



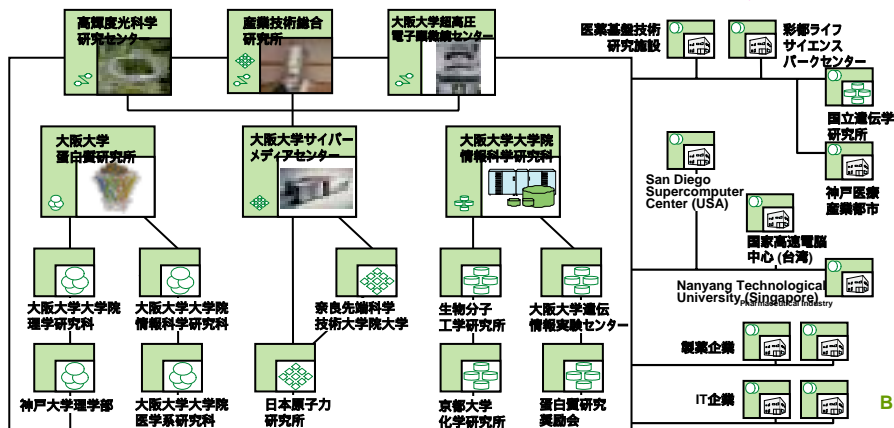
ITプログラム 「スーパーコンピュータネット ワークの構築」 平成15年度経過報告

下條真司

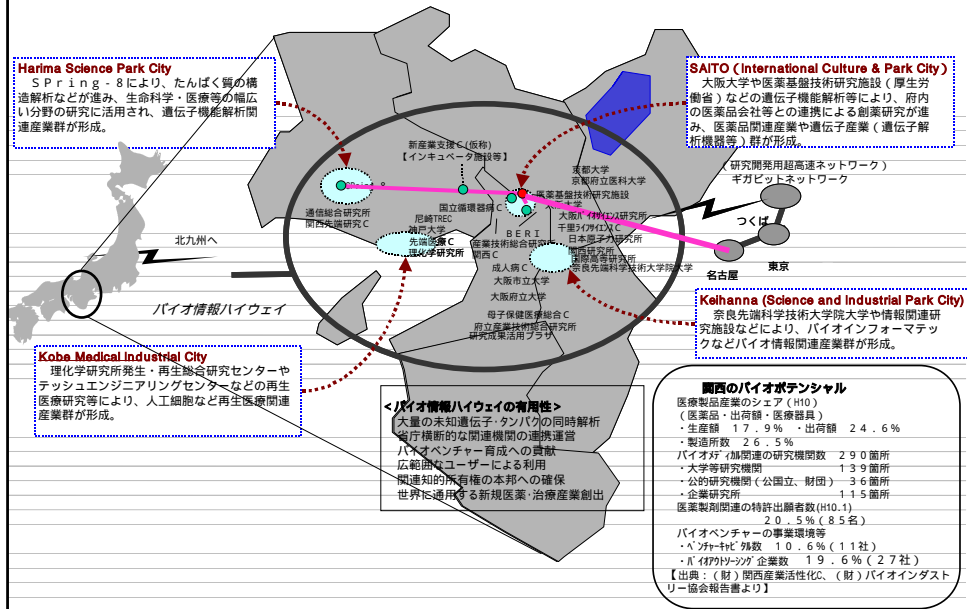
www.bioGRID.jp

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**

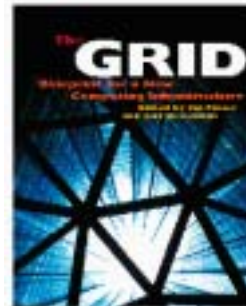


Current Network for Biogrid Project

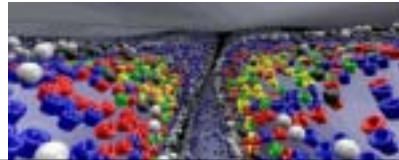


グローバルコンピューティング (The Grid)

- 広域分散計算 (High-Performance Distributed Computing)
- 仮想的な大規模並列計算機
 - Metacomputing[Smarr87]
 - "The GRID" [Fosterら98]
- さまざまなツールキットも登場
 - Globus、Ninf
 - Web computingへの傾倒-OGSA
- 最近は
 - 科学とITのコラボレーション (e-science)
 - Peer-to-peer Grid
 - Global Grid Forumによる標準化
 - IBM,HP,SUNなどの企業の参加

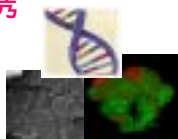


- 大規模計算
 - 無限のPC
- 大規模データ管理・処理



HPC/Distributed Computing Meets Internet

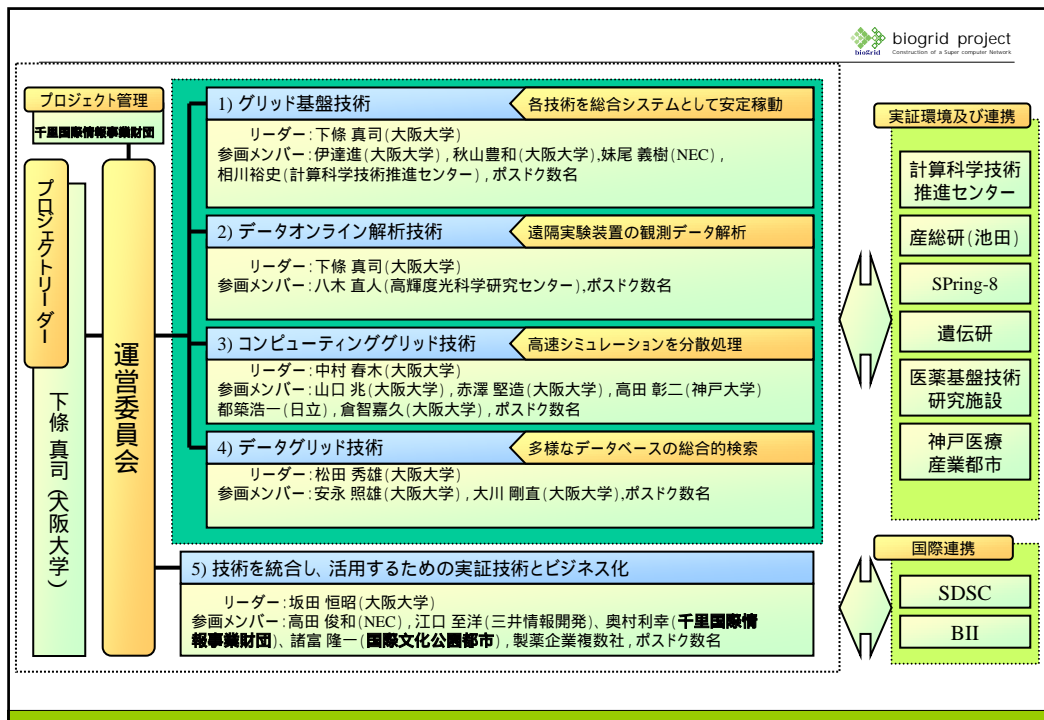
- データベース連携

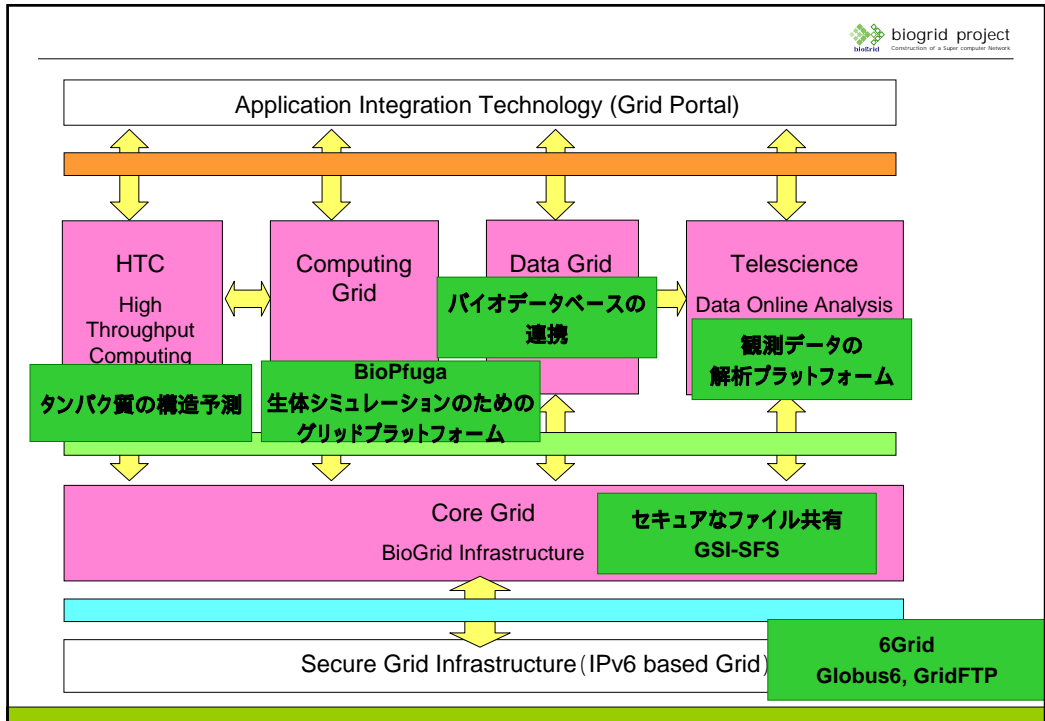


生命科学がグリッドを必要とする理由

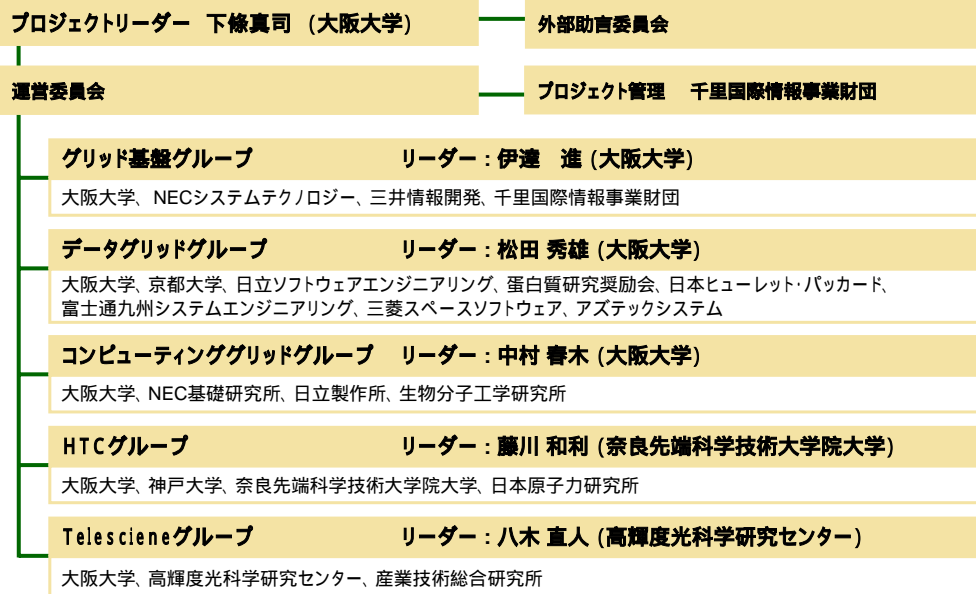
- 生命科学はゲノムの登場によってdata driven/intensive scienceに変わりつつある
- 原子、分子、細胞、組織、さまざまなレベルでのシミュレーションが可能であるが、**大規模な計算パワー**を必要とする
- 生命科学は歴史もあり、非常に多岐にわたっているため、そもそも**科学者の協調**が必要である
- 生命科学にまつわる大量の情報が世界中に分散するデータベースで維持されており、それらの**連携**が必要

- 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





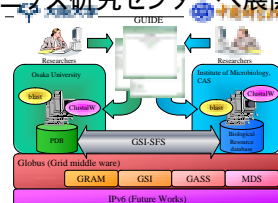
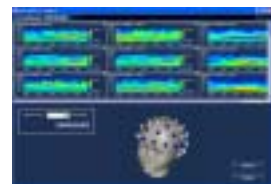
研究開発体制



- 文科省 特定領域研究(C)「ITの深化の基盤を拓く情報学研究」[2001/10-2005/3]
 - A05:最先端の情報通信システムを活用した新しい研究手法
松岡聡、下條真司
- NII スーパーSINET [2001/10-2005/3]
 - 7つのスーパーコンピュータセンターをGRIDで接続
 - NECはSX5にGLOBUSを移植
- 日本原研他 ITBL (IT based Laboratory)
 - ITによって科学研究を進化させる。
- バイオグリッド、Vizgrid(平成14年ー)
- NaReGi (National Research Grid Initiative)(平成15年ー)
- ビジネスグリッド

これまでの研究成果

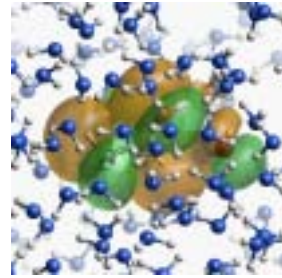
- 基盤グループ
 - PCクラスター(156CPU)等からなるバイオグリッド基盤システムを立ち上げ、Globus, Condor等のグリッドツール群を整備、PRAGMA、SC等での国際連携にも参加。
 - グリッドと統合した安全なファイル共有システム GSI-SFSを開発し、中国科学技術院(CAS)との生物資源データベース検索システムの構築を進めている。GSI-SFSについてはシンガポール、国立天文台といったユーザを獲得しつつある。
 - IPv6に基づくGrid toolを開発中。Globus 2.2.3, GridFTPなどを公開。
 - MEGの遠隔観測・解析・診断システムを開発。産総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

• 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

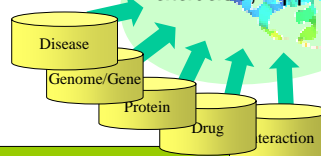
• データグリッド

- 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、実用的な応用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



- Telescience
 - 超高圧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。

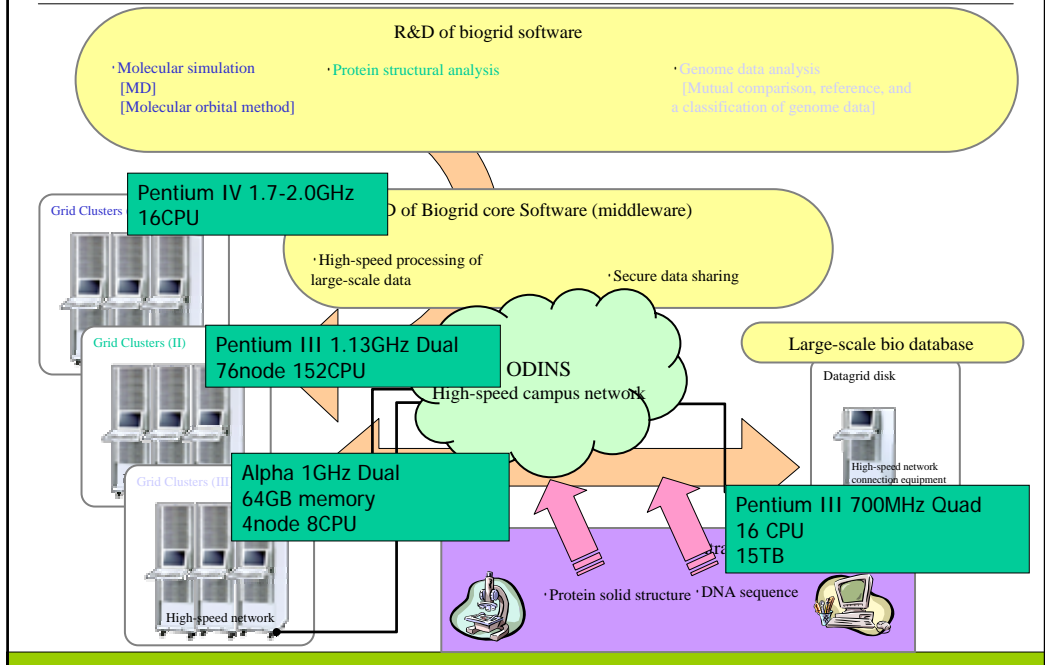
- ビジネス化グループ
 - 製薬企業・IT企業の間をうめるために創薬研究会を組織し、活動中
 - バイオグリッドのための知財戦略構築、規定作り
 - 種々の案件を弁理士、弁護士、公認会計士、税理士等でなるサポートチームを組織した。
 - バイオグリッドプロジェクトの知財の受け皿、ライセンスの窓口さらには産業界へのリエゾン機能を果たすべくNPO法人バイオグリッドセンター関西を設立し、大阪府に申請中。

- 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

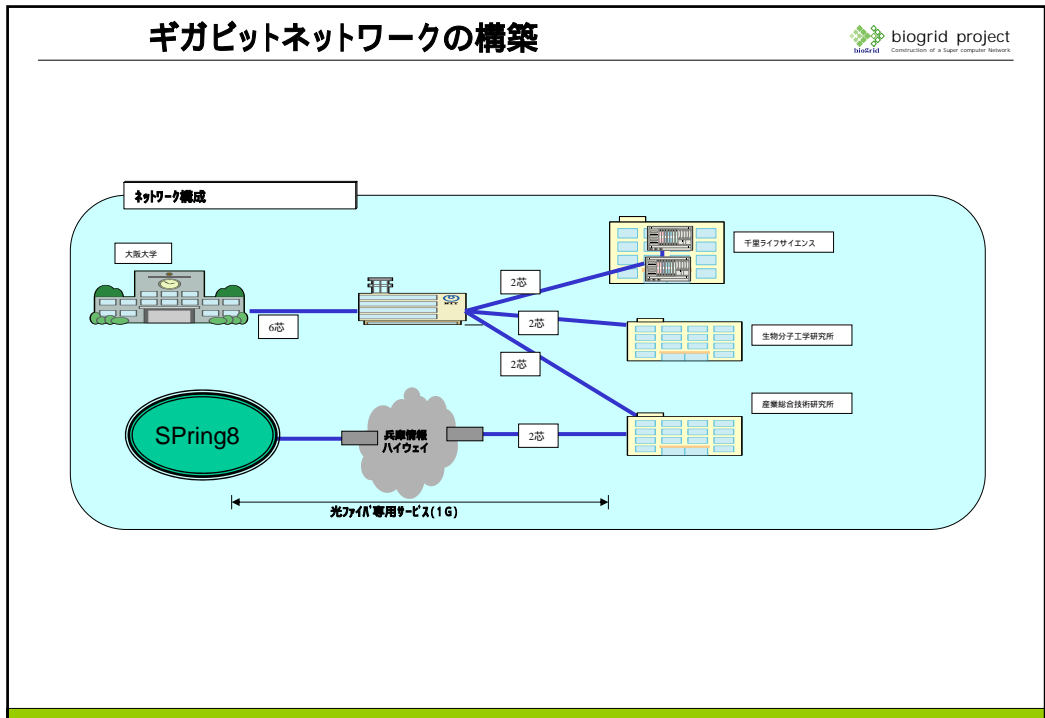
バイオグリッドR&Dセンター



BioGrid Core System



ギガビットネットワークの構築



プロジェクト全体の運営管理

バイオグリッド合宿の開催

平成14年度

第1回 10月26-27日 参加者93名

平成15年度

第1回 4月26-27日 参加者95名

第2回 9月 6-7日 参加者99名



シンポジウムの開催

BioGrid2003 3月3日 東京・日本科学未来館

参加者数 約230名

bioGRID Construction of a Supercomputer Network

Top 組織構成 プロジェクト紹介 公開資料 セミナー/研究会 リンク

本シンポジウムでは、バイオとITの融合を軸にした生命科学・工学・情報科学分野の研究者間の連携を促進し、バイオ・IT・コンピュータネットワークの構築に関する研究の推進を図りました。

当日の参加者は230名でした。今後のご参加、御期待がとごいしました。

日時 : 2003年3月3日(月) 9:00-17:30
場所 : 日本科学未来館 7階『あひろ』大会ホール
主催 : 生命科学未来センター
「スーパーコンピュータネットワークの構築」
協賛 : 日本コンピュータ学会



高西真祐



野村賢一朗



関口智嗣氏



下柳真司



中村善太



松田秀雄

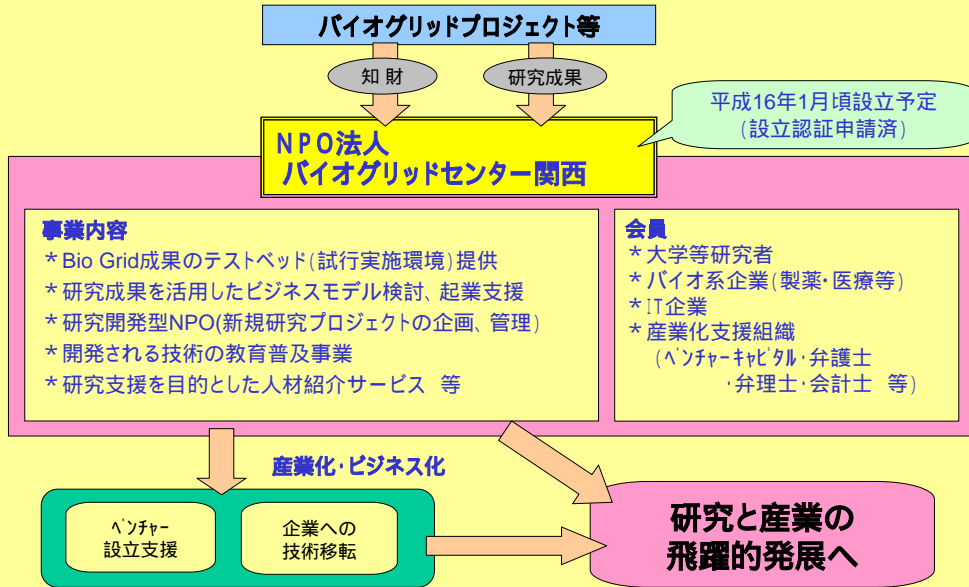
SC2002 2002年11月16-23日 米国・ボルチモア



SC2003 2003年11月15-21日 米国・フェニックス



NPO法人バイオグリッドセンター関西



世界の関連プロジェクト

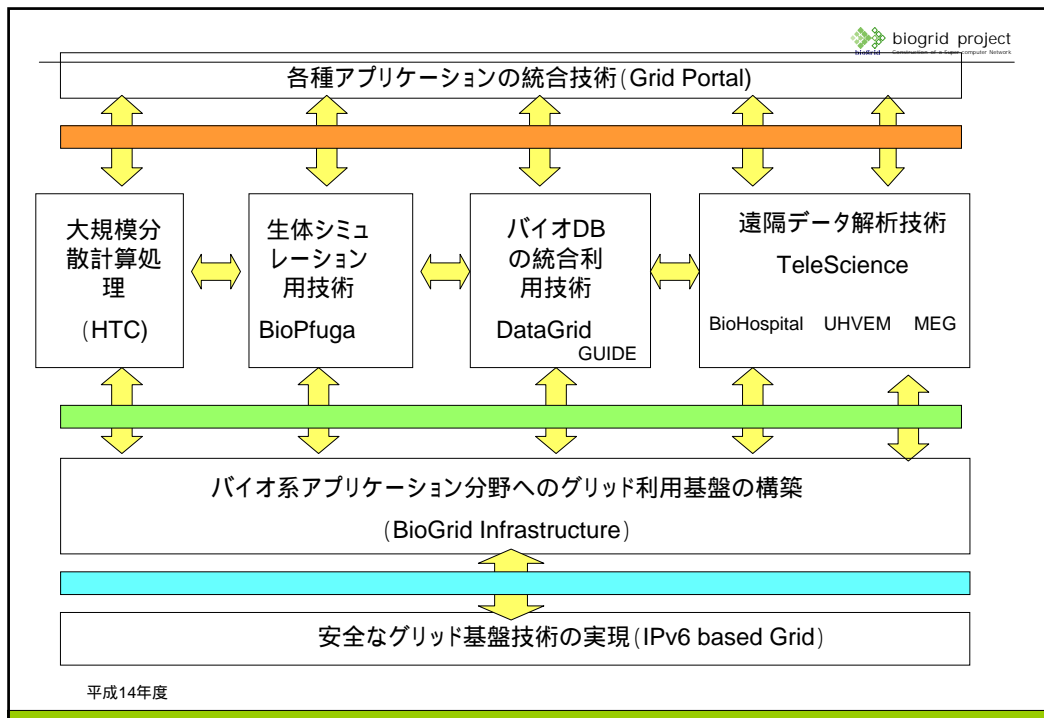
biogrid project
Construction of a Super computer Network

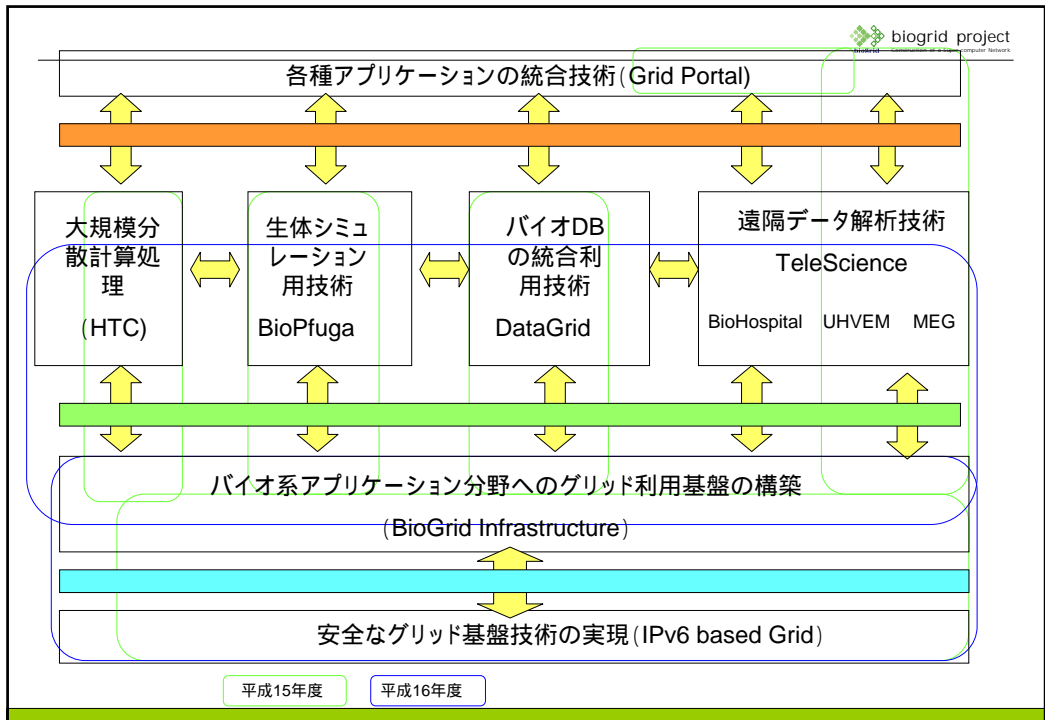
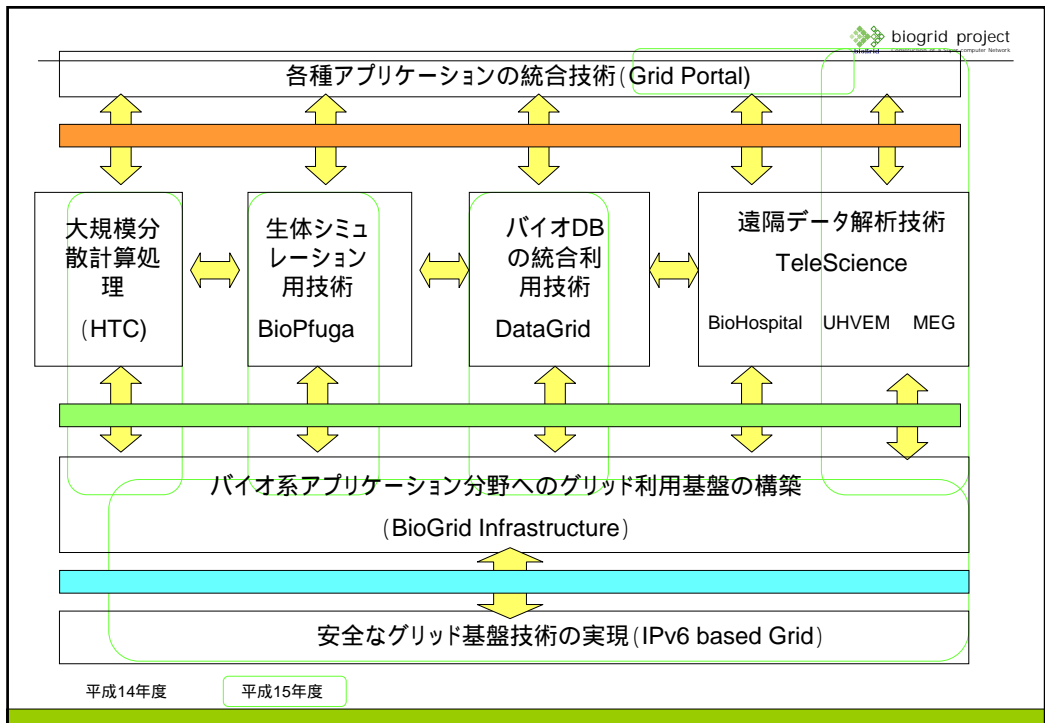
- ITBL
- BIRN (BioMedical Information Research Network) 
- [NC Biogrid](#) 
- BII@SINGAPORE
- 東京ゲノムベイ/OBIGRID
- 大阪大学COE「ネットワーク共生環境」
- UK E-Science Project 
- GGF/Semantic Grid RG

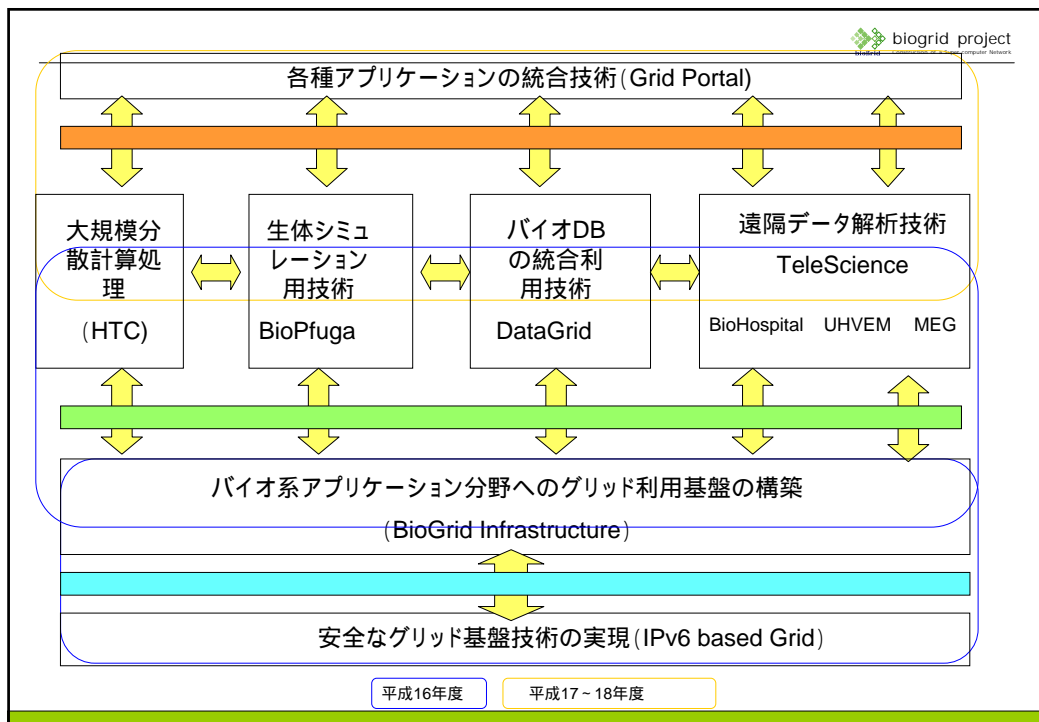
- 産総研ライフエレクトロニクスラボ
– MEGプロジェクト
- PRAGMA (Pacific Rim Application and Grid
Middleware Assembly)
- BIRN
- BII  Bioinformatics
Institute
- CAS (中国科学技術院)
- GGF/Life Science WG



<http://www.pragma-grid.net>



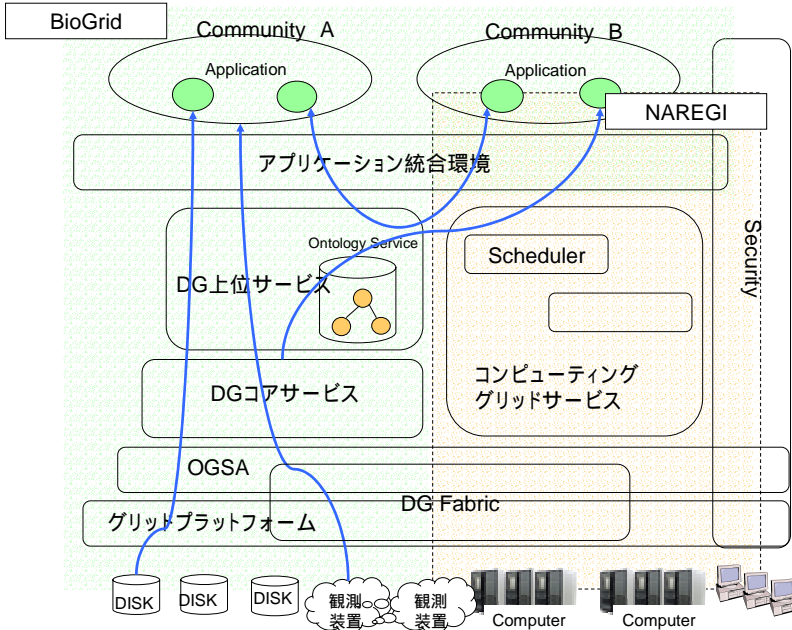




情報基盤技術としての成果

テーマ	関連する情報技術
HTC	分散計算、動的スケジューリング、計算プランニング、データグリッドとの融合
BioPfuga	大規模練成計算、動的スケジューリング、RPC、PSE (アプリケーションプール)
Datagrid	サービス連携、メタデータ、セキュリティ、知識処理、コンピューティングとの連携
Telescience	高速通信(IPv6)、大規模データ共有(メタデータ)、画像処理、Workflow

他プロジェクトの関連



これまでの経緯

- プロジェクトマネジャー等体制を整えることが重要
 - マネジメント、広報、知材管理等
- 大学における支援体制
 - 経理処理、知材管理、プロジェクト進行支援
- 研究と開発の両立
- バイオとITの融合
- IT人材の枯渇
- 人材は確実に育ってきている