クラウドコンピューティング、仮想化技術による生体高分子NMRデータベース（BMRB）統合化への取り組み

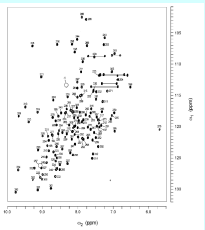
○小林直宏、岩田武史、原野陽子、児嶋長次郎、中村春木、藤原敏道
大阪大学蛋白質研究所

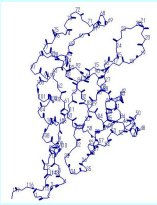
概要

核磁気共鳴法（NMR法）は生体高分子の3次元構造ばかりでなくゆらぎやリガンドとの相互作用といった動的あるいは過渡的な状態に関する情報を原子レベルで与える研究法である。我々は米ウィスコンシン大学との共同開発によりデータベースBMRBを登録サイトとして構築し、同じく原子分解能による構造情報を扱うPDBjと連携しながら運営してきた。これまでに我々は本データベースの登録業務の効率化を進めると共に、NMRデータをライフサイエンス研究で実際に利用する解析ツールとしてMagROシステムおよび関連ツール群を開発し、タンパク質などの立体構造情報との融合的な利用を可能とした。平成23年度より、NBDCを中心として推進される事業として統合化に向けたデータベースや関連ツールの開発を開始し、クラウドストレージを利用した研究者間のデータ交換、解析ツールサーバーの利用などをクラウド技術を導入してユーザーへの場所を選ばない解析環境の提供を行う試みを進めている。また、仮想化技術によるサーバー移設統合の効率化を図り、省スペース化、省電力化を行い、更には高度に安定な運用能力を持つサーバーシステムとしてのリニューアルを行っている。

生体高分子のNMRデータ

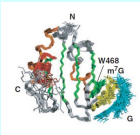
化学シフト、シグナル帰属データの有用性



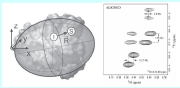


135残基のタンパク質なら135個もの原子プローブとして利用できる
$^{15}N/^{13}C$ラベル体が得られるならば1000個以上にもなる！

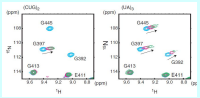
化学シフト、NMRシグナル帰属データの利用先



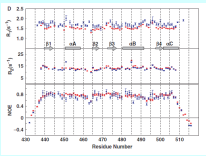
立体構造決定



ドメイン構造の配向



薬剤分子との相互作用実験



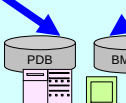
動的性質の解析

NMRデータ登録の流れ

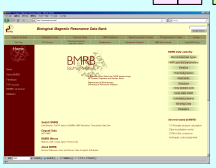
NMR実験データ、NMR立体構造の登録サイト

SMSDep

ADIT-NMR



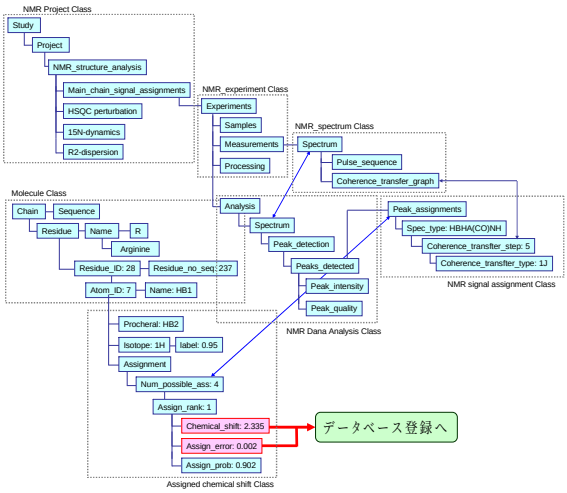
アノテータによる登録作業



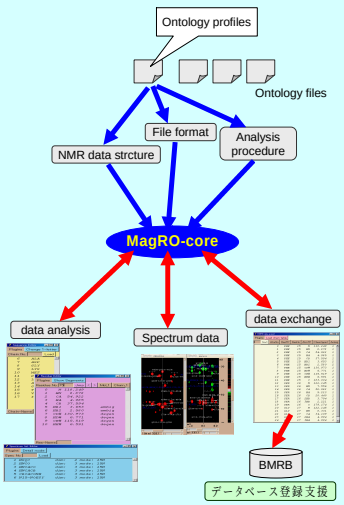
NMR実験データの公開サイト

NMR構造データの公開サイト

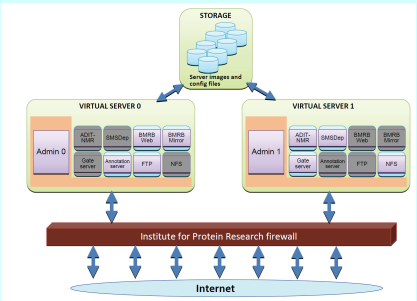
MagRO-Coreにより管理されるデータ構造記述の実際



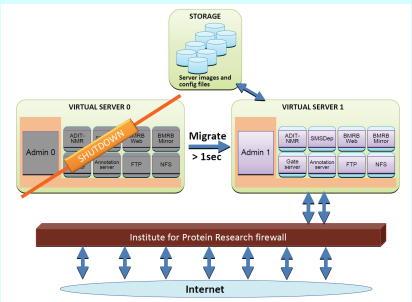
統合的NMRデータ解析、登録支援ツール, MagRO-Sparky

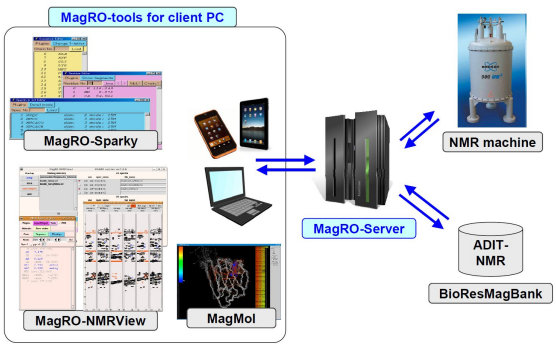


サーバー群仮想化によるフェイルオーバー機能の実現



通常運用時：2つのPCクラスタにより仮想サーバー群を管理



障害発生時：障害対処中に1つのPCクラスタにより仮想サーバー群を集中運用

MgRO-Coreにより管理されたNMRデータ解析、登録支援システム