



Суперкомпьютер
СКИФ Cyberia

Суперкомпьютер СКИФ Cyberia МВЦ Томского государственного университета

используется в разработке новых методов проектирования лекарств

Исследовательские организации:

- НИИ Фармакологии г. Томск,
- Алтайский государственный медицинский университет,
- Национальный исследовательский Томский политехнический университет

Тема:

Разработка новых методов проектирования биологически активных веществ, квантово-химические расчеты термодинамических параметров в растворах.

Термодинамика взаимодействия молекул химического вещества с биологическим объектом определяет результат комплексного воздействия препарата на организм. Причем восприимчивость органических клеток к действию препарата напрямую зависит от его биологической активности. Расчет термодинамики химических веществ позволяет теоретически описать потенциально возможный результат их взаимодействия с молекулами белка. Благодаря этому можно определить дозировку препарата, оценить наличие и величину его побочных действий.

Однако существующие ныне теоретические методы и программное обеспечение позволяют рассчитать термодинамические показатели лишь для газовой фазы биохимического процесса. Широко применяемые модели молекулярного докинга не учитывают среды и термодинамику взаимодействия веществ. Этот фактор не позволяет с достаточной точностью рассчитать протекание процессов в водной среде, где дополнительное влияние на итоговый результат влияет структура растворителя. Для решения этой проблемы объединенной рабочей группой был разработан метод расчета, учитывающий специфику термодинамических параметров взаимодействия растворителя с частицами в растворе.

Для моделирования процессов термодинамики взаимодействия химических веществ белковыми молекулами необходимо применение квантово-химических методов расчетов, предъявляющих очень высокие требования к вычислительным ресурсам. Так, определение необходимого набора термодинамических характеристик требует оптимизации и расчета термодинамики для 100-200 квантово-химических систем. При использовании современного персонального компьютера на базе восьмиядерного процессора расчет только одной из молекулярных систем занимает порядка недели, а для решения всей задачи потребовалось бы более пяти лет. Поэтому для применения наиболее развитых методик расчетов, доказавших свою эффективность в ходе многочисленных экспериментов, потребовался суперкомпьютер, обладающий большим количеством вычислительных узлов и более чем 50Гб оперативной памяти.

Учитывая высокие требования к точности расчетов и размерность этих задач, для разработки новых более точных методов проектирования биологически активных веществ рабочей группой было принято решение использовать суперкомпьютер «СКИФ Cyberia».

Для расчетов была использована откомпилированная с использованием библиотеки MPICH и Infiniband Linux-версия программного комплекса PC GAMESS (Firefly), применяемого на кластере «СКИФ МГУ». Данный комплекс был разработан группой под руководством профессора Грановского А.А., в лаборатории химической кибернетики МГУ.

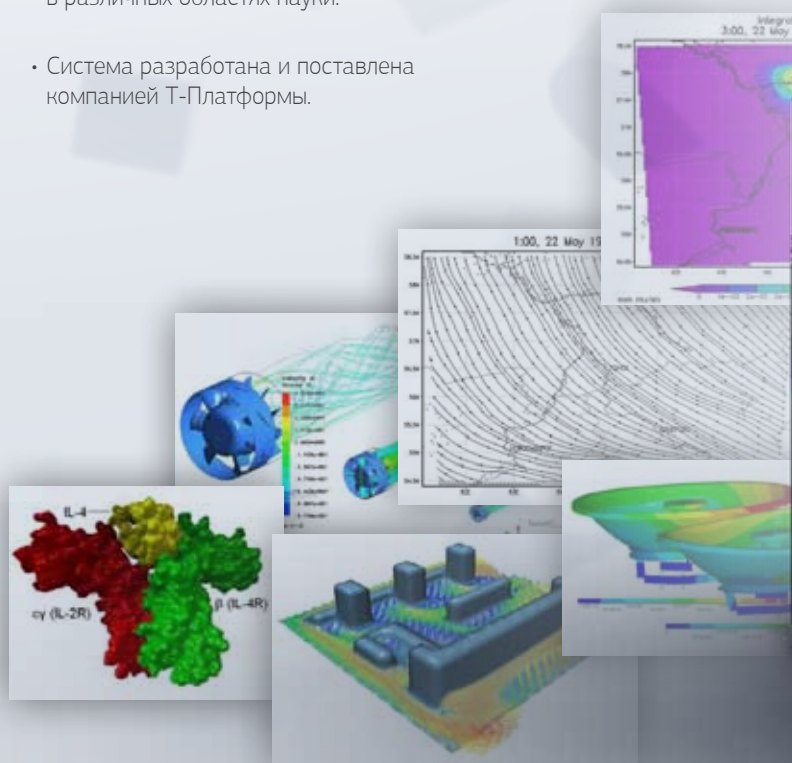
Использование суперкомпьютера «СКИФ Cyberia» и средств разработанного специалистами Томского государственного университета (ТГУ) программного обеспечения сделало возможным:

- производить расчеты для больших систем, содержащих взаимодействующие молекулы и молекулы среды взаимодействия
- достичь точности расчетов, требуемой для адекватного описания термодинамики взаимодействия растворителя с частицами в растворе
- создать единый автоматизированный комплекс квантово-химического расчета и построения термодинамических спектров взаимодействия молекул с белковыми мишенями

На практике разработанные методы позволяют проектировать более активные и безопасные в использовании биологически активные вещества, обеспечив снижение материальных и временных затрат при разработке новых лекарственных веществ.



- Суперкомпьютер «СКИФ Cyberia» состоит из 640 узлов на базе 1 280 шестиядерных и двухъядерных процессоров Intel® Xeon® серий 5150 и 5670.
- Пиковая производительность вычислительного комплекса Томского государственного университета составляет 62 Тфлопс, что позволяет проводить ресурсоемкие исследования в различных областях науки.
- Система разработана и поставлена компанией Т-Платформы.



Дополнительная информация:

Андрей Митрофанов

PR-менеджер компании «Т-Платформы»

+7 495 956-54-90

+7 926 697-22-22

Andrey.Mitrofanov@t-platforms.ru

<http://www.t-platforms.ru/>



«Т-Платформы»

Москва, Россия, Ленинский проспект, д. 113 / 1, офис В-705
Тел.: +7 (495) 956 54 90
Факс: +7 (495) 956 54 15

tPlatforms GmbH

Woehlerstrasse 42, D-30163, Hannover, Germany
Tel.: +49 (511) 203 885 40
Fax: +49 (511) 203 885 41

Т-Платформы, логотип «Т-Платформы», T-Blade, Clustrx — торговые марки или зарегистрированные торговые марки ОАО «Т-Платформы». Другие бренды и торговые марки являются собственностью соответствующих владельцев.



© 2012

www.t-platforms.com