

MDDB日本ノード構築に向けたHPCI環境での展開と課題

○小林千草¹, 金山 秀智¹, 原田 浩¹, 甲斐 俊彦¹, 杉田有治^{1,2}, 松永康佑^{1,3}
(¹理化学研究所, ²東京大学, ³埼玉大学)

背景

MDDB (Molecular Dynamics DataBase) :
分子動力学(MD) シミュレーションデータの共有・公開・
再利用を目的とした国際基盤

FAIR(Findable, Accessible, Interoperable, Reusable)原則準拠

欧州を中心に8拠点で運営中

- IRB Barcelona (Spain)
- Barcelona Super computing center (Spain)
- KTH Royal Institute of Technology (Sweden)
- EMBL-EBI (Europe)
- Nostrum biodiscovery (Spain)
- EPEL-CECAM (Swiss)
- U. Oxford (UK)
- U. Florida (US)

R. Amaro et al. *Nature Methods*, 22, 641-645 (2025)
<https://doi.org/10.1038/s41592-025-02635-0>

MDDB <https://mddbr.eu/>
MDposit <https://mdposit.mddbr.eu/>



MDDB

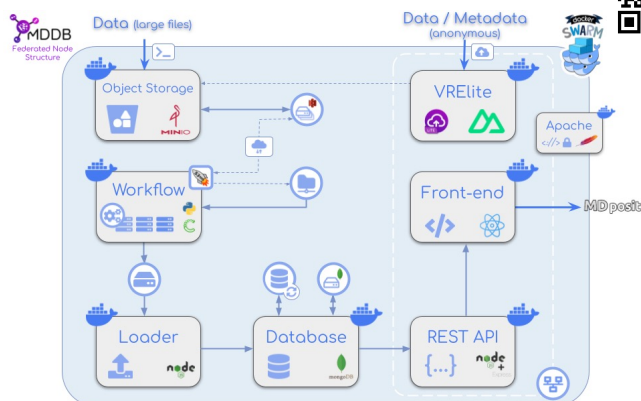


MDposit

MDposit - MDDB container

Loaderやworkflowなどシステムを構成するアプリ群は
Dockerファイルとして提供

<https://github.com/mmb-irb/MDDB-docker>



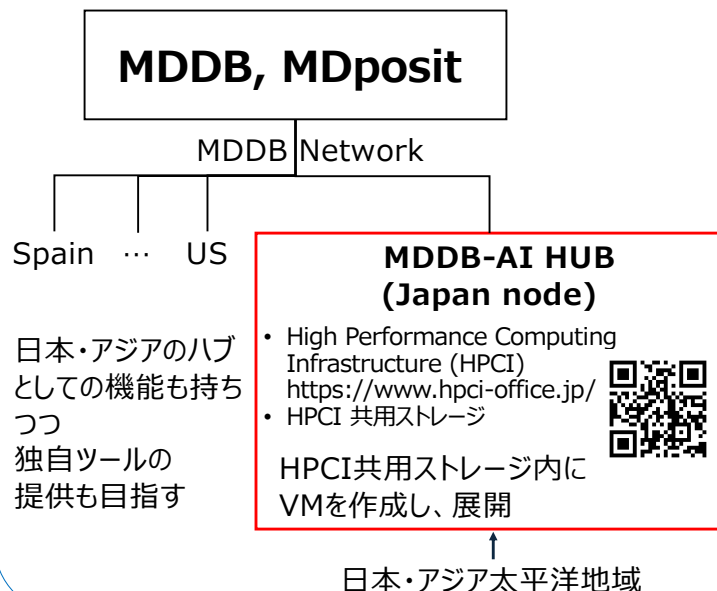
Source: MDDB-docker (mmb-irb), licensed under Apache License 2.0..

現在の状況&今後の展望

- ① ローカル環境構築
- ② Docker環境検証
- ③ MDデータ登録プロセスの確認
- ④ HPCI共用ストレージでのテストベッド構築
- ⑤ HPCI共用ストレージ展開
- ⑥ 外部公開に向けての手続き
- ⑦ 日本ノード開設

目的

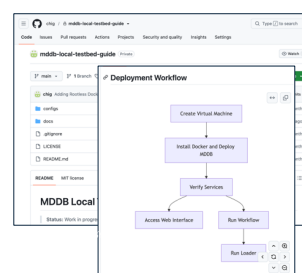
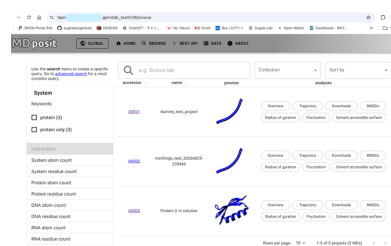
MDDB-AI HUBをMDDBの日本ノードとして構築



まとめ

これまでの成果

- ✓ 再現可能なローカル環境の構築
- ✓ MDデータ登録プロセスの検証
- ✓ HPCI共用ストレージへの展開開始
- ✓ 構築手順書の整備 (現時点では非公開)



HPCIテストベッド環境で構築した
MDposit登録済みプロジェクトの
表示例

構築手順書 (抜粋)
GitHub上で整備

今後の検討課題

- グローバルMDDBネットワークとの接続方式
- HPCI上のVMの管理体制
- 権限分担 (運用側・開発側)
- 持続可能な運用モデル
- HPCI共用ストレージを外部利用者が利用するための
仕組みづくり

Except where otherwise noted, this work is licensed under CC BY 4.0.

