



e-Glycomics 연구를 위한 Glyco-MGrid 시스템의 개발 및 활용

목 차

1. 서 론
2. 사용자 요구 사항
3. 사용자에게 제공되는 서비스
4. 포탈 시스템 구조
5. 활용 현황
6. 결론 및 향후 발전 방향

최영진 · 정갑주 · 김동광 · 이종현 · 임상범
정선호 · 허대영 · 황선태 · 변옥환
(건국대학교 · 국민대학교 · 한국과학기술정보연구원)

1. 서 론

탄수화물과 당쇄 (glycan) 분자는 생명체의 에너지원과 구성성분으로서뿐만 아니라 세포 사이의 신호 전달 및 세포 인식에서도 중요한 매개체로 사용되는 등 생명현상에 없어서는 안될 중요한 생체분자이다 [1]. 당생물학은 이러한 당쇄 분자의 구조와 기능을 다루는 학문의 한 분야이며, 이러한 당생물학 연구를 좀더 체계적이고 시스템적인 방법으로 수행하고자 하는 것이 최근 이슈가 되고 있는 글리코믹스 (glycomics)라는 방법론이다[2]. 이러한 글리코믹스 분야는 MIT에서 매년 발표하고 있는 10대 유망 기술의 하나로 선정된 바 있다. 이렇게 당쇄 분자 연구에 대한 중요성에 대해서는 점점 관심의 정도가 높아지고 있음에도 불구하고, 현재까지 과학자들 사이에 이들에 대한 이해는 핵산이나 단백질에 대한 것에 비해 훨씬 못 미치는 실정이다. 그에 대한 이유는 현재의 분자생물학 기반 연구가 지노믹스, 프로테오믹스 등에 초점이 맞추어져 있는 데에서도 찾을 수 있겠지만, 주 원인은 당쇄분자의 3차원 구조 연구가 매우 어렵기 때문이라 할 수 있다[3].

단백질의 경우 2007년 11월 현재 PDB (Protein Data Bank)에 등록되어 있는 3차원 구조에 대한 정보가 43,500 여 개에 이를 정도로 구조 연구가 전세계적으로 활발하며 이를 바탕으로 구조-기능 상관관계 (Structure-Function Relationship)에 대한 연구가 활발히 진행될 수 있는 기반이 조성되어 있다. 그러나 탄수화물이나 당쇄 분자의 경우에는 구조의 내재적인 유동성이 매우 커서 결정화된 구조를 얻어내기가 어렵다[4]. 단백질은 아미노산들이 펩타이드 결합으로 연결되어 3차원 구조에 어느 정도 제한성이 있지만, 당쇄 분자는 모든 수산기들에 결합이 가능하고 알파와 베타 탑입의 아노머 (anomer) 다양성까지 감안한다면 수용액 내에서 특정 구조로만 존재할 확률이 매우 낮아서 3차원 구조를 결정하기가 매우 어려운 것이다. 따라서 글리코믹스 연구가 활성화 되기 위해서는 어떠한 방식으로든지 3차원 구조에 대한 정보가 축적되어 다양한 연구자들이 자유롭게 이용할 수 있어야 한다. 이러한 관점에서 볼 때 분자시뮬레이션과 데이터베이스 이용을 기본으로 한 e-글리코믹스

방법론은 글리코믹스 연구의 수준을 한 차원 높일 수 있는 중요한 툴이라고 할 수 있다.

Glyco-MGrid는 이러한 e-글리코믹스 연구를 지원하기 위해 개발된 사이버 인프라로서, MGrid라는 문자 시뮬레이션 지원 그리드를 기반으로 하여 설계되었다 [5]. 사용자는 Glyco-MGrid의 웹포털 환경에서 다양한 당쇄 분자에 대한 분자시뮬레이션 작업을 수행하고, 그 결과를 데이터베이스를 통하여 다른 연구자와 공유할 수도 있으며, 시뮬레이션 작업 후 사후 분석에 이르기까지 관련된 모든 작업을 처리할 수 있는 통합환경과 협업연구 환경을 제공한다.

2. 사용자 요구 사항

분자시뮬레이션 기법은 컴퓨터를 활용한 글리코믹스 연구에 매우 중요한 방법이다. X-선 회절 기법이나 NMR (Nuclear Magnetic Resonance) 분광기를 이용한 당쇄분자의 구조 연구는, 3차원 구조를 결정하는데 적합하지 않을 뿐 아니라 이로부터 얻어지는 동역학적 정보도 불충분한 경우가 많다. 분자시뮬레이션 방법은 실험을 통해 얻기 힘든 당쇄분자의 3차원 구조와 동역학적 정보를 제공하기 때문에 e-글리코믹스 연구에 적합하다. 그러나 이러한 분자 시뮬레이션 연구는 요구 계산량이 매우 커서 대규모의 PC 클러스터나 슈퍼컴퓨터의 활용을 필요로 한다. 또한 이러한 계산 결과가 실제 실험 결과에 얼마나 부합할 것인가를 결정하고 평가하는 문제도 이슈가 된다. 현재 상황에서 컴퓨터를 활용한 글리코믹스 연구의 문제점과 개선 방향에 대한 항목을 사용자 측면에서 요약하면 다음과 같다.

- 컴퓨터를 활용한 글리코믹스의 연구 아이디어가 축적된 지식기반에 근거하여 현실화되지 못하고 있다. 대부분의 당쇄분자 구조 계산 결과는 연구자 개인의 직관이나 견해 혹은 유사한 실제 실험 결과에 근거한 것으로 제한되어 있는데, 그 이유는 컴퓨터를 활용한 당쇄분자 연구가 개

인적인 PC 클러스터나 전통적인 슈퍼컴퓨터상에서 이루어지기 때문이다. 이러한 접근법으로 도출된 결과들은 개인적으로는 모두 의미 있는 연구성과라고 할 수 있겠지만, 통계적으로 연구 데이터들을 통합하여 처리하기가 어려워 공통된 지식 정보가 축적되지 못하고 있다.

- 당쇄분자의 구조 계산 결과를 공유할 수 있는 공공의 기반이 빈약하다. 현재로서는 개인적인 당쇄분자 구조 연구 결과를 다른 연구자와 공유할 수 있는 장구는 저널에 논문 형태로 출간하는 것이다. 학회에서 발표하는 정도로 제한되어 있다. 그러나 점점 더 많은 당쇄물학자들이 연구 계산 결과를 공유할 수 있는 획기적인 인프라가 만들어지기를 기대하고 있다.

- 당쇄 분자의 계산 결과 신뢰성을 객관적으로 평가할만한 지표가 부족하다. 당쇄분자의 연결은 매우 유동적인 글리코시딕 결합을 경유하여 이루어지므로 특정한 하나의 3차원 구조를 취하지 않는다. 따라서 구조 분석 기기를 사용하여 3차원 구조를 결정하기도 어렵지만, 컴퓨터 분자 시뮬레이션을 이용한 결과도 실제의 구조와 다를 가능성도 충분히 존재한다. 시뮬레이션 결과의 정확성은 계산 프로그램, 사용한 힘장, 원자들의 전하 값, 온도, 압력, 시간, 에너지 계산 파라미터와 같은 다양한 변수에 영향을 받게 되는데, 3차원 구조의 실험결과가 공개된 것이 많지 않으므로 당쇄분자 구조 계산 결과의 정확도를 실증할 만한 기준이 명확하지 않다는 문제가 발생한다.

- 이러한 문제점들과 컴퓨터를 활용한 글리코믹스 연구의 한계는 e-글리코믹스 연구에서 추구하는 학제간의 협력 (collaboration) 연구와 시스템 통합 (integration)에 의해서 해결될 수 있는 문제로 파악된다. 본 논문에서 제안하는 Glyco-MGrid 시스템은 현재까지 연구되어 온 컴퓨터를 활용한 글리코믹스의 문제점을 개선한 e-글리코믹스 연구를 수행하기 위하여 개발된

사이버 인프라이다. Glyco-MGrid 프로젝트의 목표는 당쇄분자의 시뮬레이션 구조 데이터베이스를 구축하고 글로벌 글리코믹스 연구 그룹들 사이에 시뮬레이션 데이터를 공유할 수 있는 서비스를 제공하는 것이다. Glyco-MGrid 를 통하여 연구자들은 당쇄분자 구조의 계산 결과를 다른 연구자와 공유할 수 있으며, 결과의 상호 검증과 비교가 가능하므로 데이터 통계에 기반한 지식정보 데이터베이스를 구축할 수 있다. 다음은 구체적으로 Glyco-MGrid 가 지원하는 기능을 살펴보도록 하겠다.

3. 사용자에게 제공되는 서비스

Glyco-MGrid 의 포털 (그림 1)은 당쇄분자의 분자 시뮬레이션 협업 환경을 효과적으로 지원하기 위하여 통합 PSE (Problem Solving Environment)를 제공한다. 사용자는 포털을 통하여 당쇄분자 계산 데이터베이스와 계산 결과 분석 툴킷을 이용할 수 있다. 이를 통하여 데이터를 검색, 열람하고, 분석한 후 재시뮬레이션까지 실시할 수 있는 기능이 통합되어 있다. 사용자가 Glyco-MGrid 에서 이용할 수 있는 주요 기능은 다음과 같다.

The screenshot shows the Glyco-MGrid main interface. At the top, there's a navigation bar with links like 'Home', 'About', 'Contact', 'Help', and 'Logout'. Below the navigation is a search bar with placeholder text 'Search Glyco-MGrid'. To the right of the search bar is a button labeled 'Search'. Underneath the search bar, there's a section titled 'Welcome to the Glyco-MGrid' with a brief introduction. On the left side, there's a sidebar with various links and sections. The main content area contains several large buttons for different services: 'Molecular Simulation for the 3D Structure of Glyco-Proteins', 'Molecular Simulation for Glyco-Substrates', 'Molecular Simulation for Glyco-Products', and 'Molecular Simulation for Glyco-Enzymes'. There are also smaller buttons for 'Glyco-Structure', 'Glyco-Database', 'Glyco-Analysis', and 'Glyco-Toolbox'.

(그림 1) Main page of the Glyco-MGrid

3.1 시뮬레이션 데이터 액세스 서비스

Glyco-MGrid는 사용자들이 손쉽게 시뮬레이션 데이터에 접근할 수 있도록 직관적인 사용자

인터페이스를 제공한다. 인터페이스에서 제공하는 정보는 시뮬레이션 메타데이터와 (그림 2) 시뮬레이션 결과 데이터 (그림 3)이다. 메타데이터는 작업 타이틀, 저자 정보, 당쇄분자의 이름, 시뮬레이션 파라미터에 대한 정보 등을 담고 있다. 시뮬레이션 결과 데이터는 시뮬레이션 작업 스크립트와 로그파일, 구조 정보 파일, 궤적 (trajectory)파일, 결과 분석 파일 등을 포함한다. 사용자는 파일 이름상에서 간단한 마우스 클릭만으로 시뮬레이션 데이터 파일을 다운로드 받을 수 있다. 또한 분석 툴킷을 사용하여, 결과 파일에 대한 사후 분석을 추가로 실시할 수도 있다.

Simulation Information			
Job Title :	MD simulation of b-D-Manp-1-6-b-D-Manp-1-6-b-D-Manp-1-4-b-D-GlcNAc		
Glyco-Structure :	<chem>Man61-----> Man61-----> Man61-----> GlcNAc</chem>		
Glyco-Trivial Name :			
Classification :	Biological Glycan		
Authors :			
Citation :			
History :			
Computation Method :	MD		
Force Field	Simulation Program	Solvation	PBC
CHARMM-CSFF	CHARMM	Water	YES
Crystal Type	Ensemble	Dielectric Condition	Long-Range Electrostatics
Cubic	NPT	Constant Dielectric	Ewald Summation
Temperature Control	Pressure Control	Nonbonding Cutoff Distance	Dielectric Constant
Nose-Hoover	Langevin piston	15	1
Time Step (fs)	Total Simulation Time(ns)		
2	10		
Parameter Files :	1) MainScriptFile : MainScriptFile 2) Input File : InputFile		

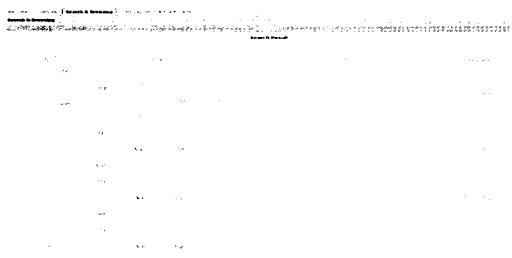
(그림 2) Metadata about a Single Simulation Job

Simulation Results			
Potential Energy	Radius of Gyration	Total Surface Area	End-to-End Distance
1.234567890	1.234567890	1.234567890	1.234567890
Dihedral Angle			
Angle #1			
Dihedral Angle Map			
Map #1			
Output Files :			

(그림 3) Simulation Result Data from a Single Simulation Job

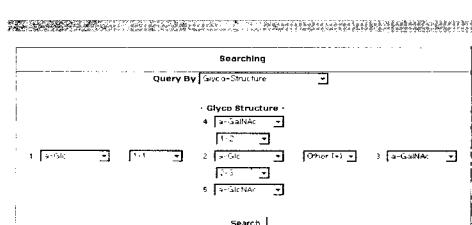
3.2 데이터 브라우징과 검색

Glyco-MGrid에서는 데이터 브라우징을 위하여 이용 가능한 모든 시뮬레이션 데이터를 리스트 형태로 출력하여 준다 (그림 4). 이러한 뷰를 이용하여 시뮬레이션 기록에도 사용할 수 있다. 각 시뮬레이션 작업을 열람하면, 당쇄분자의 구조와 시뮬레이션 작업 타이틀, 데이터가 기록된 시간등을 확인할 수 있다.



(그림 4) List View for All Simulation Data

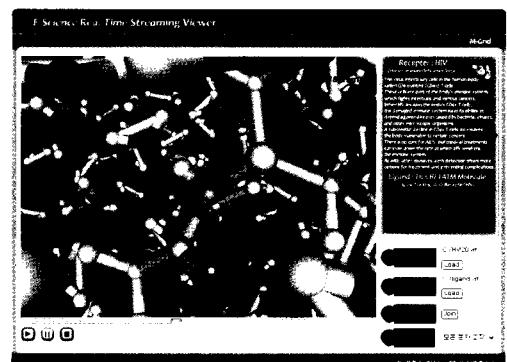
특정 시뮬레이션 작업만을 이용하기 위하여 Glyco-MGrid는 검색 기능을 제공한다. 사용자는 시뮬레이션 데이터베이스에서 키워드, 작업 이름, 시뮬레이션 프로그램, 시뮬레이션 방법, 당쇄 분자 이름 등을 이용한 검색이 가능하다. 특히 당쇄분자 구조 검색을 위해서 GUI-타입의 검색을 제공하는데, 콤보 박스 메뉴를 이용한 당쇄 잔기와 글리코시딕 결합 종류를 선택하여 검색을 하는 것이 가능하다(그림 5).



(그림 5) Text Menu-based Search Interface

3.3 당쇄 구조 시각화

데이터 리스트에서 사용자가 원하는 시뮬레이션 데이터를 선택하면 Glyco-MGrid는 당쇄분자의 시뮬레이션 결과 3차원 구조를 공개 애플리케이션 Jmol을 이용하여 보여준다. 현재, 시뮬레이션 trajectory에서 에너지가 가장 낮은 안정한 구조와, 시뮬레이션 동안 출현빈도가 가장 높은 구조 2가지 경우를 제공한다. 사용자는 이를 통해서 계산된 당쇄분자의 구조를 점검하고 조작할 수 있다. 원격 서버에 존재하는 대용량의 trajectory 파일 시각화하기 위해 Glyco-MGrid는 자체 개발한 스트리밍 뷰어를 지원한다 (그림 6). 이러한 기법을 사용하여 사용자는 원격지에서 파일 다운로드를 할 필요 없이 시뮬레이션 trajectory 파일에 저장된 당쇄분자의 구조들을 확인할 수 있다. 현재 분자 구조의 이동, 회전, 줌인/아웃 등의 조작이 가능하다.

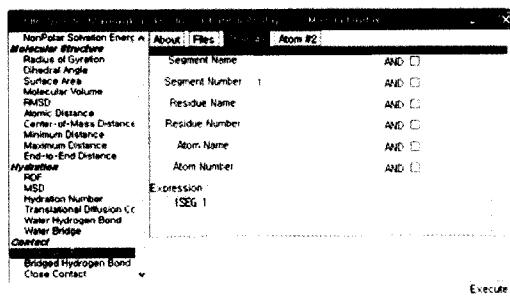


(그림 6) Trajectory File Streaming Viewer

3.4 Trajectory 분석

사용자들이 직접 Glyco-MGrid의 데이터에 저장되어 있는 trajectory file을 추가 분석할 수 있는 툴킷 (GlycoATK)이 내장되어 있다. 사용자가 분석 메뉴를 선택하면 포털에 링크되어 있는 실제 파일들을 로드하여 분석 코드를 실행시

킬 수 있는데 (그림 7), 분석된 결과를 데이터베이스에 등록하는 것도 가능하다. 현재, 당쇄분자의 구조와 에너지에 관련된 16 종류의 추가 분석이 가능하며, 결과를 채트 형태와 Microsoft-Excel 과 호환 가능한 텍스트 파일 형태로 제공한다.



(그림 7) GlycoATK Screen Snapshot

3.5 재시뮬레이션

당쇄분자의 유동성으로 인하여 3차원 구조 결정이 한 차례의 분자 시뮬레이션으로 완료되지 못할 경우가 종종 있다. 사용자가 추가 시뮬레이션을 원하거나, 계산 조건을 바꾸어서 재시뮬레이션을 실시할 경우 Glyco-MGrid 는 간편한 조작만으로 시뮬레이션 필요한 입력 파일들을 묶어서 독립된 작업으로 등록하여 준다. 사용자는 몇 가지 시뮬레이션 파라미터만 수정하여 재시뮬레이션 하는 것이 가능하다.

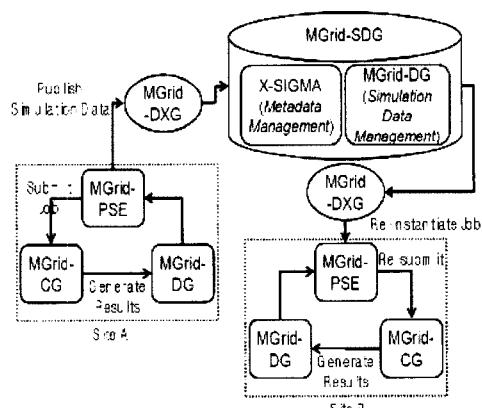
4. 포탈 시스템 구조

Glyco-MGrid 는 MGrid를 기반으로 한 당쇄분자의 시뮬레이션 및 데이터 공유 시스템으로서 통합 포탈 환경에서 분자시뮬레이션 작업을 수행하고 데이터베이스 이용과 데이터 분석에 대한 연구를 공동으로 수행할 수 있도록 설계되어 있다.

4.1 MGrid

MGrid는 분자 시뮬레이션 연구자들을 지원하는 범용적인 사이버 인프라스트럭처 (Cyber-infrastructure)이다. 사용자들은 MGrid 의 포탈을 통하여 원격지 계산 자원을 사용할 수 있으며 모든 작업 과정이 웹 환경에서 이루어지므로 편리할 뿐만 아니라, 시스템의 확장성이 좋다. 과학자들은 MGrid를 통하여 분자 시뮬레이션 데이터를 관리할 수 있고 다른 연구자와 데이터 공유가 가능하다.

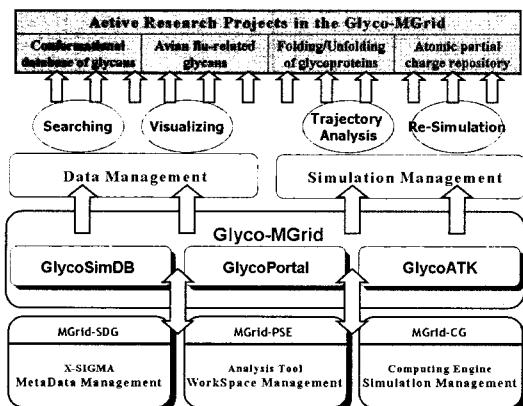
MGrid의 구성은 크게 5가지 요소로 이루어져 있는데, 사용자에게 그린트 포탈 웹 환경을 제공하는 MGrid-PSE (Problem Solving Environment), 컴퓨팅을 담당하는 MGrid-CG (Computational Grid), 효과적인 데이터 관리를 위한 MGrid-DG (Data Grid), 시뮬레이션 데이터와 메타데이터 공유를 위한 MGrid-SDG (Semantic Data Grid), 그리고 MGrid-PSE 와 MGrid-SDG 사이의 데이터 교환을 위한 MGrid-DXG (Data eXchange Gateway)가 그것이다.



(그림 8) MGrid System Structure

4.2 Glyco-MGrid

Glyco-MGrid는 MGrid를 기반으로 하여 e-글리코믹스 연구에 적합하도록 설계되었다. Glyco-MGrid의 주요 구성 요소는 MGrid, GlycoSimDB, GlycoATK, GlycoPortal의 4 가지이다 (그림 9). GlycoSimDB (Glyco-Simulation Data Base)는 MGrid-SDG와 MGrid-DG로부터의 당쇄분자 시뮬레이션 데이터에 접근하기 위하여 만들어졌으며, 시뮬레이션 입력 조건과, 출력 값 등에 대한 메타데이터와 시뮬레이션 결과 파일에 대한 데이터 정보를 가지고 있다. GlycoATK (Glyco-Analysis Toolkit)는 시뮬레이션 결과 파일을 분석하기 위한 기본 툴킷이며, MGrid-PSE에 연동되어 당쇄 분자 분석을 실시할 수 있도록 한다. GlycoPortal은 사용자의 작업 지원을 위한 것으로 웹을 이용한 작업 통합과 협업 연구 지원에 초점을 맞추고 있다.



(그림 9) System Structure of Glyco-MGrid

5. 활용 현황

현재 Glyco-MGrid를 이용하여 당쇄 분자와 관련된 다양한 분자 시뮬레이션 연구가 진행되고 있으며, 대표적으로 4가지의 테마를 주제로 한 응용 연구 프로젝트가 진행 중이다.

5.1 당쇄분자에 대한 conformational database

MGrid를 시뮬레이션 엔진으로 사용하여 당쇄 분자의 3차원 구조를 분자시뮬레이션 기법으로 계산한 후, 그 결과를 Glyco-MGrid의 데이터베이스에 등록하는 연구가 실시되고 있다. 당쇄 분자의 정확한 3차원 구조를 파악하는 것은 글리코믹스 기법을 이용하여 구조-기능 상관관계를 규명하는 데에 초석이 된다. 당쇄 분자의 구조를 표현하는 방법은 단백질에서 사용되는 라마찬드라 플롯 형태의 맵을 사용하게 되는데, 글리코시딕 결합을 이루는 (f,y) 각도를 맵으로 표현한다. 당쇄 분자 구조의 기본 단위는 이당류의 결합형태라고 할 수 있으며, 현재 Glyco-MGrid에서는 100여종의 이당류(disaccharide) 구조에 대한 계산 결과를 보유하고 있다. 또한 이당류 이외에 사당류(tetrasaccharide)를 기본 골격으로 보고, 이들에 대한 3차원 구조 맵이 연구되고 있다. Glyco-MGrid는 각 당쇄분자 단위의 계산 결과 파일을 자동으로 분석하여 여러 당쇄분자들의 3차원 구조를 맵으로 보여주고, 사용자는 이러한 결과를 임의로 검색하여 이용할 뿐만 아니라, 추가 분석을 실시할 수도 있다.

5.2 조류 독감 관련 당쇄 분자 연구

인플루엔자 A는 전세계적으로 널리 퍼져서, 가금류뿐만 아니라 때로는 사람의 건강에도 치명적인 질환을 일으키기도 하는 바이러스이다. 최근에 조류와 인류에 질병을 일으킬 수 있는 인플루엔자 바이러스가 숙주세포에 결합할 때 당쇄 분자를 매개로 하여 상호인식이 결정된다는 사실이 알려져, 당쇄 분자 구조 연구가 재조명되고 있다. 조류에 침입하는 바이러스는 알파 2-3-결합으로 연결되는 말단 시알산에 의해 결합이 일어나는데 반해, 인체에 침입하는 바이러스는 알파 2-6-결합으로 연결되는 시알산 당쇄를 매개로 하여 결합이 일어나게 된다 [6]. 이러한 차

이는 당쇄 분자의 구성분이 모두 같고 단지 말단 부위의 글리코시딕 결합의 종류만 다른데에서 기인하는 것이므로 시사하는 바가 크다. 독감 치료제나 백식 개발 과정에서 인체에 침입한 바이러스가 당쇄분자를 매개로 숙주세포에 결합하는 것을 효과적으로 막을 수 있다면, 더 좋은 성능의 약품을 개발할 수 있기 때문이다. 이를 위해서는 해당하는 당쇄분자의 3차원 구조와 동역학적 움직임을 잘 이해해야 할 뿐만 아니라, 유사한 당쇄분자 구조를 변경시켰을 경우의 바이러스 인식이 어떻게 변화할지 예측 가능하여야 한다. Glyco-MGrid에서는 이렇게 조류독감과 관련된 당쇄분자에 대해서도 3차원 구조 계산을 실시하고 있으며, 계산 결과는 별도의 데이터베이스에서 관리되고 있다. 이러한 계산결과 역시, 당쇄분자를 기반으로 한 신약이나 백신 개발 연구진들에게 좋은 기초 자료를 제공할 것이다.

5.3 당단백질의 Folding/Unfolding 시뮬레이션

생체 내에 존재하는 단백질들은 상당수가 당쇄분자가 표면에 결합되어 있는 형태로 존재한다. 이러한 글리코실화에 의하여 열안정성이나 단백질 접힘 속도가 증가된다는 것이 보고된 바 있다 [7]. 따라서 당쇄공학을 이용한 단백질 특성 변화는 바이오텍의 중요한 틀이 될 수 있다. Glyco-MGrid는 당쇄공학 기법에 의한 단백질 안정성 변화를 계산하고 예측하기 위하여 folding/unfolding 시뮬레이션 결과를 구축하고 있다. 고온 조건에서 단백질의 접힘 구조가 얼마나 빨리 풀어지는지 글리코실화된 당단백질과, 일반 단백질을 비교한 결과를 공개하여, 사용자들이 자신이 원하는 단백질에 또 다른 글리코실화 단백질을 만들어 시뮬레이션할 경우 중복되는 기준 결과는 데이터베이스를 이용하므로 시간과 경비를 줄일 수 있다. 또한 다른 연구자의 결과와 비교 연구가 가능하므로, 당쇄공학 기법을 분자 수준에서 설계할 수 있을 것이다.

5.4 Atomic Partial Charge 데이터베이스

당쇄분자를 이루는 각 원자들에 대한 전하값은 분자 시뮬레이션 작업에서 가장 중요성이 높은 입력 파라미터 중의 하나이다. 사실 e-글리코믹스 방법론의 정확성은 분자시뮬레이션 프로그램에서 사용하는 힘장 (force field)의 종류와 전하값에 크게 의존하게 된다. 따라서 사용자들이 기존의 힘장 이외에도 원자들의 전하값을 선택하여 분자 시뮬레이션 작업을 수행한다면, 더욱 의미 있는 결과를 산출해 낼 수 있다. Glyco-MGrid는 당쇄 분자들의 기본 구조 단위를 모델화하여 가우시안 프로그램과 연동된 전하값 계산을 진행하고 있다. 양자 계산의 레벨과 베이시스 세트 조건에 따른 전하값 리스트들의 결과가 공개된다면, 사용자들은 각자가 대상으로 하는 당쇄분자의 분자 모델을 만들 때 참조하여 실제 관측치에 가장 부합하는 파라미터를 선택할 수 있을 것이다.

6. 결론 및 향후 발전 방향

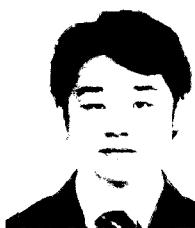
지금까지 Glyco-MGrid의 기본 설계와 제공하는 포탈 서비스, 그리고 관련된 연구 프로젝트에 관하여 살펴보았다. 당쇄분자 연구에 관심이 있는 사용자라면 누구나 포탈 서비스를 통하여 관련된 구조 정보를 얻을 수 있다. 분자 시뮬레이션 기법을 연구의 방법으로 이용하는 사용자라면 MGrid 연동을 통하여 직접 분자시뮬레이션 작업을 수행할 수 있고 그 결과를 사용자의 선택에 따라 데이터베이스에 공개하여 다른 사용자나 같은 연구 그룹에 속한 연구자에게 선택적으로 데이터를 공유할 수 있다. 분자 시뮬레이션 기법을 사용하지 않는 일반 글리코믹스 연구자도 Glyco-MGrid 데이터베이스에 등록된 당쇄분자 구조를 자신의 연구에 참조할 수 있다. 향후 Glyco-MGrid는 GUI 타입의 당쇄 분자 검색과 당쇄 분자 모델러 기능을 보강할 예정이다.

분자 시뮬레이션 분야의 전문가가 아니더라도 이러한 편의 기능을 사용하여 사용자들의 연구 성과를 높일 수 있는 분자 시뮬레이션 사이버 인프라로 발전할 것이다.

참고문헌

- [1] A. Varki, R. Cummings, J. Esko, H. Freeze, G. Harth, and J. Marth, "Essentials of Glycobiology", Cold Spring Harbor Laboratory Press, 1999.
- [2] Z. Shriver, S. Raguram, and R. Sasisekharam, "Glycomics: A pathway to a class of new and improved therapeutics", Nat. Rev. Drug Dis. 2004, 3, pp. 863-873.
- [3] S. Roseman, "Reflections on glycobiology", J. Biol. Chem. 2001, 276(45) pp. 41527-41542.
- [4] C.R. Bertozzi, and L.L. Kiessling, "Chemical glycobiology", Science 2001, 23(291) pp. 2357-2364.
- [5] The MGrid Project. <http://www.mgrid.or.kr/>
- [6] S. Yamada, and Y. Kawaoka, "Haemagglutinin mutations responsible for the binding of H5N1 influenza A viruses to human-type receptors", Nature 2006, 444, pp. 378-382.
- [7] M.E. Taylor and K. Drickamer, "Introduction to Glycobiology", Oxford University Press, 2006.

저자약력



최영진

1999년 2월 건국대학교, 미생물공학과 (학사)
2001년 2월 건국대학교, 미생물공학과 (석사)
2005년 8월 건국대학교, 미생물공학과 (박사)
2005년 9월 ~ 2007년 2월 건국대학교, 생명분자정보학센터,
Post Doc.
2007년 3월 ~ 2008년 2월 건국대학교, BK21 u-Science
기반 신기술융합 사업단 연구교수
2008년 3월 ~ 현재 호서대학교, 바이오칩연구센터 전임강사
관심분야 : Biomolecular Simulations, e-Science, Virtual Screening
이메일 : ojchoi@office.hoseo.ac.kr



정갑주

1984년 2월 서울대학교, 컴퓨터공학과 (학사)
1986년 2월 서울대학교, 컴퓨터공학과 인공지능 (석사)
1996년 2월 New York University, Computer Science (박사)
1995년 12월 1997년 8월 University of Florida, Post Doc.
1997년 8월 ~ 2001년 건국대학교, 컴퓨터 공학과 조교수
2001년 ~ 현재 건국대학교, 인터넷&멀티미디어 공학부 부교수
2006년 ~ 현재 BK21 u-Science 기반 신기술융합 사업단 단장
관심분야 : Grid Computing, e-Science, Data Integration,
및 분산컴퓨팅
이메일 : jeongk@konkuk.ac.kr



김동광

2005년 2월 건국대학교 컴퓨터 공학과 학사
2007년 2월 건국대학교 신기술융합과 석사
2007년 3월~2007년 8월 건국대학교 컴퓨터 공학과
박사과정
2007년 9월~현재 NHN 연구원
관심분야 : Grid Computing, System Architecture,
분산컴퓨팅
이메일 : walhalla@gcslab.konkuk.ac.kr



임상범

1995년 12월 Eastern Michigan University, Computer Science(학사)
1998년 12월 Syracuse University, Computer science (석사)
2003년 8월 Florida State University, Computer Science 박사
2003년 8월~2004년 6월 Indiana University, Researcher.
2004년 7월~2005년 1월 삼성 SDS 책임연구원
2005년 2월~2007년 2월 KISTI e-Science 사업단
기술연구팀장
2007년 3월~현재 건국대학교 신기술융합학과 조교수
관심분야 : Grid Computing, e-Science, 병렬 및 분산 컴퓨팅
이메일 : sblim@konkuk.ac.kr



이종연

2003년 2월 건국대학교 컴퓨터 공학과 학사
2005년 2월 건국대학교 컴퓨터 공학과 석사
2005년 3월~현재 건국대학교 컴퓨터 공학과 박사과정
관심분야 : Grid Computing, System Architecture, 분산컴퓨팅
이메일 : lejohy@gcslab.konkuk.ac.kr



정선오

1985년 2월 서울대학교, 화학과 (학사)
1987년 2월 서울대학교, 화학과 (석사)
1993년 8월 Michigan State University, Biochemistry (박사)
1993년 9월~1995년 2월 Michigan State University, Post Doc.
1995년 3월~2000년 3월 건국대학교, 미생물공학과 조교수
2000년 4월~2005년 2월 건국대학교, 미생물공학과 부교수
2005년 3월~2006년 2월 건국대학교, 미생물공학과 교수
2006년 3월~현재 건국대학교, 생명공학과 교수
관심분야 : Bioinformatics, e-Science, Molecular modeling
이메일 : shjung@konkuk.ac.kr



이 대 영

2006년 ~현재 국민대학교 전산과학 박사 과정
2005년 국민대학교 전산과학(석사)
2004년 국민대학교 컴퓨터학부(학사)
관심분야 : 그리드 시스템, 시스템 아키텍쳐, 디자인 패턴,
 공개소프트웨어
이메일 : dyheo@cs.kookmin.ac.kr



변 육 완

1979년 2월 한국항공대학교 통신정보공학과(학사)
1985년 2월 인하대학교 전자공학과(석사)
1993년 8월 경희대학교 전자공학과(박사)
1978년 9월 ~1999년 10월 KIST/SERI, ETRI(실장/책임연구원)
1999년 11월 ~현재 한국과학기술정보연구원(KISTI)
 초고속연구망부장, 슈퍼컴퓨팅인프라개발실장,
 e-Science사업단장
1997년 4월 ~1998년 4월 미국 UIUC/NCSA 초빙연구원
현재 ~한국정보처리학회 이사, 한국 e-Science포럼 부의장,
 UST 겸임교수
관심분야 : e-Science, 고성능연구망, 그리드컴퓨팅,
 첨단협업연구
이메일 : ohbyeon@kisti.re.kr



황 선 태

1985년 서울대학교 컴퓨터공학과(학사)
1987년 서울대학교 컴퓨터공학과(석사)
1996년 Manchester University (PhD)
1997년 ~현재 국민대학교 컴퓨터학부 부교수
관심분야 : e-Science, 그리드시스템, PSE, 공개소프트웨어
이메일 : sthwang@kookmin.ac.kr