

平成17年度科学研究費補助金実績報告書（研究実績報告書）

1. 機関番号 1 4 6 0 3      2. 研究機関名 奈良先端科学技術大学院大学
3. 研究種目名 特定領域研究      4. 研究期間 平成16年度～平成17年度
5. 課題番号 1 6 0 1 6 2 6 4
6. 研究課題名 プログラムの実行戦略を考慮した高スループットコンピューティングに関する研究

7. 研究代表者

研究者番号	研究代表者名	所属部局名	職名
3 0 2 5 2 7 2 9	フガナ フジカワ, カズトシ 藤川, 和利	情報科学研究科	助教授

8. 研究分担者(所属研究機関名については、研究代表者の所属研究機関と異なる場合のみ記入すること。)

研究者番号	研究分担者名	所属研究機関名・部局名	職名
2 0 2 0 6 5 7 7	フガナ スナハラ, ヒデキ 砂原, 秀樹		教授
	フガナ		
	フガナ		
	フガナ		

9. 研究実績の概要(国立情報学研究所でデータベース化するため、600字～800字で記入。図、グラフ等は記載しないこと。)

多くの科学技術計算では、一連の処理の中で最終的に精度の高い結果を得るために、途中結果から計算パラメータを調整し直し、再度実行するといった試行錯誤を行うことが多い。そこで、本研究課題では科学技術計算における試行錯誤をグリッド環境で効率的に行うための高スループットコンピューティングシステムについての研究開発を行った。

本研究課題では、タンパク質立体構造予測を対象アプリケーションとして扱い、タンパク質立体構造予測を行う研究者が短時間で精度の高い結果を得ることのできる環境の提供を目標とした。現在、タンパク質立体構造予測手法は確立されておらず、試行錯誤によってタンパク質立体構造予測を行なわれている。このため、立体構造予測を行うツール/プログラムに対して入力パラメータの変更が、ツール/プログラムの実行途中に得られた立体構造の結果により、しばしば行われる。また、複数のツール/プログラムを組み合わせることで立体構造を予測することが多く、個々のツール/プログラムの結果により、組み合わせを変更したり、同じツール/プログラムを何度も繰り返し実行することがある。このため、利用者と高スループットコンピューティングシステムとの間に対話的な操作を実現し、ツール/プログラムの実行順序やパラメータ設定を定義できる機能が必要であると考へ、複数のツール/プログラムの実行順序の定義や、それぞれのツール/プログラムにおける入力パラメータの定義を容易に実現することのできるワークフロー支援機構を提案した。

本研究課題で開発したワークフロー支援機構では、実行中のジョブに対するワークフローを変更し、即座にその変更を反映することが可能となるよう、変更部分のみを再実行できるようにしている。これにより研究者が任意の時点でワークフローを変更することができ、最終的なタンパク質立体構造予測の結果も精度を高めることが実現された。

※ 成果の公表を見合わせる必要がある場合は、その理由及び差し控え期間等を記入した調書(A4 判縦長横書 1 枚)を添付すること。

10. キーワード

- (1) ワークフロー                      (2) グリッドシステム                      (3) タンパク質立体構造予測  
 (4)    (5)    (6)  
 (7)    (8)    (裏面に続く)

11. 研究発表(平成17年度の研究成果)

〔雑誌論文〕 計(3)件

著者名	論文標題			
蟻川浩, 増田慎吾, 古田忠臣, 金文珍, 朴聖俊, 高田彰二, 藤川和利, 砂原秀樹	対話的動作を考慮したタンパク質立体構造予測システム			
雑誌名	巻・号	発行年	ページ	
情報処理学会論文誌コンピューティングシステム	46. SIG12	2005	407-419	

著者名	論文標題			
Kazutoshi Fujikawa, et al.	Applying a Grid Technology to Protein Structure Predictor "ROKKY"			
雑誌名	巻・号	発行年	ページ	
Proceedings of HealthGrid 2005 Conference		2005	27-36	

著者名	論文標題			
池部実, 増田慎吾, 藤川和利, 砂原秀樹	動的なデータ発生・移動に対応した一意にアクセス可能なデータグリッドシステムの提案			
雑誌名	巻・号	発行年	ページ	
情報処理学会研究報告	2006-HPC-105	2006	133-138	

著者名	論文標題			
雑誌名	巻・号	発行年	ページ	

著者名	論文標題			
雑誌名	巻・号	発行年	ページ	

著者名	論文標題			
雑誌名	巻・号	発行年	ページ	

〔図書〕 計( )件

著者名	出版社			
書名	発行年	総ページ数		

12. 研究成果による工業所有権の出願・取得状況

計( )件

工業所有権の名称	発明者	権利者	工業所有権の種類、番号	出願年月日	取得年月日