



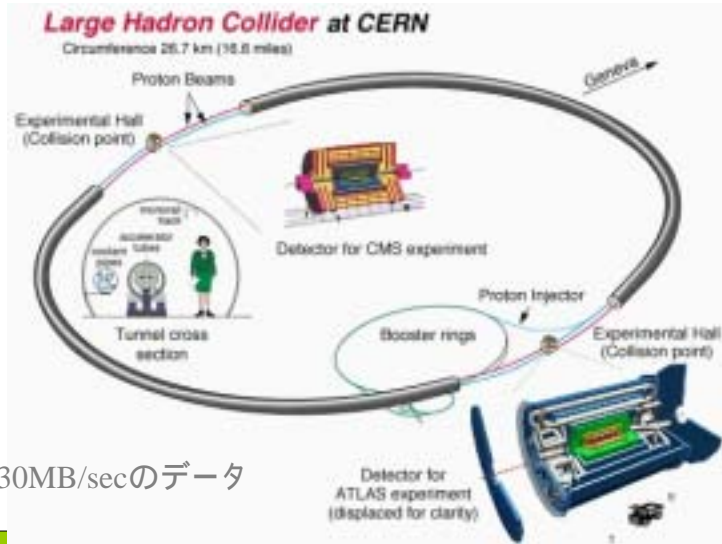
# E-science -- ITと科学の幸せな結婚 とは? --

下條真司

[www.biogrid.jp](http://www.biogrid.jp)

## グリッド:ネットワークの利用

- ネットワークを利用して共有する
  - 計算機
  - 観測装置
  - データ
  - 人間
- ネットワークを介した多数の科学者の協調による科学
  - e-science



既存WWW-DB

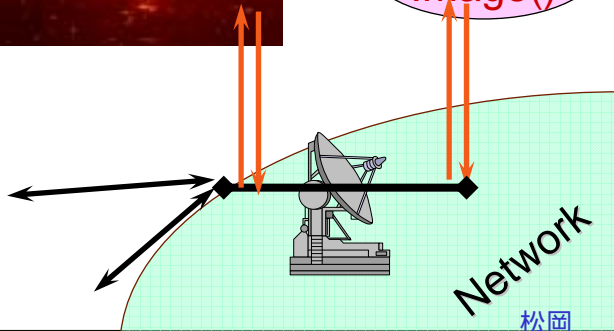


デジタルスカイ  
DBの検索



計算サーバ  
での実行

enhance  
Image()



- 1999年SDSS(Sloan Digital Sky Survey)による
  - <http://skyserver.sdss.org/edr/jp/sdss/discoveries/discoversies.asp#brown>
  - 40年かかっても見つからなかったものが, SDSSのあとわずか一年で
- 今なら, 複数のVO (Virtual Observatory)を組み合わせることで数分で見つかる。  
(Paul MessinaのNaregi Symposium 2004の講演から)
- <http://virtualsky.org>



- 最先端の情報技術
  - Tバイト, Pバイト級のデータベース
  - Web Service Federation, 標準化
  - 高速ネットワーク
- データはみんなのもの
  - 1年たつと公開される.
- 国際的な協調
- 全天地図 (Atlas)

Science as a team sport



# Building the BIRN

## Biomedical Informatics Research Network

### “(BIRN)”

Mark Ellisman

Maryann Martone

Steve Peltier

Amarnath Gupta

Bertram Ludaescher

Phil Papadopoulos

Chaitan Baru

Dave Nadeau

Jay Dombrowski

Tom Hutton

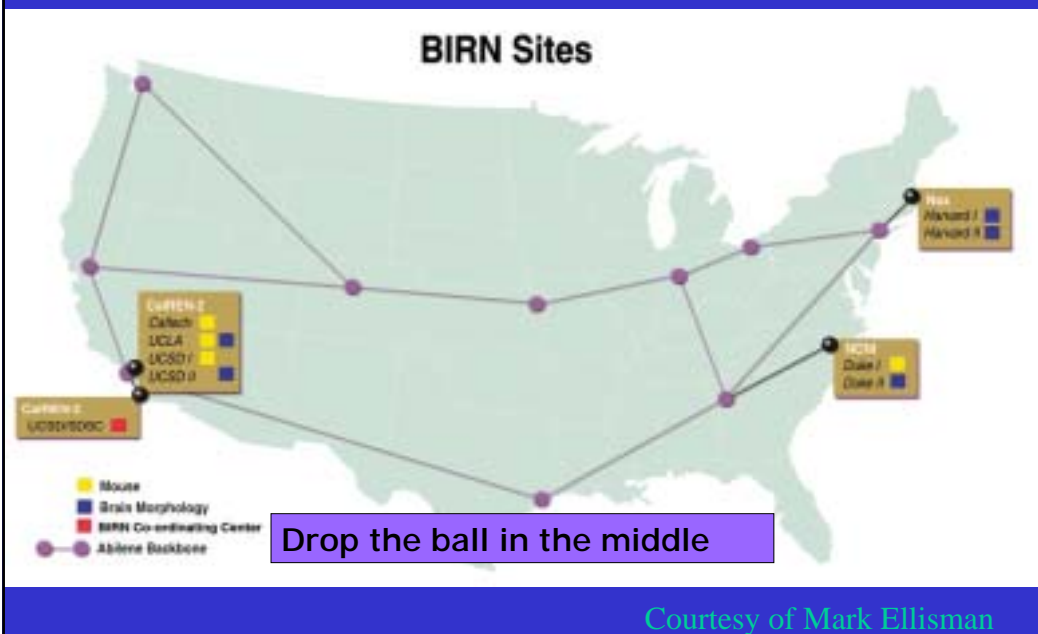
Mark James

Peter Arzberger

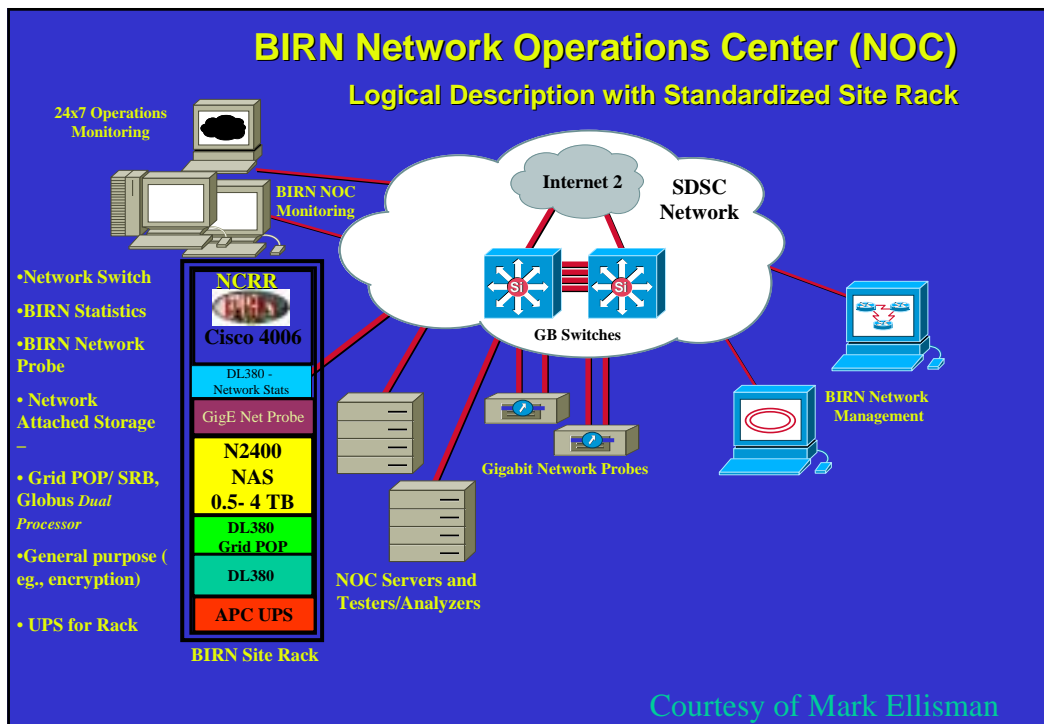
Courtesy of Mark Ellisman

## THE BIOMEDICAL INFORMATICS RESEARCH NETWORK

### LAYOUT FOR PHASE 1



Courtesy of Mark Ellisman



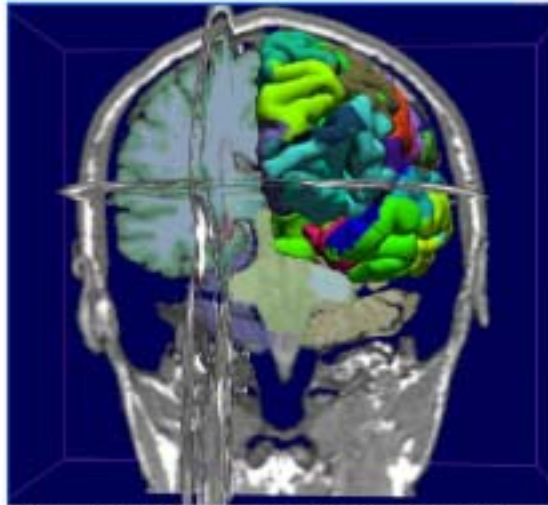
## BIRNのポイント



- **最先端の情報技術**
  - Tバイト, Pバイト級のデータベース
  - グリッドポータル
  - 高速ネットワーク
  - BIRN Rack/BIRN CC
- **共通の目標**
  - Mophometry, Mouse, Functional BIRN
- **データとツールはBIRN内部で共有されている**
- **地図 (Atlas)**

Hot Topics

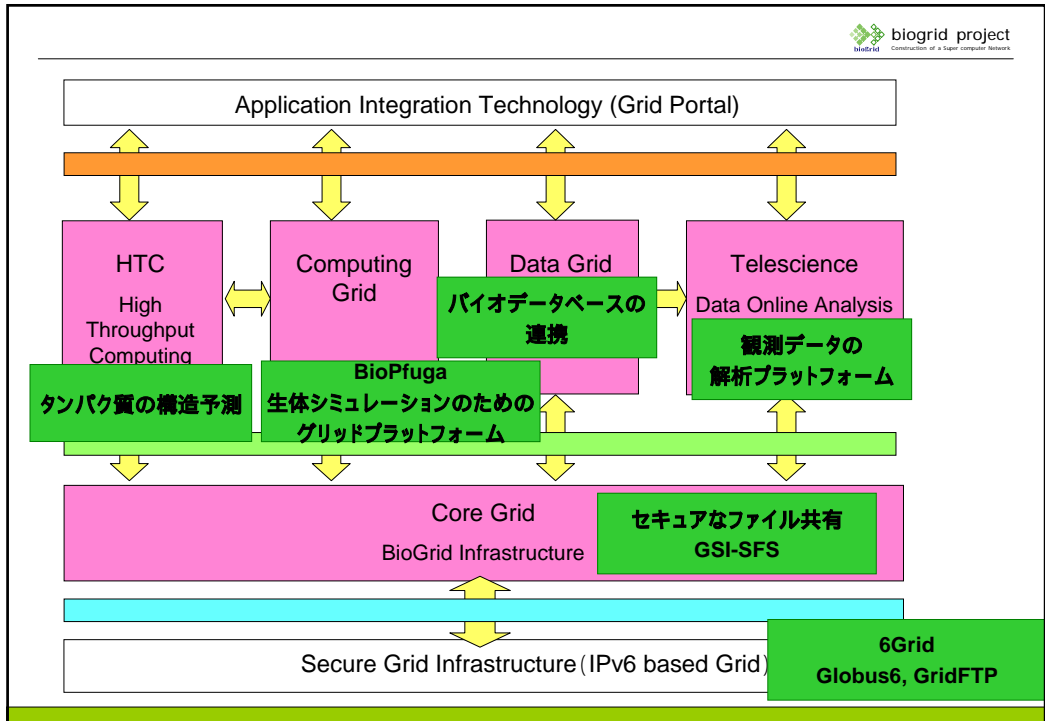
Winter 2004



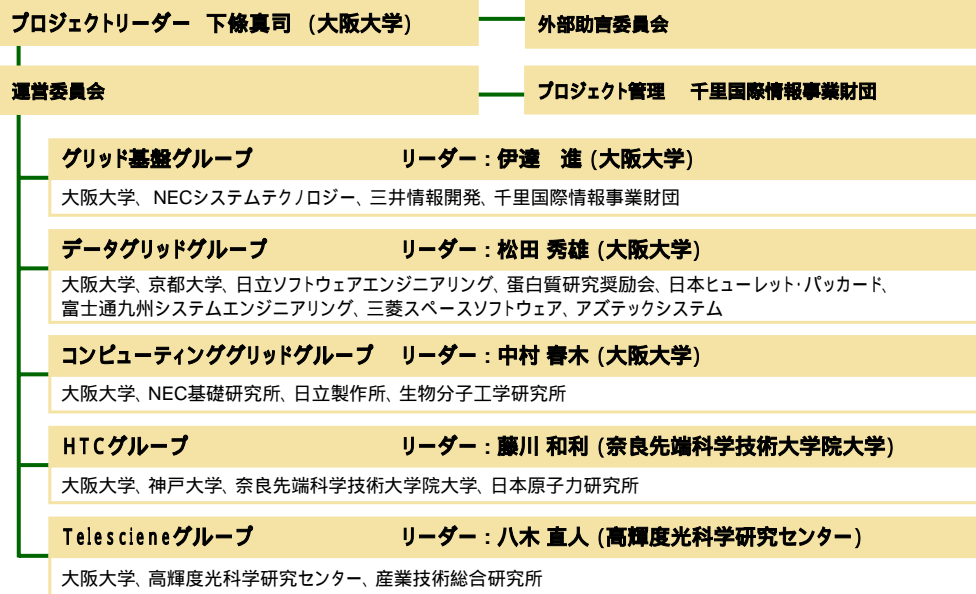
Integration of brain morphometry, visualization, and query tools

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

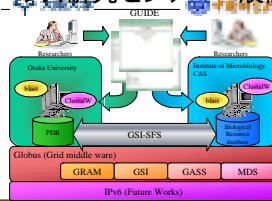


## 研究開発体制



• 基盤グループ

- PCクラスター (156 CPU) 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(6Grid)。
- 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。



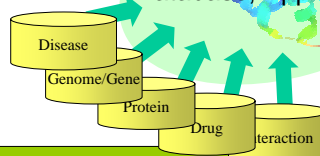
• データグリッド

- 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



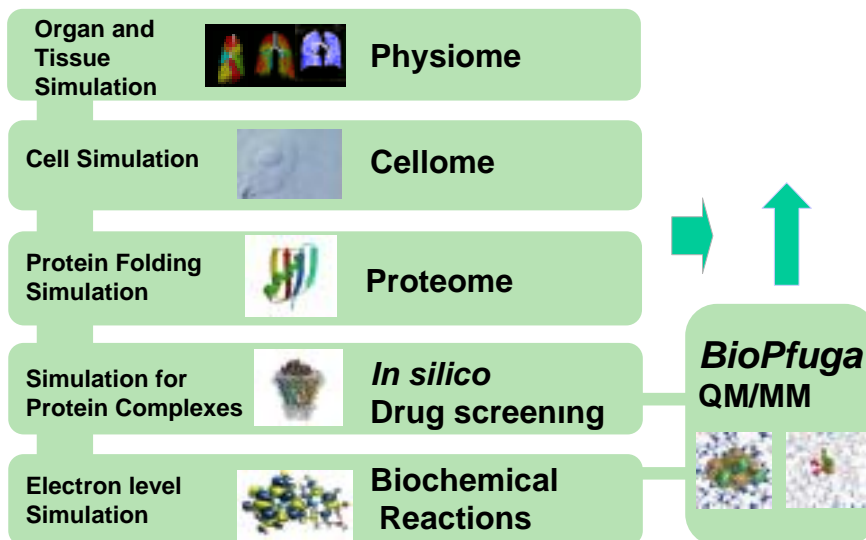


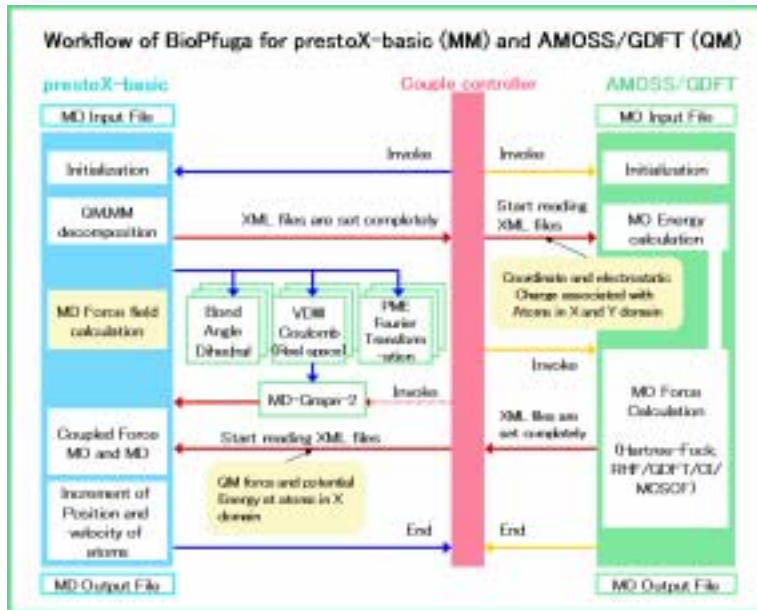
# Computing Grid – *BioPfuga*

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

Yasushige Yonezawa  
Institute for Protein Research, Osaka University

## The biological systems on multiple levels

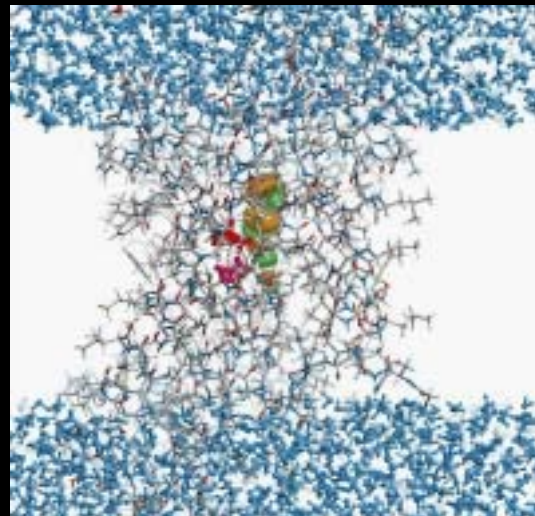




中村

## Molecular system: Aquapolin with water

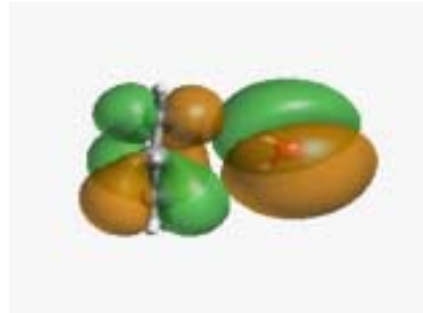
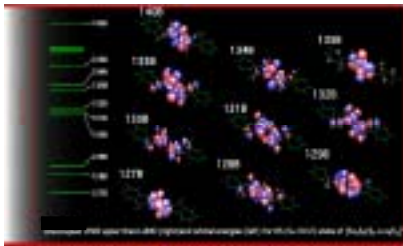
- **4 water molecules** near the NPA residues of bovine aquapolin-1 were treated by Quantum Mechanics (MINI-4).
- Other **4,393 water molecules** were treated by Molecular Mechanics with the TIP3P model.
- Total **16,962 atoms** were simulated without truncation at 300 K.
- Canonical ensemble.



計算は、NEC基礎研によるAMOSSと、阪大蛋白質および基礎研生物情報解析センターによるprestoXを融合したhybrid-QM/MMシステムによって、阪大蛋白質の米澤康道、Rossen Apostolov、中村書木が行った。

中村

## DFT (Density Function Theory)/Generalized DFT, have been integrated into *BioPfuga*



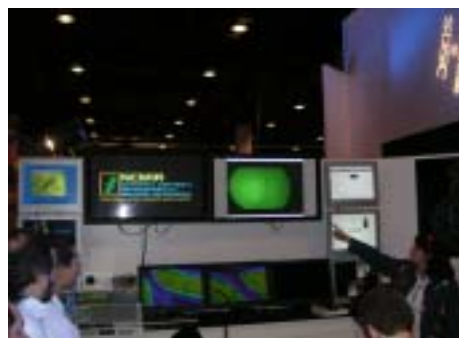
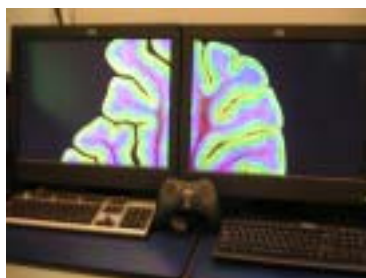
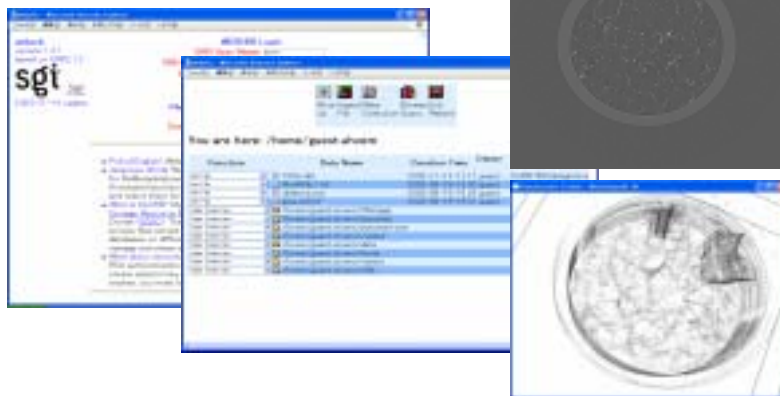
中村

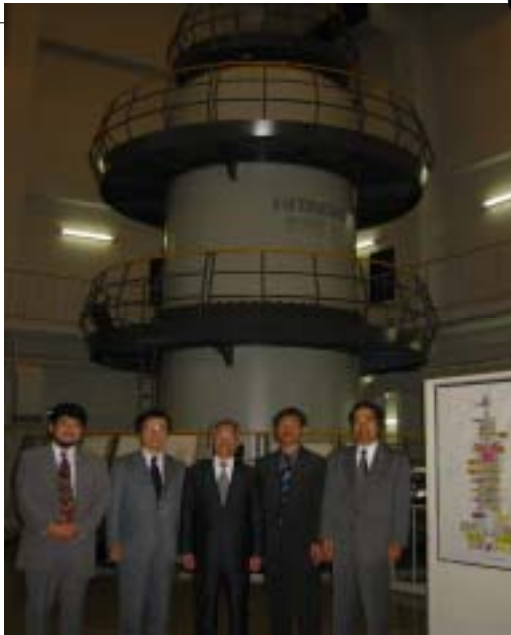
## プロトタイプシステム

- 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

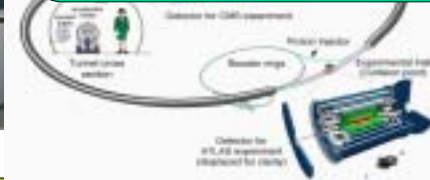
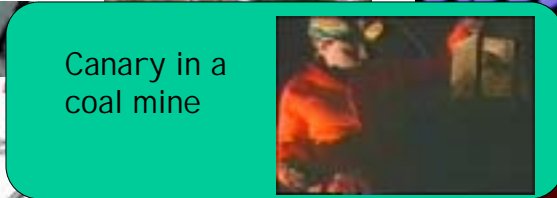




MoU among NCMIR (UCSD), CMC, UHVEM, (Osaka Univ), KDDI, KBSI

### なぜe-scienceなのか

- 科学の転換期
  - 個別競争から協調して作り上げる科学へ
    - Science as a team sports
- しかし、実現するのは難しい
  - E-scienceはビッグプロジェクトである
  - ITとscienceの人々の協調が必要
  - そのための組織的な支援とリーダーシップ



- 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

- 俺たちは道具か？
- 成功するか？
  - 金持ちになる？出世する？
- Innovation vs Evolution
  - MOTが重要

今までが幸せすぎた

- 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

- 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

- Meeting place for science and IT
- 研究と実装のバランスのよい配置
  - 外部プロジェクトの獲得
  - 民間との共同研究
- 研究支援体制
  - マネジメントのプロ
  - プロジェクトリーダー
- キャリアパスの一躍を担う
  - 技術のプロ、マネジメントのプロ、プロジェクトリーダー