

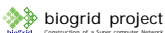
 biogrid project
Construction of a Super computer Network

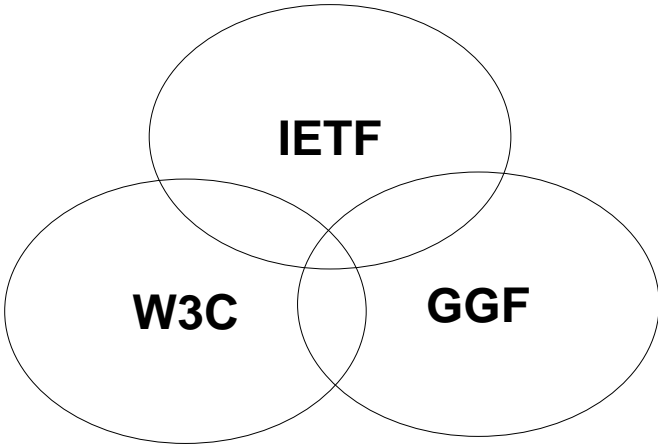


バイオグリッドプロジェクト の近況

下條真司

www.biogrid.jp


Internetの世界  biogrid project
Construction of a Super computer Network



IETF

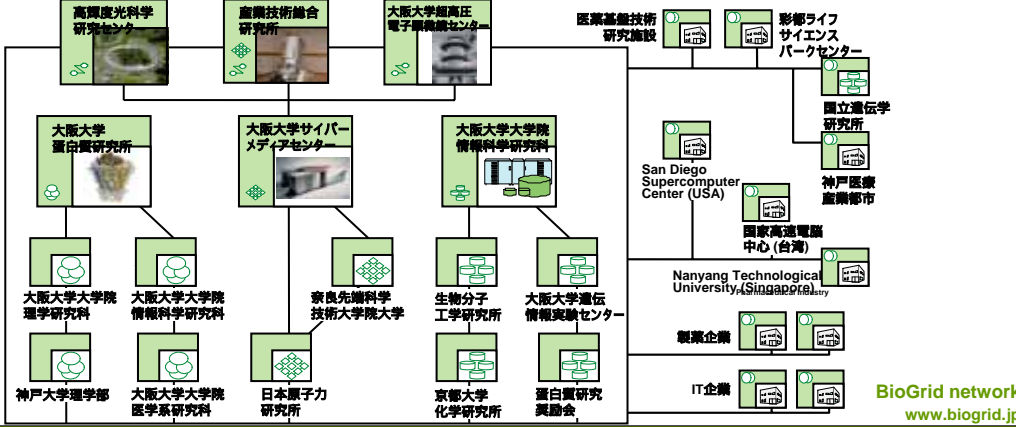
W3C **GGF**

スーパーコンピュータネットワークの構築 (BioGrid Project)






- 文部科学省 ITプログラム「e-scienceプロジェクト」の一つ
- 生命科学(医学・生物学など)分野におけるIT応用研究を推進するため、大阪大学サイバーメディアセンターを核として、高度な計算資源とネットワークを利用する基盤環境とソフトウェアをグリッド上に構築する。
- 生命科学とIT分野を結ぶ架け橋となる人材を育成する。
- 国立研究期間、民間企業、国際機関との連携を通じて、スピードの速い開発を行う。
- これらの基盤環境とソフトウェアにより関西における関連機関の連携を強化し、in silico創薬の可能性を開くとともに我が国の国際競争力の強化をねらう。

• コンピューティンググリッドとデータグリッドの融合を生命科学分野に特化して行う

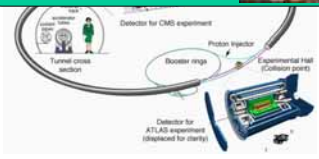


e-science: Data-Intensive Science



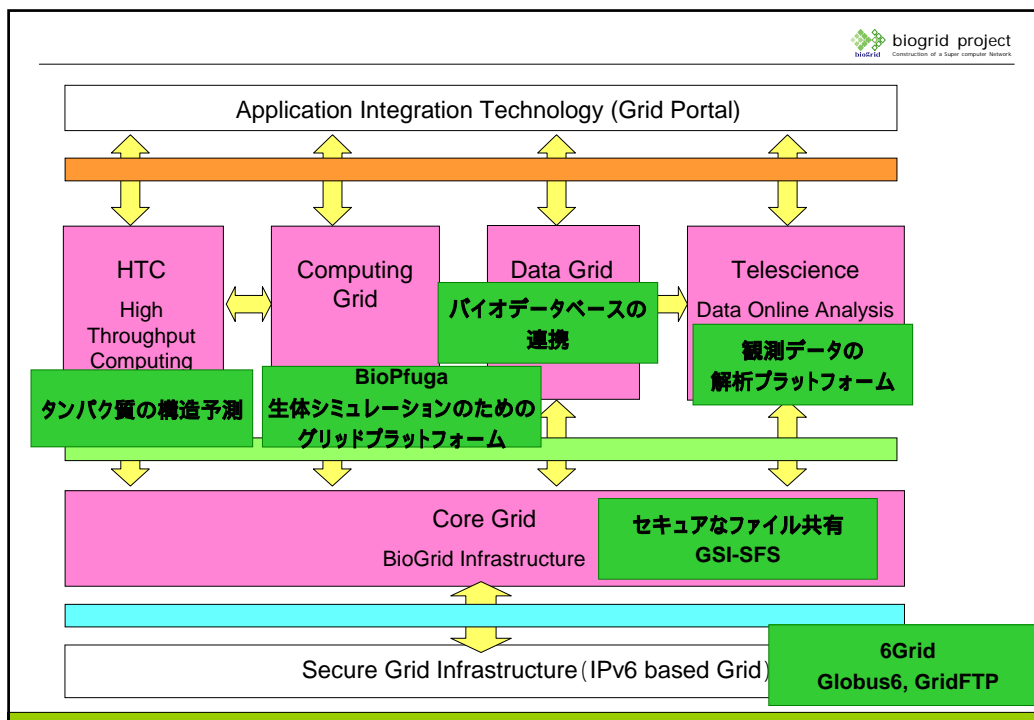
Canary in a coal mine

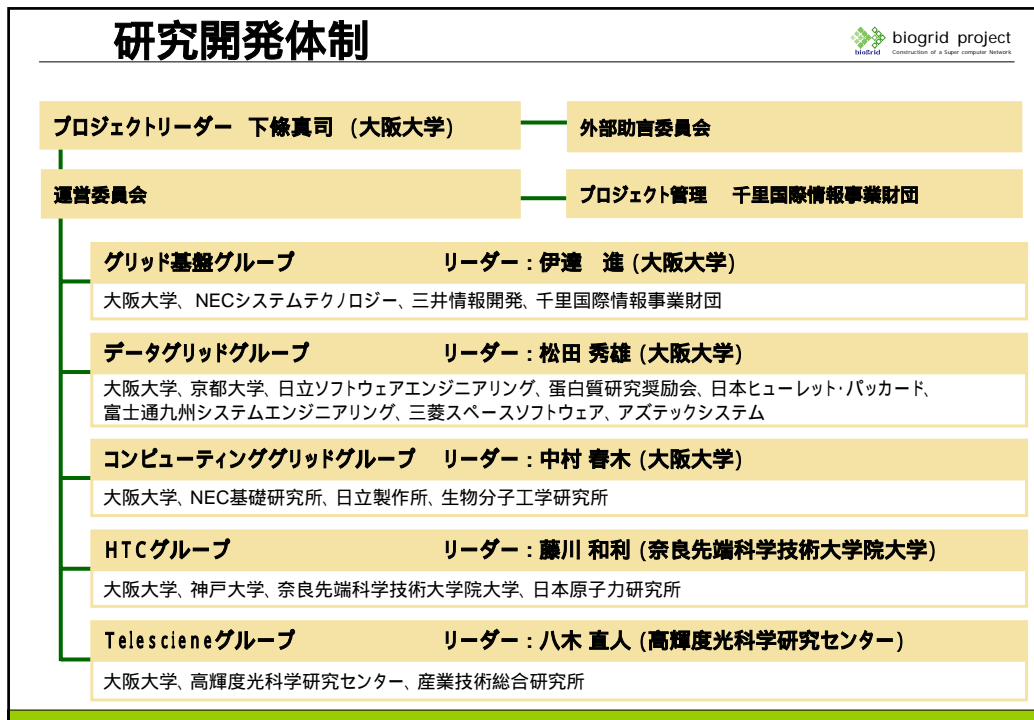


生命科学がグリッドを必要とする理由




- 生命科学はゲノムの登場によってdata driven/intensive scienceに変わりつつある
- 原子、分子、細胞、組織、さまざまなレベルでのシミュレーションが可能であるが、**大規模な計算パワー**を必要とする
- 生命科学は歴史もあり、非常に多岐にわたっているため、そもそも**科学者の協調**が必要である
- 生命科学にまつわる大量の情報が世界中に分散するデータベースで維持されており、それらの**連携**が必要




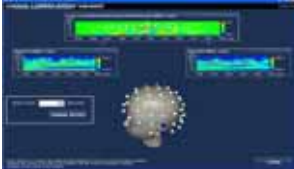
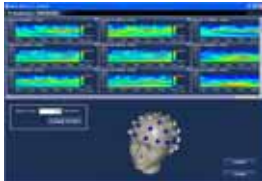


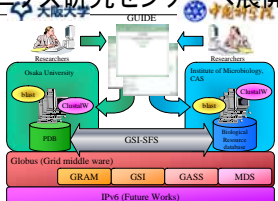
これまでの研究成果



Construction of a Super computer Network

- 基盤グループ
 - PCクラスター(156CPU)等からなるバイオグリッド基盤システムを立ち上げ、Globus、Condor等のグリッドツール群を整備、PRAGMA、SC等での国際連携にも参加。
 - グリッドと統合した安全なファイル共有システム GSI-SFSを開発し、中国科学技術院(CAS)との生物資源データベース検索システムの構築を進めている。GSI-SFSについてはシンガポール、国立天文台といったユーザを獲得しつつある。
 - IPv6に基づくGrid toolを開発中。Globus 2.2.3、GridFTPなどを公開。
 - MEGの遠隔観測・解析・診断システムを開発。産総研ライフエレクトロニクス研究センターへ展開し、SC2002でデモ。

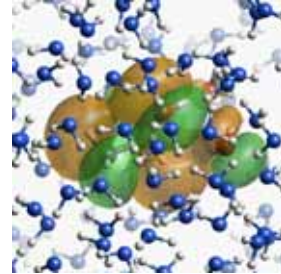






これまでの研究成果

biogrid project
Construction of a Super computer Network

- コンピューティンググリッド・グループ
 - 異なるアプリケーション・プログラムが、グリッド上で統合化され連成計算を実行する仕組み(バイオフォーガ)を提案し、プロトタイプの開発を行った。
 - 生体分子の電子状態解析を行うHFおよびDFT(GSO)計算プログラムと、原子を古典力学的に扱うMM計算プログラムとを、バイオフォーガを用いてグリッド環境の上で連成し、いくつかの低分子系および蛋白質の系に対して適用した。
 - 細胞シミュレーションにおいては、心筋細胞の活動電位を定量的にシミュレートできるKuo-Rudyモデルによるプログラムを開発し、さらにその拡張によってL型カルシウム・チャンネルの不活性化機構等をシミュレートした。
 - 生体組織シミュレーションにおいては、人間の肺の気流・変型連成シミュレーション・プログラムを開発し、換気分布と気流計算について実CT画像を用いた計算が可能となった。



これまでの研究成果

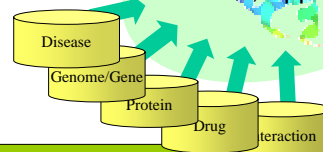
biogrid project
Construction of a Super computer Network

- データグリッド
 - Web上に散在する多数のデータベースを連携するデータグリッド技術を、世界に先駆けて開発した。
 - ゲノム創薬支援を目的として、疾患、ゲノム、タンパク質、薬物に関連した11個のデータベースを実際に連携することにより、個別のデータベースを意識させることなく相互のデータを動的に関連付けて検索できるシステムを開発し、SuperComputing 2003でデモを行った。
 - 最新のグリッド技術であるGlobus Toolkit 3/OGSA-DAIをいち早く取り入れ、実用的なアプリケーションシステムを構築することにより、データベース連携のためのデータグリッド技術の有効性を実証した。



Easy-to-Use Grid Portal

Database, Application and Grid



これまでの成果



- Telescience
 - 超高压電子顕微鏡のためのプロトタイプシステムの実装およびHDTVコーデック(JPEG2000)、伝送システム(IPv6)の構築を行った。
 - SRBに基づく画像解析Webポータルを構築し、SC2002, SC2003でデモ。SC2003ではbandwidth challenge best application賞を受けた。
 - 画像処理サービスのパイプライン最適化に関する検討を行っている。また、Spring-8のCT画像処理システムへの適応を考えている。
- HTC
 - タンパク質の構造予測システムをグリッド上に展開しつつある。

これまでの研究成果



- ビジネス化グループ
 - 製薬企業・IT企業の間をうめるために創薬研究会を組織し、活動中
 - バイオグリッドのための知財戦略構築、規定作り
 - 種々の案件を弁理士、弁護士、公認会計士、税理士等でなるサポートチームを組織した。
 - バイオグリッドプロジェクトの知財の受け皿、ライセンスの窓口さらには産業界へのリエゾン機能を果たすべくNPO法人バイオグリッドセンター関西を設立(平成15年2月)。

プロジェクトの運営



- バイオグリッドR&Dセンターの設置
- ギガビットネットワークとバイオグリッド基盤システムの設置、運営
- プロジェクト運営委員会の開催 (月1回)
- バイオグリッド研究会の開催 (隔月)
- バイオグリッド合宿の開催 (年2回)
- シンポジウムの開催
- SuperComputing2002,2003での展示、デモ
- PRAGMA福岡(2002年1月)、アジアグリッドシンポジウムの共催

バイオグリッドR&Dセンター



国際会議・学会等での発表

 biogrid project
Construction of a Super computer Network

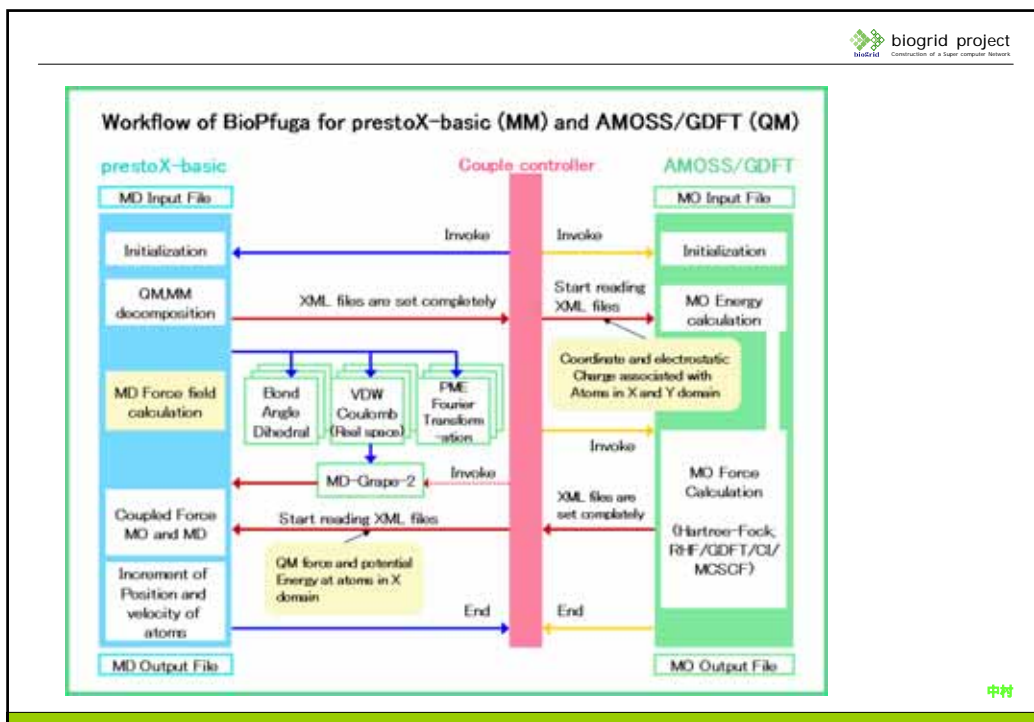
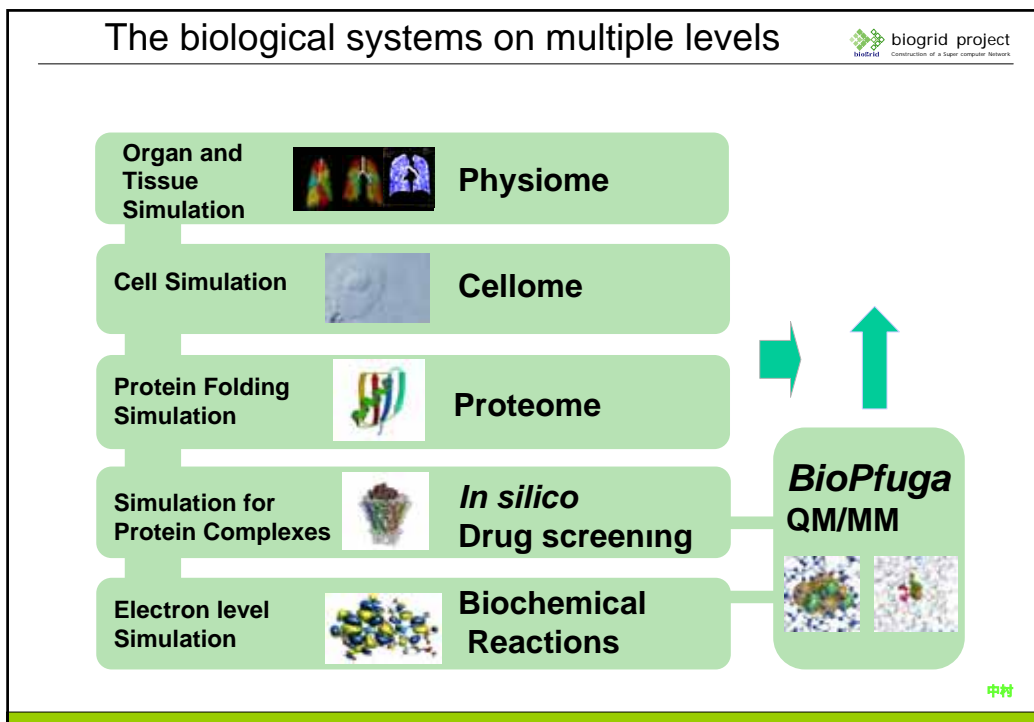
SC2003 2003年11月15-21日 米国・フェニックス

 biogrid project
Construction of a Super computer Network

Computing Grid – *BioPfuga*

Integration of large scale computations
on a grid architecture
for modeling biological systems on multiple levels

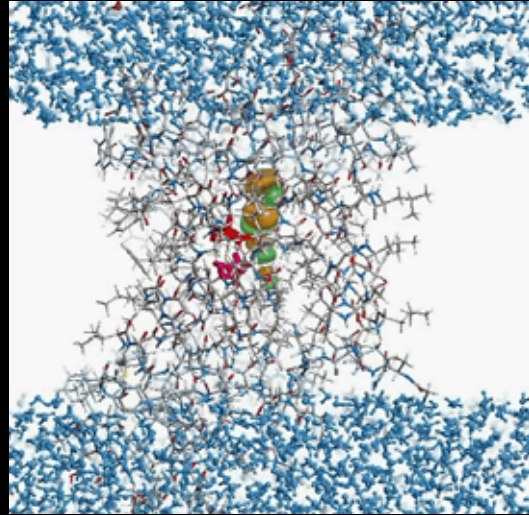
Yasushige Yonezawa
Institute for Protein Research, Osaka University



Molecular system: Aquapolin with water

biogrid project
Construction of a Super computer Network

- **4 water molecules** near the NPA residues of bovine aquapolin-1 were treated by Quantum Mechanics (MINI-4).
- Other **4,393 water molecules** were treated by Molecular Mechanics with the TIP3P model.
- Total **16,962 atoms** were simulated without truncation at 300 K.
- Canonical ensemble.



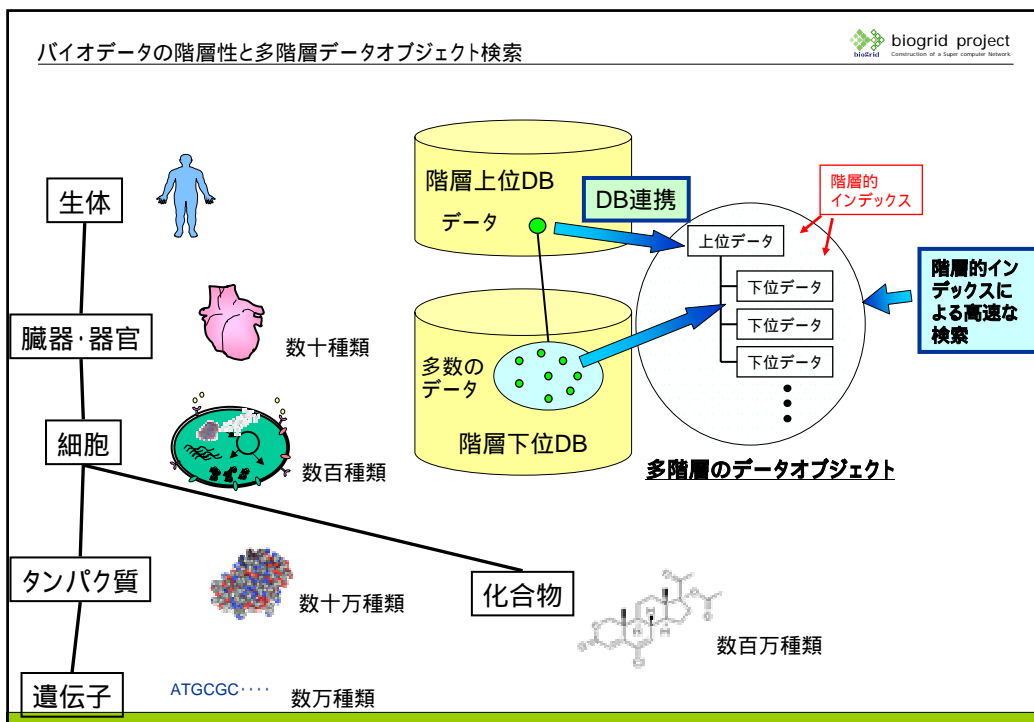
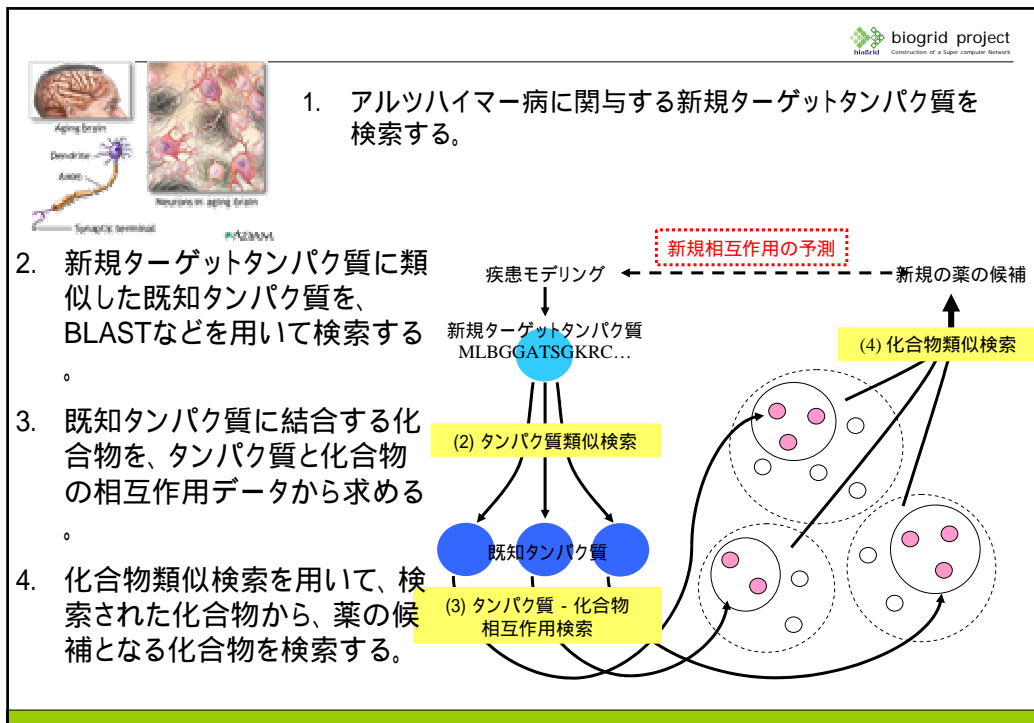
中村

biogrid project
Construction of a Super computer Network

Data Grid

Yukako Tosato

Graduate School of Information Science
and Technology , Osaka University



Telescience

- Improvement of observation throughput on special devices -

Toyokazu Akiyama
 Cybermedia Center, Osaka University

Collaborators:

R.C. for UHVEM, SPring-8, NCMIR, SDSC, KDDI
 Labs, SGI, NCHC, KBSI

4) データ遠隔収集技術

- 世界最高性能を誇る観測機器を超高速ネットワークで共有
 - 超高压電子顕微鏡 (UHVEM)
 - 大阪大学超高压電子顕微鏡センター (大阪府茨木市)
 - 脳磁計 (MEG)
 - 産業技術総合研究所ライフエレクトロニクスラボ (大阪府池田市)
 - Spring-8
 - 高輝度光科学研究センター (西播磨)



データ観測

解析、シミュレーション

データグリッド、Intelligent Gridへの融合

- 仮想研究空間の実現 (E-Science)
 - データ解析手法、シミュレーション手法の共有 (知識の共有)
 - シームレスなオンライン解析の実現
 - 観測機器の遠隔操作
 - 大規模データの処理、可視化

biogrid project
Construction of a Super computer Network

グループの研究目標

- 情報技術を用いた観測装置のスループット向上
 - 研究開発項目
 - データ解析システム
 - 知識共有システム
 - 遠隔操作システム

高性能デバイス

グリッドコンピューティング環境

データグリッド環境(データ共有基盤)

biogrid project
Construction of a Super computer Network

Tele-science on Tomography

NCHC

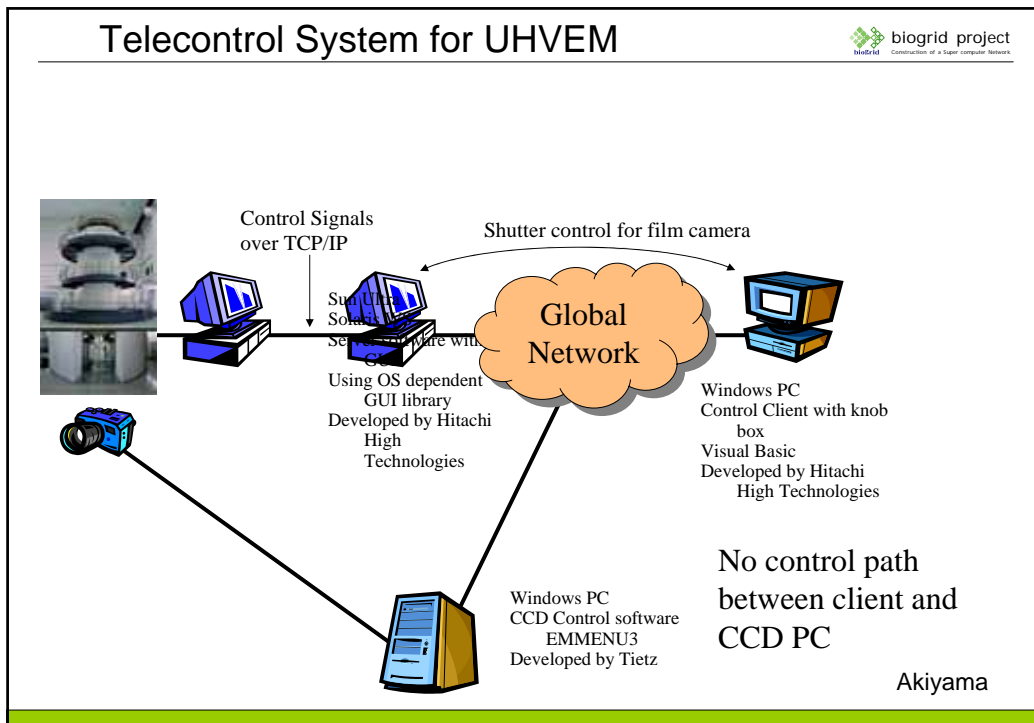
Osaka U

SDSC


Pacific Rim Application Grid Middleware Assembly

NCHC will host 5th PRAGMA in Oct. 2003

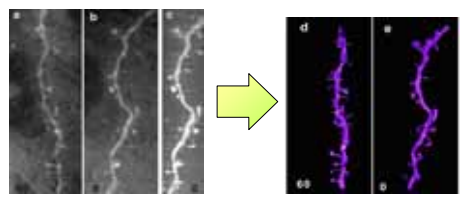
iGrid 02, joint demo, Sep. 2002
SC 02, HPC Challenge, Nov. 2002



Data analysis function


biogrid

- Image data analysis on UHVEM and High resolution CT (SPring-8)
 - Real-time analysis of large scale data obtained from special devices
 - Dataflow optimization
 - Adaptive visualization system for handling various environments



Provided by Dr. Naeko Yamada (NCMIR)

プロトタイプシステム

biogrid project
Construction of a Super computer Network

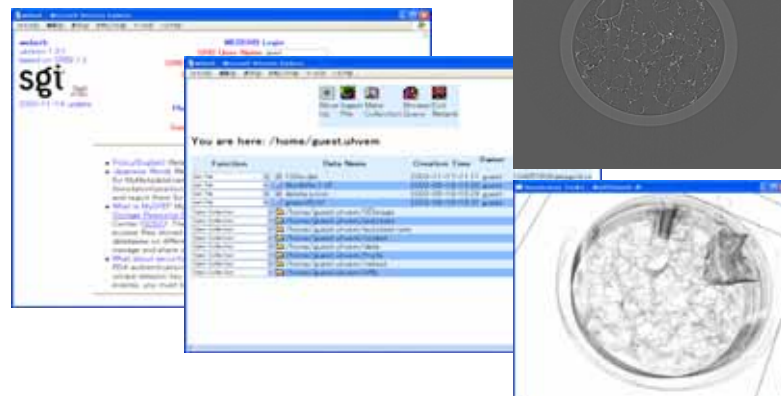
- SC2003にてデモンストレーションを実施
 - 改良版遠隔操作システム(新しくCCDカメラを統合)
 - HDTV伝送システム
 - 画像解析Webポータル



画面例

biogrid project
Construction of a Super computer Network

- 画像解析Webポータル
 - データグリッド管理システム
 - 解析画像可視化システム



SC2003 



Collaborations 



MoU among NCMIR (UCSD), CMC, UHVEM, (Osaka Univ), KDDI, KBSI

e-scienceの意味するもの



- 研究体制の変革
 - プロジェクトに対するコミットメントへ
 - 標準化、国際連携
 - 個人の評価ではない
 - 多数が協力する必要
 - みんながコアをやる必要はない
- 企業がやる仕事？
- 情報は部品？

第二種の基礎研究へ

再考



- 個人の評価
 - 単一ではない多様な専門家集団が必要
- 大学、企業、政府の役割分担
- 予算の付け方、評価の仕方
 - 小さく始めて、大きく育てる
- 学会のあり方
 - 論文の評価
 - コミュニティの作り方
 - 企業とのつきあい方

Grand Challenge



- Multiscale simulation
- Multiscale knowledge discovery
- World wide telescience
- Atlas for all life science
- Integration of computing and data grids
- Secure and high performance data access and integration
- Semantic bridging of heterogeneous communities