

全球網格基礎架構 (WLCG/EGEE e-Infrastructure), 再創生物計算新高峰

中央研究院網格計算團隊

繼去(94)年12月中央研究院成為亞洲唯一的全球網格 (WLCG) Tier-1 中心之後, 中央研究院網格計算團隊再度透過全球網格基礎架構, 與歐盟支持的EGEE (Enabling Grid for eScienceE)計畫攜手進行禽流感變種病毒藥物設計之計算模擬挑戰。

本次合作案由中央研究院網格計算團隊、中央研究院基因體中心、法國Corpuscular Physics Laboratory of Clermont-Ferrand, CNRS/IN2P3、及義大利Institute for Biomedical Technologies, CNR共同合作, 於今(95)年四月十日起進行為期四週之禽流感變種病毒藥物設計模擬。本案係由台灣與法國主導, 串連EGEE、AuverGrid及中研院TWGrid三網格系統, 歐洲動員超過2,000台電腦, 使用約137個CPU年的計算量, 產生1,400 GB的資料量, 此乃目前全球最大的跨國藥物設計計算合作案例。

本次的模擬是針對禽流感病毒蛋白(neuraminidase)的8種可能變異結構分別進行30萬個小分子 (compounds) 藥物之活性反應模擬測試 (docking)。在短短四週之內, 亞洲與歐洲的WLCG/EGEE科研單位迅速的動員超過2,000台電腦進行本次的計算模擬。此舉不僅證明WLCG/EGEE網格系統大幅提昇了生物計算及資料分析的速度, 同時亦展現全球網格基礎架構彈性: 整合全球網路資源與即時支援大規模計算的應變能力。

「在過去數年間, 我們目睹電腦資源(含CPU power、儲存能力、網路連結)以前所未見的速度快速發展, 進而推動下一代網路應用的基礎架構—網格計算環境。而隨著網格系統逐漸成熟, 其終將成為一個快速、方便、且

強而有利的工具，以利科學家進行更大規模的各類科學研究與國際合作。」中研院網格計算團隊主持人林誠謙博士表示。

中央研究院基因體中心吳盈達博士亦表示「以往科學家需要花較長的時間等待電腦計算模擬的結果，以便檢視可能成為藥物的化學分子。如今有了網格系統提供高產出計算及處理大量資料的能力，藥物化學家可以省下許多測試的時間，進而專注在發現有初步療效的藥物上。對像禽流感這種傳染力又強又迅速的時疫，爭取時效尤其重要。」

歐盟資訊社會與媒體的負責人Viviane

Reding一方面對歐盟旗艦級的EGEE計畫能在禽流感的研究做出貢獻感到高興；另一方面對網格系統提供科學家一個穩定而且高速的全球資源，進而開創科研的新模範亦表示肯定。

EGEE (Enabling Grid for eScienceE)為歐盟主導的旗艦級e-Science計畫，目前已有39個國家、180個研究單位參加。其計畫目標是以全球網格架構(WLCG/EGEE e-Infrastructure)為基礎，將全球網格資源與計算平台推廣至其他科學領域如生物醫學、天文、地球科學等。中央研究院網格計算團隊自2004年12月加入該計畫以來，成果倍受肯定，目前負責亞太區域e-Science相關工作的協調與整合。

相關網站：

1. WISDOM (wide *in silico* docking against malaria) : <http://wisdom.eu-egge.fr/>
，聯絡人：Nicolas Jacq (CNRS/IN2P3)，電子信箱：jacq@clermont.in2p3.fr
2. Enabling Grids for E-sciencE (EGEE) : <http://www.eu-egge.org/>
，聯絡人：Hannelore Hammerle (CERN)
，電子信箱：hannelore.hammerle@cern.ch
3. Corpuscular Physics Laboratory of Clermont-Ferrand,
CNRS/IN2P3 : <http://clrwww.in2p3.fr/>

4. 中央研究院基因體中心：<http://www.genomics.sinica.edu.tw/>
5. 中央研究院網格計算團隊：<http://www.twgrid.org/>
6. Institute for Biomedical Technologies, CNR：<http://www.itb.cnr.it/>
7. AuverGrid：<http://www.auvergrid.fr/>

8.