

平成28年度 学内研究助成金 研究報告書

研究種目	<input type="checkbox"/> 奨励研究助成金	<input type="checkbox"/> 研究成果刊行助成金
	<input type="checkbox"/> 21世紀研究開発奨励金 (共同研究助成金)	<input checked="" type="checkbox"/> 21世紀教育開発奨励金 (教育推進研究助成金)
研究課題名	タンパク質構造予測用の超小型省電力並列計算機システムの構築を通じた生物系の学生のためのハイパフォーマンスコンピューティング(HPC)教育の試行	
研究者所属・氏名	研究代表者： 生物理工学部 生命情報工学科 准教授・宮下尚之	

1. 研究目的・内容

生命科学分野の大学生が HPC を体験したり、学べる機会はこれまで少なかった。そこで 学生と共に、タンパク質の構造予測用超小型超省電力並列計算機システムを構築し、HPC 教育プログラムを開発し、タンパク質のシミュレーションも含めて、生命科学系の学生に HPC 技術を体験してもらう。また、その HPC 教育の為の教育用キットの作成を行い、試行した。本研究課題は⑤健康・長寿・発達研究クラスターの「認知症高齢化社会の質の向上の為の医工文理認知症研究」(認知症) 研究コアの共同研究の下で実施した。

2. 研究経過及び成果

本研究で raspberry pi3 という超小型パーソナルコンピュータ(PC)ユニットを用いて、2つのシステム①教育用 PC クラスタシステムと②タンパク質シミュレーションシステムを構築し、これらのシステムを用いて生物理工学部の学生の希望者に対して③HPCに関する講義・講習を実施した。

raspberry pi3 は非常に小型の教育用の PC である。素子が露出している為、IT 教育には非常に使い勝手が良い。また、拡張性があるだけでなく、通常の Linux PC として安価に利用することができるシステムである。本研究ではこの raspberry pi3 を用いた PC クラスタを作成し、HPC などの並列コンピューティングの基礎からタンパク質の構造予測に繋がる生体分子シミュレーションなどの応用までを、生命科学・生体工学分野の学生に体験してもらう講義を実施した。

①raspberry pi3 を用いた教育用 PC クラスタシステムの構築

raspberry pi3 を数十台、それぞれにモニターと電源を接続し、microSD カードに共通の OS を入れた独立したシステムを持つミニ Linux を作成した。そしてそれらを 1Gbps のスイッチングハブを用いた有線ネットワークで結合し小型並列コンピュータが作れる下準備を行なった。教育の為、使用する際に毎回、学生が必要な数の PC を使って PC クラスタを組み立てられる様に整備している。また、ハイブリッド並列計算の実験ができる様に必要なソフトウェア及び、教材を作成した(現状、約 50 台程度までの接続が可能である)。

②タンパク質シミュレーションシステムの構築

全ての PC に Gromacs をインストールし、生体分子シミュレーションが実施できる様に整備した。

③作成したクラスタシステムを用いた HPC 教育

1) 作成した α -version の機器及び教材のプロトタイプを試行を機能性生体分子システム研究室の4年生に対して実施

(2016年8月19日図1)。

2) 1) の経験から内容の再吟味を行い、教材を修正した β -version を研究室の3年生に対して試行した(2016年9月12日)。



図1:HPC 教育のプロトタイプの試行

3) 以降、2) を参考に大学院のバイオスーパーコンピューティング特論用に HPC 教育プログラムを作成し、実践的な試行を実施した。

非常に好評で、2017 年度もプログラムを修正しながら実施している

(図2)。尚、この講義の最後の数コマで、受講者に生体分子シミュレーションを体験してもらっている。



図2:HPC 教育の実践的試行

3. 本研究と関連した今後の研究計画

本学大学院生物理工学研究科で開講している バイオスーパーコンピューティング特論にて、2017 年度も本課題で作成した機材を用いた HPC 教育プログラムを実施している。プログラミング経験の無い生物工学専攻の学生も受講しており、教育プログラムを修正しながら今後も運用する。更に、本課題の結果として、2017 年度後期開講の生物理工学部生命情報工学科の「情報基礎実験 (2 年次必修)」という実験講義の実験項目の1つにて、本課題で作成した機材及び教育プログラムの一部を用いた「並列コンピューティング」という実験を実施する。今後の研究計画としては、本課題で作成した超小型 PC クラスタ (HPC) を利用したタンパク質構造予測研究の結果・成果を出す事である。また、関連した外部助成金申請として「医療・健康関連データ解析と応用に貢献する HPC 人材育成プログラム」という提案が、近大から平成29年度文科省「データ関連人材育成プログラム (公募)」に応募し、1 次エントリーに選抜され公開された。今後も本学における IT・HPC 教育の提案とそれらを利用した生物理工学研究を精力的に実施する。

4. 成果の発表等

発表機関名	種類 (著書・雑誌・口頭)	発表年月日(予定を含む)
なし		