

일본 JST의 고기능 기반 DB 구축 사업 소개

박 영 시 (E-mail: yongsik@kist.go.kr)

신한기술정보원 산업정보분석실장

- I. 서 론
- II. 고기능 기반 DB의 개발
- III. JST의 고기능 기반 DB와 복합 슈퍼컴퓨터 시스템

I. 서 론

컴퓨터 다양화·고도화되고 있는 정보화에 대한 니즈와·부단히 진보하고 있는·정보기술에 대응하기 위해 일본 과학기술 정보 분야의 중추적 기관인 일본 과학 기술 진흥 사업 단 (Japan Science and Technology Corporation, JST)은 계산과학이나·컴퓨터·그래픽(CG)의 발달·정보 유동 네트워크의 고도화를 배경으로 해시·물질·재료 및 생명과학의 2분야에서 선구·자원형의 세로운 DB인 「고기능 기반 DB」를 개발하고 있다.

또한 슈퍼컴퓨터를 포함해서 계산재료과학 분야의 계산 물질 데이터 향후·생명과학분야의 대규모 일기사열(sequencing)의 자원이나·매일 해석·등을 하는 환경구축을 계획하고 있다.

본 고에서는 이와 같이 슈퍼컴퓨터의 포함으로 새로운 전기를 맞고 있는 JST의 「고기능 기반 DB」구축 사업을 소개한다.¹⁾

II. 고기능 기반 DB의 개발

JST는 "연구 정보 DB 개발사업"으로서 물질·재료분야 및 생명과학분야의 고기능 기반 DB를 개발하고 있다.

고기능 기반 DB는 신규 데이터를 추가하거나 여러 데이터를 보완하는 기능, 연구자가 직접 데이터를 등록할 수 있는 기능, 검색이나 출력을 고도로 편리하게 제공하는 기능 등을 주축으로 하고 있다.

1. 고기능 기반 물질 DB의 개발 (물질·자료 분야)

JST의 고기능 기반 물질 DB의 개발은 핵심 분야와 고분자 분야를 대상으로 해서 추진되고 있다. 물질·재료 분야를 장악할 때 원자·분자·에不满의 마이크로한 세밀로부터 채코크사의 마크로한·현상까지가 대상이다.

예를 들어 물질의 구조라고 하는 기본 데이터로부터 그 물질의 성질을 예측하거나·반대로 기체(気体)·물질의 데이터를 기초로 유용한 기능을 가진 물질을 계산기상에서·상제하는 기능·기지 데이터를 기초로 결실된 데이터를 추산·보완하는 기능, CG 기술을 이용해서 일기·시운·출력 결과를 얻는 기능, 그리고 네트워크를 통해서 많은 연구자가·간단하게·데이터를 제공하거나 이용할 수 있는 기능을 중심으로 개발하고 있다.

이러한 기능을 가진 것으로서·결정 구조·고유 특성, 표면 회결·상태도의 각 데이터로 구성된 고기능

합금 DB 개발을 국제협력으로 추진하고 있다. 또한, 고분자에 대해서도 물성지뿐만 아니라 구조·형상의 상호·교환 기능이나 해석·추산 기능을 가진 DB를 개발하고 있다.

합금 DB는 마이크로한 계산 물성 DB, 마이크로한 엔지니어링 DB, 그 중간에 있는 키트 DB의 3가지 축으로 개발되고 있으며, 금속캐로 강도 DB, 압력용기 채로 DB, 3차원 상대도 표시 시스템, 계산 물성 DB, 기초적 DB 등이 있다.²⁾

고분자 DB PolyInfo는 고분자와 화학구조에 근거해서·식별·동경(同鏡)하는·시스템인 고분자 사전을 개발하고 있다.³⁾

2 고기능 기반 생체 DB의 개발 (생명과학 분야)

생명과학 부문에서는 JICST 시절인 1995년부터 고도로 복잡한 생체인 인간을 타깃으로, 가장 키오적인 생체 정보인 인간 계놈 DNA의 업기 서열 데이터를 기본으로 해서 캡 아미노산 배열, 단백질 구조 등 유전과 관련 데이터의 종합 접속이 가능한 고기능·기반·생체·DB (Advanced Lifescience Information System, ALIS)를 개발하고 있다.

관련 분야의 연구자가 인간 계놈 DNA 해독 데이터를 활용할 수 있는 시스템을 목표로, ① 대규모 인간 계놈·서열의 해독과 DB화, ② GDB 등 관련된 공동정보화의 통합, ③ 계놈 데이터 고도 이용을 위한 정보처리 기술을 개발하고 있다.⁴⁾

JST는 ALIS 프로젝트의 실현으로 인간 계놈 연구를 목적으로 하고 있는 외부 연구기관에 대해서 인간 계놈 특강·정역의 DNA 업기·서열을 위탁하는 계놈 프로젝트를 추진하고 있다.⁵⁾

외부 위탁기관은 남장 성역을 업기·서열화 함으로써 해당 성역의 DNA 업기·서열을 확득한다.

여기서 확득한 업기·서열 데이터는 위탁기관 내에서의 계놈 연구계로가 됨과 동시에 업기·서열 데이터

“
슈퍼컴퓨터를 도입해서 ·
계산재료과학 분야의 ·
계산 물성 데이터 창제 ·
생명과학분야의 대규모 업기 ·
서열의 지원이나 배열 해석 ·
등을 하는 환경정비를 계획 ·
하고 있다. 이와 같이 ·
슈퍼컴퓨터의 도입으로 ·
새로운 전기를 맞고 있는… ·
”

창출에 관련된 딱트 데이터가 JST에 제출된다. 이와 같이 해서 획득한 데이터를 세계적으로 경비·DB화 해서 네트워크 연구 중보 차원으로서 그 일부를 전 세계에 공개하고 있다.

그리고 유전과 관련 데이터를 연구자가 유효하게 이용하기 위한 해석 기능·해석·결과의 표시 기능도 개발하고 있다. 해석 기능으로서는 DNA 업기·서열의 절대적·전집 보정 기능·유전과 성역의 추정 기능 등이 있다.

또한 네트워크를 이용해서 검색·해석·결과를 연구자가 간단한 조작으로 이용할 수 있는 환경구축도 개발하고 있다.

3 고기능 기반 생체 DB 개발의 목표

고기능 기반 생체 DB 개발은 인간 계놈 해석 계획에 의해 선언한 대량의 DNA 업기·서열 데이터 DB에 수록하여 공개함과 동시에 고도의 데이터

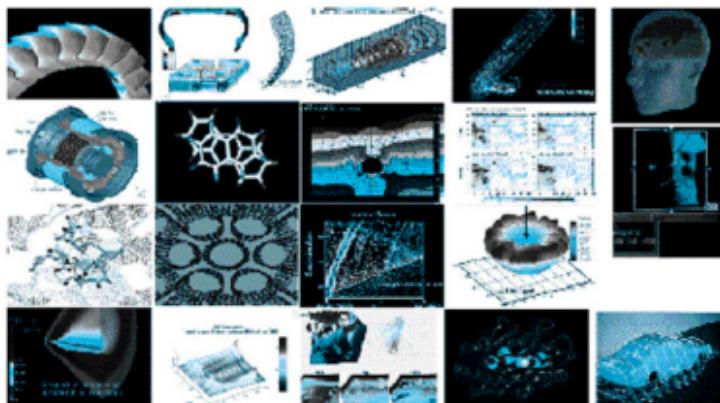
활용을 실시하는 응용프로그램웨어 큐를 갖춘 DB 시스템을 제공함으로써 업기·서열 데이터 중에서 유전과 등의 의미 있는 정보를 추정·해석·검색할 수 있는 연구활동 지원 툴의 개발을 목표로 하고 있다.

4 고기능 기반 생체 DB의 개발 단계

고기능 기반 생체 DB는 다음과 같이 크게 4단계로 나누어 개발되고 있다.

1) 대규모 업기·서열 결정

고기능 기반 생체 DB의 키트 데이터가 되는 100만 업기의 연속한 DNA 업기·서열 데이터를 해독하는 업기·서열 결정(sequencing) 작업을 한다. 업기·서열 결정 작업은 업기·서열 결정에 필요한 인간 계놈의 캐로 및 기술을 보유한 연구자가 소속되어 있는



대학이나 연구기관에 위치한다.

1995년부터 모델 데이터를 획득할 목적으로 대량의 캐노니컬 절경·파일럿 프로젝트로서 선속 100만 암기 이상의 인간 캐노니컬 절경 작업을 4기관에 위탁하고 있다.³⁾

2) 기반 DB의 개발

DB 개발의 첫 단계는 암기 셰일로 얻어진 DNA 암기·서열 데이터를 받아 꽁카·공기하는 3개의 서버시스템(광비 서버시스템, 꽁카 서버시스템, 공기 서버시스템)으로 구성된 「기반 DB」를 개발하는 것이다.

3) 인간 캐노니컬 통합 DB의 개발

고기능 기반 캐노니컬 통합 DB의 중심 DB는 「인간 캐노니컬 통합 DB」이다. 이 DB에는 2)에서 상술한 DB 외에 카드 정보·유관나 배설 정보·유관나 질환 정보 등 인간 캐노니컬 프로젝트의 전반에 따라 축적되어 다양한 정보를 수집·정리·캐 구축한 DB(기본 DB)가 포함된다.

4) 데이터 해석 소프트웨어의 개발

기반 DB—인간 캐노니컬 통합 DB의 개발과 병행해서

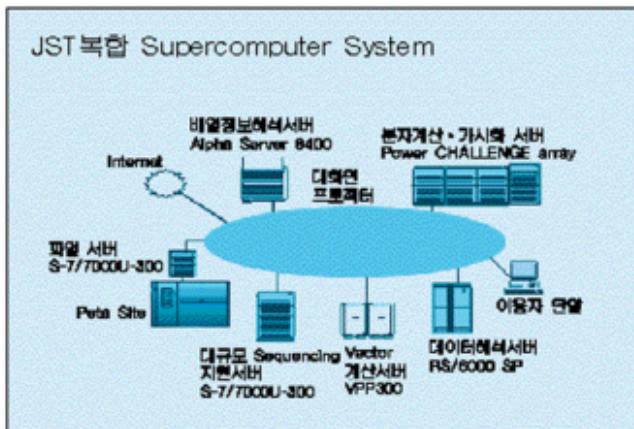
유관나 성역의 예측이나 유관나 채어 성역의 예측과 같은 고도의 계층 정보를 해석하고, JST 독자적인 응용소프트웨어를 개발할 계획이다.

또한 암기·서열·정보로부터 드백걸 케렐의 해석(기능 예측, 2차 구조 예측, 암체구조 예측 등)을 수행 할 수 있는 응용소프트웨어의 개발도 추진할 계획이다.

III. JST의 고기능 기반 DB와 복합 슈퍼컴퓨터 시스템

JST에서는 「연구 기반 DB 개발 사업」으로서 물질·체계분야 및 생명과학분야의 고기능 기반 DB를 개발하고 있다. 이 고기능 기반 DB는 연구 정보 네트워크의 보급을 배경으로 한 연구개발 활동의 고도 정보화에 대응하여 다양한 과학기술 분야의 연구가를 대상으로 해서 그 특성에 맞는 활용성이 확보되도록 정보나 기능을 제공함을 목적으로 하고 있다.

이러한 사업을 위해 JST가 조립하여 JST 등장 본부의 슈퍼컴퓨터실에 설치한 복합 슈퍼컴퓨터 시스템은, 계산 목적에 따른 5종류의 고속 계산 서버 및 기타 워크스테이션 등이 상호 고속 네트워크로 연결되어 있으며, 서버 간 효율적 연대를 가능케 하고 있



■ 그림 1 JST 복합슈퍼컴퓨터 시스템

다. 이 시스템은 고기능 기반 DB가 갖고 있는 다양한 기능의 개발에 필요한 고속 계산 처리 알고리즘의 연구·개발과 데이터 해석 등의 실제의 계산 처리 시스템의 개발에 취력을 발휘하여 기타 JST의 기초 연구·기량의 지원과 공동연구에도 이용되고 있다.

본 시스템은 1997년 2월 25일부터 본격적으로 개통되었다.

1. 도입 경위

JST에서는 생명과학분야 및 물질·재료분야의 고기능 기반 DB를 개발하고 있다. 이 고기능 DB는 신규 데이터의 출판이나 여러 데이터를 보완하는 [데이터 통합기능], 연구자와 DB가 대화하면서 데이터 정기화·데이터 등록을 하는 [인터랙티브 기능], 또한 검색·맞출력시·고도의 편의성을 제공하는 [이용자 친화 기능] 등을 주축으로 하고 있다.

2. 시스템 소개

본 시스템은 기본적으로 5종류의 고속계산서버·파일서버·네트워크·메모리 등으로 구성되어 있다.

가. 시스템의 특징

① 기능·성능에 대응할 수 있는 다양한 계산기 편집·고기능 DB를 개발하는 2분야에서는, 계산에 이용되는 알고리즘이 다르다. 모든 계산을 대형 계산기 1대로 하는 것이 아니라 각각의 계산에 맞는 최적 계산기를 도입했다.

② 세계 최초의 VRML을 프로그래머.

Supercomputing과 Visualization의 유기적 결합을 목표로 본부의 지하·홀에 복합 슈퍼컴퓨터 시스템과 직관·언어·1D·인체·대화면·프로젝터를 설치했다.

액정 서터 방식의 인장을 적용함으로써 가시화(可视化)·서버로 작성된 CG나 인터넷 상에서 공개되고 있는 VRML 데이터를 쉽게 화상으로 볼 수 있다.

3) 대용량 기억장치

DB를 개발하기 위해서는 대량의 데이터 처리가 필요하기 때문에 시스템 전체로 77GB, 디스크 23TB, 메모리 기록장치 6TB라고 하는 대용량 기억장치를 갖추었다.

나. 시스템의 개요

1) 빅데이터 처리 서버

빅데이터 및 빅데이터 분석으로 대규모 수치 계산을 한다.

2) 분자 계산·가시화 서버

계산과 가시화를 선택, 기능지기며 결경구조의 변화 등 계산 과정을 그림으로 표시한다. 또한 그 결과를 대형 프로젝터로 투영(생물)시키거나 씨디오로 녹화 할 수 있다.

3) 대규모 암기 서열 결정 서버

다른 생명과학 관계 기관과의 협력을 중시한 다양 한 소프트웨어 이용이나 교류를 하기 위한 플랫폼으로 한다. 고속 同源(homology) 검색이나 DNA 조합 등에 이용된다.

4) 서열 정보 해석 서버

신규 알고리즘의 검증이나 연구개발을 위해 단체(單體)·CPU 성능이 높은 계산기이다. DNA 서열의 주석(注釋) 등에도 이용된다.

5) 메이티 해석 서버

메이티 해석을 원만히 병행 처리시키는 병렬의 연구개발 등에 이용된다.

네트워크부는 기능 분산화를 도모하기 위해 HIPPI 와 FDDI의 2종류 네트워크를 중심으로 한 LAN으로 구성되어 있다.

3. 시스템의 활용 예

생명과학 분야에서 생각하고 있는 당면의 메마는 고속 등록·검색·유전자 구조 예측·인간 DNA 서열 등의 시그널 패턴 추출이나 유전자 양식 추정·생체 고분자의 구조 해석 등이다.

기타 IST의 기초 연구·개발의 지원과 공동연구에의 이용이 기대되고 있다.

■ 주

- ① 일본IST의 홈페이지, <http://www.jst.go.jp> 참조.
- ② 雷鳥計算機, “雷鳥管理”, IST, 제41권 제10호, 1998. 1, pp.834-845.
- ③ 高山弘, “J. L. “雷鳥管理”, IST, 제42권 제3호, 1998. 6, pp.200-207.
- ④ 今井建輔 “雷鳥管理”, IST, 제41권 제8호, 1998. 12, p731.
- ⑤ 佐川善彦, “雷鳥管理”, IST, 제41권 제4호, 1998. 7, pp.254-261.