

## 俄美超级计算机合作新动向

日期: 2013年04月02日      科技部

超级计算机的飞速发展与广泛应用,为俄罗斯生物制药领域带来了许多重大的发现与成果。俄罗斯的I-Scalare生物制药实验室与美国Intel公司通过跨行业合作,在Intel公司提供的带有针对医学研究软件系统的超级计算机上,由I-Scalare实验室开展生物医学、药理学等方面的科学研究。

通过近三年的合作,双方共同完成了与生物病毒、细胞膜、生物蛋白与细胞膜之间交互作用等多项仿真应用计算任务。美国Intel针对医学上的分子动态、生物化学等特点而设计的超级计算机软件系统,使俄罗斯学者取得了多项新成果。俄罗斯科学院有机生物化学研究所借助I-Scalare实验室平台,研究利用天然抗生素合成新型抗菌化合物,并获得了细胞膜内抗生素靶向性分子微秒级活动轨迹。通过对分子活动轨迹的分析,未来可研发出新型抗生素。除此之外,俄罗斯学者还对黄病毒(Flavivirus)的蛋白质外壳结构及分子动态进行仿真研究,并建立了病毒粒子膜及蛋白质外壳片段分子模型。这些研究成果使学者们获得了病毒蛋白结构数据,并据此分析其动态,并进一步研究该病毒蛋白和阻止黄病毒与人体细胞结合的分子之间关系。

此前进行这些研究是不可能的,当前,借助超级计算机可寻找潜在的蜚传脑炎病毒结合抑制剂等。在超级计算机的帮助下,使人类在未来研发出可治愈以前无法治愈的某些疾病的药物成为可能。