

2006年6月19日  
独立行政法人 理化学研究所  
インテル株式会社  
日本 SGI 株式会社

## 理化学研究所に、日本 SGI、インテルが協力 1 ペタ FLOPS の高速専用コンピュータ・システムを構築 - 新薬の開発期間の短縮化とタンパク質の働きを高度にシミュレーション -

独立行政法人理化学研究所（略称:理研、理事長:野依 良治、本所:和光市広沢）と日本 SGI 株式会社（社長:和泉 法夫、本社:東京都渋谷区）およびインテル株式会社（代表取締役共同社長:吉田 和正/ロビー・スウィヌン、本社:東京都千代田区）は、理論ピーク性能 1 ペタフロップス (PFLOPS)<sup>注1</sup> (1 秒間に 1,000 兆回の演算を行う能力) を実現する分子動力学シミュレーション専用コンピュータ・システム「MDGRAPE<sup>注2-3</sup> (エムディーグレープ・スリー)」の構築に成功しました。

たとえば、この性能をスーパーコンピュータの性能ランキング「TOP500 (www.top500.org)」(2006年6月16日現在) リストと比べると、現在第一位にランクされている汎用スーパーコンピュータは、米国ローレンスリバモア研究所の保有する IBM BlueGene/L であり、その理論ピーク性能は 360 テラフロップス (TFLOPS) です。今回開発した専用計算機 MDGRAPE-3 では、TOP500 リストの基準となる「Linpack ベンチマーク」を実行できないため、性能を直接比べることはできませんが、理論ピーク性能で約 3 倍に相当するものです。

本システムは、理研の開発した世界最高速の分子動力学シミュレーション専用 LSI チップである「MDGRAPE-3 チップ」を 24 個搭載したユニット 201 台 (計 4808 チップ<sup>注3</sup>) に、インテル社製の最新のデュアルコア インテル® Xeon® プロセッサー 5000 番台 (開発コード名: Dempsey) コアを 256 個搭載した並列サーバー 64 台と、インテル® Xeon® プロセッサー 3.2GHz (2 次キャッシュ 1MB) コアを 74 個搭載した並列サーバー 37 台を接続した大規模な構成です。最新鋭のデュアルコア・プロセッサーを用いた信頼性の高い大規模クラスタの利用により、高性能の専用コンピュータ・システムをより効率よく構築することができるようになりました。

本成果は、横浜研究所 (小川智也所長) ゲノム科学総合研究センター (榊佳之センター長) システム情報生物学研究グループ高速分子シミュレーション研究チームの泰地真弘人チームリーダー、成見哲研究員、大野洋介研究員ら<sup>注4</sup> とハイパフォーマンスコンピューティング (HPC) 分野で大規模並列システムの開発・構築で実績豊富な日本 SGI が共同研究に基づくシステム構築を行い、インテルが最新プロセッサーの早期提供およびシステムの最適化などへの技術支援をしたものです。

分子生物学の進歩により、生物の仕組みを原子レベルで研究することが可能になりつつあり、コンピュータシミュレーションによる生命現象の解明が現実のものとなりつつあります。また新薬の研究開発では、医薬品の候補物質のタンパク質への結合のしやすさをシミュレーションで高速・高精度に検証することが期待されており、分子動力学シミュレーションの技術は重要度を増しています。そこで、高性能分子シミュレーション分野の研究をリードする理研は、2002 年度にペタフロップス級の分子動

力学計算専用計算システムの開発に着手し、2004年8月には本システムの心臓部である高速な専用プロセッサ「MDGRAPE-3 チップ」の開発に成功しています。今回、構築した高速専用コンピュータ・システムは、新薬の開発期間の短縮に役立つことが期待される他、タンパク質の働きをシミュレーションで明らかにすることにより、病気を引き起こす仕組みの解明や、生物に学んだナノマシンの開発のための重要なツールになります。

#### ●デュアルコア インテル® Xeon® プロセッサについて

今回構築したシステムに搭載されている最新のデュアルコア インテル Xeon プロセッサ 5000 番台は、先進の 65 ナノメートル・プロセス技術で製造され、デュアルコア、インテル® バーチャライゼーション・テクノロジー、FB-DIMM メモリのサポートや高速化されたシステム・バス (1066MHz) など、数々の革新技術をサポートしています。同システムは、今後のさらなる性能向上に向け、次世代のマイクロアーキテクチャ、インテル® Core™ マイクロアーキテクチャに基づくデュアルコア インテル Xeon プロセッサ 5100 番台 (開発コード名:Woodcrest) に移行する予定で、すでに検証作業を開始しています。また、今回構築したシステムではインテル®コンパイラが使用されており、理研プログラム・コードのインテル Core マイクロアーキテクチャへの最適化で、相乗的な性能向上を目指します。

#### ●分子動力学シミュレーションの応用

このシステムは、文部科学省が科学技術分野の重要課題として取り組んでいる「タンパク 3000 プロジェクト<sup>注5)</sup>」の一環であり、タンパク質の構造を解明した後、創薬を進める際の大規模シミュレーションが容易に実現されることとなります。

また、同システムにより医薬品候補物質のタンパク質への結合しやすさを精度よく見積もることが可能となり、新薬の開発期間短縮に役立つことが期待されます。さらに、タンパク質の精緻な構造を原子レベルで解き明かすことが可能となり、タンパク質が関与して病気を引き起こす原因を原子レベルで解明するなど、ナノレベルの研究で強力なツールとなります。

### <ご参考>

#### ●本システムは、6月24日に開催される理研横浜研究所一般公開

(<http://www.yokohama.riken.jp/open/20060624/index.html>)にて公開される予定です。研究の詳細は、研究チームのサイト (<http://mdgrape.gsc.riken.jp/>) をご参照ください。

注 1) フロップス (FLOPS) =1 秒間に何回浮動小数点演算ができるかを表す単位。  
本システムは粒子間に働く力を 1 秒に 27 兆 9000 億回計算できる。クーロン力 1 対の計算に要する演算量を 36 演算としたとき、1 秒あたり 1000 兆回の演算能力 (1 ペタフロップス) を有することになる。(システムは 300MHz 動作の MDGRAPE-3 チップ 3,861 個、250MHz 動作の MDGRAPE-3 チップ 947 個からなり、各チップが 1 サイクルあたり 20 対の力を計算する。これにより

1 秒に 27 兆 9000 億回の力の計算を実現している。)

- 注 2) MDGRAPE: 東京大学が 1989 年から天文シミュレーション計算機 GRAPE を開発。その後、理研は同システムをベースに分子動力学専用システムとして MDM (MDGRAPE-2) を開発、2004 年 8 月には世界最高速の MDGRAPE-3 チップを開発。
- 注 3) 全部で MDGRAPE-3 チップ 4,824 個であるが、内 16 個不良があり、現在 4,808 個となっている。なお、不良チップがあってもそれを使わずに正しく計算できるようになっている。
- 注 4) 本システムの構築にあたっては、理研所内の以下の研究室の協力を得ています。情報基盤センター(センター長 姫野龍太郎)、フロンティア研究システム (システム長 玉尾 皓平) 時空間機能材料研究グループ (グループディレクター 国武豊喜) 次世代ナノパターンニング研究チーム (チームリーダー 小野寺純一、副チームリーダー 藤川茂紀)、中央研究所 (所長 茅幸二) 戎崎計算宇宙物理研究室 (主任研究員 戎崎俊一)
- 注 5) タンパク 3000 プロジェクト: 文部科学省が 2002 年 4 月から開始した国家プロジェクト「新世紀重点研究創生プラン (RR2002)」のひとつとして推進しているもので、タンパク質のメカニズムも含めて、そのタンパク質の機能を解明するポスト・ゲノムの中核的取り組み。

## <各社紹介>

### ●独立行政法人理化学研究所

独立行政法人理化学研究所は、科学技術 (人文科学のみに係るものを除く。) に関する試験及び研究等の業務を総合的に行うことにより、科学技術の水準の向上を図ることを目的とし、日本で唯一の自然科学の総合研究所として、物理学、工学、化学、生物学、医科学などにおよぶ広い分野で研究を進めています。研究成果を社会に普及させるため、大学や企業との連携による共同研究、受託研究等を実施しているほか、知的財産権等の産業界への技術移転を積極的にすすめています。

([http://www.riken.jp/index\\_j.html](http://www.riken.jp/index_j.html))

### ●インテル株式会社

シリコンの技術革新で世界をリードするインテルは、人々の仕事と生活をさらに豊かにする先進的な技術と製品を開発、イニシアティブを推進していきます。インテルに関する情報は、<http://www.intel.co.jp> で入手できます。

### ●日本 SGI 株式会社

日本 SGI は、最先端科学の研究機関をはじめ HPC 市場の大規模並列システムの構築で、豊富な経験と技術を持ちます。そしてリサーチ&サイエンス分野のソリューション・ビジネスにおいて、2005 年 7 月に分子動力学シミュレーション分野に進出し、理研と共同で分子動力学シミュレーション専用機を販売しています。

(日本 SGI のリサーチ&サイエンスの情報は、<http://www.sgi.co.jp/solutions/science/>)

報道関係者からのお問い合わせ先

(MDGRAPE-3 について)

独立行政法人理化学研究所

ゲノム科学総合研究センター

高速分子シミュレーション研究チーム

チームリーダー 泰地 真弘人

Tel : 045-507-2508/2510 / Fax : 045-507-2524

Mail : taiji@gsc.riken.jp

(報道担当)

独立行政法人理化学研究所 広報室 報道担当

Tel : 048-467-9272 / Fax : 048-462-4715

Mail : koho@riken.jp

インテル株式会社 広報室 山下

Tel : 03-5223-9100 (代表)

日本 SGI 株式会社 広報 菊池、中西

Tel : 03-5488-1834 (広報直通) / Fax : 03-5420-7201

Mail : koho@sgi.co.jp



(写真)MDGRAPE-3 システム(左)と MDGRAPE-3 ボード(右)

## 1. 背景

国内における現代的な科学計算専用計算機の開発は、泰地チームリーダーらが18年前に開発した統計物理専用計算機 m-TIS<sup>\*1</sup> に始まり、その後東京大学で開始された GRAPE (GRAvity PipE) 計画によって大きく発展しました。これはもともと無数にある星と星との力学(引力)を計算し、銀河などの成り立ちや振る舞いを調べる天文学のための専用計算機でした。今回の分子動力学シミュレーションも同じ方法で計算するもので、泰地チームリーダーらは、1995年に第一世代のチップである MD-GRAPE chip の開発を担当してきました。一方、タンパク 3000 プロジェクトを代表とする構造ゲノム科学は急速に発展しており、重要なタンパク質の構造が次々と明らかにされています。これらの新しい知見を活かし、タンパク質の働きを解明したり、新しい薬を設計したりするために分子の結合状態を解くことができる、分子シミュレーションへの期待・要請が高まっています。

こうした要請にこたえるため、これまでの専用計算機開発の実績を背景として次世代の分子動力学専用計算機「MDGRAPE-3」の開発に2002年度に着手しました。

## 2. 研究成果と手法

MDGRAPE-3 では特にタンパク質のシミュレーションを高速化するための工夫を盛りこんでいます。今回完成させた MDGRAPE-3 システムでは、1ペタフロップス(1000兆演算/秒)の性能に到達しました。これは理研で2001年に開発した前世代機 MDM (75テラフロップス)の13倍の性能です。また、6/16現在のスパコン Top 500 リスト(世界の汎用高性能計算機500傑のリスト)のトップである米国ローレンスリバモア研究所の IBM BlueGene/L は360テラフロップスの理論ピーク性能を持っています。MDGRAPE-3 システムは専用計算機であり、TOP500 リストに掲載されるための基準となる「Linpack ベンチマーク」を実行できないため、直接の比較はできませんが、BlueGene/L の約3倍の理論ピーク性能を持つこととなります。半導体技術の性能向上は速いペースで進んでいます。これを受けパーソナルコンピュータに代表される汎用計算機もどんどん高速化していますが、実はその性能には陰りが見え始めています。

計算機の性能を上げる研究とともに、複数の計算機を活用して計算能力を高める並列処理の開発が進んでいます。しかし、通常の計算機では並列処理にも限度があり、並列処理をするために LSI の能力が抑えられています。これに対し、分子動力学シミュレーション専用計算機では「ブロードキャストメモリアーキテクチャ」<sup>\*2</sup> を用いることによって、より高い並列動作が可能になります。2004年度に開発に成功した「MDGRAPE-3 チップ」では一個の LSI で同時に720演算もの演算を同時に実行することができ、性能を飛躍的に向上することができました。

今回はこの LSI を4,808個利用したシステムを構築し、1ペタフロップスの理論ピーク性能を得ました。LSI の製造は(株)日立製作所、専用計算機部分の基板等の製造は(株)東京エレクトロデバイスが行なっています。このような高い性能にもかかわらず、システムの消費電力は最大200キロワットと低く、大きさも22ラック分となり非常にコンパクトに作れるのが専用計算機の利点です。また、今回のシ

システムのうち、専用計算機部分の開発にかかった費用は人件費・開発費等を含めて約 10 億円であり、低コストであることも特徴です。本システムの構築では、インテル(株)の協力のもと、日本 SGI(株)より専用計算機を接続するホスト計算機の提供、システムの構築支援を受けています。インテル社の最新プラットフォームの利用により、システムの電力効率を向上させることが可能になり、また今後の実効性能向上も期待されます。

### 3. 今後の展開

今後は、本システムの応用研究を進めるとともに、ソフトウェア開発等も積極的に進めていきます。開発した計算機の商用化も計画しています。ソフトウェアとしては、世界中で使われているタンパク質の分子動力学シミュレーションのためのソフトウェア Amber、Charmm 等への対応を進めています。また特に現在、薬剤のタンパク質への結合能力を、分子動力学シミュレーションにより高精度に予測する研究の実証を行なっています。現在、文部科学省が推進しているタンパク 3000 プロジェクトにより、病気に関係する重要なタンパク質の原子レベルの構造が次々と明らかになっています。ペタフロップス級の性能をもつ MDGRAPE-3 の完成により、医薬品のタンパク質への結合しやすさを精度よく見積もることができ、将来的には薬効が高く、低コストの薬をより短期間で開発できることにつながると期待されます。また、タンパク質の動作原理・設計原理の解明にも MDGRAPE-3 は力を発揮します。特にこれまで十分に計算できなかったタンパク質の動きを見ることにより、病気を引き起こす原因を原子レベルで調べたり、生物の知恵に学んだナノ機械の開発などにも貢献していくと期待されます。さらに、今後も専用計算機の技術的な優位性を活かして、性能向上も期待されます。

近年、シミュレーション技術の向上、技法の向上により、専用・汎用を問わず高性能の科学技術計算の重要性はますます高まっています。生物学においては、分子シミュレーションや生体分子の作るネットワークの解析、物質科学においてはナノテクノロジーや材料開発、工学においては自動車のまわりの流体計算など、地球科学では天気予報から地球温暖化などのグローバル気象まで等々、その広がりには枚挙に暇がありません。こうした中、科学技術計算用高性能計算機の国際競争は激しさを増しており、日本においても次世代のスーパーコンピュータ開発が開始されています。本研究グループによる専用計算機技術は、今後の国際競争上重要な鍵になると期待されます。

※ 本研究に関する詳細な内容は、研究チームのサイト <http://mdgrape.gsc.riken.jp/> をご参照ください。

(問い合わせ先)

独立行政法人理化学研究所 横浜研究所  
ゲノム科学総合研究センター  
システム情報生物学研究グループ  
高速分子シミュレーション研究チーム

チームリーダー 泰地 真弘人

Tel : 045-507-2508 / Fax : 045-507-2524

## <補足説明>

### ※1 統計物理専用計算機 m-TIS

東京大学で泰地チームリーダーが開発した磁性体（磁石）モデルのシミュレーションのための専用計算機。パーソナルコンピュータと接続して使う方式は専用計算機として画期的であった。また2号機はFPGA（ハードウェアを書き換え可能なLSI）を用いた、再構成可能な計算機システムとして世界最初のものであった。

### ※2 ブロードキャストメモリアーキテクチャ

一回メモリから読み出した値を使って、いくつもの計算を並列に行なう方式。これにより、飛躍的に高度な並列化が可能になる。どんな応用にも使えるものではないため、普通の計算機では使えない方式であるが、分子動力学計算などへの応用では劇的な効果がある。他には、遺伝子配列解析や、密行列（要素がぎっしり詰まった行列）の計算、境界要素法（電磁波の解析などさまざまな工学的応用がある計算法）、3次元テレビ（計算機ホログラフィ）などへの応用が可能である。