

2004年7月7日プレス発表@'バイオグリッド'事務局



複数の異機種の高速コンピュータを インターネットで結び、複雑な分子計算を 高速処理するグリッド計算技術を開発

中村春木 大阪大学蛋白質研究所 教授

文部科学省科学技術振興調整費

主要5分野の研究開発委託事業・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」

通称「バイオグリッド・プロジェクト」

(研究代表者: 下條真司 大阪大学サイバーメディアセンター教授)

グリッド計算 GRID computing

Ubiquitous computing with a high-speed network

異なるリソース (PC・高速計算機・データベース・測定装置)
を高速ネットワークで結合して、高度な計算科学環境を実現
する。

- ・PC グリッド (PCのグリッド)
 - ・HPC グリッド (スパコンのグリッド)
 - ・データ グリッド (データベースのグリッド)
- 統合DB 分散統合DB

背景
 連成計算に対する要請：
 生命科学の新しいパラダイム
 ・Physiome Project (IUPS)
 ・細胞生体機能シミュレーション
 (文部科学省リーディングPJ)

マルチスケールの
 データベースと
 シミュレーション

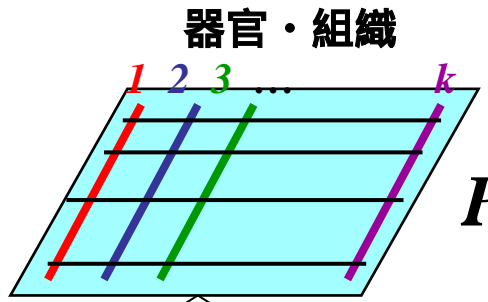
Genome

Transcriptome

生物個体

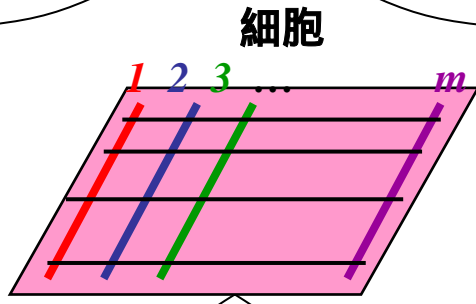
*Ecology,
Sociology*

器官・組織
 器官機能
 薬物感受性
 組織間相互作用
 体内局在



Physiome

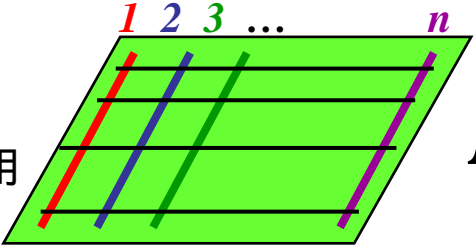
細胞
 細胞機能
 薬物感受性
 細胞間相互作用
 器官・組織局在



Cellome

発現蛋白質

アミノ酸配列
 立体構造
 蛋白質間相互作用
 薬物阻害
 細胞内局在化



Proteome

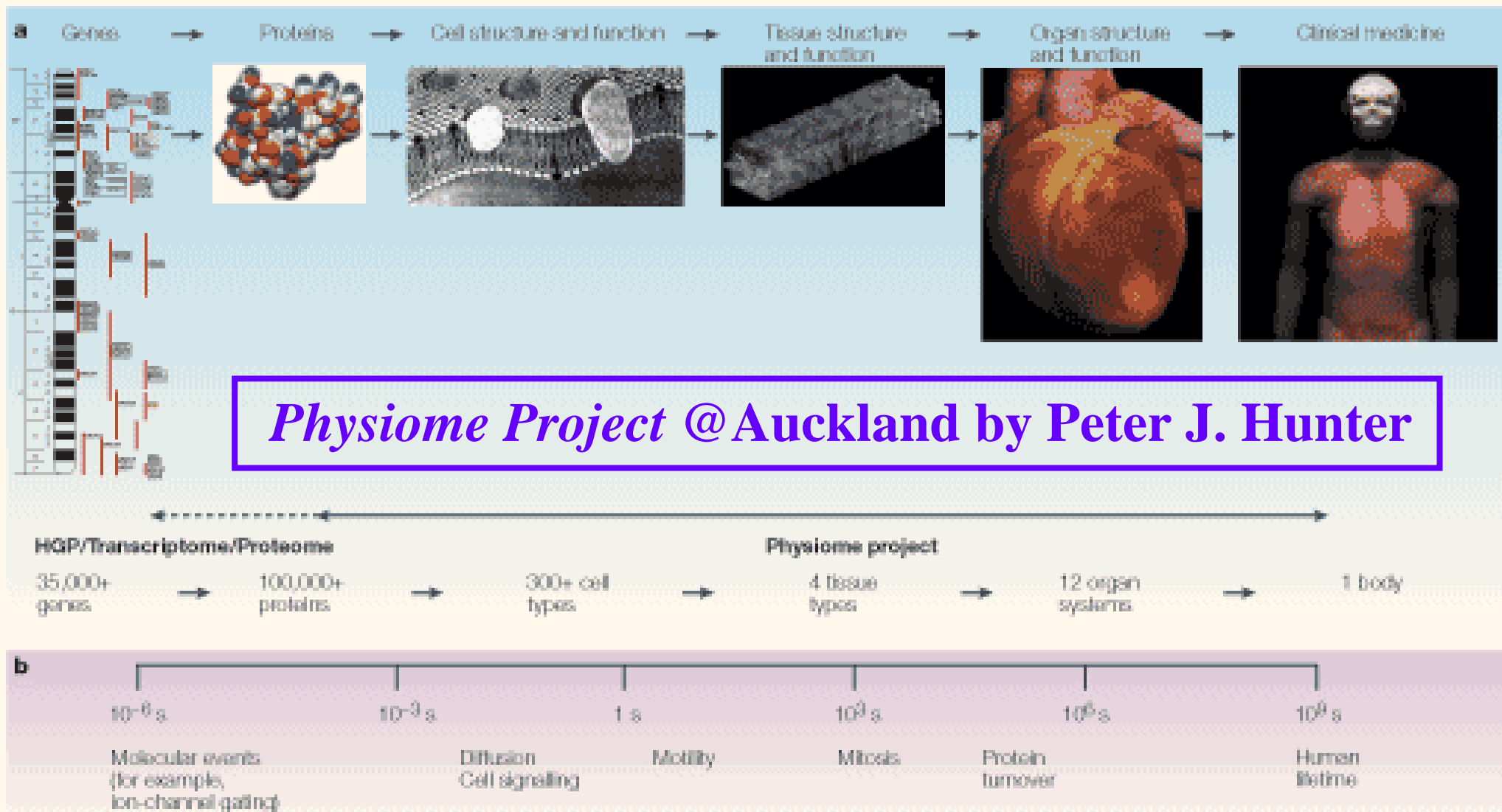


Figure 2 | **Linking molecular and cellular events with physiological function must deal with wide ranges of length scales and timescales.** **a** | Levels of biological organization from genes to proteins, cells, tissues, organs and finally the whole organism. The range of spatial scales — from ~1 nm for proteins to ~1 m for the whole body — requires a hierarchy of models. Different types of model are appropriate to each level, and relationships must be established between models at one level and the more detailed, but spatially or temporally limited, models at the level below. The organ-level and whole-body-level models shown are the Auckland heart and torso models, respectively^{21,26}. The tissue figure is a reconstructed three-dimensional confocal image of a transmural section of rat myocardium, which is also from the Auckland Bioengineering Institute, New Zealand²⁸. **b** | The range of temporal scales as shown here is even more daunting and again calls for a hierarchy of models. HGP, human genome project. Modified with permission from REF. 30 © Springer-Verlag (2002).

(Hunter, P.J. & Borg, T.K. (2003) Nature Rev. Mol. Cell Biol. 4, 237-243)

生体シミュレーション@BioGrid

器官・組織シ
ミュレーション



阪大医が開発中の筋電位信号発生シミュレーションとヒト肺換気シミュレーションプログラム:臨床応用を目指す

細胞生理
シミュレーション



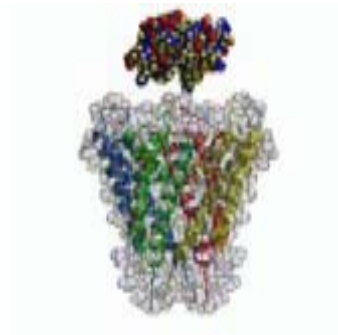
阪大医が開発中のヒト・チャネル電流シミュレーションプログラム:臨床応用を目指す

蛋白質フォールド
シミュレーション



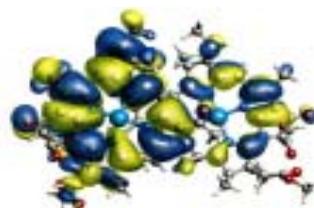
神戸大理が開発した粗視化モデルによる予測: 国際コンテストで高い評価

蛋白質複合体
シミュレーション



Molecular Mechanics Calculations by prestoX-basic (阪大蛋白研・産総研が開発した分子動力学計算プログラム:効率的な構造探索が可能。)

電子状態
シミュレーション



Quantum Mechanics Calculations by AMOSS & DFT (NEC基礎研・阪大理が開発した非経験的量子化学計算プログラム:巨大な系の高精度計算が可能)

BioPfuga:

Biosimulation Platform United on Grid Architecture

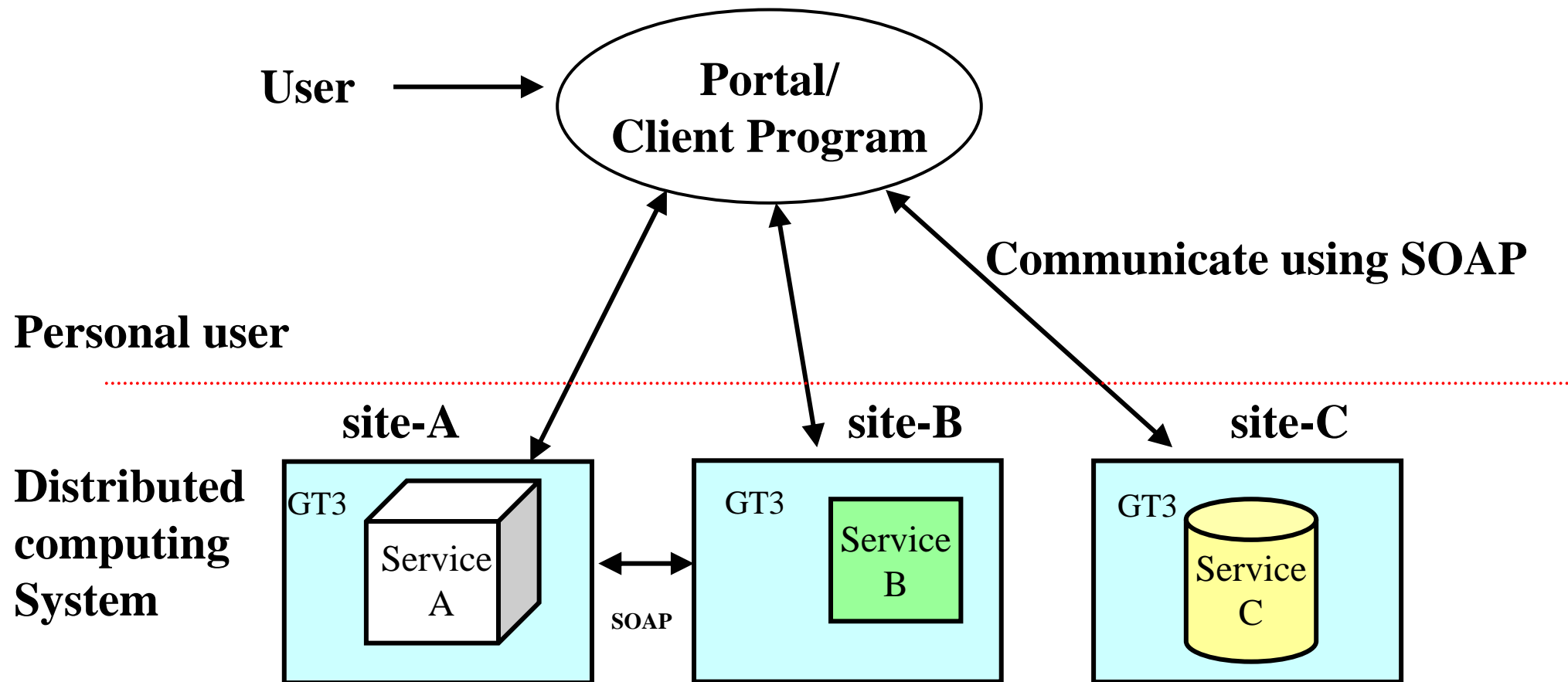
バイオフィューガ

グリッド(異機種・多様なマシン)のハード上で、異なるレベルのアプリケーション・プログラムが統合化されて練成計算を実行する仕組み。特に、バイオのシミュレーションに焦点をあてたものをバイオフィューガと称する。

- ・ プログラム間のデータ授受の標準化
bmsML (BioMolecular Simulation Markup Language) の提案
- ・ プログラムのコンポーネント化
Web serviceプログラムへ (OGSA (Open Grid Service Architecture)に準拠)

- 1) **生体分子シミュレーション計算中(前後も含む)の巨大なデータについて、データ記述の標準化を行い、異なるプログラム間でのデータ授受を一元化する。**
プログラム開発グループに依存しない利用。
コンポーネント化されたプログラムで利用することによって、開発グループの異なるプログラムを容易に入れ替えて利用。
マルチスケールの連成計算が容易となる。
- 2) **スキーマと主なAPIを公開する。**
- 3) **データグリッド技術の利用によるワークフロー管理が将来行える。**

複数の異なるシミュレーションをグリッド上で連成計算するための仕組み。(OGSAによるWeb service化)



(GT3: Globus Toolkit version 3.2 of OGSA-Open Grid Service Architecture)

マルチスケール・シミュレーションのための統合化例

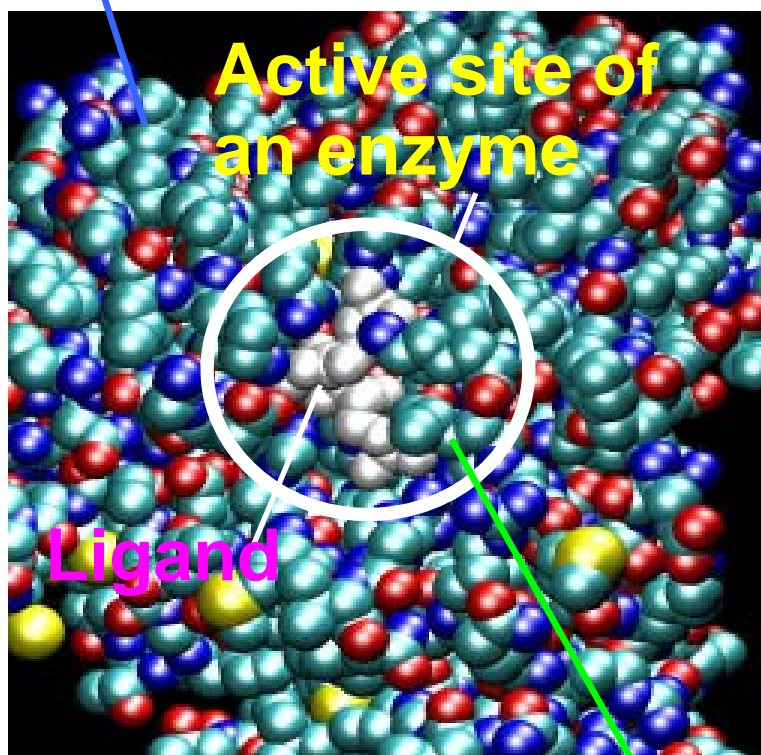
蛋白質分子構造のダイナミクス・シミュレーション



Grid 計算による連成化

電子状態シミュレーション

MM area



QM area

分子動力学: Molecular mechanics (MM)と
量子化学: Quantum mechanics (QM-
HF/DFT) の連成計算

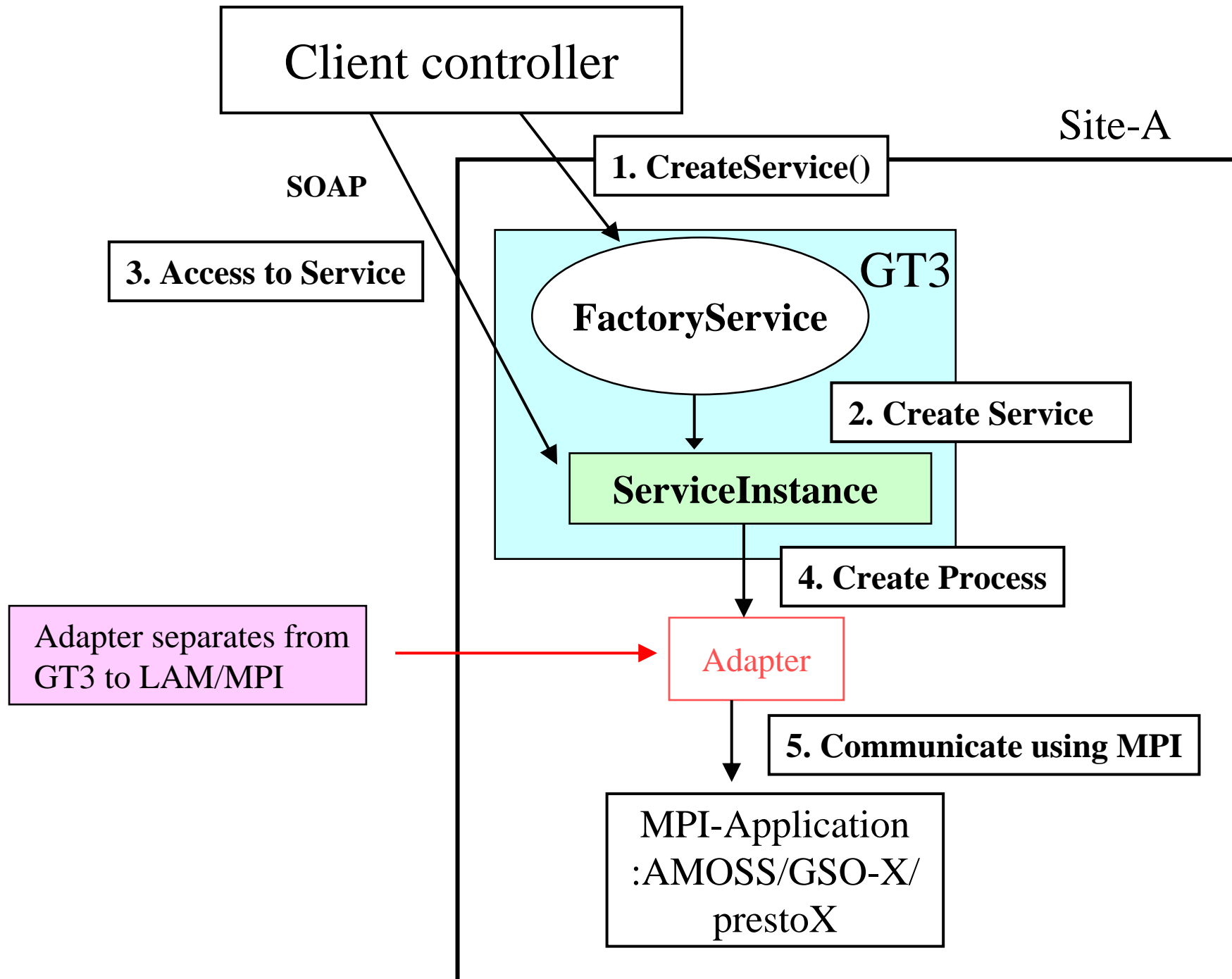
Hamiltonian of total system

$$H_{total} = H_{QM}(x,x) + H_{QM/MM}(x,y) + H_{MM}(y,y)$$

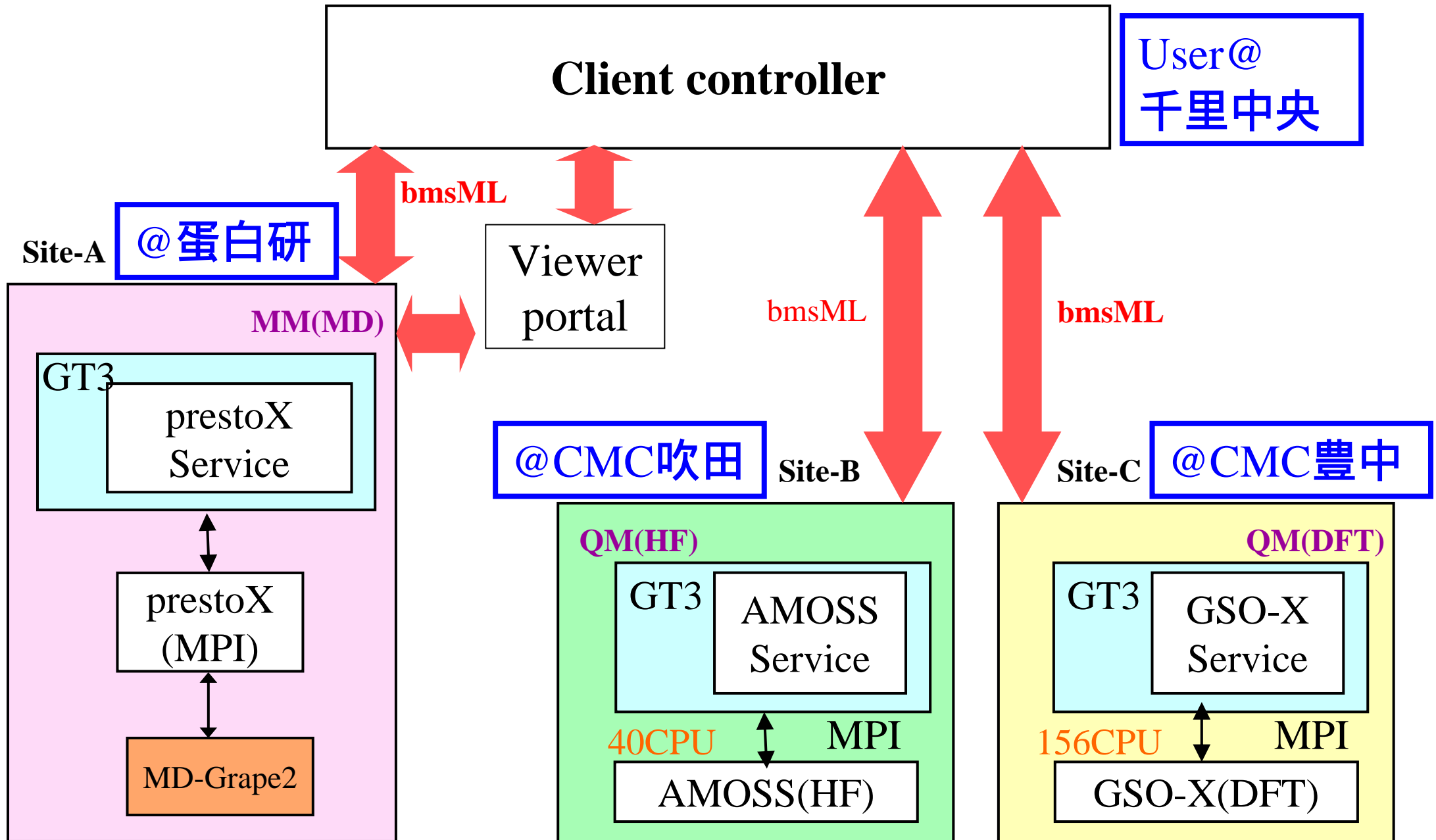
Calculate in QM area

Calculate in MM area

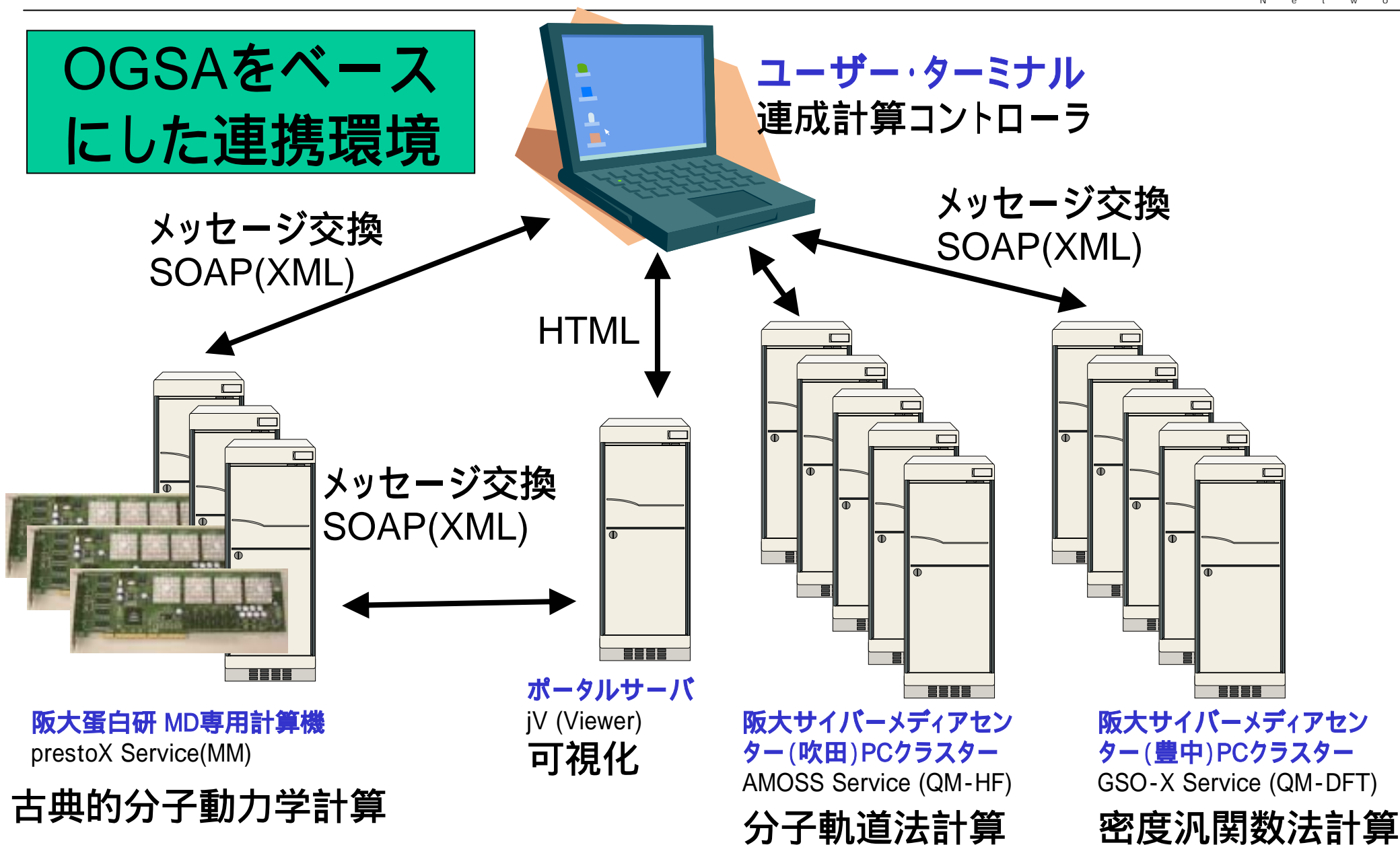
Grid Serviceの仕組み



バイオフィューガによるHF/DFT/MM連成計算



異機種分散高速コンピュータを結んだグリッド計算



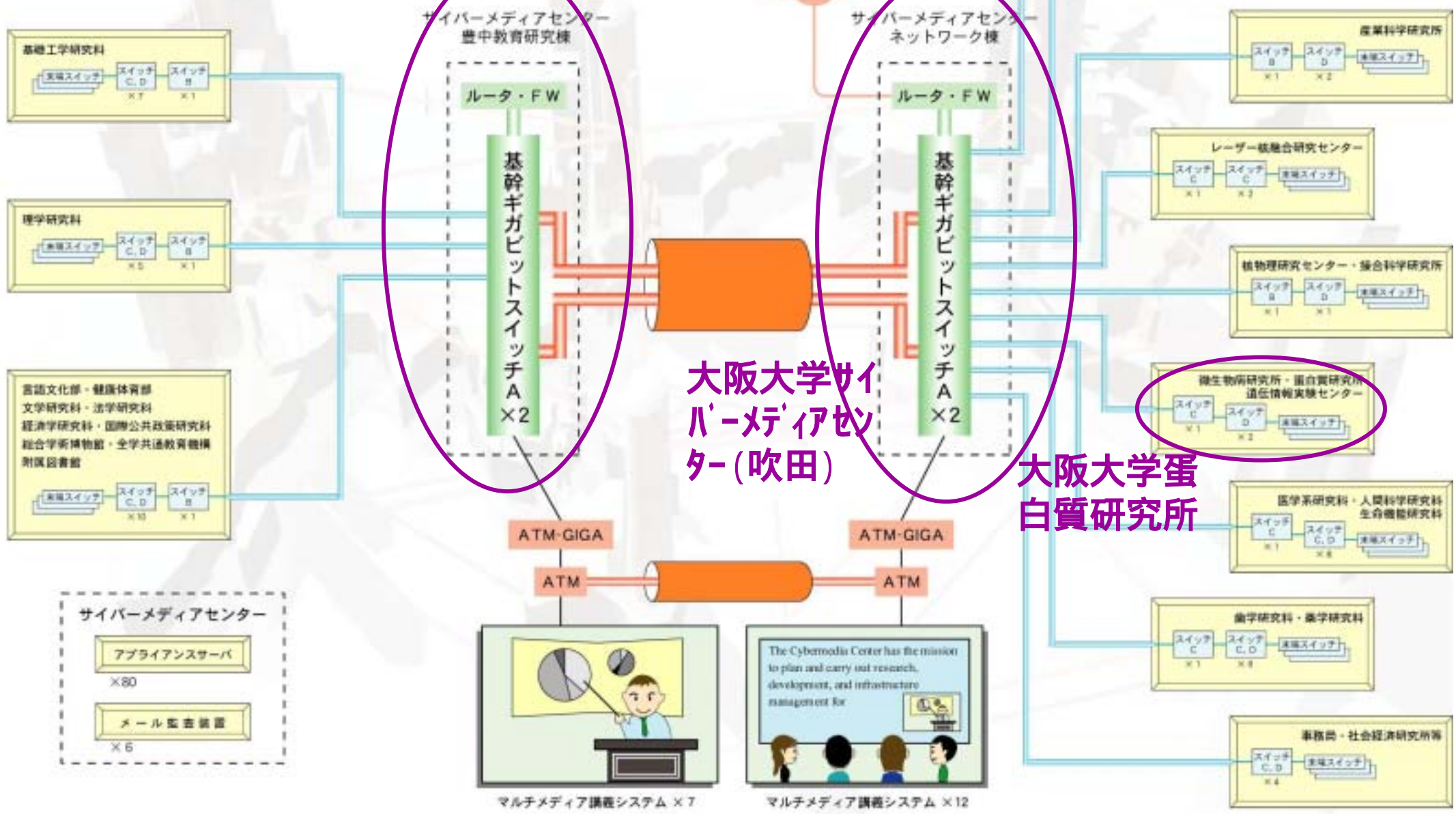
豊中キャンパス

ODINS構成図

吹田キャンパス

大阪大学サイバ-メディアセンター(豊中)

バイオグリッド・センター



大阪大学サイバ-メディアセンター(吹田)

大阪大学蛋白質研究所

マルチメディア講義システム x7

マルチメディア講義システム x12

HF/DFT/MM 連成計算による 電子の関わる水素結合の解析

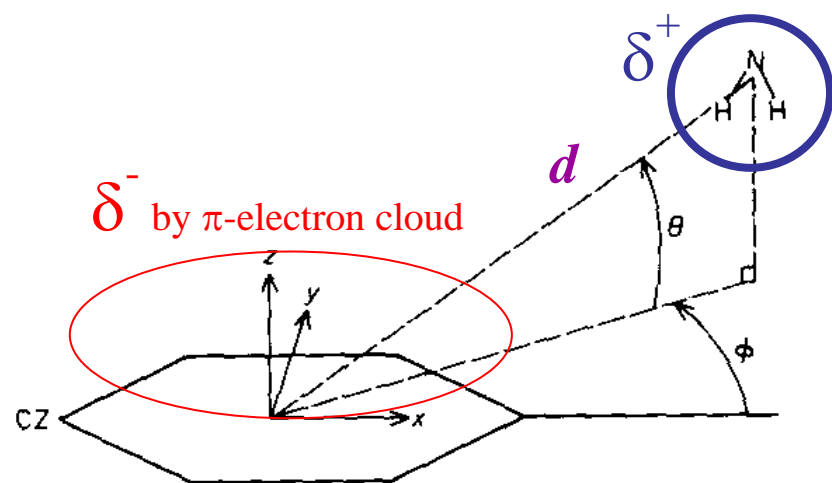
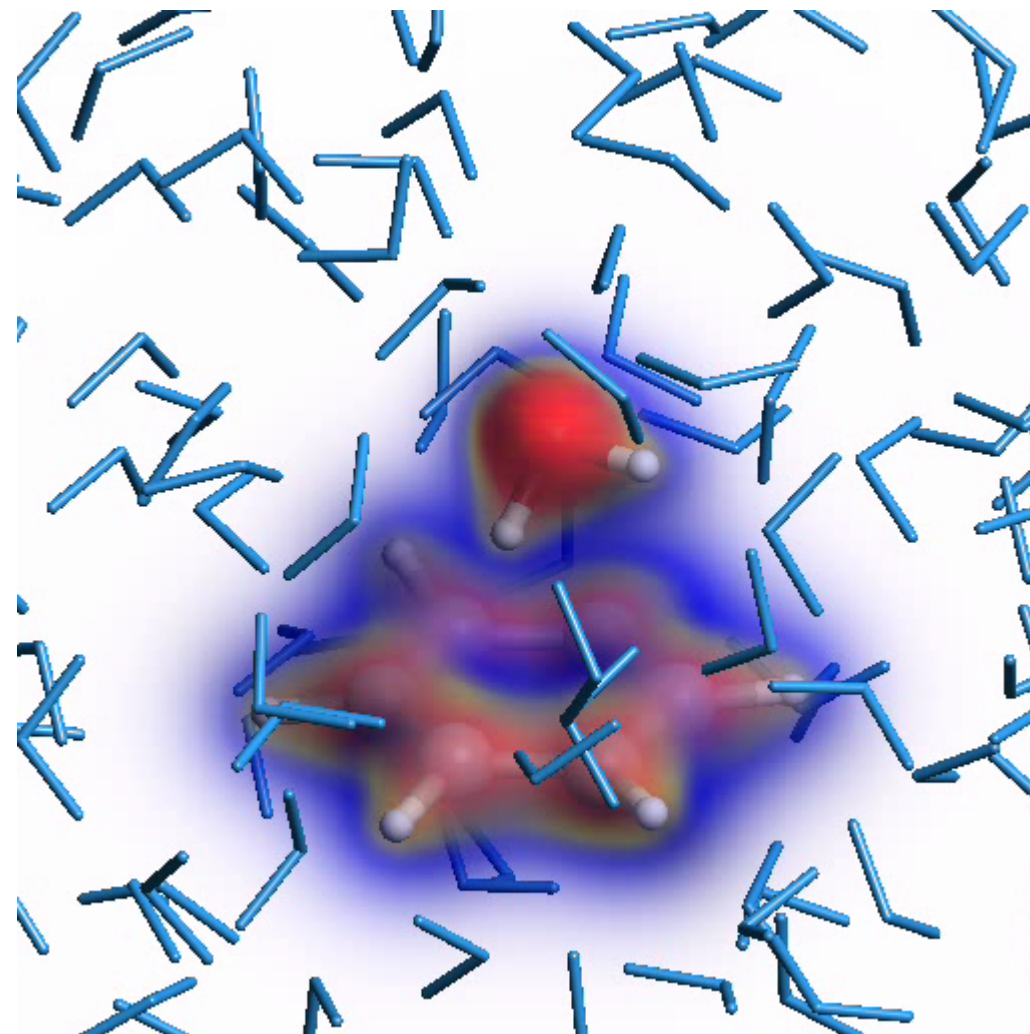
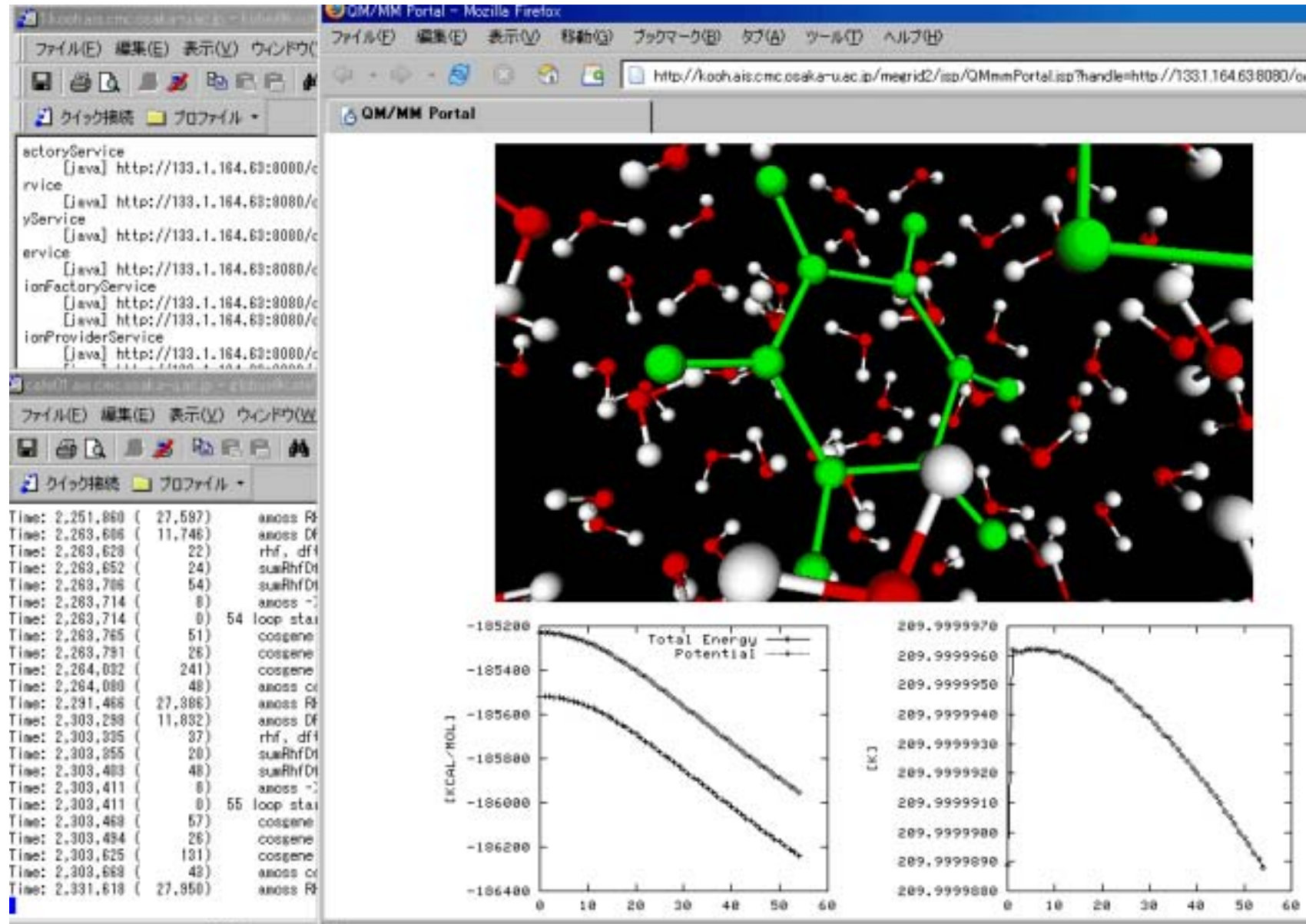


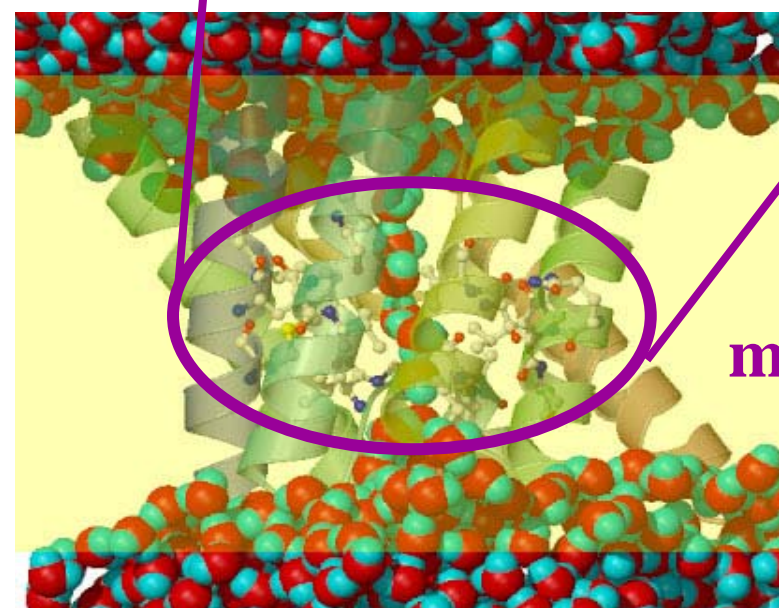
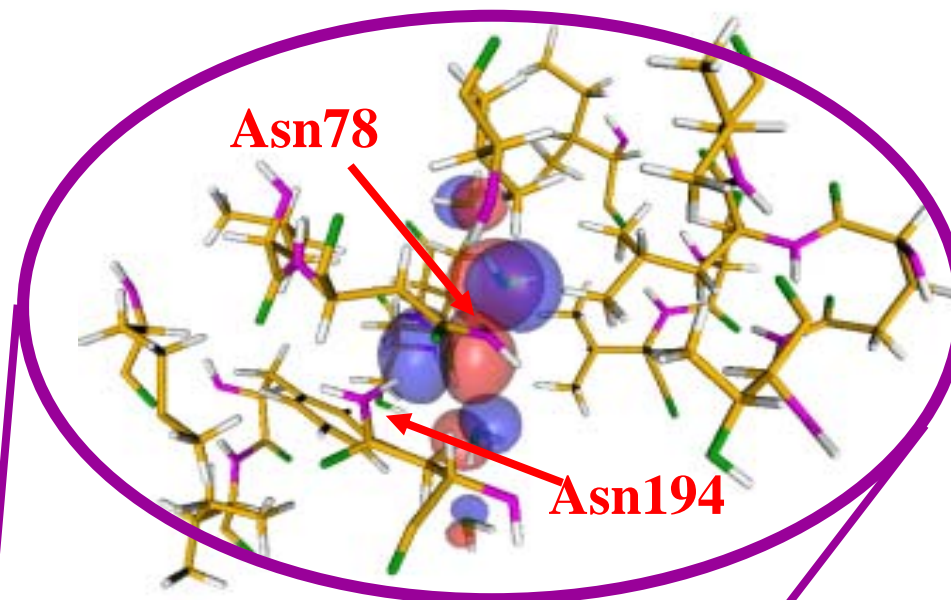
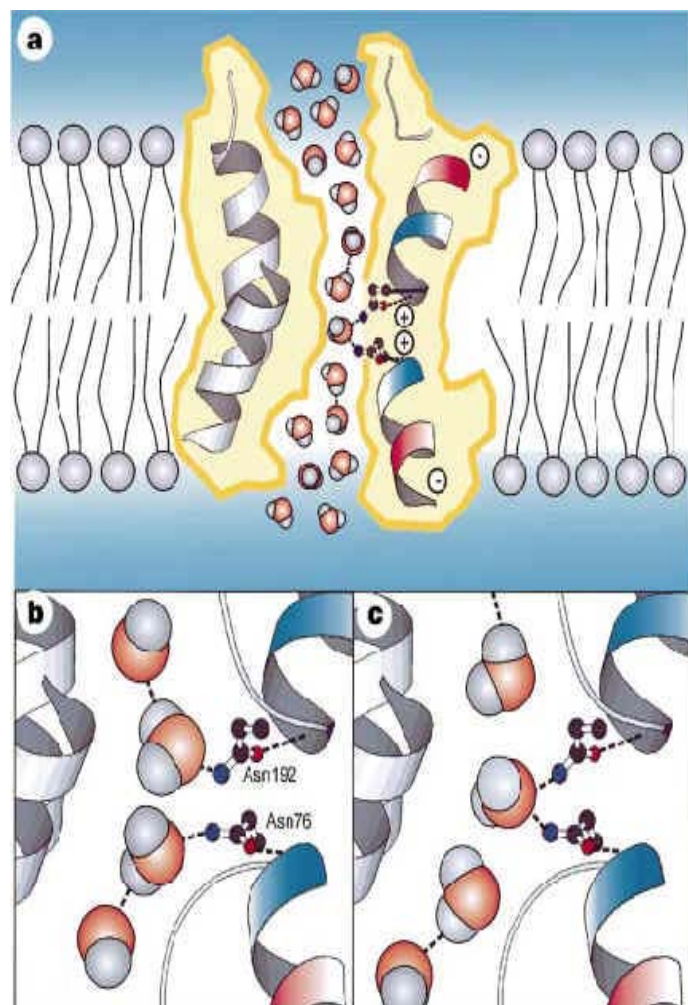
Figure 2. Definition of the spherical polar angles θ , ϕ for an interacting aromatic-amino pair. Reference Phe-ring lies on the x - y plane. An NH₂ group is shown above the plane of the ring. θ defines the position of the NH₂ above the x - y plane. ϕ defines the position of NH₂ in the x - y plane.



計算実施のデモ



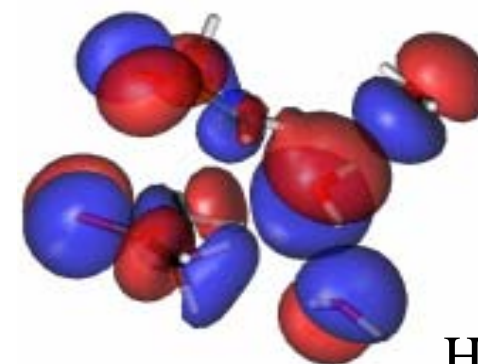
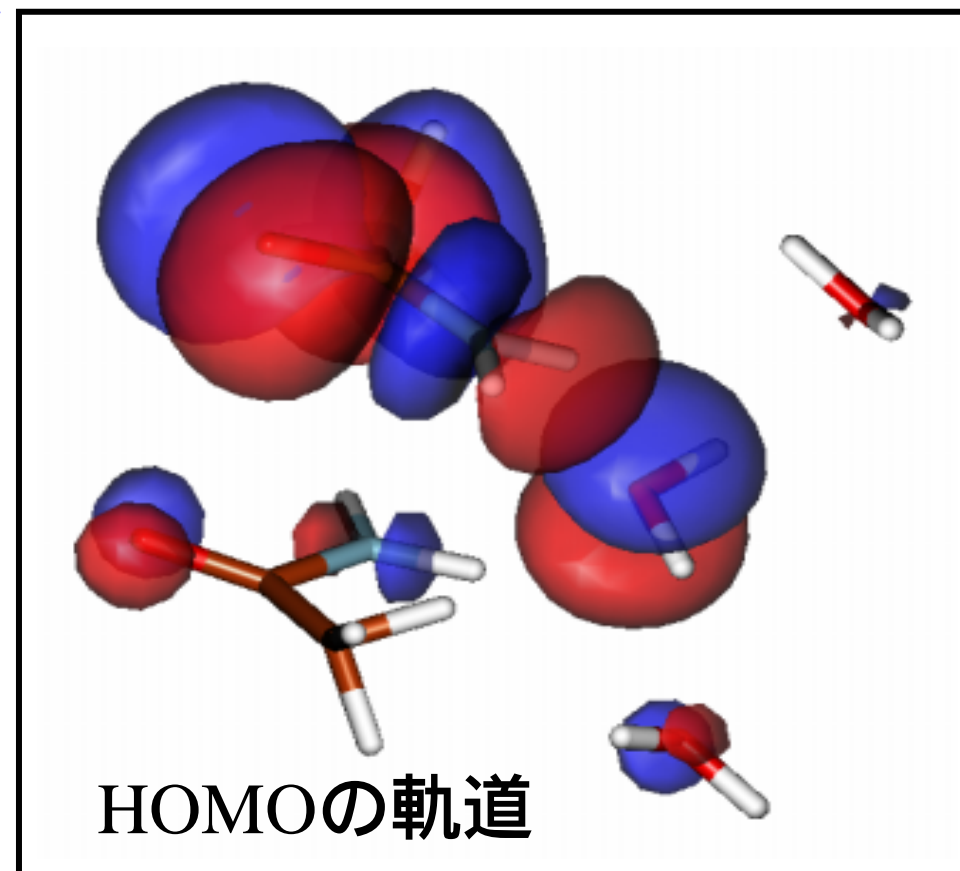
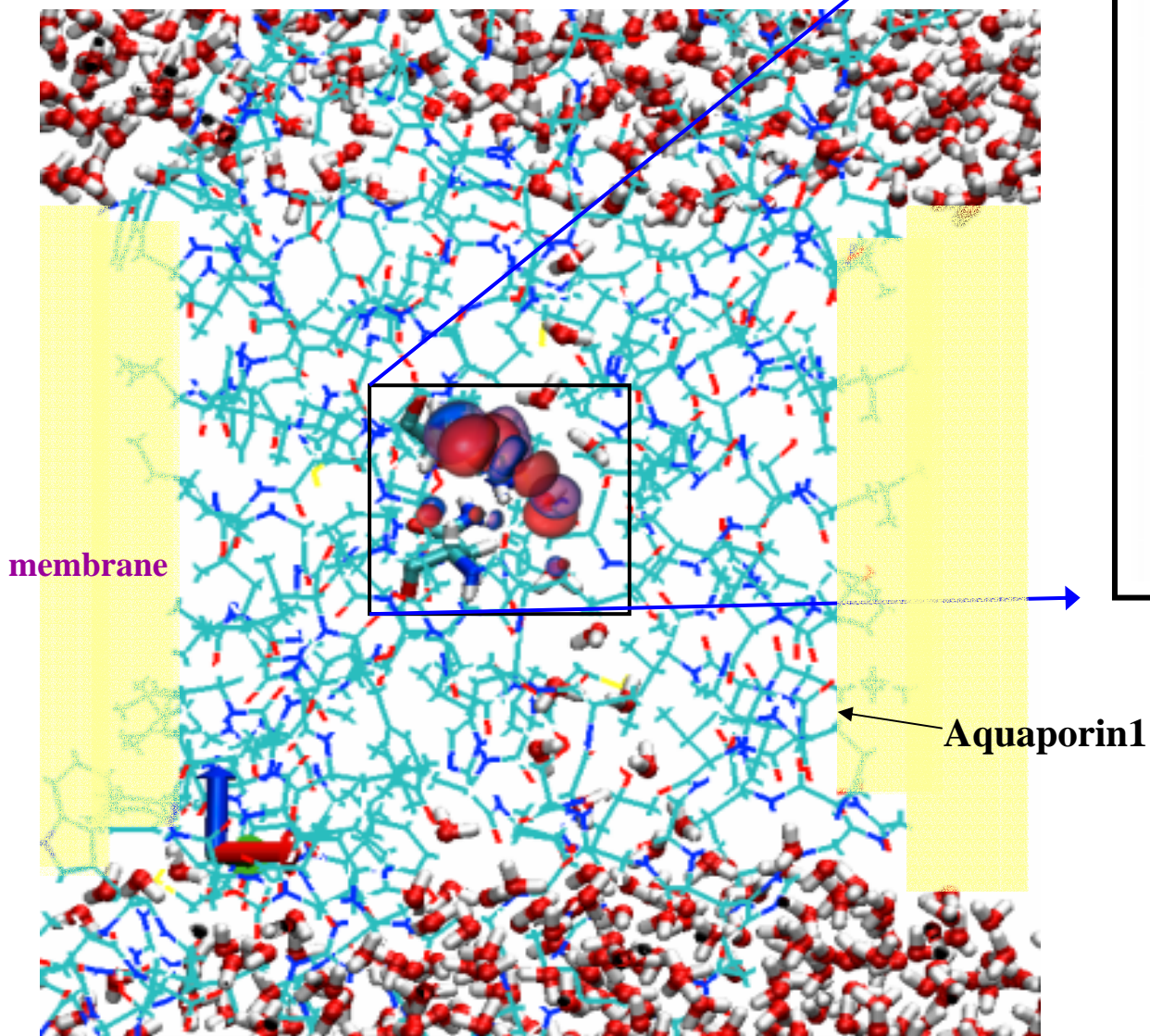
水チャネル(アクアポリン) のHybrid-HF/DFT/MM simulation



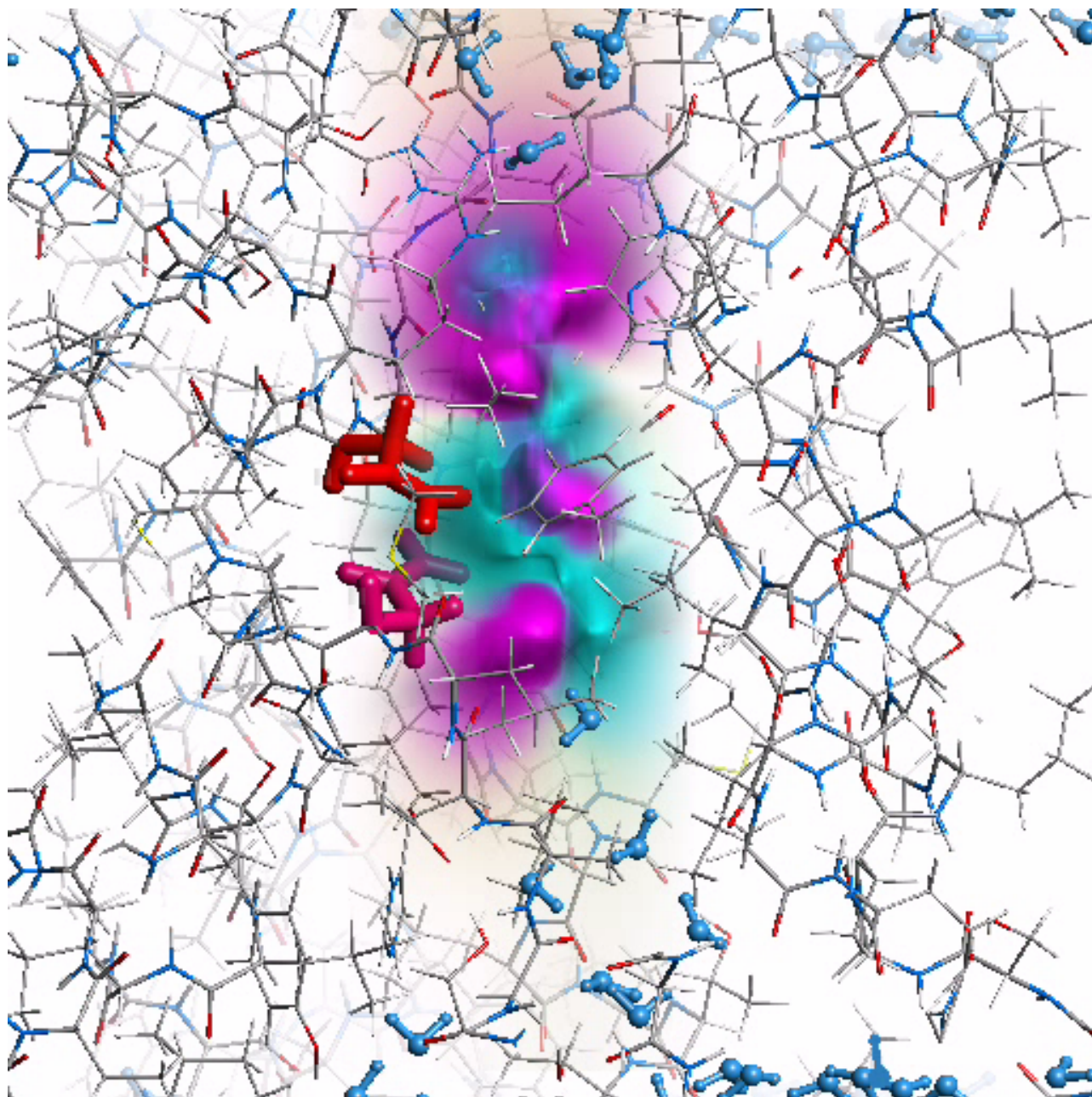
membrane region

Murata et al. (2000) Nature 407, 599-605.

Hybrid-HF/DFT/MM simulation of Aquaporin 1



水チャンネル・
アクアポリン
のHF/MM
連成計算に
よる電位分布



参画研究者

中村春木、米澤康滋、中島伸介（阪大蛋白研）

市川昊平、下條真司（阪大サイバ-メディア）

山口 兆、山中秀介（阪大理・化学）

高田俊和、中田一人、佐久間俊広（NEC基礎・環境研）

何 希倫、黒澤 隆、都築浩一（日立製作所）

（ _ は産学官連携研究員）