

超大規模遺伝子配列DBシステムの構築

Introduction of Supercomputer System for DNA Data Bank of Japan

あらまし

大学共同利用機関法人情報・システム研究機構国立遺伝学研究所 生命情報・DDBJ研究センターは、欧州のEBI/EMBLおよび米国のNCBI/GenBankと共同で、国際塩基配列データベースを構築し、全世界の研究者の研究に供している。生命科学研究の進展とともにこの国際塩基配列データベースは毎年、前年比130～150%という爆発的な拡大を続けており、データベースの構築・公開、検索・解析サービスの提供には大規模なコンピュータシステムが必須である。また継続的な性能・容量の増強とソフトウェアの進化が重要である。

本稿では、爆発的データ増大への対応、高速かつ安定した検索・解析サービスの提供、旧システムからの円滑な移行、ユーザ資産継承、互換性の実現、高信頼性の実現とセキュリティ対策といった困難な要件を克服し2007年3月に運用を開始した新スーパーコンピュータシステムについて説明し、本システムの日本および国際的な生命科学研究への貢献について紹介する。

Abstract

The Center for Information Biology and DNA Data Bank of Japan (CIB-DDBJ) at the National Institute of Genetics (NIG) of Research Organization of Information and Systems has joined forces with GenBank (USA) and EMBL (Europe) to form the International Nucleotide Sequence Database Collaboration (INSDC) and make their databases accessible to researchers over the Internet. In parallel with advances made in the life sciences, the INSDC databases are increasing rapidly in size by 30 – 50% annually. Moreover, a large-scale computer system for constructing and releasing them and providing search and analysis services has become necessary. Important requirements of such a system will include ongoing enhancements to system performance and capacity and support for software evolution.

This paper describes a new supercomputer system that went into operation in March 2007. It meets a variety of difficult requirements including support for a rapidly growing database, provision of high-speed and stable search/analysis services, smooth migration from the old system, compatibility with existing user assets, high reliability, and support for security. This paper also introduces the contributions that this new system is making to life sciences research both inside and outside Japan.



菅原秀明 (すがわら ひであき)
国立遺伝学研究所 名誉教授
現在、バイオインフォマティクス
研究開発に従事。



山田弘明 (やまだ ひろあき)
バイオIT事業開発本部大規模シス
テム開発室 所属
現在、国立遺伝学研究所のスーパー
コンピュータシステム、DDBJ運用
業務のサポートに従事。



山田久仁 (やまだ ひさひと)
富士通アメリカ 所属
現在、科学分野のコンピュータシ
ステムサポートに従事。

まえがき

大学共同利用機関法人情報・システム研究機構 国立遺伝学研究所（以下、遺伝学研究所）では、2007年2月に、大型サーバ、PCクラスタ、大容量ストレージ、キーワード検索専用システムなどから構成されるスーパーコンピュータシステムを導入し、2007年3月より本稼働を開始した。

本スーパーコンピュータシステムは、遺伝学研究所 生命情報・DDBJ研究センター（以下、DDBJ研究センター）が運営するDNA Data Bank of Japan（以下、DDBJ）⁽¹⁾⁽³⁾の、データ収集・データベース構築、データ公開、検索・解析サービスとともに、遺伝学研究所内および国内外の研究機関の研究用に供されるシステムである。

本稿では、本スーパーコンピュータシステムがいくつかの困難な課題をどのように克服したかについて説明し、本システムの日本および国際的な生命科学への貢献について紹介する。

DDBJの概要

DDBJ研究センターでは、欧州のEBI/EMBL⁽⁴⁾および米国のNCBI/GenBank⁽⁵⁾と共同で「DDBJ/EMBL/GenBank国際塩基配列データベース」⁽⁶⁾を構築している。

DDBJ/EMBL/GenBank国際塩基配列データベースとは、全世界の研究者が実験によって決定したDNA（またはRNA）の塩基配列データをDDBJ/EMBL/GenBankの3大データバンクが、三者間で定めたデータ構築規範に沿って収集・編集し、一体となったコンピュータファイルのかたちで提供するものである。DDBJ/EMBL/GenBank国際塩基配列データベースは研究者から直接送付されたDNA塩基配列データを編集することによって作成されており、さらに、日本の特許庁（JPO）、欧州特許庁（EPO）、米国特許商標庁（USPTO）が処理したDNAデータも含まれている。

塩基配列データベースは、データの単位である「エントリー」の集合として構成されている。それぞれのエントリーは、塩基配列のほか、配列を決定した研究者、関連文献、生物種、遺伝子の機能、特性などに関する情報を含んでいる。各データバンクで収集されたデータはデータバンク間で相互に毎日

交換され、3大データバンクで同じ情報を提供している。DDBJでは3大国際データバンクで公開されるデータの約2割の収集・編集を行っている。

20年前の1987年7月にDDBJが初めて塩基配列データベースを公開した際には、わずか66エントリー、108 970塩基対であったが、近年は毎年前年比130%～150%の率で増加しており、20年後の2007年9月には76 273 345エントリー、79 706 204 461塩基対を数えるまでになった。国際塩基配列データベースの登録データ量の推移を図-1に示す。

さらに、最近では従来の数十倍から百倍以上の速さで塩基配列を解読可能な装置が普及し始めており、今後さらにデータ増加が加速することが予想されている。

DDBJ/EMBL/GenBankの各データバンクはインターネット上でデータを公開するとともに、キーワード検索や後述する相同性検索サービスを提供し、広く世界中の研究者に利用されている。各データバンクが提供するデータベースは世界中の誰でも自由にコピーして利用することができる。しかし、データ量の増大に伴い利用者が自らコピーしたデータベースを最新状態に維持することは困難になりつつある。そのため、データベースが常時最新データに維持され、パソコンだけで世界中の最新データが検索できる本検索サービスの利用価値はますます高まっており、研究者からの要望や期待も大きい。

DDBJ業務を支える新スーパーコンピュータシステム

前章で述べたように爆発的に拡大し続けるデータベースを確実に提供するためには、コンピュータシステムの性能・容量の増強とソフトウェアの進化を継続的に進めることが重要である。従来のシステムが運用開始後6年を経過し、データの急激な増加や新サービスへの対応が困難となってきたため、2005～2006年に最新のシステムへの更新が計画され、富士通が新スーパーコンピュータシステムを納入した。

以下、本章では新スーパーコンピュータシステムへの要求要件と、それぞれをどのように実現したかについて述べる。

● 新スーパーコンピュータシステムへの要件

(1) 爆発的データ増大への対応

- ・年率1.5倍で増加し、5年後には約4億エントリー

となる膨大な塩基配列データへの対応

- ・全データ更新間隔の短縮 (3箇月→2箇月)
- (2) 高速かつ安定した検索・解析サービスの提供
 - ・相同性検索サービスでは高速レスポンスかつ高速スループットの実現
 - ・キーワード検索サービスでは、拡大し続けるデータに対して、検索条件によらず高速かつ安定したレスポンスの実現
- (3) 旧システムからの円滑な移行, ユーザ資産継承, 互換性の実現
 - ・各種サービスを実現する大量の既存アプリケーションプログラムの, 短期間での円滑な移行の実現
- (4) 高信頼性の実現とセキュリティ対策
 - ・世界3大データバンク間のデータ交換, 国内外へのサービス提供を支える, 安定・安全なシステムの実現

● **新スーパーコンピュータシステムの特長・特徴**

新スーパーコンピュータシステムは, 前節に示した要件を満たすべく開発された。その特長・特徴を以下に示す。

- (1) 爆発的データ増大に対応したリソース配置とシステム設計
 - ・基幹データ処理用として, 大型SMPサーバ, 大容量ストレージ, バックアップ装置, 最新RDB管理ソフトウェアを組み合わせ, 大量データの高速処理を実現
 - ・相同性検索用および解析処理用には最新のPCクラスシステムを採用し, 分散処理による高速なレスポンスと高いスループットを実現

- ・キーワード検索用には大規模XMLデータベース専用サーバを採用し, 高速かつ安定したレスポンスを実現

- (2) 高速かつ安定した検索・解析サービスの提供
 - ・キーワード検索では, 3000万件の複雑なデータに対して, 複雑な検索条件でも10秒以内の安定したレスポンスを実現

- ・相同性検索では従来比5~8倍の単体性能向上と並列処理による高いスループット性能を実現

- (3) 旧システムからの円滑な移行, ユーザ資産継承, 互換性の実現

- ・基幹のデータ処理用途には旧システムのOSと同様のSolarisを採用

- ・相同性検索処理用途にはデファクトスタンダードなOSであるLinuxを採用

- ・解析処理用途にはSolarisとLinuxを組み合わせ採用し, 解析処理プログラムの特性に応じて最適な利用が可能

- (4) 高信頼性の実現とセキュリティ対策の採用

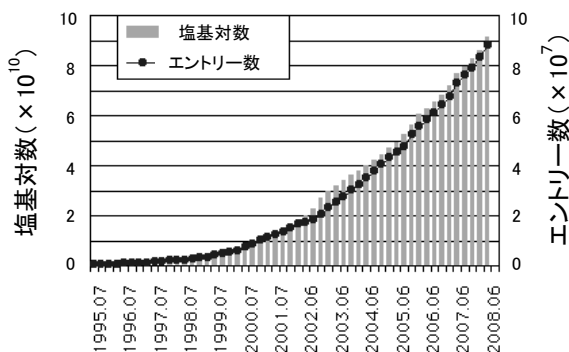
- ・活性保守対応および冗長化構成の採用, 予兆監視機能による障害の事前検知の実現

- ・国産RDB管理ソフトウェアであるSymfowareとHiRDBを採用

● **新スーパーコンピュータシステムの構成・性能の概要**

今回導入したスーパーコンピュータシステムを構成する主要な機器を以下に示す (図-2)。

- (1) データベース構築・公開用サーバ
 - ・大型SMPサーバPRIMEPOWER2500 (28 CPU)
 - ・大容量ストレージ装置ETERNUS8000 (125 Tバ



出典: DDBJ: DDBJ/EMBL/GenBank database growth.⁽⁷⁾

図-1 国際塩基配列データベースの推移
Fig.1-INSDC database growth.

- イト)
 - ・ブレードサーバBladeSymphony
 - (2) 相同性検索用サーバ
 - ・PCクラスタPRIMERGY RX200 S3 (66ノード)
 - (3) キーワード検索用サーバ
 - ・大規模XMLデータベース専用サーバ
ShunsakuEngine (2520 CPU)
 - (4) 解析用サーバ
 - ・大型SMPサーバPRIMEPOWER2500 (32 CPU)
 - ・PCクラスタPRIMERGY RX200 S3 (66ノード)
 - (5) バックアップ装置
 - ・テープライブラリ装置VD800 (750 Tバイト)
 - (6) そのほかのサーバ/ネットワーク装置
 - ・ネットワークサーバPRIMERGY RX200 S3/RX300 S3
 - ・スイッチ/ルータCatalyst6506/IPCOM S2400など
- 新スーパーコンピュータシステムの主要な機器について旧システムとの比較を表-1に示す。

新遺伝子配列DBシステムの詳細

● データベース構築・公開用サーバ

データベース構築・公開用サーバは、DDBJのデータの一元管理、公開用データの作成を行うシステムであり、大規模データベースシステムの安定運

用実績の高いSolaris OSを採用した大型SMPサーバであるPRIMEPOWER2500 (28 CPU/88 Gバイトメモリ)を中心に、125 Tバイトの大容量ストレージ装置ETERNUS8000およびブレードサーバBladeSymphonyを組み合わせ構成している。データベース管理ソフトウェアとしては、データベース構築システム用にHiRDBを、データベース公開システムにはSymfowareを用途に応じて採用している。データベースおよび公開用データは、大容量ストレージ装置ETERNUS8000に格納されており、定期的にバックアップ装置VD800にバックアップされるほか、とくに重要なデータについては、国立情報学研究所のサーバに接続されたディスク装置に遠隔バックアップも行っている。

データベース構築システムでは、主として国内の

表-1 主要な機器の旧システムとの性能比較

業務・用途	機器	性能比
DB構築/公開業務用	UNIXサーバ	約10倍
	ブレードサーバ	
	ストレージ	
キーワード検索用	ShunsakuEngine	約20倍
相同性検索用	PCクラスタ	約15倍
解析用	UNIXサーバ	約20倍
	PCクラスタ	
ストレージ	SANストレージ	約5倍
バックアップ装置	アーカイブ	

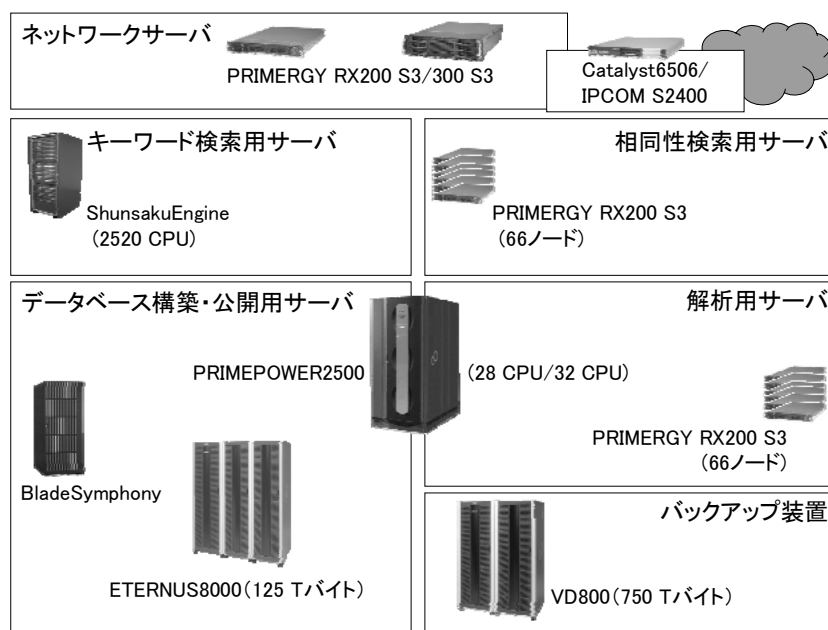


図-2 新スーパーコンピュータシステムの概要
Fig.2-New supercomputer system.

研究者から塩基配列登録システムSAKURA[®]ならびに大量登録システムを利用して登録された塩基配列解析データを格納し、遺伝学研究所のアノデータと呼ばれる専門家がデータの確認や編集を行う。確認後のデータはエントリ単位に編集した後、毎日、データベース公開システムに引き渡される。

データベース公開システムでは、データベース構築システムから受け取ったデータに加えて、EMBL/GenBankから追加更新データを毎日収集し、DDBJ形式への変更を行った上で、世界3大データベースが日々収集するデータすべてを公開している。データベースはエントリ（フラットファイル）形式のほか、DDBJ-XML形式、INSD-XML形式、FASTA形式でも公開している。利用者はDDBJのアノマスFTPサイト[®]から必要なデータをダウンロードして利用できるほか、エントリ単位での検索システムgetentry⁽¹⁰⁾や、後述する相同性検索システム、キーワード検索システムを用いて検索することができる。

● 相同性検索用サーバ

相同性検索とは、DNA配列、RNA配列、アミノ酸配列に対して生物学的な類似性をもとに行う検索であり、生命科学研究においては遺伝子機能の推定や進化解析などに広く用いられている。相同性検索には検索対象データの種類や相同性検索アルゴリズムの違いから様々なソフトウェアが存在するが、現在ではBLAST、PSI-BLAST、FASTA、SSEARCH、HMMPFAMなどが広く利用されている。また、複数の塩基配列やアミノ酸配列の生物学的類似性をもとに整列するマルチプルアライメント解析も生命科学研究において広く用いられている。

DDBJでは、国際塩基配列データベースのほか、主要なタンパク質データベースを含む7000万件を超える（2007年11月現在）データベースに対して前記のソフトウェアによる相同性検索、およびマルチプルアライメント解析（CLUSTALW）をWebブラウザ上から利用できるサービス⁽¹¹⁾を提供している。検索結果はWebブラウザ上で参照するほか、Eメールによって受け取ることも可能である。また、Eメールによる検索依頼や、Web/APIを利用してプログラムから利用することも可能である。

相同性検索用サーバには66ノード（うち2ノードは管理ノード）のPRIMERGY RX200 S3から成るPCクラ

スタを利用している。各ノードには、3.0 GHzのデュアルコアCPU×2個と8 Gバイトのメモリ、140 Gバイトのディスク装置（RAID1）を搭載し、OSには64ビットモードのLinuxを採用している。

利用者からの検索リクエストはNQS（ネットワークキューイングシステム）を用いて各ノードに自動的に分散実行され、待ち時間の発生を最小限に抑え、利用者への高速なレスポンスと高いスループットを実現している。また、HMMPFAMでは、富士通研究所が開発した並列化版ソフトウェアを利用して超高速処理を実現している。

これらの性能向上により、とくに利用の多いBLAST/FASTA/CLUSTALWサービスでは、利用件数が2007年10月には前年同月比で110～130%と伸びている。

● キーワード検索用サーバ

DDBJでは、国際塩基配列データベースのほか、生命科学分野の主要なデータベース24種に対する統合的なキーワード検索サービスARSA^{(12),(13)}を提供している。SRS⁽¹⁴⁾に代表されるような従来のキーワード検索システムでは、検索条件が複雑になるとともに加速度的に検索レスポンスが悪化したり、データ量の増加に伴ってキーワードインデックスの生成に長時間を要したりするという課題がある。キーワード検索サービスARSAでは、富士通が開発したXML型データベースエンジンShunsaku⁽¹³⁾を専用ハードウェアに搭載した大規模XMLデータベース専用サーバShunsakuEngineを利用する⁽¹⁴⁾ことにより、24種/3000万件（2007年11月現在）のデータベースに対して複雑な複合条件検索でも10秒以内（平均3～4秒）のレスポンスを実現している。

ShunsakuEngineは、2Uの筐^{きょう}体の中に168 CPUコアのマイクロプロセッサと合計42 Gバイトのメモリを搭載し、メモリ上に展開したデータを専用アルゴリズムで検索することにより、高速な検索レスポンスと省スペース、省電力を実現している。本システムでは15台のShunsakuEngineと9台のLinuxサーバを2ラックに搭載している。

これらの施策により、キーワード検索サービスでは2007年の利用件数が前年同月比で110～200%と伸びている。

● 解析用サーバ

遺伝学研究所内で共同利用する研究用・解析用に、大規模メモリジョブに適したSMP型サーバとしてSolaris OSを採用した32 CPU/128 GバイトメモリのPRIMEPOWER2500と、分散メモリジョブに適した66ノード（うち2ノードは管理ノード）のLinux PCクラスタシステムを運用している。PCクラスタシステムの各ノードには、3.0 GHzのデュアルコアCPU×2個と8 Gバイトのメモリ、140 Gバイトのディスク装置（RAID1）を搭載し、OSには64ビットモードのLinuxを採用している。また、インタコネクタとして通常のGigabitイーサネットに加えてより高速なInfiniBandも搭載し、分散プログラムの高速な処理実行を実現する。

遺伝学研究所の研究者は申請により解析用サーバを利用することができる。また遺伝学研究所以外の研究者も遺伝学研究所との共同研究において申請により解析用サーバを利用することができる。

● バックアップ装置

容量750 Tバイトのテープライブラリ装置VD800を導入している。本装置は容量6.25 Tバイトのディスク装置を備えており、このディスク装置に対してアクセスすることにより、自動的にテープへのバックアップ/リストアが行われるため、テープ装置の存在を意識せずにあたかも750 Tバイトのディスク装置であるかのように利用することができる。

バックアップ装置はDDBJのデータベースのバックアップに利用するほか、遺伝学研究所の研究者も申請により利用することができる。

● ネットワークサーバ/ネットワーク機器

ここまで説明したサーバ類は遺伝学研究所のファイアウォールによってインターネットから隔離されている。さらに、インターネットに対して公開するWebサーバ、FTPサーバ、メールサーバなどはDMZ（非武装ゾーン）に設置し、国際塩基配列データベースのような重要なデータを保管するシステムはサブネットワークを分離し、より強固なセキュリティを実現している。

今後の展望

本スーパーコンピュータシステムは2007年3月より運用を開始し、現在まで大きなトラブルもなく安定して運用している。

本スーパーコンピュータシステムは、導入2年後に主要なシステムの性能、容量をほぼ2倍に増強することが導入当初より計画されている。本スーパーコンピュータシステムの利用状況の分析を行うとともに、生命科学分野の研究における情報システムの利用動向を十分に考慮しながらシステム増強を実施していく予定である。

む す び

本稿では、本スーパーコンピュータシステムが生命科学分野の研究における超大規模遺伝子配列データベースシステムの課題をいかに克服したかについて紹介した。

生命科学分野の研究ではデータの急速な増加が今後も見込まれるだけでなく、従来、個別のデータベース、個別の研究テーマであったものから、相互のデータを連携し関連付けて、生命現象の全体像に迫る動きが急速に進展しており、より複雑かつ体系的なデータの管理、より使いやすい検索やデータ利用システムの整備が望まれている。

本スーパーコンピュータシステムを、日本および世界の生命科学研究の先端的情報基盤として運用していきたい。

参考文献

- (1) DDBJホームページ.
<http://www.ddbj.nig.ac.jp>
<http://www.ddbj.nig.ac.jp/index-e.html>
- (2) H. Sugawara et al. : DDBJ with new system and face. *Nucleic Acid Research*, 2007, 1-3 doi : 10.1093/nar/gkm889.
<http://nar.oxfordjournals.org/cgi/content/full/gkm889v1>
- (3) 山口政仁 : 国立遺伝学研究所におけるDNAデータベース : DDBJ. *FUJITSU*, Vol.53, No.5, p.353-358 (2002).
<http://img.jp.fujitsu.com/downloads/jp/jmag/vol53-5/paper04.pdf>
- (4) EMBL-EBI : European Bioinformatics Institute.
<http://www.ebi.ac.uk/>
- (5) NCBI : GenBank Overview.
<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/Genbank/index.html>
- (6) INSDC (International Nucleotide Sequence Database)

- Collaboration).
<http://www.insdc.org/page.php?page=home>
- (7) DDBJ : DDBJ/EMBL/GenBank database growth.
http://www.ddbj.nig.ac.jp/images/breakdown_stats/DBGrowth-e.gif
- (8) DDBJ : SAKURA.
<http://sakura.ddbj.nig.ac.jp/>
- (9) DDBJ : FTP Listing of Root at ftp.ddbj.nig.ac.jp.
<ftp://ftp.ddbj.nig.ac.jp/>
- (10) DDBJ : getentry
<http://getentry.ddbj.nig.ac.jp>
- (11) DDBJ : Search and Analysis.
<http://www.ddbj.nig.ac.jp/search/>
- (12) DDBJ : ARSA (All-round Retrieval of Sequence and Annotation).
<http://arsa.ddbj.nig.ac.jp/>
- (13) 西宮直樹 : 国際塩基配列データベース検索システムへの Interstage Shunsaku の適用. *FUJITSU*, Vol.56, No.1, p.54-58 (2005).
<http://img.jp.fujitsu.com/downloads/jp/jmag/vol56-1/paper05.pdf>
- (14) DDBJ : SRS (Sequence Retrieval System)
<http://srs.ddbj.nig.ac.jp/top-j.html>
<http://srs.ddbj.nig.ac.jp/>

