

# 大量に作成されるエピゲノムデータと宇宙プラズマデータへの対応

深沢圭一郎<sup>1, 2, 3</sup>

1. 九州大学情報基盤研究開発センター
2. 九州大学国際宇宙天気科学・教育センター
3. CREST, JST

## ビッグデータへの対応

1

### 九州大学での下記データに対する取り組み

- 医学系ビッグデータであるエピゲノムデータ(大川恭行先生)  
エピゲノムとは細胞がもつゲノム修飾の総体のことで、近年次世代シーケンサーによりこの情報を効率的に取り出すことが可能になった。  
→ 1TB/解析で、100解析/年@2012年当時
- 従来からある宇宙プラズマシミュレーションデータ  
宇宙天気を調べるための惑星磁気圏シミュレーションのデータサイズが、近年の計算機性能の向上により、巨大になっている。  
→ 6TB/run@2013年秋導入計算機

## 九州大学での下記データに対する取り組み

- 医学系ビッグデータであるエピゲノムデータ(大川恭行先生)  
エピゲノムとは細胞がもつゲノム修飾の総体のことで、近年次世代シーケンサーによりこの情報を効率的に取り出すことが可能になった。  
→ 1TB/解析で、100解析/年@2012年当時
- 従来からある宇宙プラズマシミュレーションデータ  
宇宙天気を調べるための惑星磁気圏シミュレーションの-出たサイズが、近年の計算機性能の向上により、巨大になっている。  
→ 6TB/run@2013年秋導入計算機

## 質問1

### エピゲノムはご存じですか?

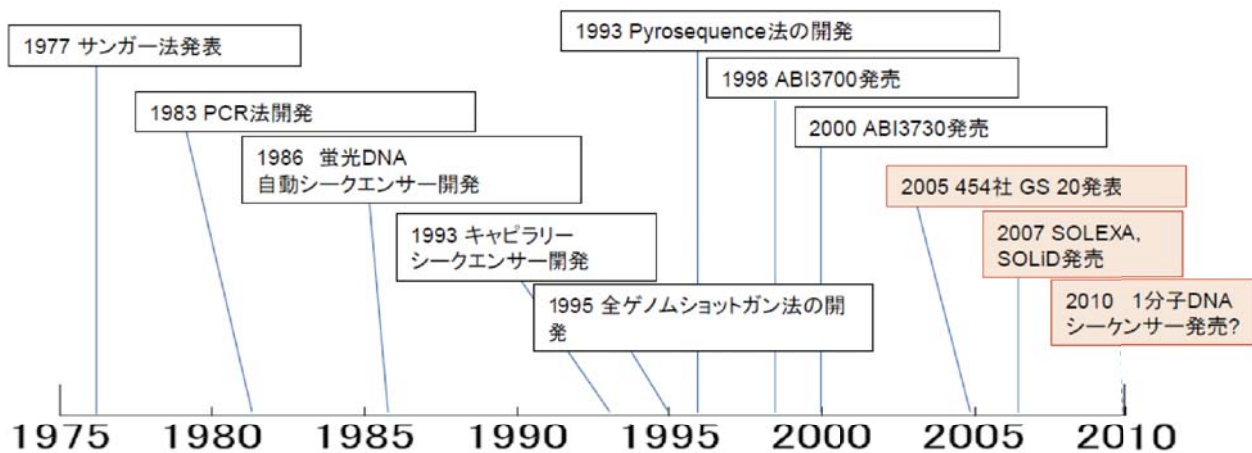
1. よく知っている
2. 聞いたことがある
3. 初めて聞いた
4. エピってフランス語の麦の穂だから、  
麦の穂のゲノムでしょ

# ゲノムDNAを読む

- 生物の遺伝情報はACGTのDNA配列でコードされている (ゲノム)
- 塩基配列を解読することで、どのような遺伝情報を持っているかが分かる。(遺伝子の同定)
- 原核生物から、ヒトに至るまで現在までに様々な遺伝情報が解読されてきた。

## DNA配列決定技術の進展

### DNA配列解析機:シーケンサー



year	event
2003	13 years, \$3 billionのHuman Genome Project完了。1000ドルゲノムprojectをNHGRI発表
2008	10万ドルでヒトゲノム解析を目標 (grantに15 teams選考: 454社)
2013	1000ドル以下でヒトゲノム解析を最終目標 (grantに25 teams選考: Helicos社, VisiGen社)

Adapted from DDBJ

# 次世代シーケンサーを用いたプロジェクト

## ■ James D. Watson博士の個人ゲノム解読(BCM Human Genome Sequencing Center)

- 個人特定のゲノムは世界初
- 100万ドル、2カ月。

Year	Event
2007年5月	配列解読を発表, NCBIから配列ダウンロード可能に
2008年	論文発表(Nature)



Nature 452: 872-876 2008

## ■ Craig Venter博士の個人ゲノム解読(Craig Venter Institute)

- 家族歴を含めた発表は世界初
- ヒトDNAの個人差は0.5~1.0%?

Year	Event
2007年9月	論文を発表(PLoS Biology)



PLoS Biology, Volume 5, e254 Sep 2007

# 進化を続けているシーケンサー

Platforms	Read length (bp)	Read# / run	Throughput capability(Gb/run)	Reagent cost/run	Run time
ABI 3730	900	96	0.00009	\$ 1.5 (150円)	3h
Roche 454 GS FLX	250	0.4M	0.1	\$ 8,500	7.5h
titanium	400-500	1M	0.4	---	10h
Illumina (solexa) Genome Analyzer II	30-40	37M	1.3	\$3,000	3 days
Ilx	50-75	150M	7.5	(160万円)	9.5 days
ABI SOLiD	35	114M	4	\$3,400 (200万円)	10 days
Helicos BioSciences (Heliscope)	35	170M	6	---	0.5 Gb per day

<http://www.bentham.org/pfna/samples/pfna1-1/008FNA.pdf> 2009



454 GS FLX™



SOLEXA™

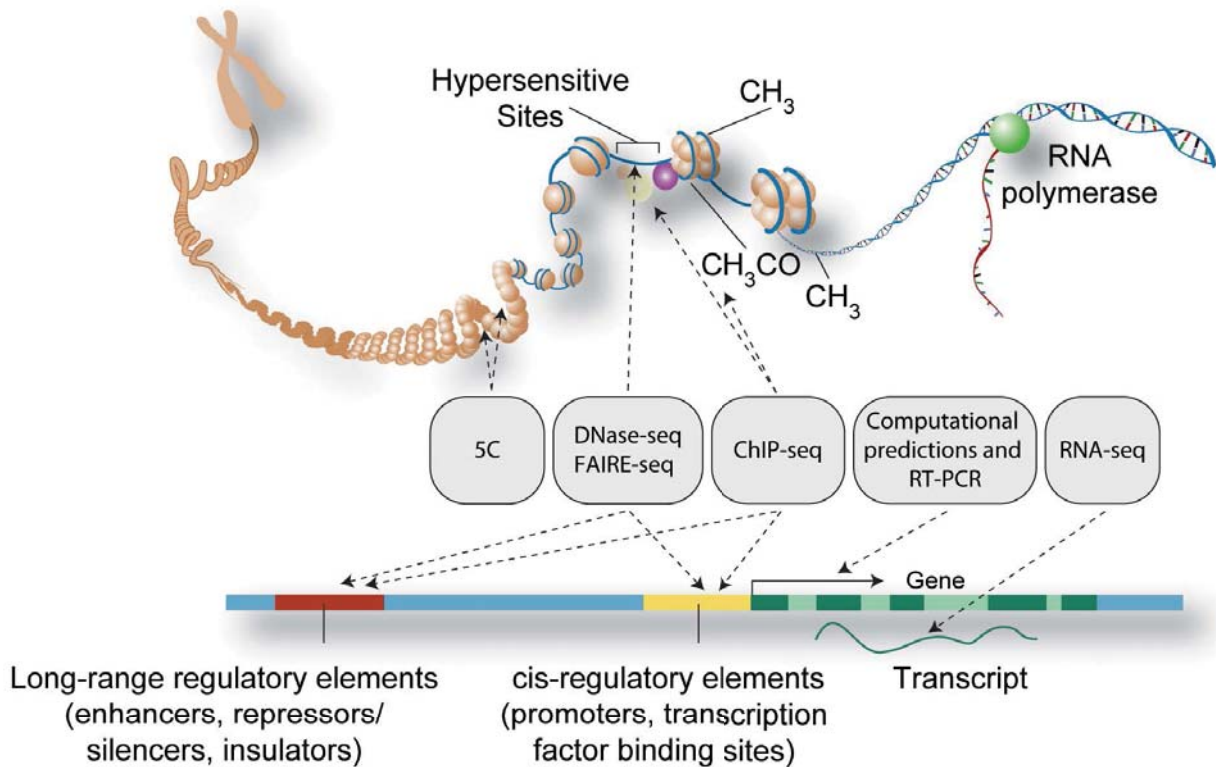


SOLiD™



Heliscope™

# “全染色体上の遺伝子を見る”研究への転換



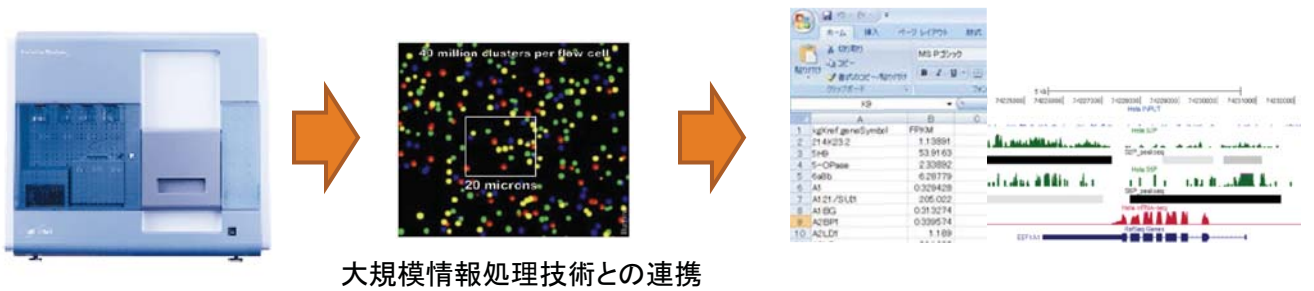
## エピゲノムとは

- DNAの塩基配列を変えずに、遺伝子のはたらきを決めるしくみをエピジェネティクスと呼び、その情報の集まりがエピゲノムと呼ばれている。
- 現実的にはエピゲノムは、細胞の中にあるゲノムDNAや、DNAが巻き付いているヒストン蛋白質にくっつくさまざまな化学修飾(メチル化やアセチル化)のことを指している。
- これらの化学修飾は、ゲノム上の遺伝子のはたらきをコントロールする。

From 国際ヒトエピゲノムコンソーシアム

# 九州大学ゲノム解析コンソーシアムでの活動

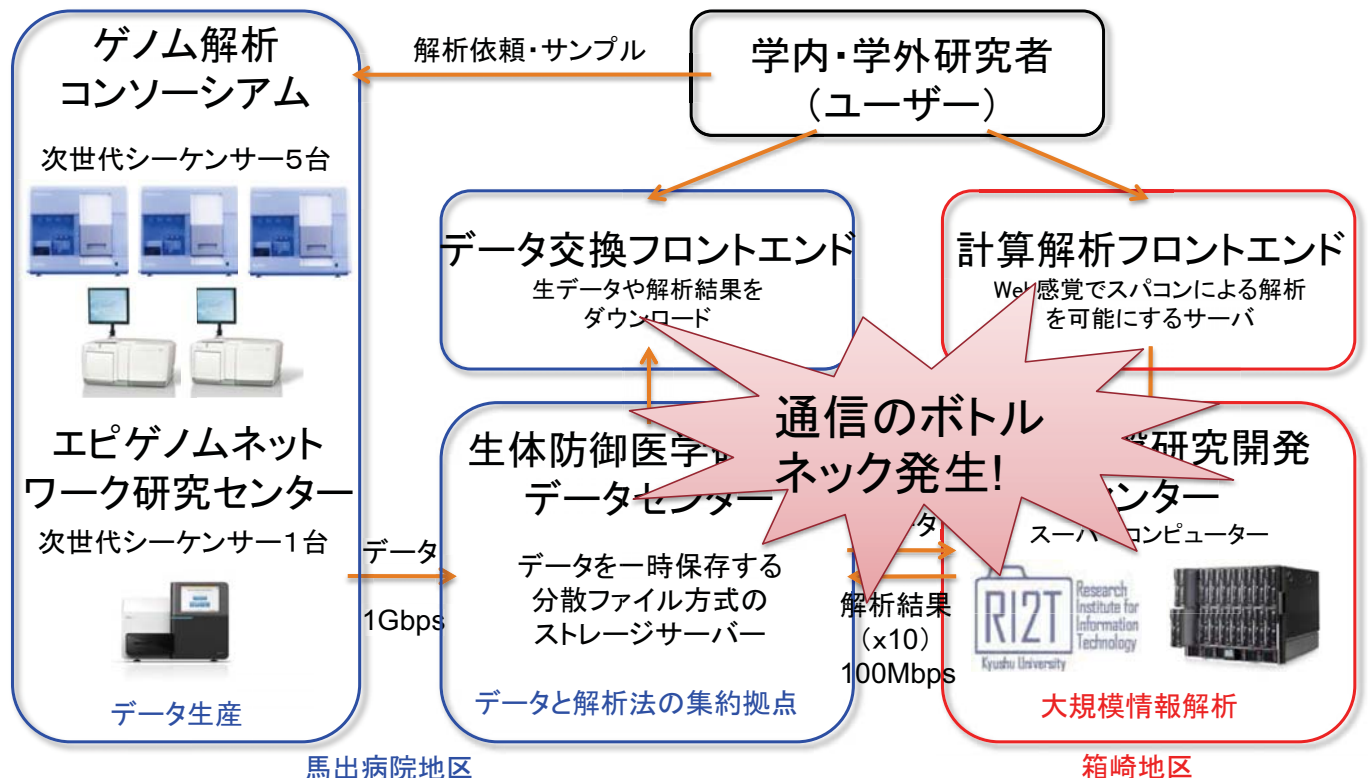
## 次世代シーケンサー解析+データ処理



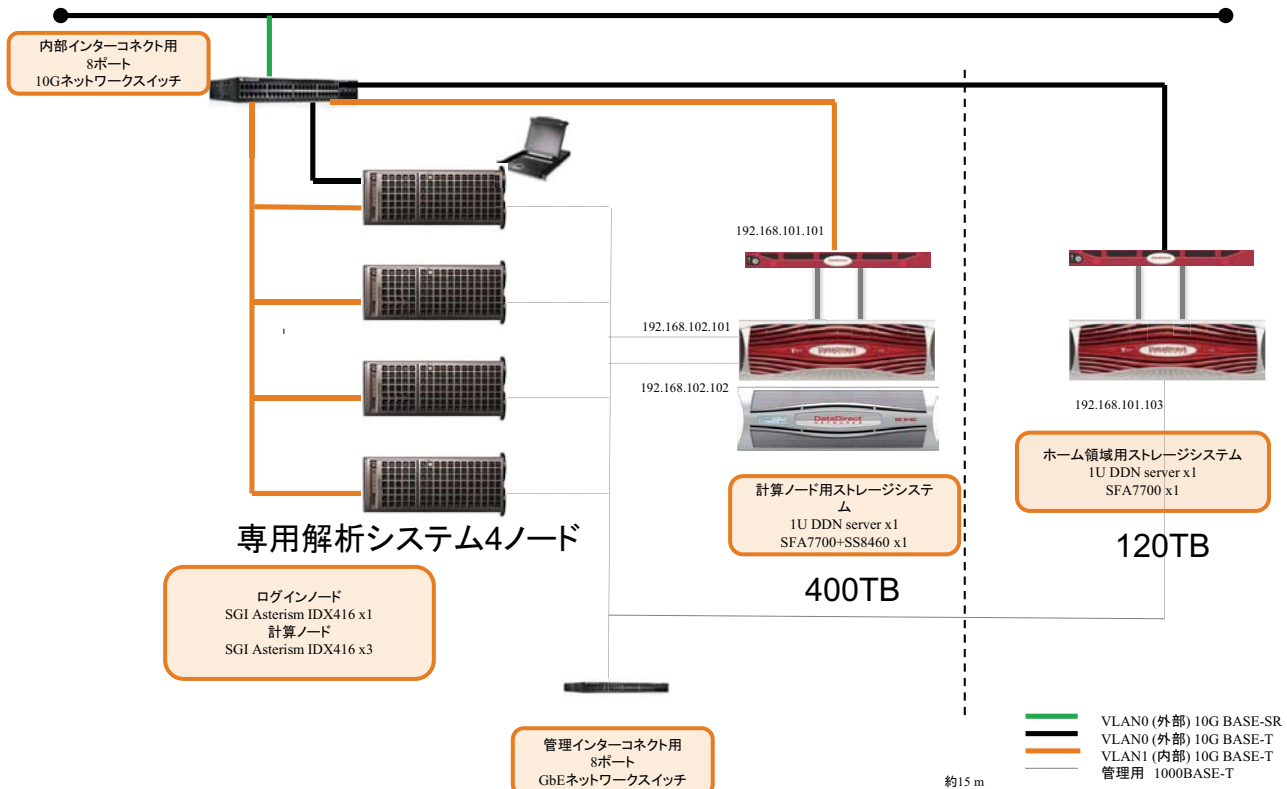
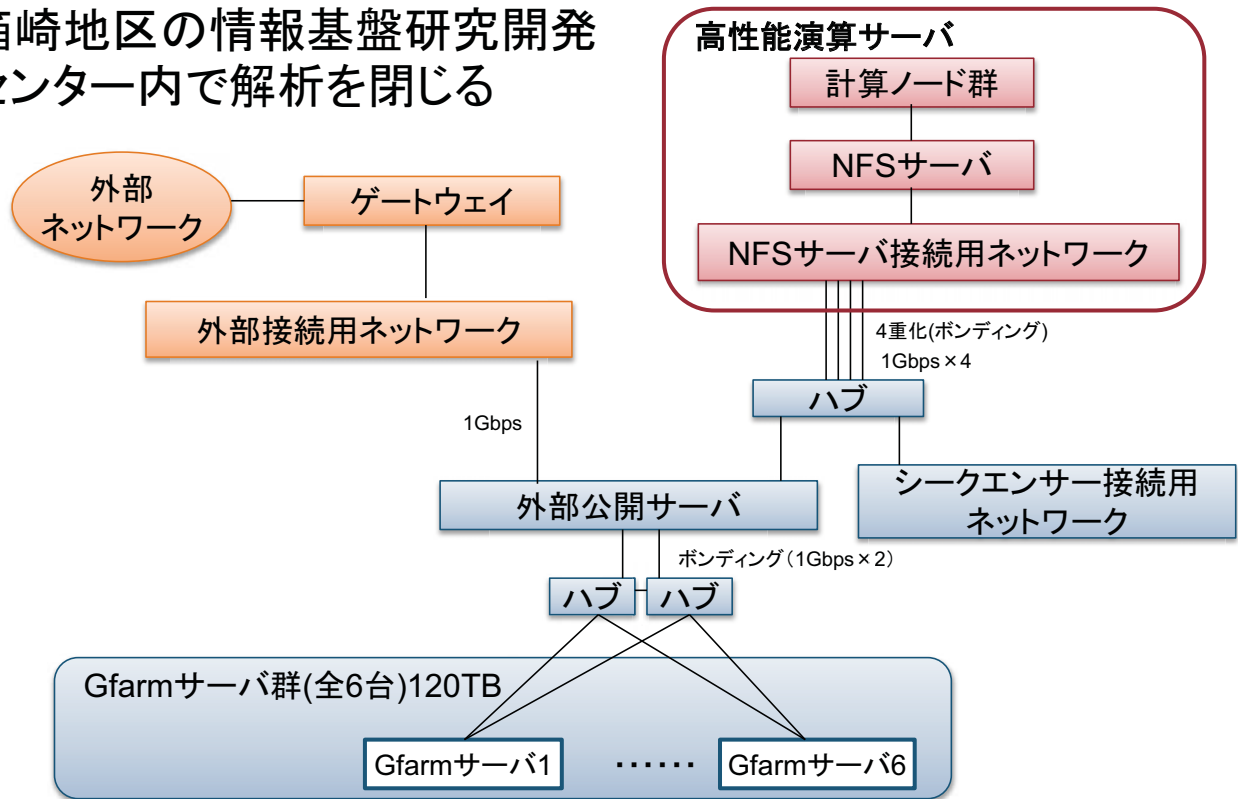
大規模情報処理技術が必須になってきている

情報学、コンピューターサイエンスとの連携

## 解析パイプライン



箱崎地区の情報基盤研究開発センター内で解析を閉じる



# エピゲノム解析まとめ

## 拡大するデータへの対応

- 現在1解析あたり1TB、年間解析回数はH23実績で100回程度。
- H24稼働の機器は更にアウトプットが増大しており、よりストレージが必要(1PB以上)

## データ転送の問題

- 巨大なデータのやり取りもボトルネックのひとつ  
(計算処理時間より転送に時間がかかることもある)

解析システム、ストレージ、公開サーバを情報基盤センター内で閉じたことで、自転車操業的だが、うまくシステムが回っている。

# ビッグデータへの対応

## 九州大学での下記データに対する取り組み

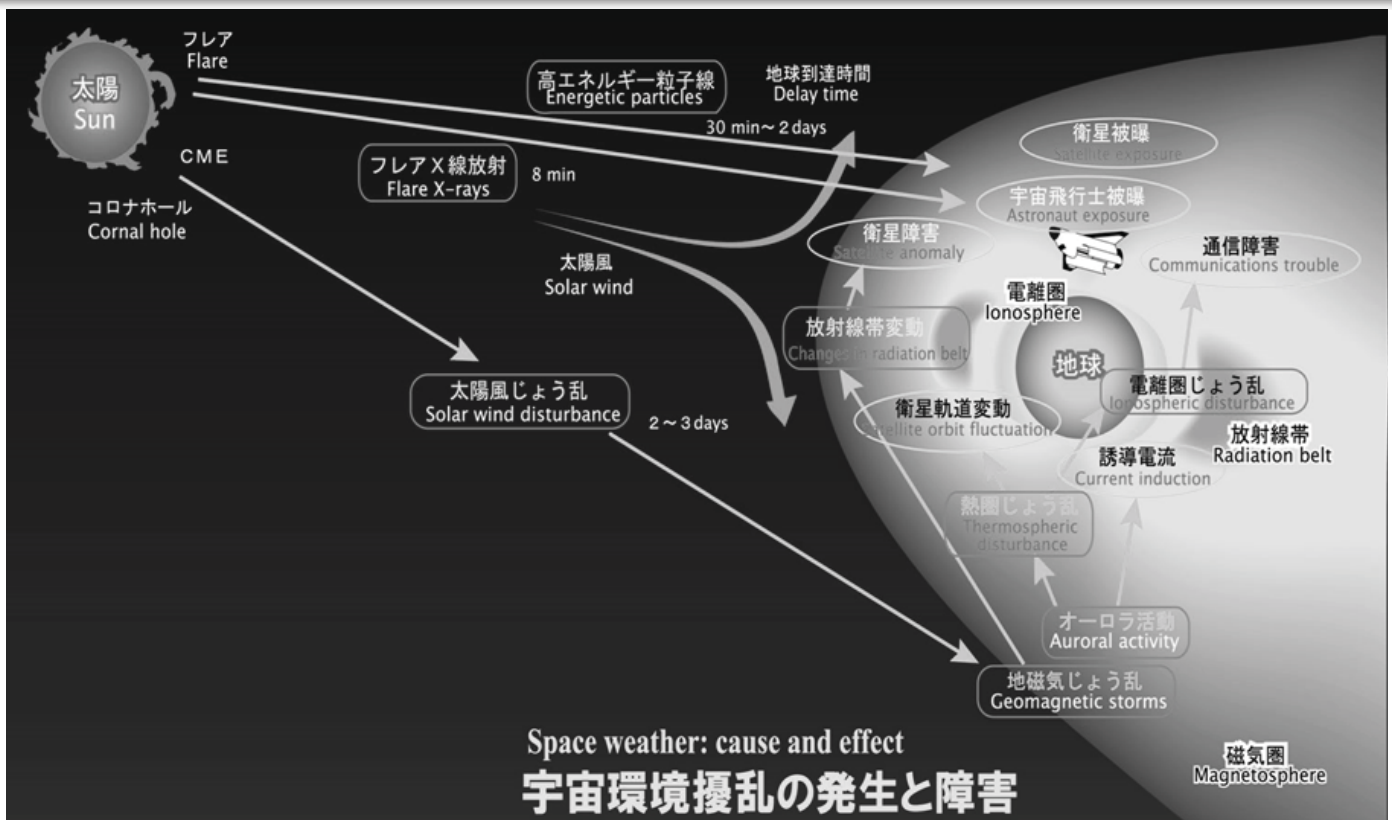
- 医学系ビッグデータであるエピゲノムデータ(大川恭行先生)  
エピゲノムとは細胞がもつゲノム修飾の総体のことで、近年次世代シーケンサーによりこの情報を効率的に取り出すことが可能になった。  
→ 1TB/解析で、100解析/年@2012年当時
- 従来からある宇宙プラズマシミュレーションデータ  
宇宙天気を調べるための惑星磁気圏シミュレーションのデータサイズが、近年の計算機性能の向上により、巨大になっている。  
→ 6TB/run@2013年秋導入計算機



## 宇宙天気の原因ではないものはどれでしょう？

1. オーロラ
2. 海外のラジオが聞こえる
3. 宇宙飛行士被爆
4. 地球寒冷化

## 宇宙天気とは



# シミュレーション結果の例1

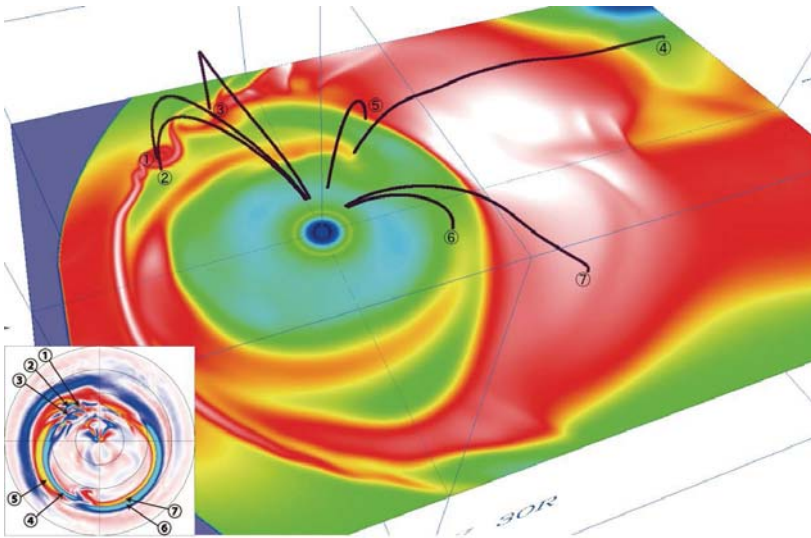


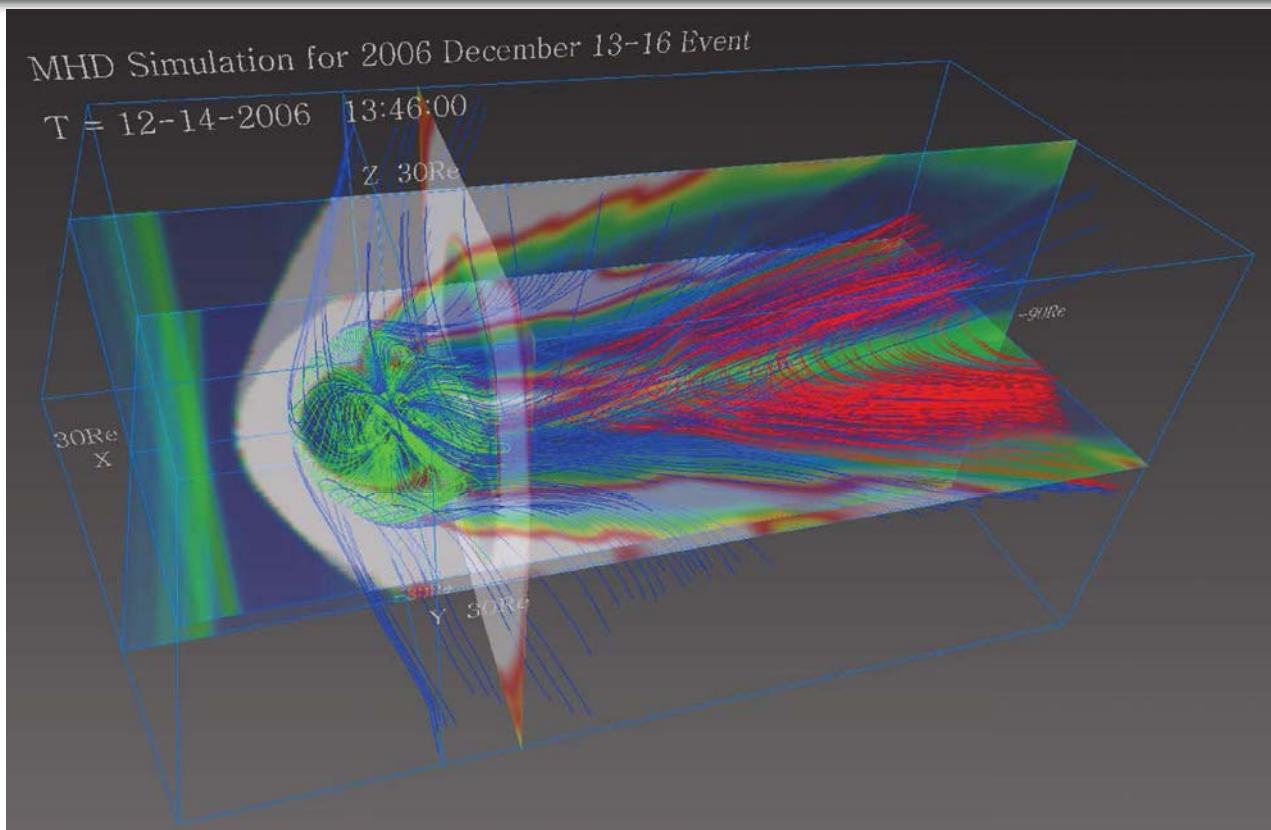
Fig. 1. The magnetic field connection from the polar region to the magnetosphere.

磁気圏は非常に大きな構造を取る一方で、そこで起きる現象は $10^8$ 程度の幅でスケールが変わる。

Fig. 1 は実際の土星磁気圏のシミュレーション結果で、オーロラと磁気圏対流の関係を示している。

オーロラは小さな現象だが、それは磁気圏の変動が磁力線を通じて伝わっている。

# シミュレーション結果の例2



## Vlasov方程式

無衝突Boltzmann方程式とMaxwell方程式から成るプラズマの振る舞いを最も正確に表現できる方程式系。

速度分布関数 $f(x, \mathbf{v}, t)$ を考えると、

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} + \frac{q}{m} (\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = 0$$

これとMaxwell方程式を連立して解く。

しかし、位置 $(x, y, z)$ 3次元、速度 $(v_x, v_y, v_z)$ 3次元と時間から成る非線形方程式系で、解くことが困難。

$f(x, y, z, v_x, v_y, v_z, t)$ を計算するにはメモリ不足。

# 宇宙プラズマを解く方程式2

## MHD (Magnetohydrodynamics)方程式

Vlasov方程式の $n$ 次モーメント取ることで、求められる。

0次(速度空間で積分)、1次( $\mathbf{v}$ かけて積分)、2次( $\mathbf{v}^2$ かけて)より、

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot (\mathbf{v} \rho)$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = -(\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} - \frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{1}{\rho} \mathbf{J} \times \mathbf{B}$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -(\mathbf{v} \cdot \nabla) p - \gamma p \nabla \cdot \mathbf{v}$$

を得る。これらと磁場の誘導方程式

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \nabla \times (\mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad \text{をまとめてMHD方程式という。}$$

→ 速度空間を解かない分、現在でも計算が可能になる。

## 数値解法はLeap-frog+Lax Wendroff法の混合手法 計算グリッド

- $X \times Y \times Z \times 8$ が基本
- ワーク配列で基本配列の7倍程度利用する
- 解きたい惑星、利用する計算機システムで計算サイズは変わる  
→見たい解像度までまだ計算機が対応出来ていない

## 並列化手法

- MPIで3次元領域分割

## FX10@九大での計算の場合



Fig. 6. PRIMEHPC FX10

96ノード(1536コア)を用いて毎日計算

3000 × 2000 × 2000 × 8 = 768GBが書き出される。  
現在150データ = 120TB程度利用

		PRIMEHPC FX10
CPU	Architecture	16 cores SPARC64 IXfx
	Frequency	1.848 GHz (236.544 GF)
Memory	Band width	85GB/s /CPU (=node)
	Node	Number of CPUs
System	Memory size	32GB
	Number of nodes	768 (12288 cores)
	Rmax	181.6 Tflops
Storage	Node comm.	Tofu Interconnect (5GB/s)
	FEFS	約600TB

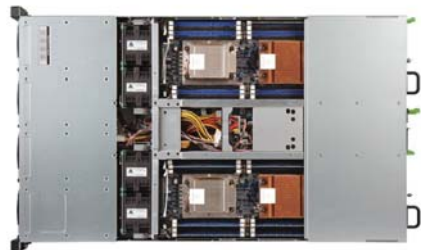


Fig. 9. PRIMERGY CX400 system

128ノード(2048コア)  
を用いて毎日計算

$6000 \times 4000 \times 2000 \times 8 = 3\text{TB}$ が書き出される。  
現在100データ=300TB程度利用

		PRIMERGY CX400
CPU	Architecture	8 cores Xeon E5 (SB)
	Frequency	2.7GHz (172.8GFlops)
Memory	Band width	51.2GB/s /CPU
Node	Number of CPUs	2
	Memory size	128GB
System	Number of nodes	1476 (23616 cores)
	Rmax	510.1 TFlops
	Node comm.	InfiniBand FDR (6.78Gb/s)
Storage		4PB



Fig. 2. HA8000-tc

128ノード(3072コア)  
を用いて毎日計算

$6000 \times 4000 \times 4000 \times 8 = 6\text{TB}$ が書き出される。  
現在20データ=120TB程度利用

		HA8000-tc / HT210
CPU	Architecture	12 cores Xeon E5 2697
	Frequency	2.7 GHz (259.2 GF)
Memory	Band width	51.2 GB/s /CPU
Node	Number of CPUs	2
	Memory size	256 GB
System	Number of nodes	965 (23,160 cores)
	Rmax	500.256 TFlops
	Node comm.	InfiniBand FDR (6.78Gb/s)
Storage		3.6PB

大学のシステムは共有システムなので、ストレージを独り占めにはできない...



## HPCIストレージ

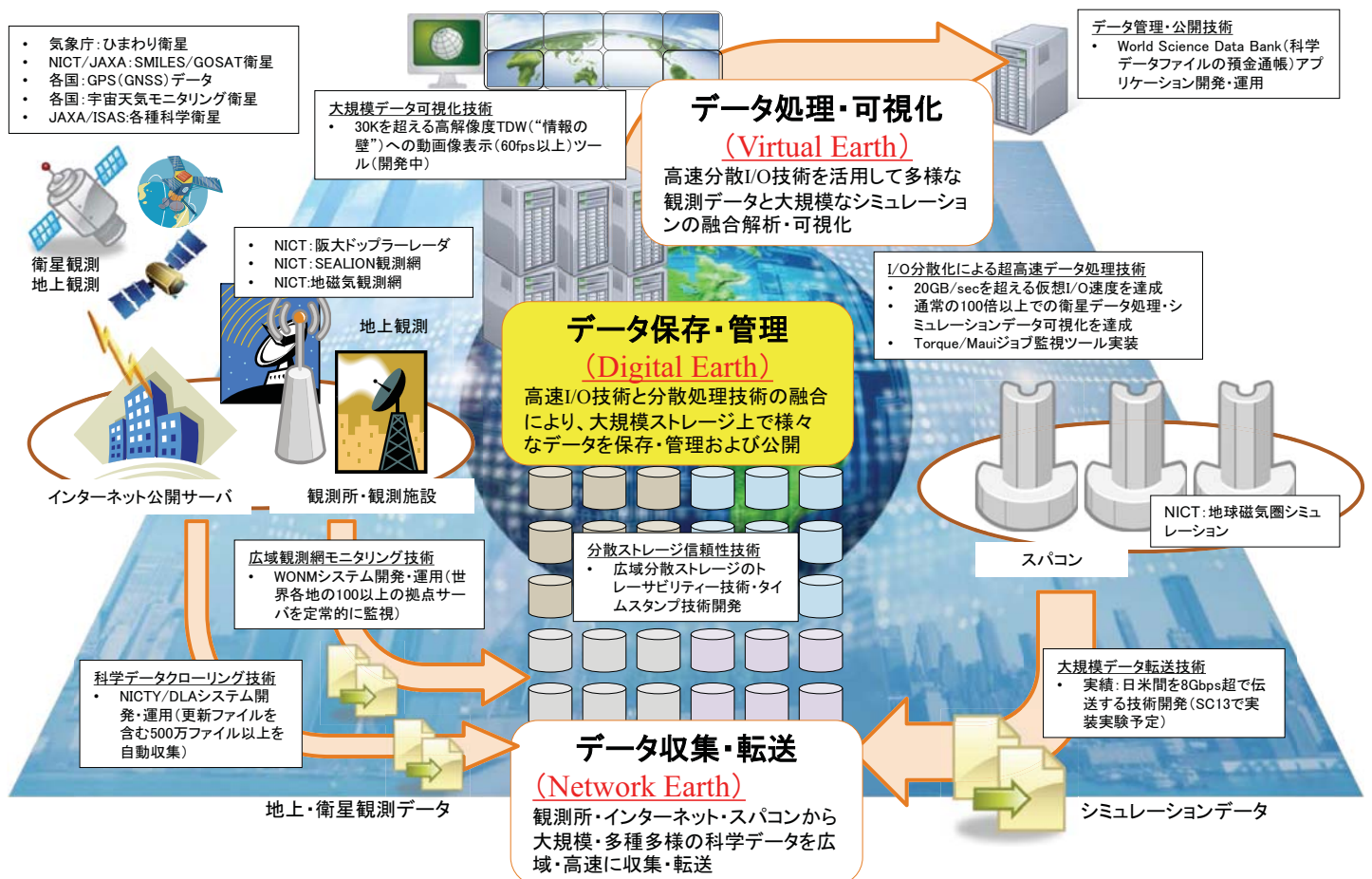
- HPCIシステム上で利用できる並列分散型ストレージ(Gfarm)。
- 総容量21.5 PB(東拠点: 11.5 PB, 西拠点: 10 PB)。
- SINET4で接続。

## NICTサイエンスクラウド

- NICTが運用しているストレージを含む様々な計算機資源。
- 容量約4PBでJGN-Xで接続。

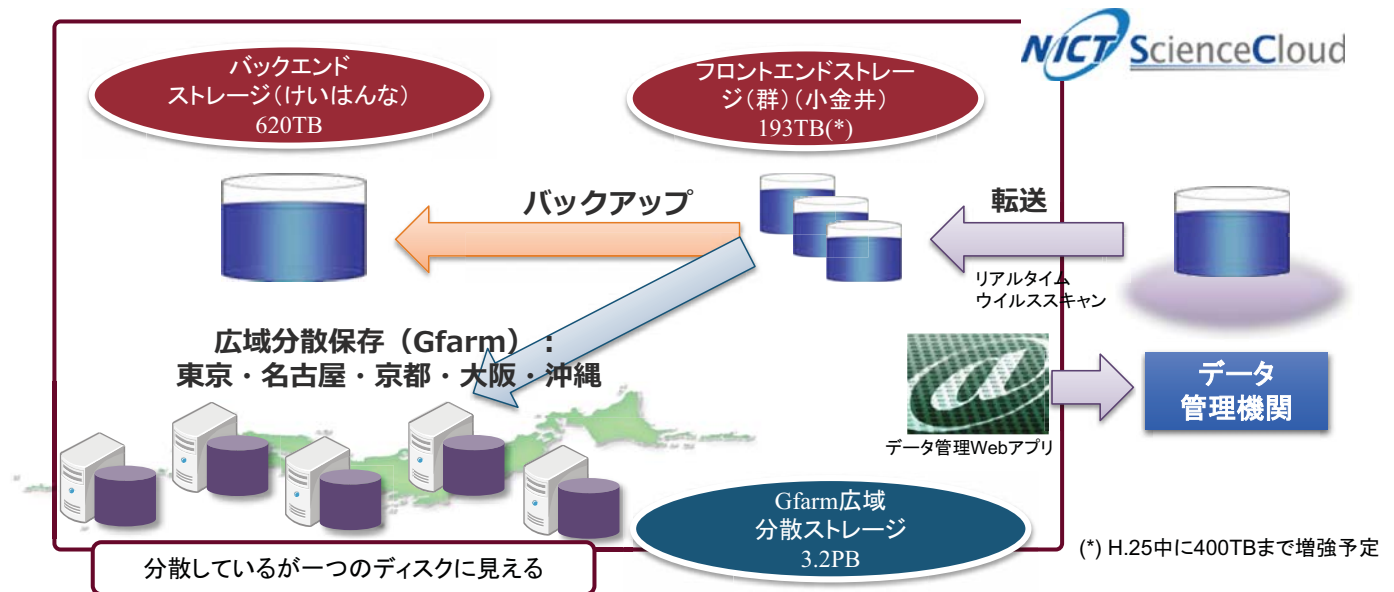
## NICTサイエンスクラウド(Cyber Earth)

### マッシュアップによる統合的地球環境・宇宙環境科学データシステム

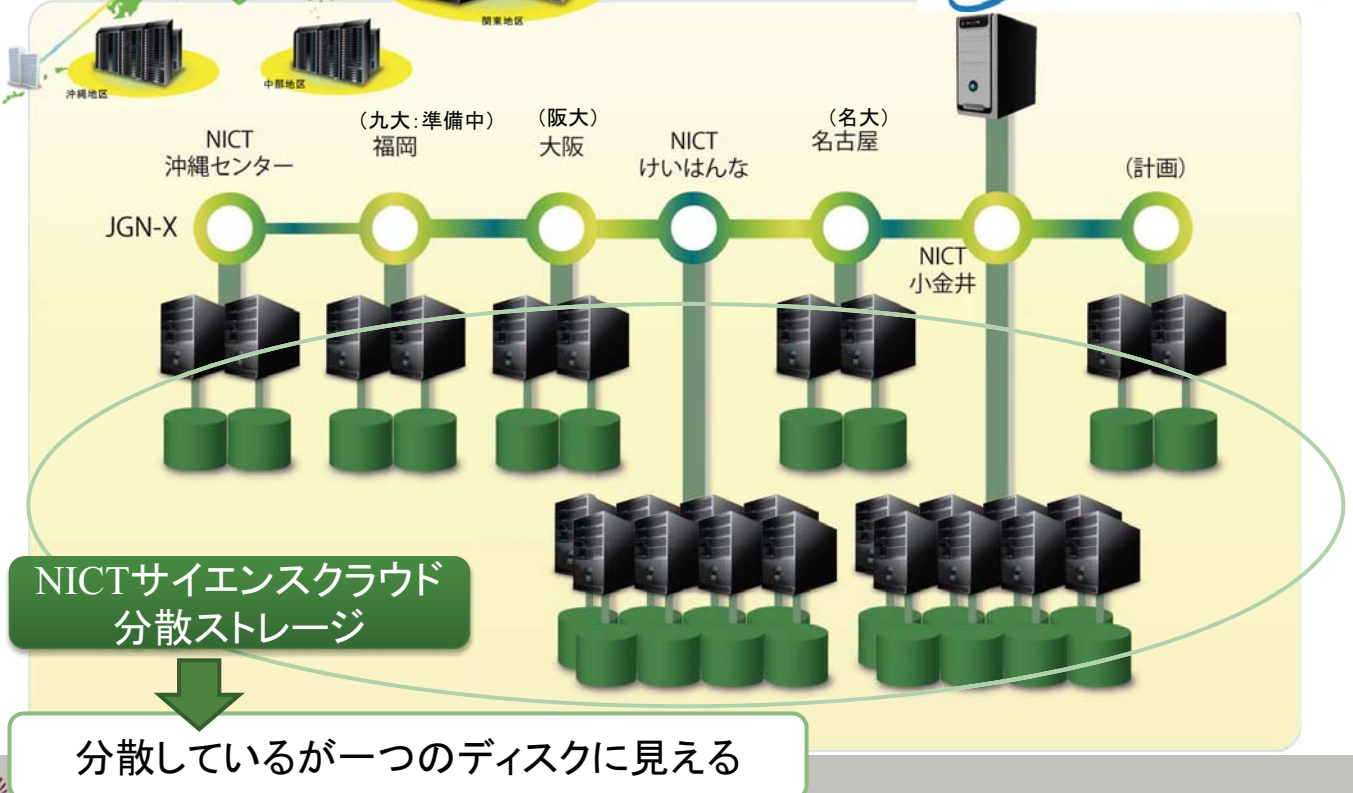


# NICTサイエンスクラウドストレージ

- NICTサイエンスクラウドストレージは、各種研究データファイルを保存するためのストレージシステム

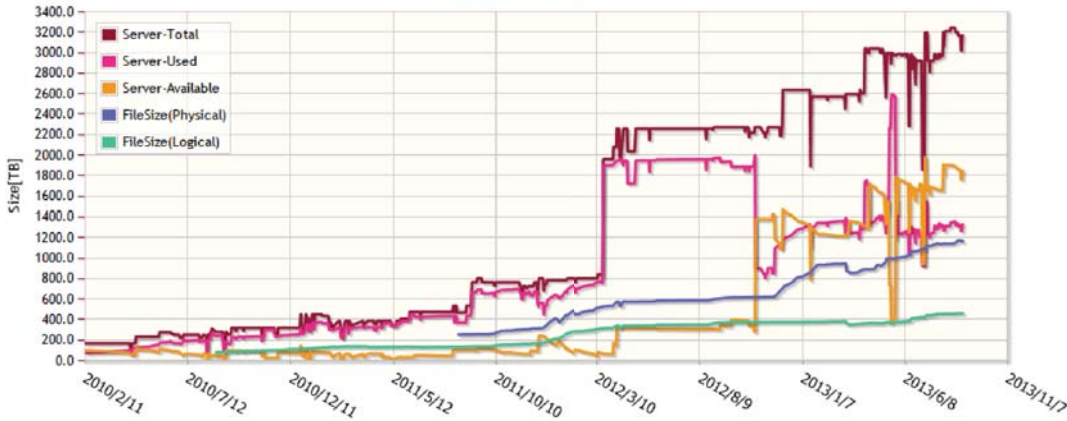


## NICTサイエンスクラウド 広域分散ストレージ

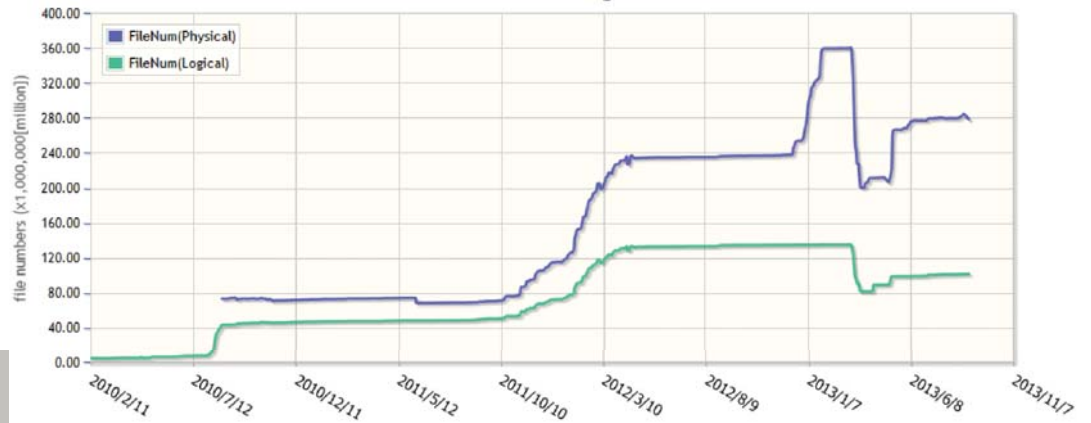


# NICTサイエンスクラウド : Gfarmストレージ履歴

Gfarm Size Log



Gfarm FileNum Log



## 広域分散型クラウド基本性能 (Gfarm)

ls コマンド(ファイル属性なし) 応答時間 [秒]

ファイル数	小金井C	名古屋C	けいはんなC	大阪C	沖縄C	参考(ローカルサーバ)
1	0.01	0.07	0.36	0.37	1.5	0.01
100	0.01	0.09	0.37	0.38	1.5	0.01
10,000	0.16	0.92	0.99	0.99	3.6	0.08
1,000,000	24.7	85.6	56.3	65.3	177.2	14.6

ls --color=tty コマンド(ファイル属性あり) 応答時間 [秒]

ファイル数	小金井C	名古屋C	けいはんなC	大阪C	沖縄C	参考(ローカルサーバ)
1	0.01	0.07	0.65	0.37	1.5	0.01
100	0.03	0.10	2.1	0.39	1.5	0.01
10,000	1.5	2.0	*	1.9	4.7	0.16
1,000,000	170	202.1	*	179.6	259.7	21.7

\*DDN社 SFA10000EのGfarm動作不良(現在調査中)により測定データなし。



# 宇宙プラズマまとめ

## 見たい現象を見るためにはまだ解像度が必要

- 計算機性能が上がれば、出力データも増大。
- 九大システムで768GB～6TB/samplingの出力

## 外部ストレージの利用

- 共同利用センターのストレージを使いすぎるのは問題
- HPCI共有ストレージだけでなく、NICTサイエンスクラウドを利用し、データを退避させている。

## まとめ

## 九州大学情報基盤研究開発センターにおける2つの大規模データに対する取り組み

- ✓ シークエンサーの発展に伴い、ゲノム解析効率が上がり、ゲノムの修飾を行うエピゲノムの解析まで行われてきている。
- ✓ 一方でそのデータ量は爆発的に増えており、九州大学ではデータの加工/解析からストレージへの保存、データ公開までを情報基盤研究開発センター内で閉じることで対応している。
- ✓ 宇宙プラズマシミュレーションではまだまだ現在の計算機では見たい現象まで見えておらず、計算機性能が上がるにつれて、計算結果データも巨大化している。
- ✓ データは計算機システムにも置いてあるが、外部ストレージにも置いてある。センター的にはHPCI共有ストレージ、NICTサイエンスクラウドが利用しやすい。

九州大学 医学研究院 先端医療医学部門  
大川 恭行 准教授  
前原 一満 研究員

情報通信研究機構 統合データシステム研究開発室  
村田 健史 統括