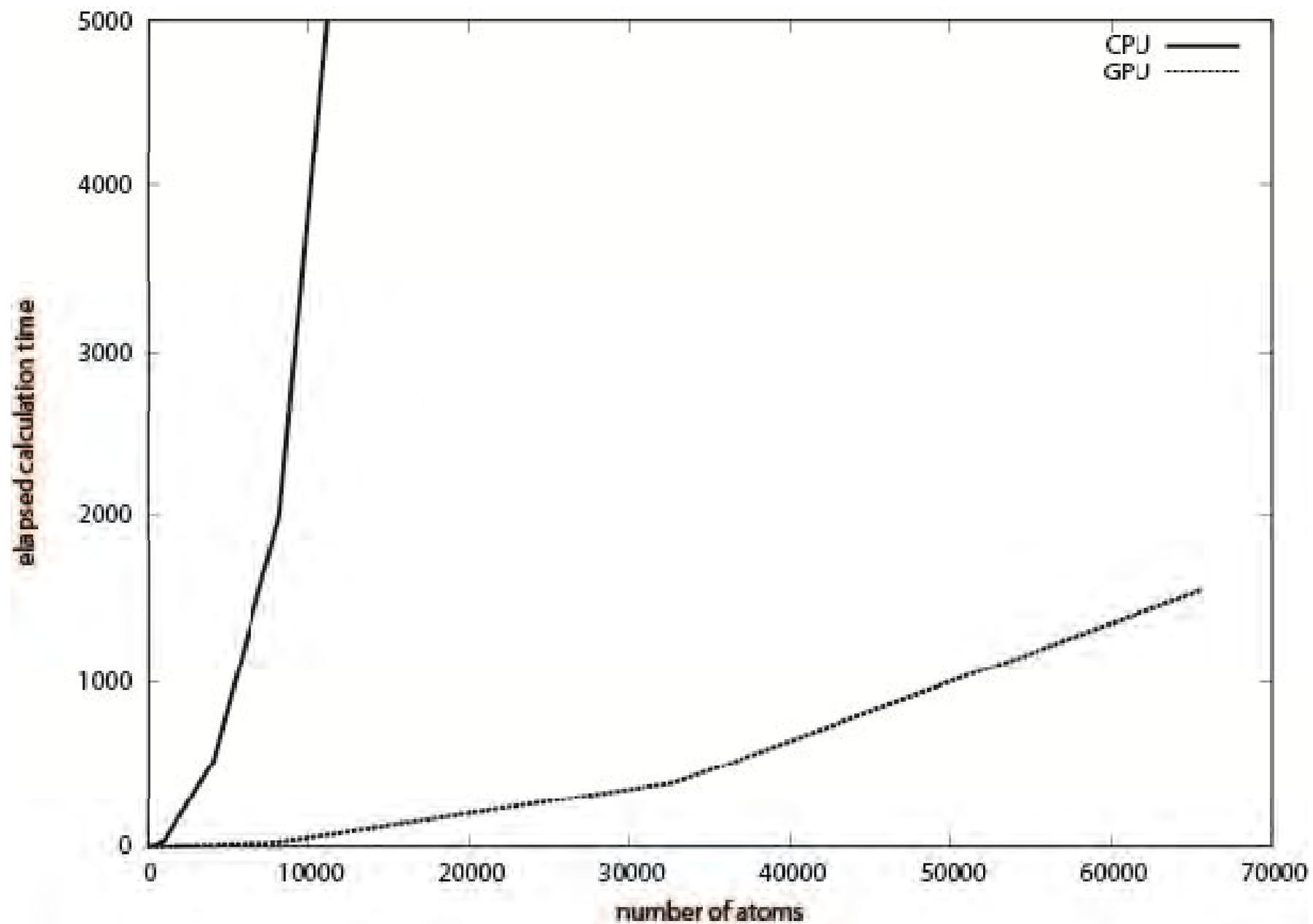
$$v(t) = \frac{1}{2\Delta t} [r(t_+) - r(t_-)]$$

$r(t)$ : 時刻tの座標  
 $a(t)$ : 時刻tの加速度  
 $v(t)$ : 時刻tの速度  
 $\Delta t$ : 時間幅

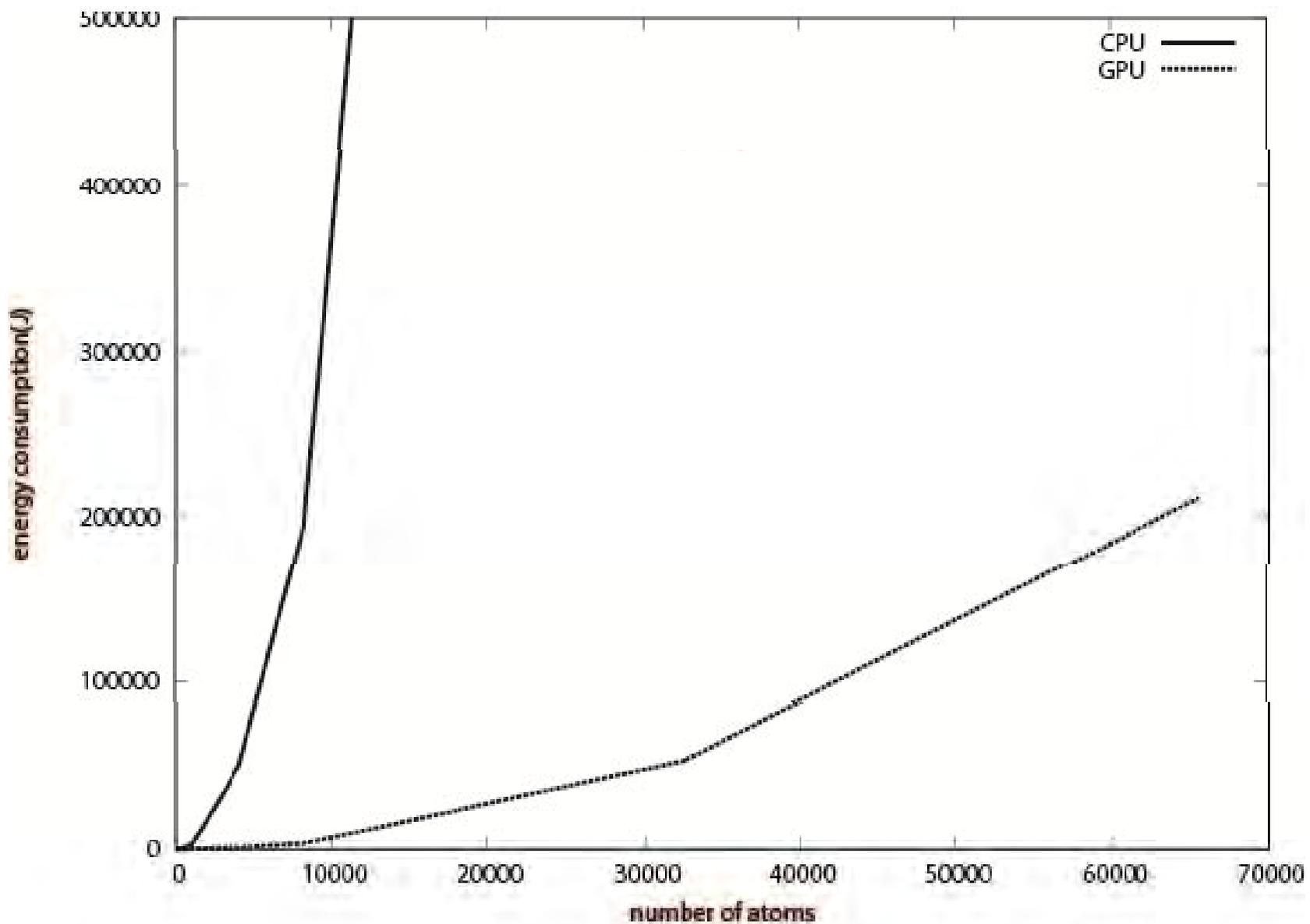
# CPU Serial VS GPU

atoms	value	Serial	GPU	Serial/GPU
8	Sec	0.0030	0.0089	0.337
	Watt	92.5	114	0.811
	Joule	0.2775	1.015	0.273
64	Sec	0.160	0.038121	4.20
	Watt	94.3	115	0.820
	Joule	15.088	4.384	3.44
512	Sec	8.280	0.2941	28.1
	Watt	94.8	121	0.783
	Joule	784.944	35.59	22.1
65536	Sec	106508	1554.98	68.5
	Watt	98.5	136	0.724
	Joule	10491038	211477	49.6

# 計算時間



# 消費エネルギー



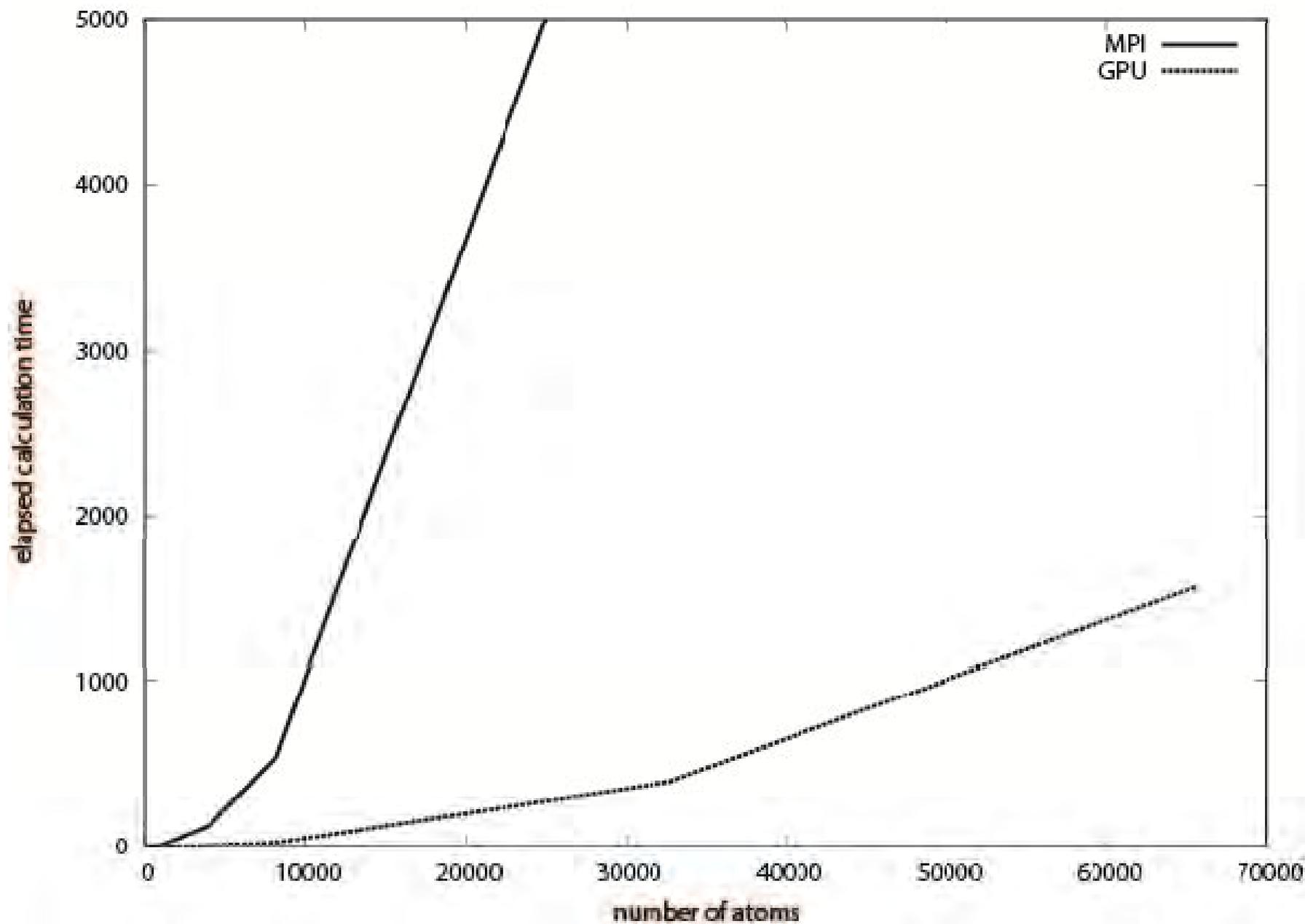
# Results(CPU Serial VS GPU)

- GPUの方が、CPUでserial計算に対して多くの供給電力が必要
- 原子数 8 個の場合はCPUにおけるserial計算の方が高速
- 原子数64個以上ではGPUが計算速度、消費エネルギーで圧倒

# Results(MPI VS GPU)

atoms	value	MPI (8 processes)	GPU	MPI/GPU
8	Sec	0.020	0.0089	2.25
	Watt	168	114	1.47
	Joule	3.36	1.015	3.31
64	Sec	0.090	0.038121	2.36
	Watt	168	115	1.46
	Joule	15.12	4.384	3.44
512	Sec	3.53	0.2941	12.0
	Watt	170	121	1.40
	Joule	600.1	35.59	16.9
65536	Sec	26164.63	1554.98	16.8
	Watt	182	136	1.34
	Joule	4761962	211477	22.5

# Results (計算時間)

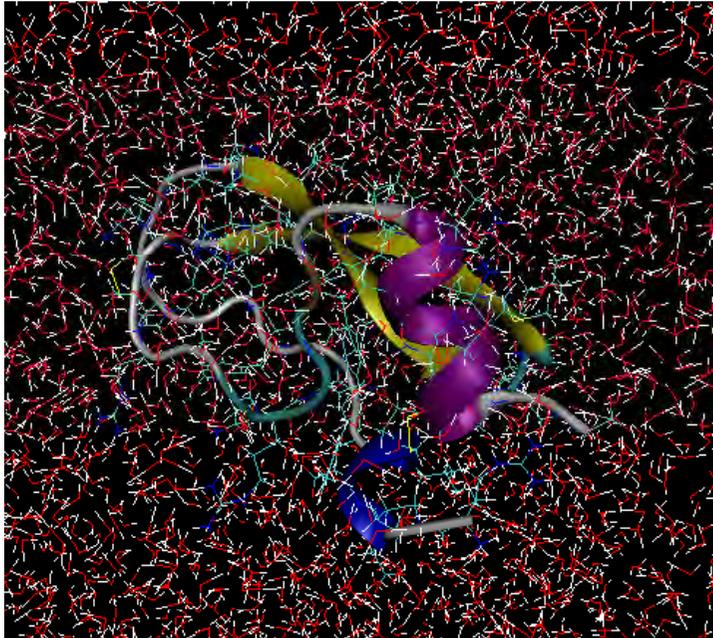


# Results(MPI VS GPU)

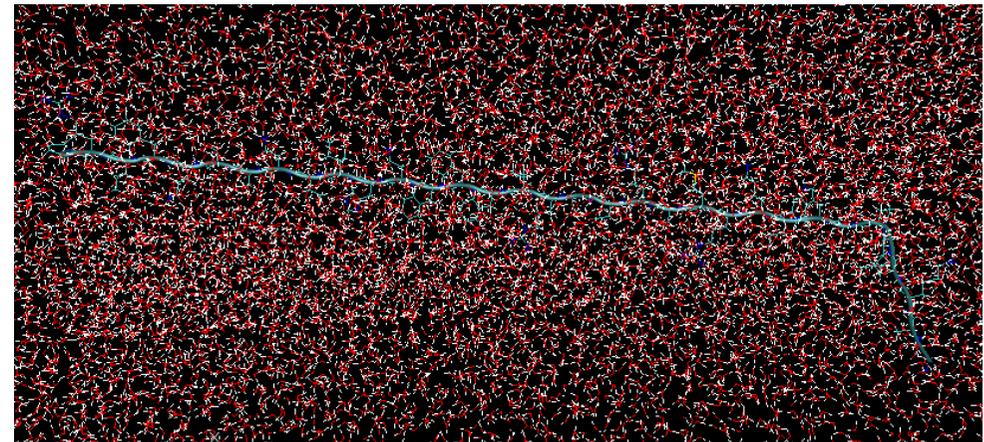
- MPIで8プロセス実行する方が、GPUを使用するよりも多くの電力を消費
- 計算速度は、単ースレッドの場合より改善されたが、GPUの方が高速(65536原子で16.8倍)
- 計算速度、消費電力、消費エネルギーすべての場合でGPUの方が勝った

# 生体分子ではどうだろう？

## シミュレーション対象



BPTI(PDBID:6PTI)  
57残基、4804水分子  
(Antonでは4215水分子)  
トータル15111原子



WWdomain  
35残基、4741水分子  
(Schulten groupでは総原子数が  
3万程度という言及のみ)  
トータル34966原子

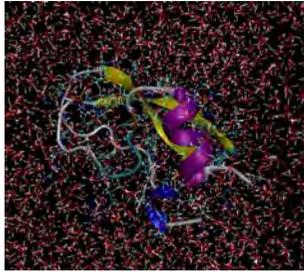
水は両者とも、TIP3Pモデルのexplicit water

# 実行環境

## HPCテック社製GPUクラスタ

- Intel Xeon 5550 2.66GHz
- DDR3 1333 12GB/node
- NVIDIA GTX480(1.4GHz×480CUDA core)
- InfiniBand SDR
  
- AMBER11 pmemdのCUDA版  
(現在はsingle GPUのみ、数日中にmulti版の  
パッチがリリースの見込み)
- ff99SB

# 実行結果の比較

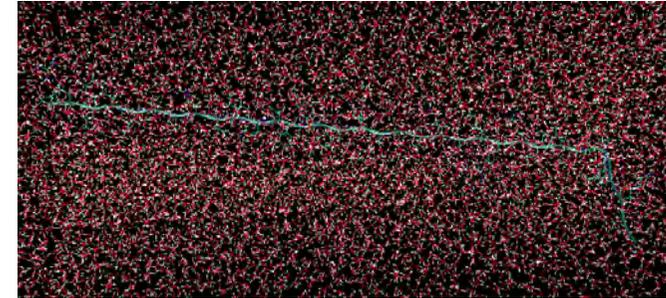


**Anton (Shaw group)**

- 9.8 $\mu$ 秒/日

**GTX480 (1枚)**

- 13.6n秒/日
- ざっくりと1000倍遅い



**NCSA(Schulten group)**

- 111n秒/日

**GTX480 (1枚)**

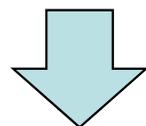
- 7.0n秒/日
- ざっくりと16倍遅い

# 実行結果を振り返って

- Schulten groupによるWWdomainにおける実行では1枚のNVIDIA GTX480の1枚で16倍遅い程度なので、NCSAのスパコン329CPUと同程度は、1ノードに3枚のNVIDIA Tesla M2050を搭載するTSUBAME2.0では6ノードあれば十分実現可能ではないか？
- Shaw groupによるBPTIにおける実行では、1000倍という圧倒的な差を付けられているので、GTX480をTeslaにしてmultiノードにしても、例えば100倍遅い程度にしかならない可能性がある。

# Antonを前に白旗を揚げる しかないのか？

- D.E.ShawもいずれAntonをコミュニティで使えるようにしているため、チャンスがあれば乗り遅れないようにする？！
- 現在のGPU上で動作するMDプログラムは、GPUのみで動作している訳では無い。
  - Antonのように出来る限りGPUで実行することで性能向上
- Folding@Homeのような戦い方もある。熱揺らぎの構造サンプリングなら、TSUBAME2.0で100ノード(300GPU)使用しようすればAntonの3倍の時間程度になる。
- マルチカノニカル法やレプリカ交換法を始めとする手法の改善もある。



Antonに学びながらも、まだまだ出来ることはある  
富士通さんに「京」の隣に1024ノードほど置いて頂けると嬉しい

# 高速で大規模な計算の先に 何が見えるだろうか？

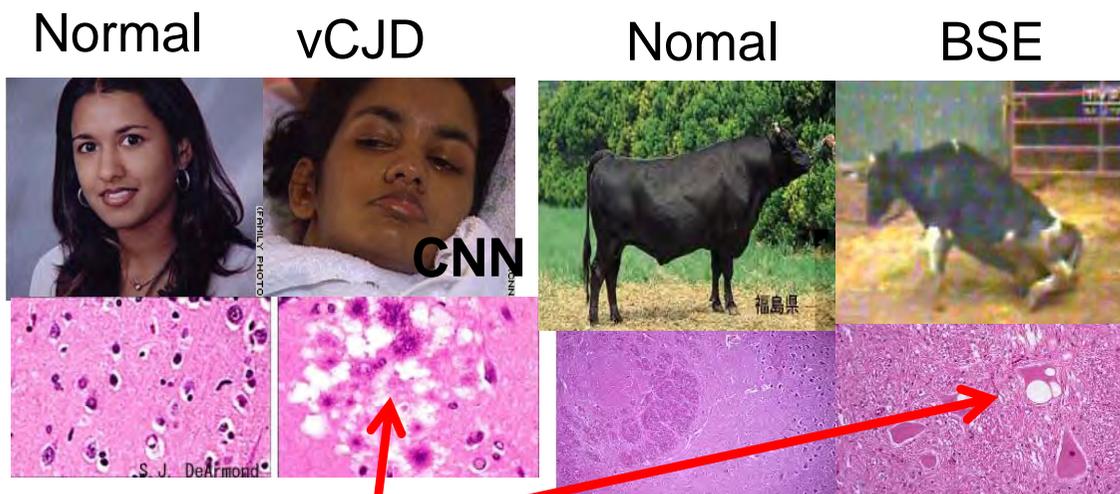
- フォールディング原理の解明
- タンパク質の設計
- 創薬への応用

## フォールディング原理の解明

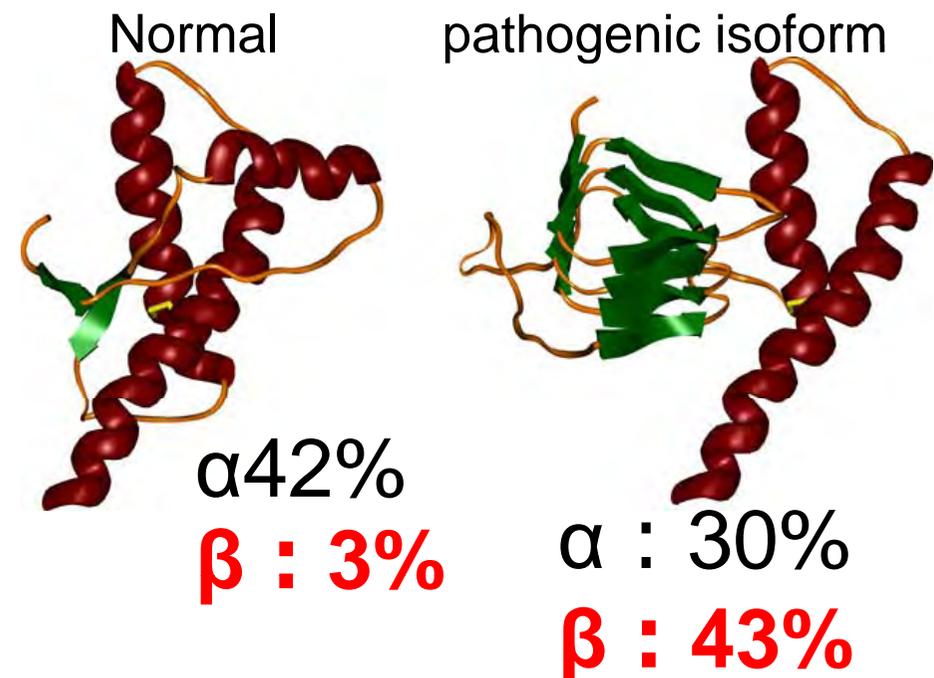
- $\mu\sim m$ 秒のタンパク質のシミュレーションから、タンパク質のフォールディング原理が解明
- 例えば、プリオンタンパク質
  - 正常な構造のプリオンタンパク質は、わたくし達の体内に存在
  - 遺伝的な疾患もしくは外部から異常構造のプリオンタンパク質を摂取することで、正常構造が異常構造に変異し、プリオン病の原因に？！

# プリオン病

- Prion Protein is known as a disease factor of prion disease such as BSE, scrapie, and CJD.
- Dynamics and functions of the normal cellular form ( $\text{PrP}^{\text{C}}$ ) remain unknown.
- The process underlying the conformational change from  $\text{PrP}^{\text{C}}$  to its pathogenic isoform ( $\text{PrP}^{\text{Sc}}$ ) is inapparent.

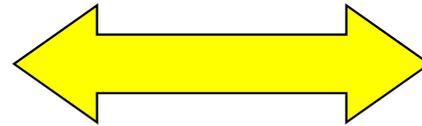


Both brains have many vacuoles (microscopic holes).

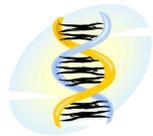


# プリオンタンパク質の不思議

Virus



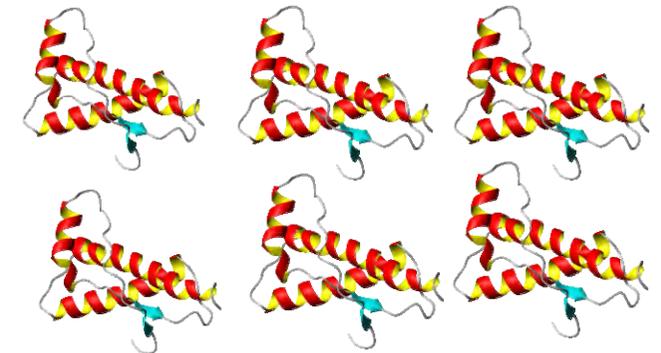
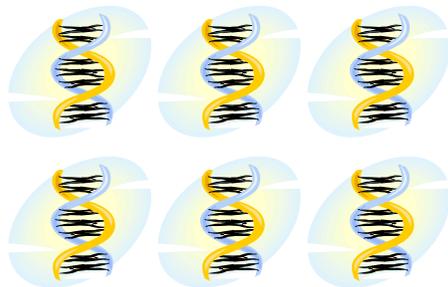
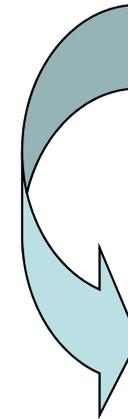
Prion Diseases



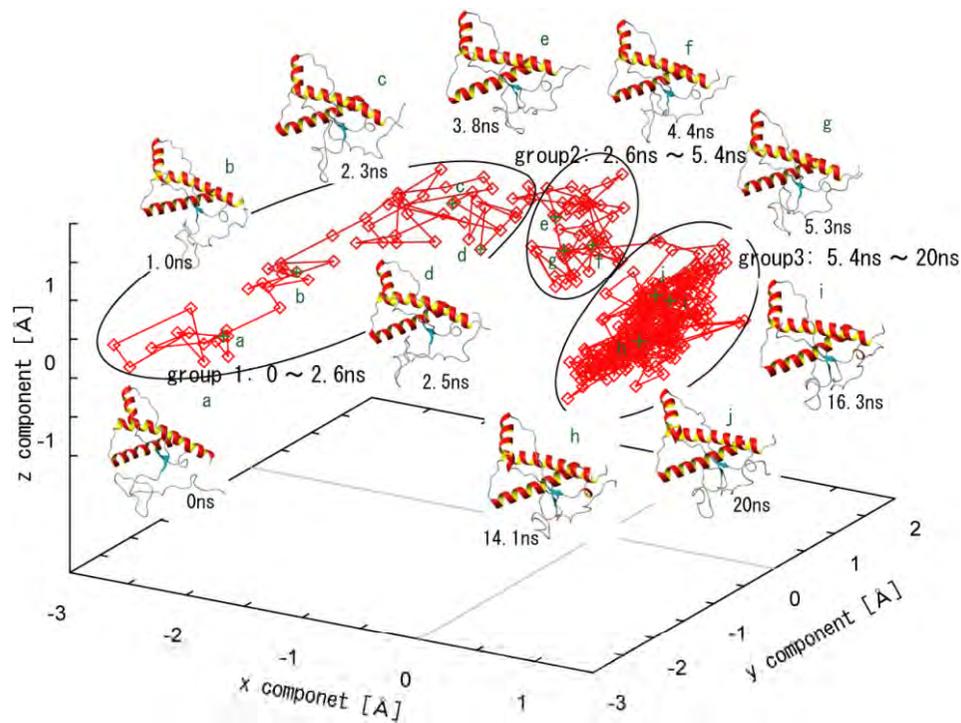
nucleic acid to  
infectious



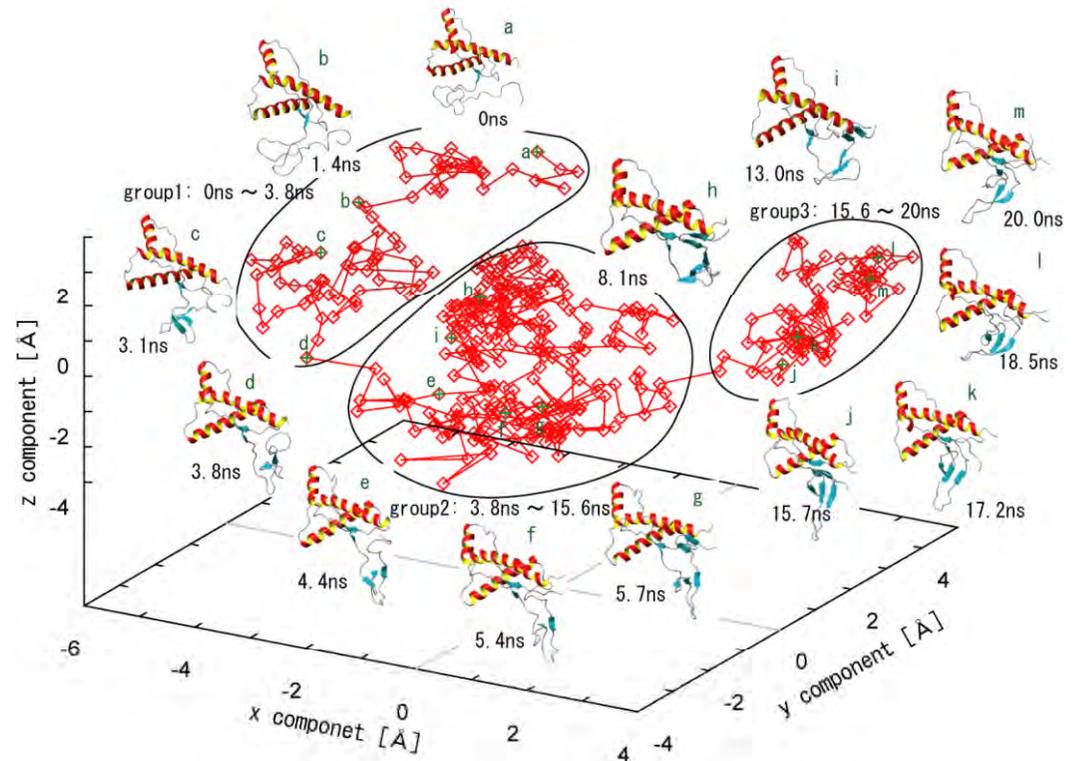
Only Protein ?



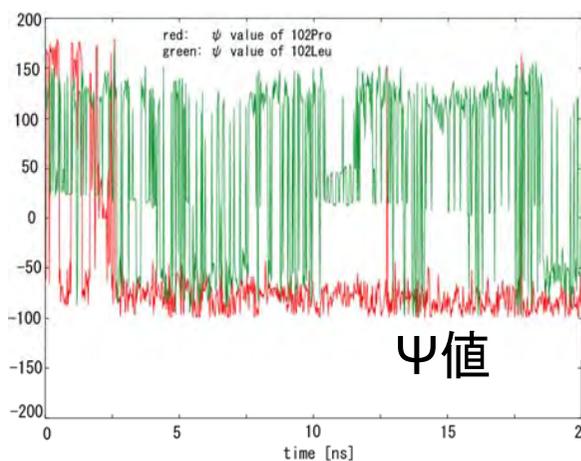
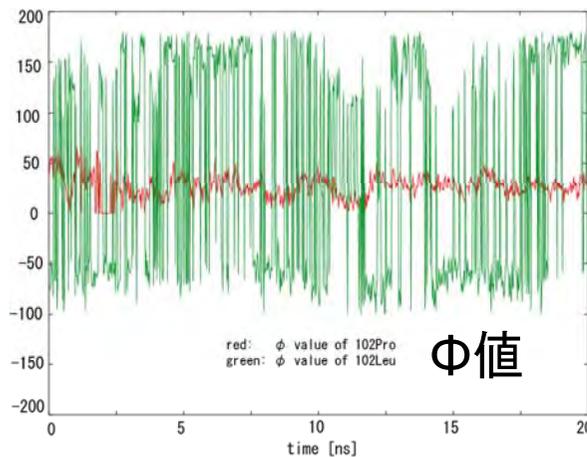
# 3次元のPCA空間の比較



野生型 (102Pro)



変異型 (102Leu)



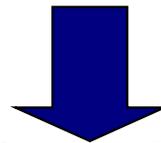
ロイシンのdihedral angleの柔軟性が、プリオンタンパク質のβシート形成を加速したのではないか？



現在、追実験中

# 生体分子の機能と揺らぎ

- 生体分子は、PDBの構造そのままの形状で機能しているとは限らない。
- どのように構造の揺らぎを表現したらよいか分かりにくい？



- 大規模分子動力学シミュレーションから自由エネルギー地形解析システムを開発する
  - ペプチド、タンパク質などの生体分子の熱揺らぎを理解しやすくするものとする
  - 分子動力学シミュレーションの初心者にも分かりやすいものとする  
ことで、分子生物学者が気軽に使用出来、理論的な裏付けのある生体分子設計に役立てるものとする

# 自由エネルギーの定義

- $F = -k_B T \log P$

P: ある状態の構造が出現している確率

$k_B$ : ボルツマン定数

T: 温度

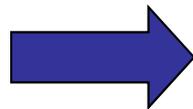
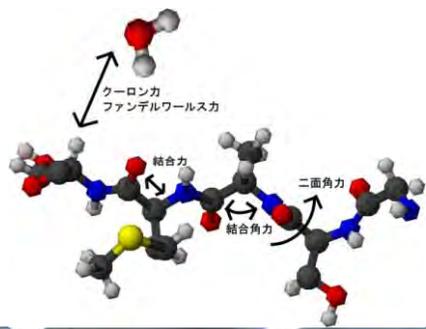
ヒストグラムから確率密度分布を求めて

$-\log$ を取る

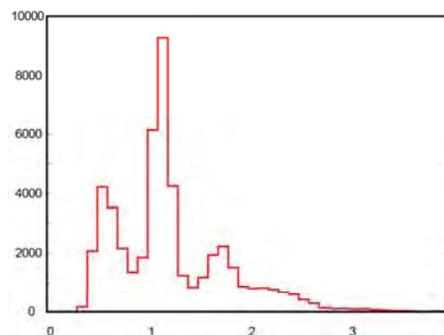
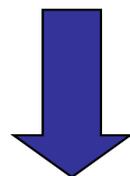


自由エネルギーが低い = ある状態の  
構造が出現している確率が高い

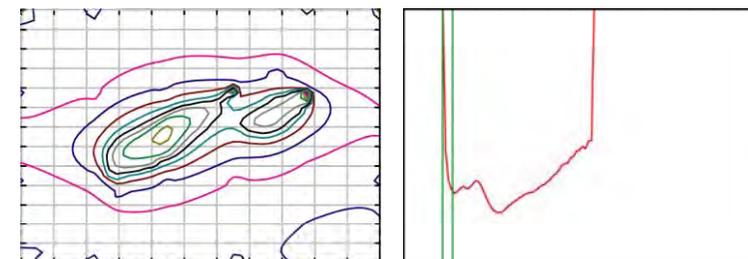
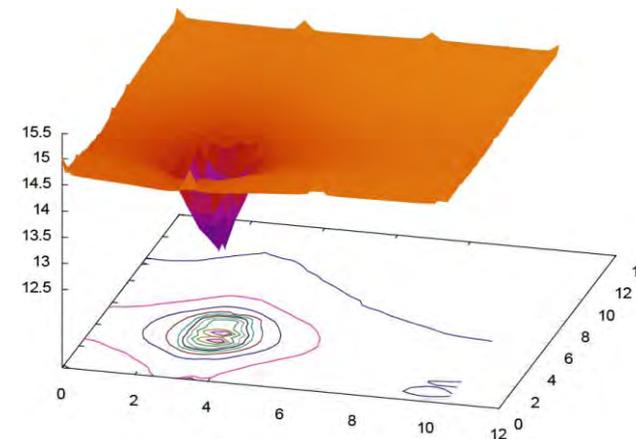
# システムの概要



トラジェクトリ解析

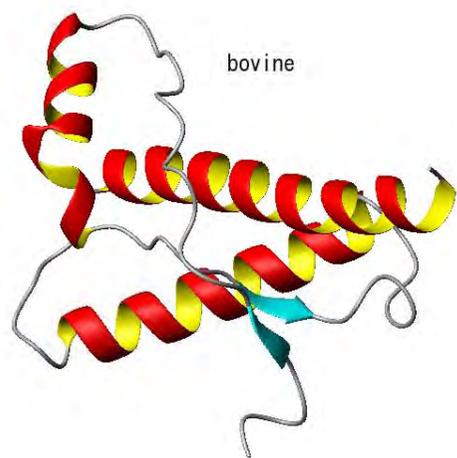


ヒストグラム作成

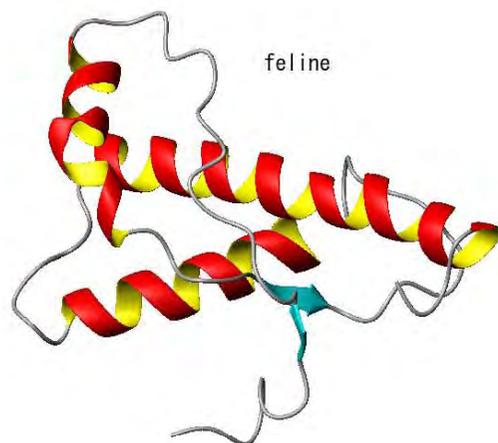


大規模分子動力学シミュレーション

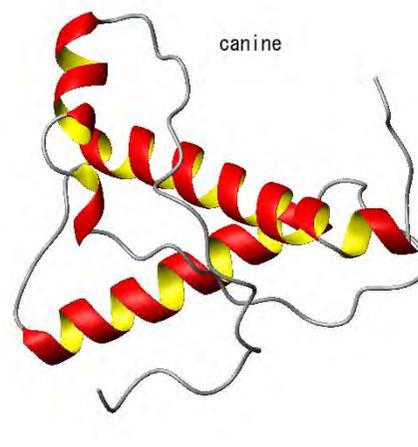
# 様々な種のプリオンタンパク質の NMRで決定された構造



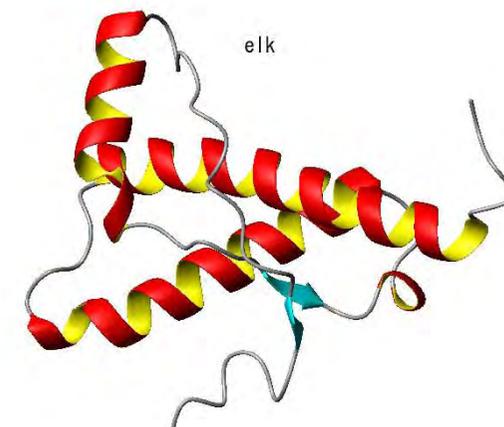
bovine (ウシ)



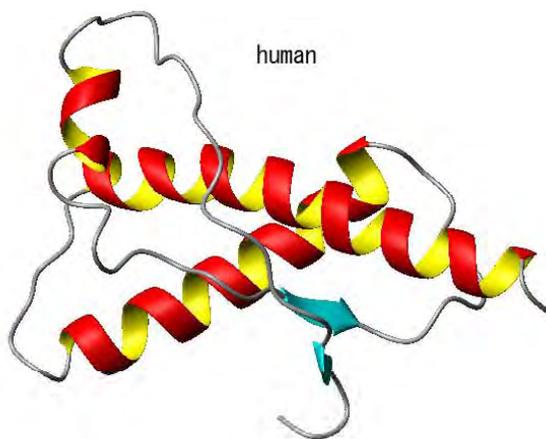
feline (ネコ)



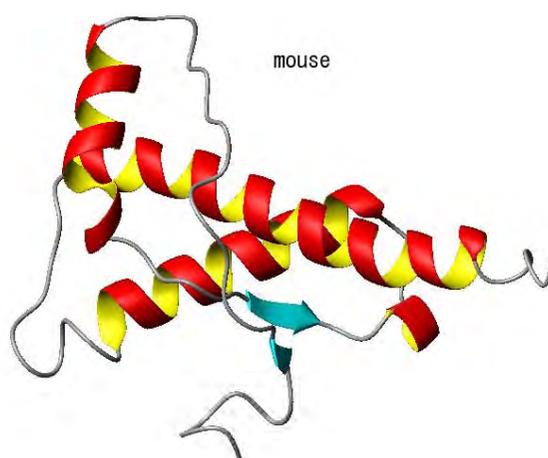
canine (イヌ)



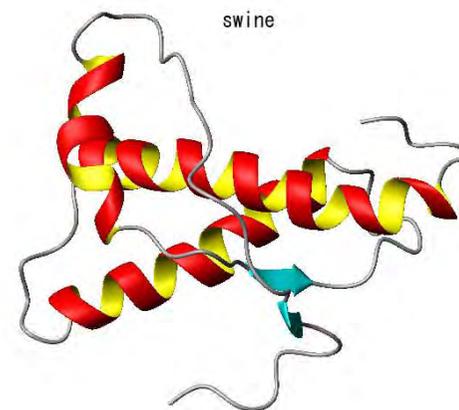
elk (シカ)



human (ヒト)



mouse (マウス)



swine (ブタ)

# プリオンタンパク質の種による配列の違い “種の壁”をどう考えよう？！

	$\beta 1$	$\alpha 1$	$\beta 2$	$\alpha 2$	$\alpha 3$
ウシ bPrP	LGGYMLGSAMSRPLIHFGSDYEDRYRENMHRYPNQVYYRPVDQYSNQNNFVHDCVNITVKQHTVTTTTKGENFTETDIKMMERVVEQMCITQYQRRESQAYYQRGAS				
ヒツジ ovPrP	.....N.....Y.....H/R.....I.....				
イヌ cPrP	.....N.....Y...D.....R.....M.I.....V...K..E.....				
ネコ fPrP	.....N.....Y.....R.....M.I.....V...K..E...R..				
ブタ scPrP	.....Y.....S.....V..I.....K.YE..A.....				
マウス mPrP	.....M...N.W.....Y.....I.....V.....V...K.....DGRR..				

Lysek et al., PNAS, 2004より

イヌとネコのプリオンタンパク質は、上記の範囲では4箇所しか異ならないが・・・  
BSEからの伝搬実験によれば、

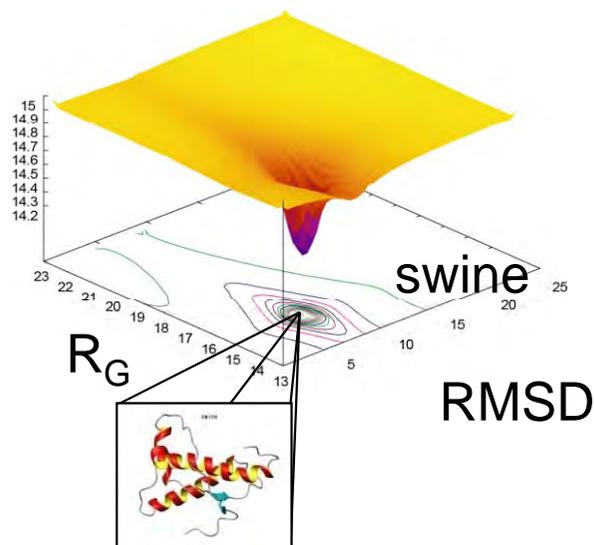
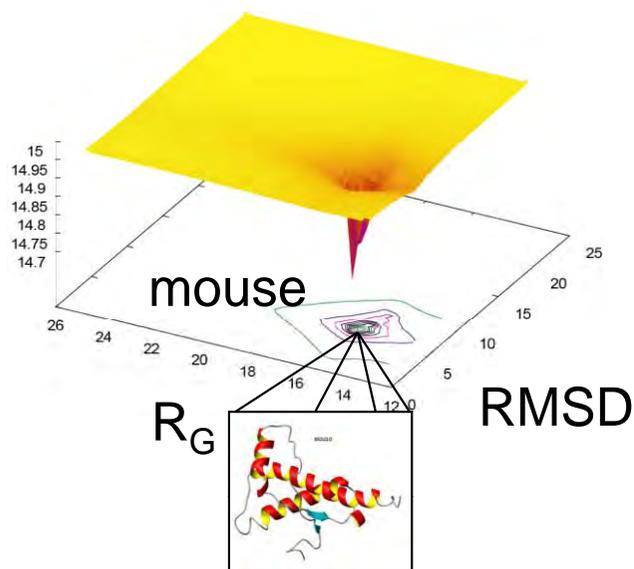
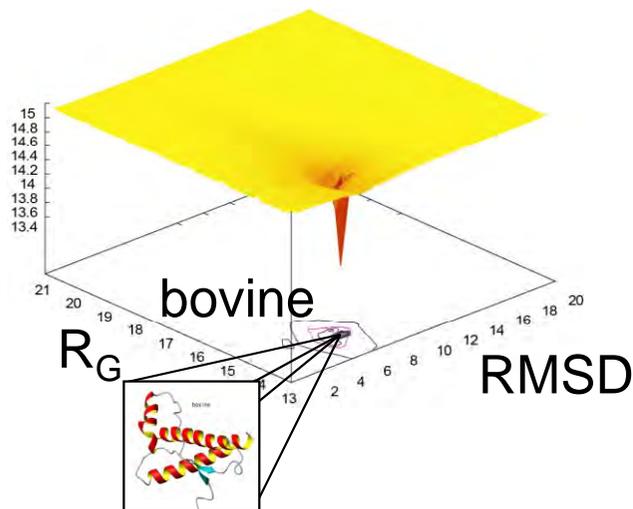
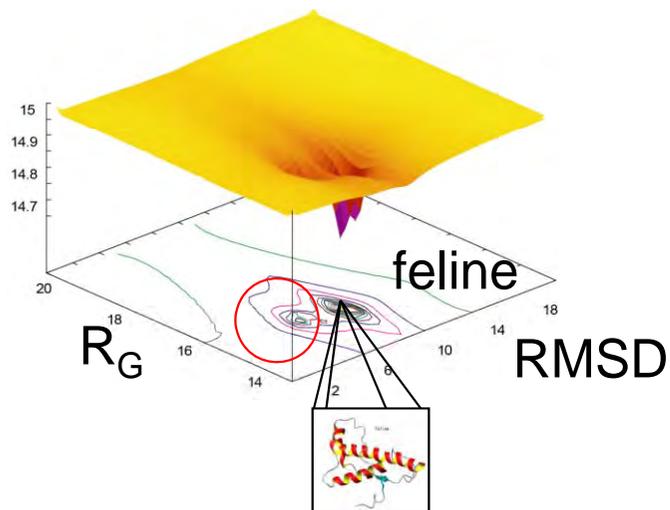
feline(ネコ)は容易にプリオン病に感染する



この違いは何だろう？！

一方、TSE infected canine(イヌ)は現在まで報告されていない

# 500KにおけるRgとrmsdの自由エネルギー地形解析



種の壁を容易に越える種には、アンフォールディングシミュレーションから、準安定状態と言える構造があることを発見

# 高速で大規模な計算の先に 何が見えるだろうか？

- フォールディング原理の解明
- タンパク質の設計
- 創薬への応用

# シニョリントンパク質

- **CM001 Chignolin (stable control sequence)**

**GYDPETGTWG**



CM001: Chignolin 1UAO  
determined by NMR

- **GPM012 (unstable control sequence)**

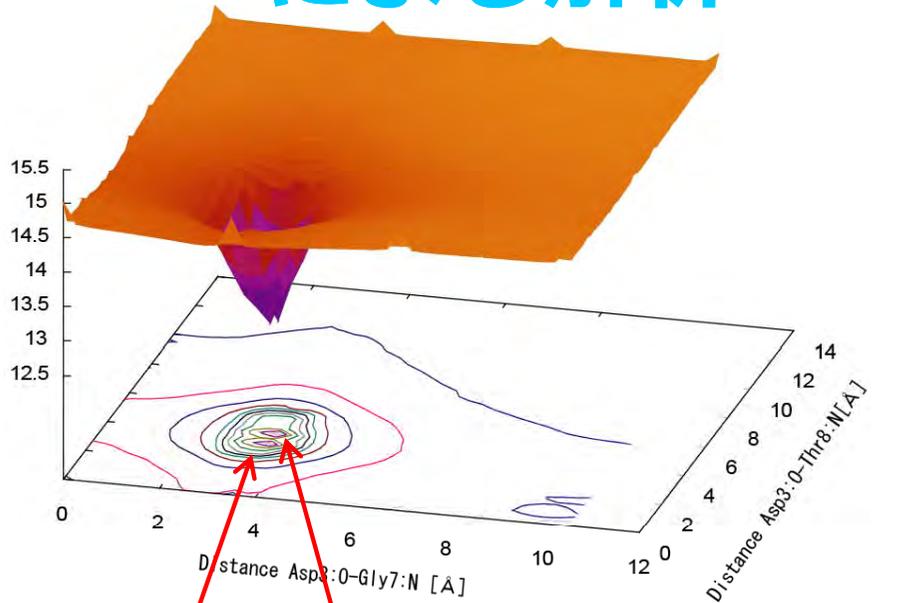
**GYDDATKTFG**



GPM012: 45-52 residues from 1PGA  
and added Gly to N- & C- terminus region

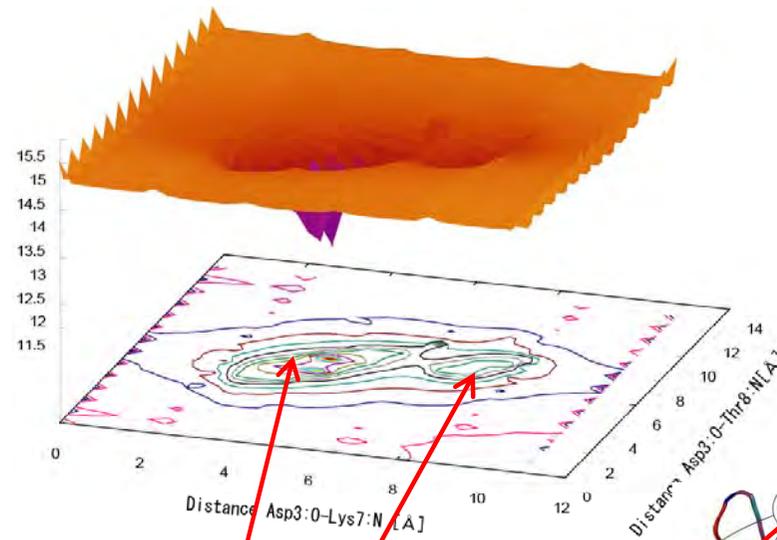
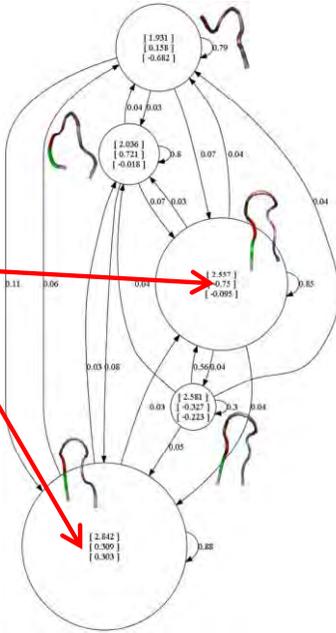
- **ff99SB amber force field, 315K, Generalized Born Water Motel, NTP, 1 $\mu$ S**  
(all simulations are executed on BlueProtein)
- **Both condition's simulations are required 230,400 core hours.**

# 自由エネルギー解析と隠れマルコフモデル による解析



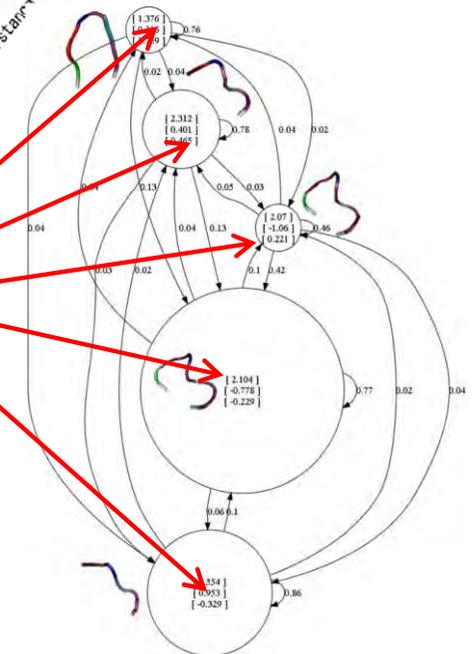
Two stable structure's cluster.

CM001

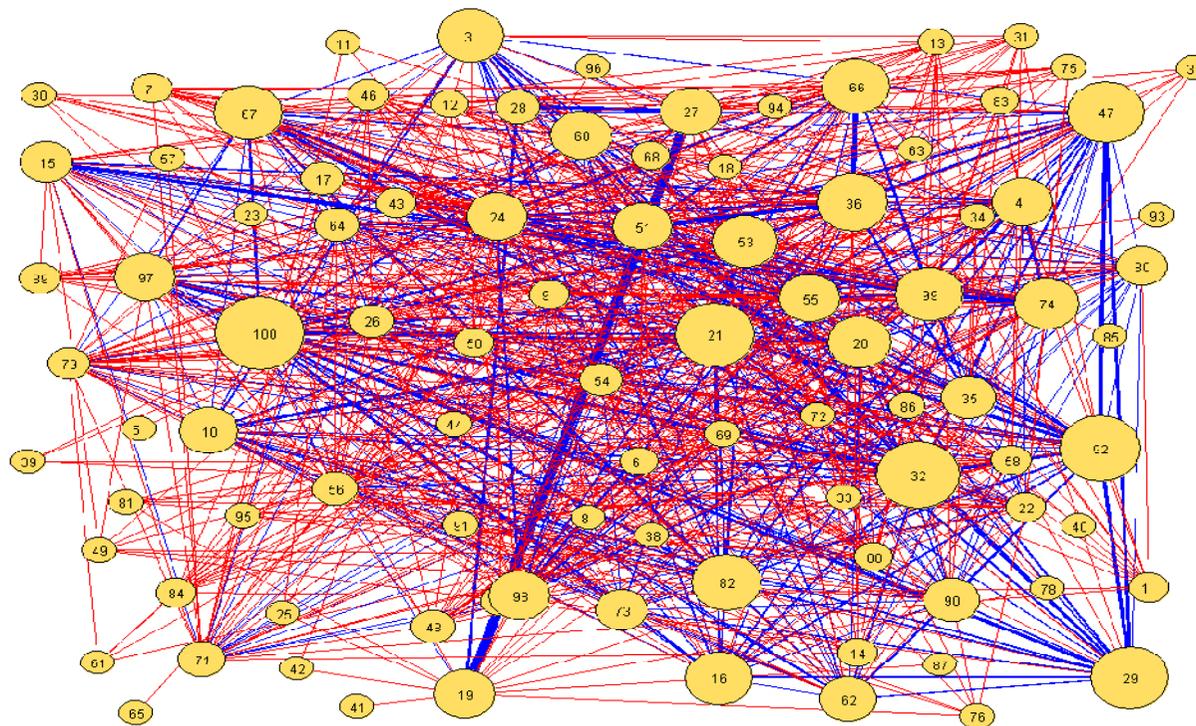


There are no specific structures.

GPM012



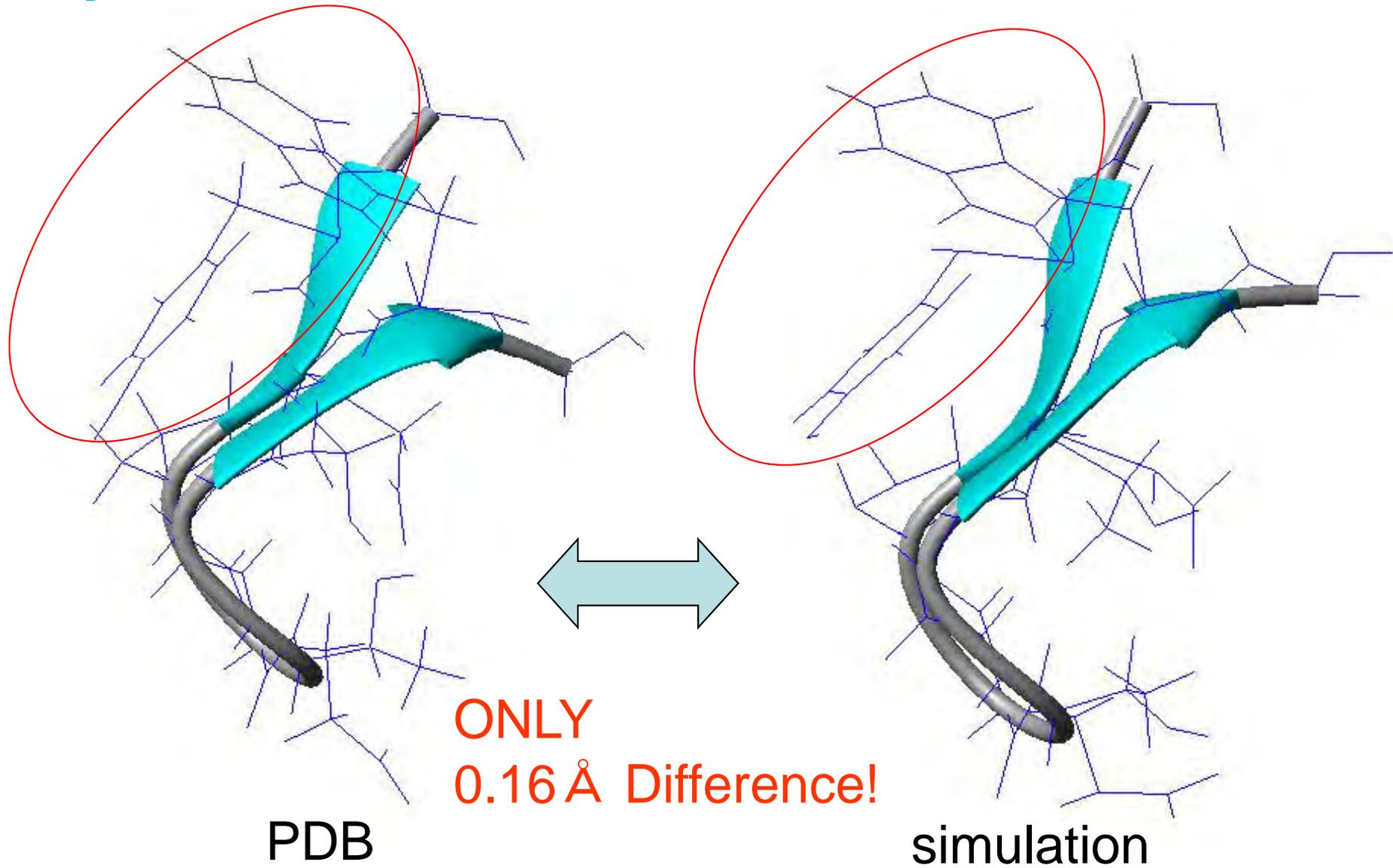
# タンパク質のフォールディング 経路のネットワーク解析



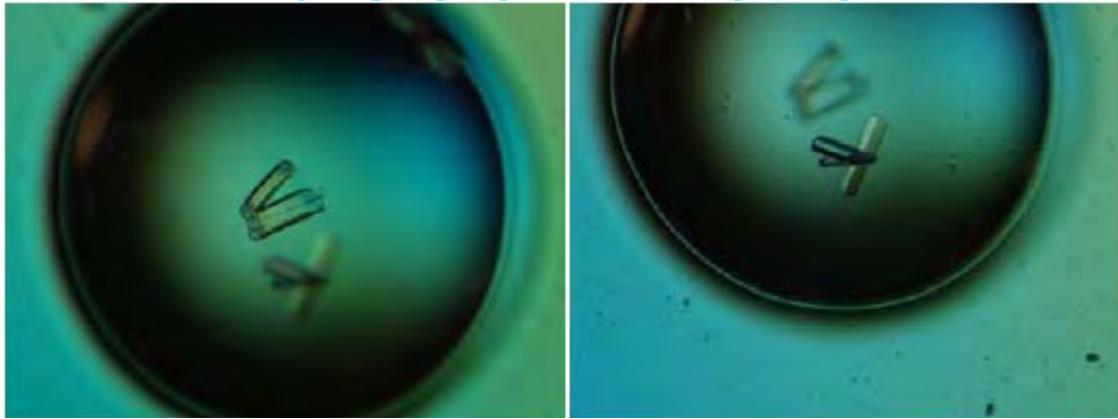
Red lines: single directional transitions

Blue lines: bi-directional transitions

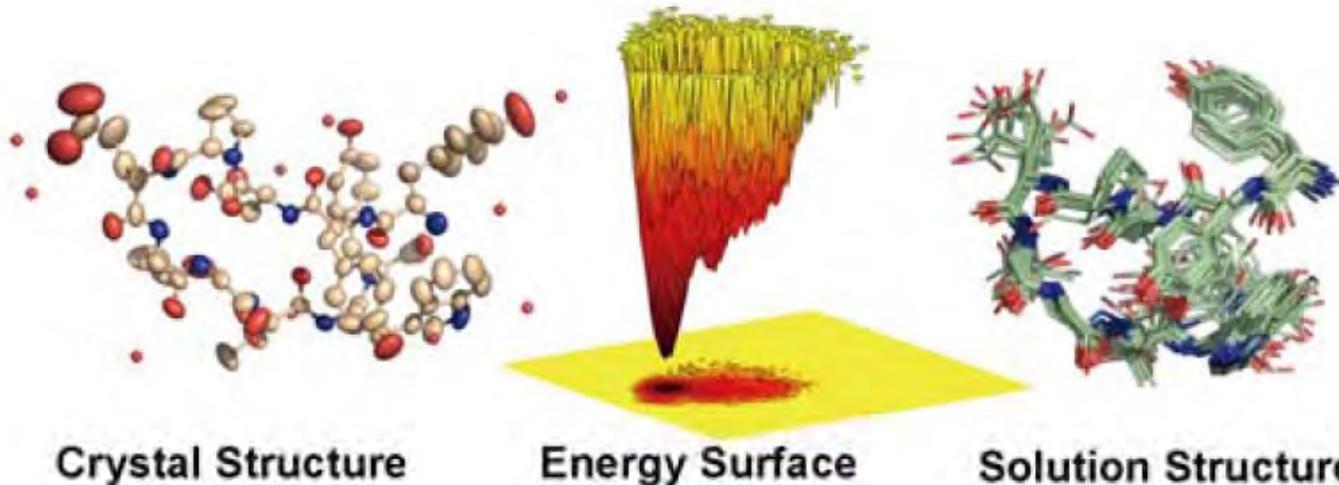
K-means clustering of PCA results



# Molecular Dynamics Simulation Based Protein Design



Collaboration:  
Dr. Shinya Honda  
AIST



Novel protein design in  
20 residues or more

New Sequence: YYDPETGTWY

S. Honda et al., "Crystal Structure of a Ten-Amino Acid Protein",  
*Journal of the American Chemical Society*, 130,  
pp.15327-15331, 2008

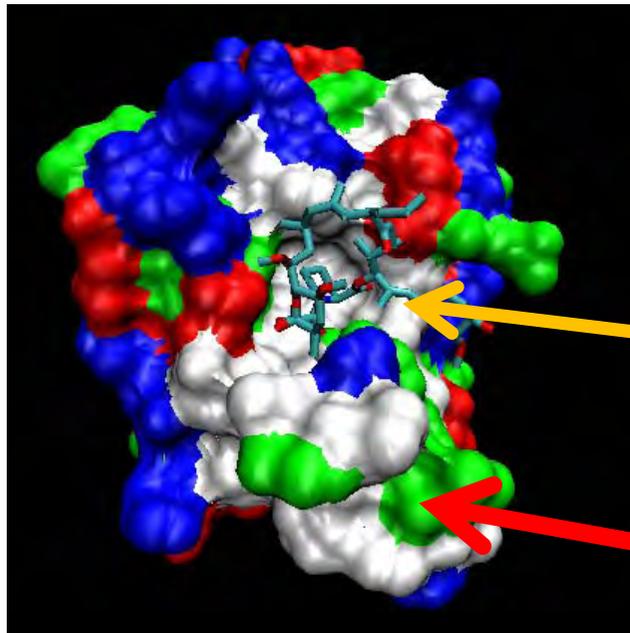
# 高速で大規模な計算の先に 何が見えるだろうか？

- フォールディング原理の解明
- タンパク質の設計
- 創薬への応用

# 結合自由エネルギー解析

To obtain binding free energy of protein and ligand

affinity between protein and ligand

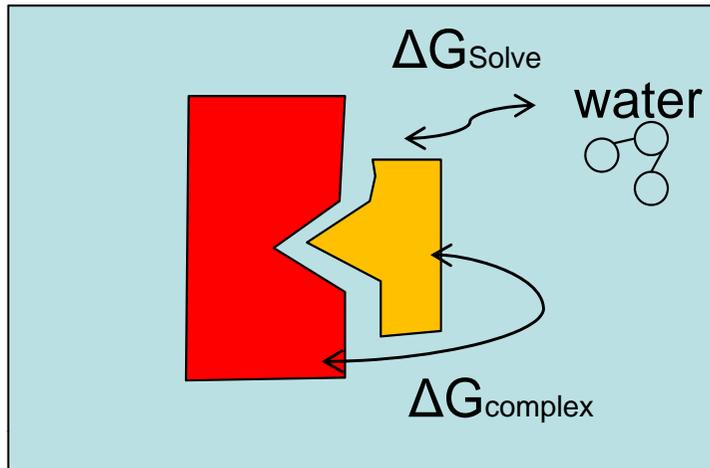


リガンド

タンパク質

We developed a system to obtain the binding free energy between protein and ligand with higher accuracy.

# Binding Free Energy $\Delta G$



$$\Delta G_{\text{Solve}} \equiv \Delta G_{\text{Solv}}^{\text{C}} + \Delta G_{\text{Solv}}^{\text{vdw}}$$

$$\Delta G_{\text{Complex}} \equiv \Delta G_{\text{Complex}}^{\text{C}} + \Delta G_{\text{Complex}}^{\text{vdw}}$$

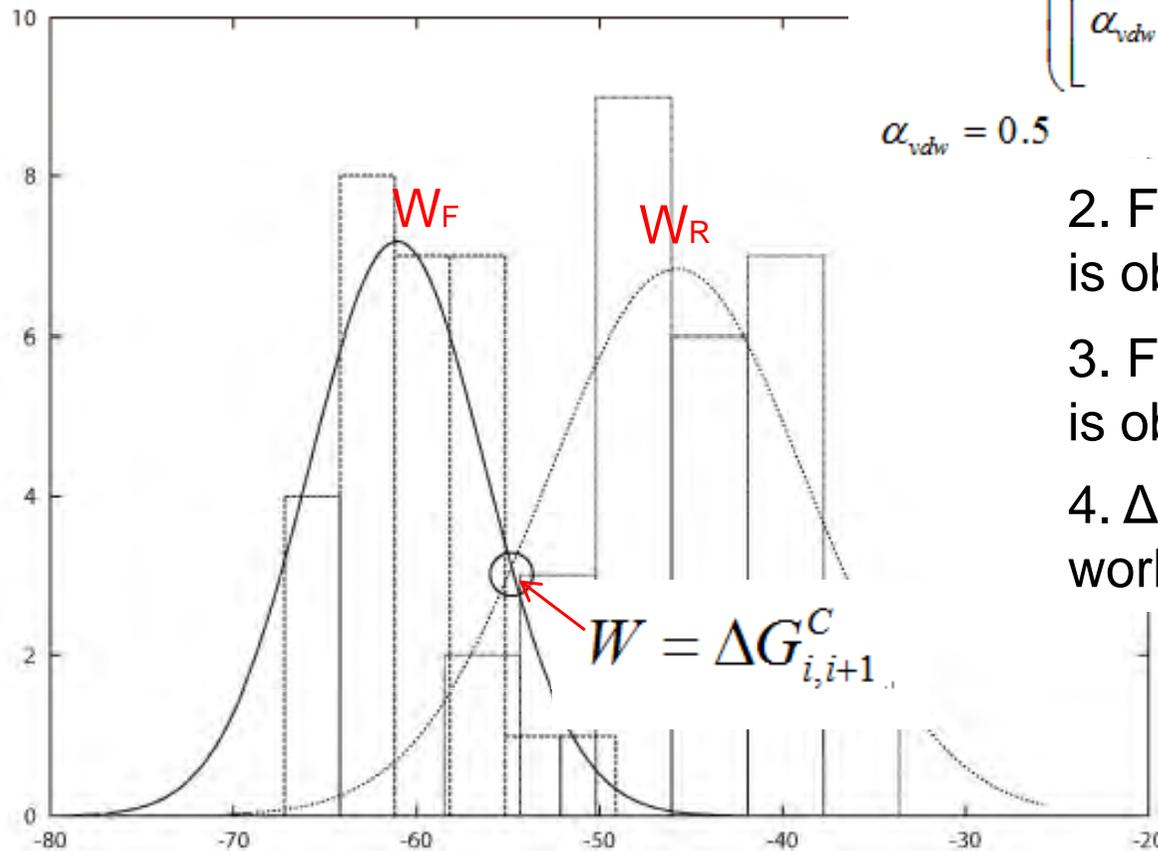
$$\Delta G \equiv \Delta G_{\text{Complex}} - \Delta G_{\text{Solv}}$$

$$= \Delta G_{\text{Complex}}^{\text{C}} + \Delta G_{\text{Complex}}^{\text{vdw}} - \Delta G_{\text{Solv}}^{\text{C}} - \Delta G_{\text{Solv}}^{\text{vdw}}$$

# Binding Free Energy $\Delta G$ (2)

1. Molecular Dynamics Simulation on many coupling constant  $\lambda_c$ .

$$0 \leq \lambda_c \leq 1$$



$$U(\lambda_c, \lambda_{vdw}) = \sum_{i,j} \lambda_c \frac{q_i q_j}{r_{ij}}$$

$$+ \lambda_{vdw} 4 \epsilon_{ij} \left( \frac{1}{\left[ \alpha_{vdw} (1 - \lambda_{vdw}) + \left( \frac{r_{ij}}{\sigma_{ij}} \right)^6 \right]^2} - \frac{1}{\alpha_{vdw} (1 - \lambda_{vdw}) + \left( \frac{r_{ij}}{\sigma_{ij}} \right)^6} \right)$$

$$\alpha_{vdw} = 0.5$$

2. Forward path (condition i to i+1) work is obtained from work distribution.

3. Reverse path (condition i+1 to i) work is obtained from work distribution.

4.  $\Delta G^C_{i,i+1}$  is obtained from cross point of work distributions.

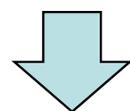
$$\Delta G^C = \sum_{i=0}^{N-1} \Delta G^C_{i,i+1}$$

# Simulation Target and condition

We used 2JUP from the Protein Data Bank (PDB) as a calculation object in this study.

$0 \leq \lambda_c \leq 1$  : 0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5,  
0.6, 0.7, 0.8, 0.9, 1

$0 \leq \lambda_{vdw} \leq 1$  : 0, 0.05, 0.1, 0.15, 0.2, 0.25,  
0.3, 0.35, 0.4, 0.45, 0.5, 0.55,  
0.6, 0.65, 0.7, 0.75, 0.8, 0.85,  
0.9, 0.95, 1.0



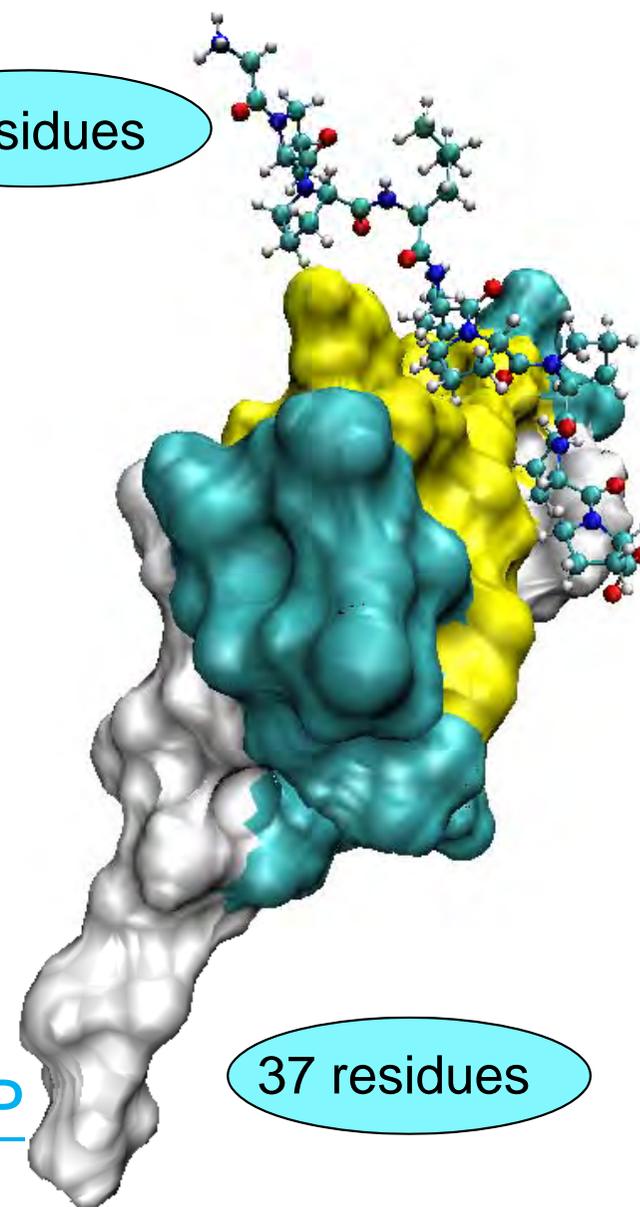
×30 different initial velocity simulations

We totally calculated 990 times 1ns NPT ensemble MD simulations.

9 residues

2JUP

37 residues



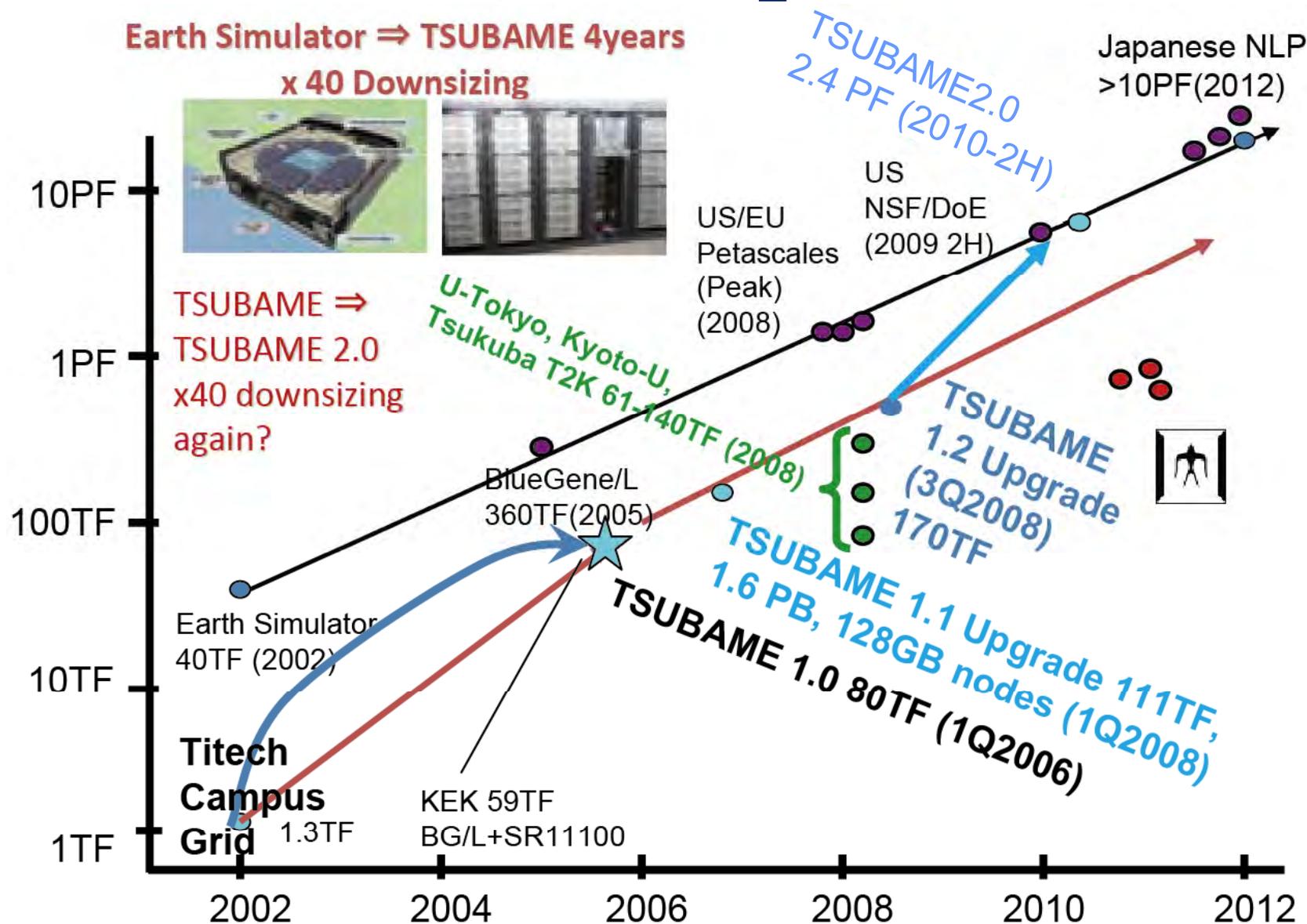
# 今年秋にTSUBAME2.0 を導入!



**世界トップレベルのスパコンへ  
今年秋に更新予定!**



# 日本初・世界最高クラスの 「ペタコン」 TSUBAME2.0



# TSUBAME2.0の特徴

TOKYO INSTITUTE OF TECHNOLOGY  
Pursuing Excellence

## 1. 世界一クラスのペタコン: 倍精度2.4ペタフロップス

- 最新型GPU・CPUによるベクトル・スカラー混合アーキテクチャ: 圧倒的計算性能・バンド幅
  - 2.4 Petaflops, メモリバンド幅0.72ペタバイト/s (地球シミュレータの4.3倍)
- 世界最高速の200テラビット級のバイセクションバンド幅を実現した光ネットワーク
- 最新のSSDなどを活用した多階層ストレージによる15PBの大規模化と高速化(0.66TB/s)

## 2. 世界一環境「グリーンスパコン」

- TSUBAME1同等のエネルギー消費・30倍の電力性能比・PUE=1.28・「Green500」世界一?
  - GPUマルチコアCPUの大幅活用による高効率化
  - 最先端の冷却法: 密閉型の水冷ラック, 負荷集中での高熱勾配, 夏季の負荷キャップ
  - JST-CREST Ultra Low Power-HPCの成果の応用
- => PUE 1.28以下(他の国内のセンターは1.7~2.0程度)

## 3. 「クラウドスパコン」: 総合的学内ITホスティング

- Windows HPC/Linuxなど複数OS, 複数環境のサポート
- 仮想化による種々のデータセンターホスティング機能のサポート
- 教育用/Kioskシステムのバックエンド化、全学アカウント・総合的学内ITの集中化・費用削減

## 4. 東工大GSICでの種々の基礎研究・メーカー共同開発の成果

- JST-CREST “Ultra Low Power HPC”, 科研特定領域「情報爆発」, 文科省-国立情報研 NAREGI/CSI等、多くの基礎研究
- 海外企業とも: NVIDIA CUDA CoE (日本初), Microsoft TCI 包括共同研究契約
- NEC, HP, NVIDIA, Microsoft, Voltaire, DDN 等との共同開発体制

# TOKYO TECH Pursuing Excellence TSUBAME2.0 の特徴

## ベクトル・スカラ混合型アーキテクチャ

- Intel のx64 CPU コアによる「スカラ演算」
- 最新型 Fermi コアの NVIDIA Tesla GPGPU による「ベクトル演算」
  - NVIDIA Tesla M2050 を約4200台搭載
- **GPGPUクラスター環境を共同利用により日本全国へ提供**
  - 日本における GPGPUの普及へ貢献
  - TSUBAME 1.2 の特徴を継承
- **GPU コンピューティング研究会**
  - CUDA プログラミング講習会
  - GPU セミナー



nVIDIA Tesla M2050  
GPUコンピューティングモジュール

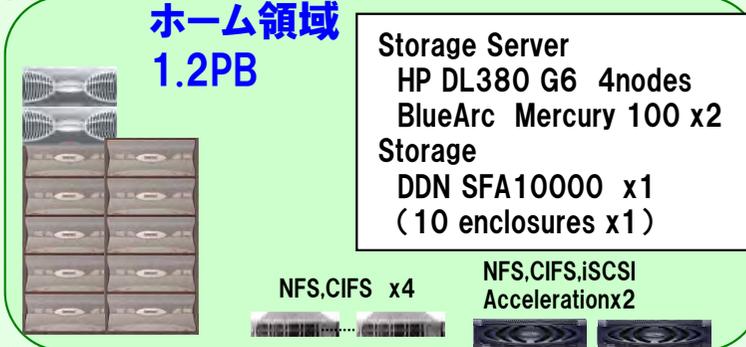
# TSUBAME2.0 システム概念図

ペタバイト級HDD ストレージ: Total **7.13PB** (Lustre + home)

並列ファイルシステム領域  
**5.93PB**



ホーム領域  
**1.2PB**



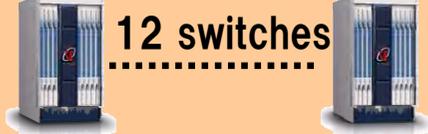
Sun SL8500  
テープシステム  
~8PB

SuperTitenet

SuperSinet3

ノード間相互結合網: フルバイアクションノンブロッキング光QDR

Core Switch



Voltaire Grid Director 4700  
IB QDR: 324ports

Edge Switch



Voltaire Grid Director 4036  
IB QDR : 36 ports

Edge Switch (w/ 10GbE)



Voltaire Grid Director 4036E  
IB QDR:34ports  
10GbE: 2ports

管理サーバ群

計算ノード: **2.4PFlops (CPU+GPU)**

Thin計算ノード  
**224.69TFlops (CPU)**



1408nodes

(32node x44 Ranks)

NEW DESIGN Hewlett Packard CPU+GPU  
High BW Compute Nodes x 1408  
Intel Westmere-EP 2.93GHz  
(TB 3.196GHz) 12Cores/node  
Mem:55.8GB (=52GiB) or 103GB (=96GiB)  
GPU NVIDIA M2050 515GFlops,  
3GPUs/node  
SSD 60GB x 2 120GB ※55.8GB node  
120GB x 2 240GB ※103GB node  
OS: Suse Linux Enterprise + Windows HPC

4224 NVIDIA "Fermi"  
GPUs

Memory Total:80.55TB

Medium計算ノード



24 nodes 6.14TFLOPS

HP 4Socket Server 24nodes  
CPU Nehalem-EX 2.0GHz  
32Cores/node  
Mem:137GB (=128GiB)  
SSD 120GB x 4 480GB  
OS: Suse Linux Enterprise

Fat計算ノード



10 nodes 2.56TFLOPS

HP 4Socket Server 10nodes  
CPU Nehalem-EX 2.0GHz  
32Core/node  
Mem:274GB (=256GiB) x8  
549GB (=512GiB) x2  
SSD 120GB x 4 480GB  
OS: Suse Linux Enterprise

PCI-E gen2 x16 x2slot/node

GSIC:NVIDIA Tesla S1070GPU (34 units)

# クラウド型グリーンスパコン

## TSUBAME2.0 の主な特徴(1/3)

### 演算性能

- 汎用CPUとGPU型アクセラレータによる**2.4PFLOPS**の演算性能と毎秒 0.7 PBの高メモリバンド幅

### 通信性能

- 計算機間の通信は、Fat Tree接続によるフルバイセクション・ノンブロッキング

### ストレージ

- ペタバイト級ストレージとして、7 PB強のディスク
- 最新SSD技術と高密度HDDによる毎秒 0.66 TBの合算データ I/O 性能

### 省スペース

- 計算ノード部分は僅か 200 平方メートルの設置面積

# クラウド型グリーンスパコン

## TSUBAME2.0 の主な特徴(2/3)

- 「クラウド型スパコン」

- 教育や事務系サービスへの仮想化機能を実現

- LinuxおよびWindows HPC Serverという2つのOS環境の選択
- 動的なプロビジョニングを行える資源配分機能
- 仮想化環境の実現

- 「グリーンスパコン」

- システム及び設備冷却系を含む省エネ設計を実現

- ピーク消費電力の抑制
- 省エネ運用環境の実現

# クラウド型グリーンスパコン

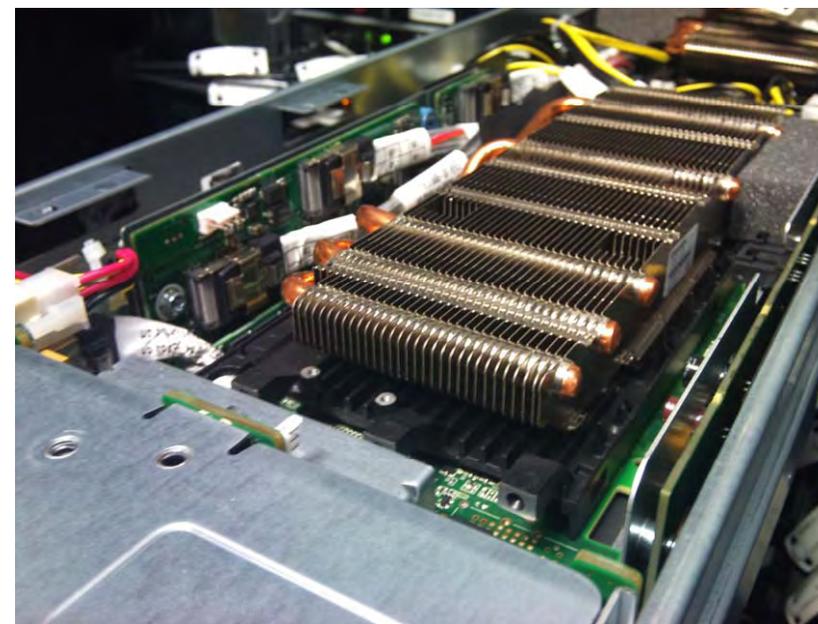
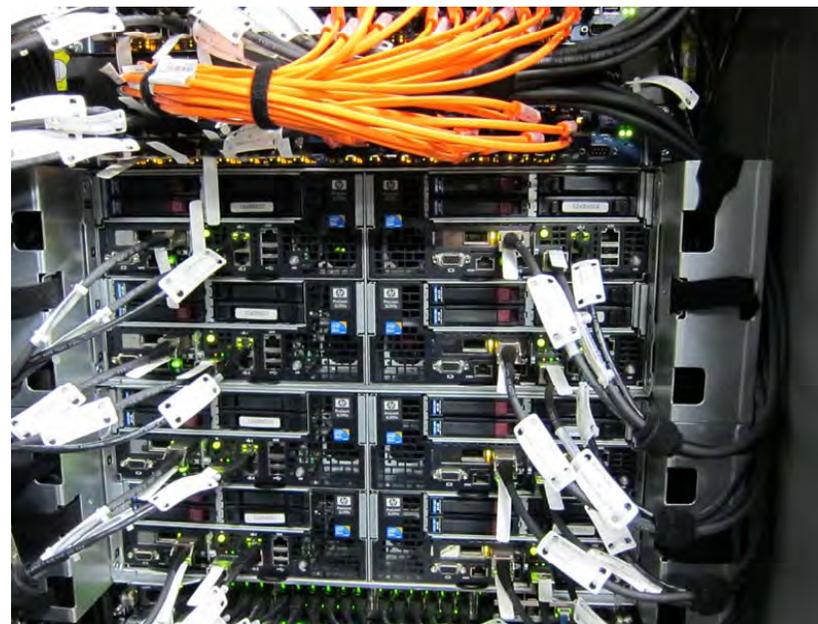
## TSUBAME2.0 の主な特徴(3/3)

- **ベクトル・スカラ混合型アーキテクチャ**
  - Intel のx64 CPU コアによる「スカラ演算」
  - 最新型 Fermi コアの NVIDIA Tesla GPGPU による「ベクトル演算」
    - NVIDIA Tesla M2050 を約4200台搭載
- **GPGPUクラスター環境を共同利用により日本全国へ提供**
  - 日本における GPGPUの普及へ貢献
  - TSUBAME 1.2 の特徴を継承
- **GPU コンピューティング研究会**
  - CUDA プログラミング講習会
  - GPU セミナー



nVIDIA Tesla M2050  
GPUコンピューティングモジュール

# TSUBAME2.0 11月稼働を目指して！



# TSUBAME の共同利用

## 平成19年度～ 民間企業へ TSUBAMEを提供

- 文部科学省 先端研究施設共用促進補助事業

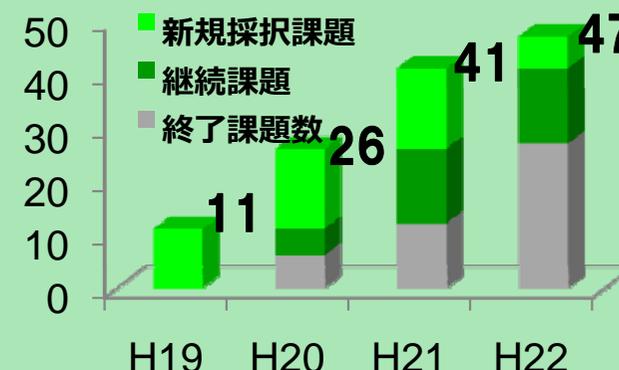
## 平成21年度～ TSUBAME 共同利用

- 東工大独自事業として、外部利用制度の確立



## 「産業利用」にて大きな成果

4年間で民間企業の47課題を採択・実施



成果報告会 6/29(火) 13:00～ 蔵前会館  
東工大・TSUBAME共用促進シンポ

文部科学省より最高の評価

(22機関中、3機関のみ)

## 平成22年度～ 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点

- 「ネットワーク型」の共同利用・共同研究拠点

**日本最先端のスパコン環境を提供し、学術・産業・社会へ貢献**  
**最新GPGPUクラスター環境を提供し、GPGPUの普及へ貢献**

# GPU コンピューティング研究会

東京工業大学・学術国際情報センターの中の研究会活動

## 活動内容：

- ・ 月に一度の CUDA 講習会
- ・ 2~3カ月毎にセミナー
- ・ 国際ワークショップ
- ・ 年一回シンポジウム
- ・ ML を通じた情報交換



**東工大の教員・学生だけでなく、他大学・研究機関、民間企業の方も参加（入会）可能。基本的に無料。**

**<http://gpu-computing.gsic.titech.ac.jp/>**