



作者: 成舸 于东阳 唐又旺 来源: 中国科学报 发布时间: 2015/8/20 10:05:37

选择字号: 小 中 大

### 超高通量药物分子虚拟筛选平台问世 “天河二号”一天筛完地球上所有药用化合物

本报讯(记者成舸 通讯员于东阳、唐又旺)日前,国防科技大学计算机学院联合中科院上海药物研究所、广州超算中心,成功研发出一种超高通量的药物分子虚拟筛选平台,可以利用“天河二号”超级计算机,在一天之内完成对4200多万个化合物的计算评价,相当于把包括现有药物、天然产物和人工合成有机化合物在内的地球上所有可用于药物研发的化合物都计算筛选一遍。这为人类应对暴发性恶性传染病的应急药物快速研发提供了强大的计算模拟保障。

大规模暴发性急性传染病是人类大敌。由于常规药物研发平均须耗时十年以上,导致一些新出现病种,如SARS、MERS、埃博拉等,在暴发早期无药可用。如果能针对药物靶标进行超大规模的计算机虚拟药物筛选,不仅有可能从现有药物中迅速找出用于治疗新型急性传染病的药物,还能为新一代药物研究提供依据。

迄今为止人类已知的化合物约有1.02亿个,其中适合于药物虚拟筛选的有机化合物有3500多万。考虑到不断涌现的新化合物,国防科技大学和中科院上海药物研究所在任务设计时多加了20%的冗余,希望新开发的药物虚拟筛选平台每天至少能完成4200万个化合物的计算评价。要完成如此巨大的计算模拟工作,只有依靠“天河二号”超级计算机和新一代的超高通量药物虚拟筛选平台。

目前地球上总共有3500万药物化合物分子,单个对接任务的I/O量为20M,总任务包括3500万个文件,总量达到700TB,这就对超级计算机的I/O、通信、计算等能力提出了挑战。针对“天河二号”的大规模异构体系结构,充分利用和发挥CPU与MIC的超强计算能力和高速互联技术,成为加快我国药物发现与设计的关键所在。

国防科技大学计算机学院研究员杨灿群、卢宇彤,副研究员彭绍亮,中科院上海药物研究所所长蒋华良,研究员朱维良等经一年多联合攻关,成功研发出一种面向大规模异构超级计算机的虚拟药物筛选软件平台——mD3DOCKxb。该平台包括一个全新的高效通信引擎,并采用多进程结合多线程的CPU/MIC大规模协同并行加速技术,对核心遗传算法进行深度加速,全面提高了对生物医药大数据的计算处理速度。

截至记者发稿,研究人员已在“天河二号”上实现了19.2万个CPU核和136.8万个MIC核的协同并行,整体并行效率达84.9%。测试结果显示,该平台可在一天内完成至少4200万化合物对埃博拉病毒靶标蛋白的虚拟筛选,表明我国已经具备了应对突发性恶性传染病的超高通量药物虚拟筛选的能力。

《中国科学报》(2015-08-20 第1版 要闻)

打印 发E-mail给:

以下评论只代表网友个人观点,不代表科学网观点。

2015/10/23 16:33:35 chenqibinscu

该平台可在一天内完成至少4200万化合物对埃博拉病毒靶标蛋白的虚拟筛选,表明我国已经具备了应对突发性恶性传染病的超高通量药物虚拟筛选的能力。。。。。。筛选结果呢?????如此大量的化合物筛选,不会连一个化合物都没被筛为潜药吧,不过话说回来,不管怎么样,该成果确实有一定的意义,只是模拟筛选软件的可靠性有待验证

2015/8/20 18:41:12 Hrrrli

还是要请制出乙肝药是实话,有进步是好事,作为乙肝患者盼良音。

2015/8/20 10:31:53 qlqlqlql

在一天之内完成对4200多万个化合物的计算评价。这些计算有什么用。

姑苏人才计划 苏州 创新团队最高奖励5千万

江南大学 2018年海内外优秀人才招聘启事

- | 相关新闻                     | 相关论文 |
|--------------------------|------|
| 1 首都农业国际合作知识成果服务平台亮点纷呈   |      |
| 2 瑞金医院与张江知识产权平台签约        |      |
| 3 云平台将为山西经济转型增添活力        |      |
| 4 山西首家涉农电子商务平台上线         |      |
| 5 京津冀科协科技成果转化平台项目公布      |      |
| 6 中科院苏州纳米所构建多功能纳米诊疗一体化平台 |      |
| 7 美将造新超级计算机 速度超天河二号30倍   |      |
| 8 中国首艘机动登陆平台舰服役          |      |

图片新闻

>>更多

- | 一周新闻排行                   | 一周新闻评论排行 |
|--------------------------|----------|
| 1 贺建奎最新回应: 坚信伦理将站在我们一边   |          |
| 2 中科院学部关于免疫艾滋病基因编辑婴儿的声明  |          |
| 3 中国科学院青年科学家奖获奖候选人公示     |          |
| 4 2018北京市“杰青”出炉 资助经费三千万  |          |
| 5 天河工程被指荒诞后, 相关单位三缄其口    |          |
| 6 清华博士后万蕊雪获2018年度青年科学家奖  |          |
| 7 违规录取两研究生, 武汉工程大学一院长被撤职 |          |
| 8 南科大回应基因编辑婴儿: 校外开展, 不知情 |          |
| 9 世界首例基因编辑婴儿诞生 科学界强烈谴责   |          |
| 10 教育部任免清华大学等直属高校部分领导    |          |
- 更多>>

- 编辑部推荐博文
- 访谈进行中: 《研究生职业生涯规划》(不限时)
  - 40年不睡觉怪人背后的现象
  - 大学教师: 时间都去哪儿了
  - 不是砼话的话砼
  - 登极取义10: 科技创新与科学普及
  - 爱犯错的智能体(十八): 情感与回忆错觉
- 更多>>

论坛推荐

有价值的信息时什么.  
还是需要人.

目前已有3条评论

[查看所有评论](#)

需要登录后才能发表评论, 请点击 [\[登录\]](#)

- AP版数理物理学百科 3324页
- 物理学定律的特性 feynman
- 波恩的光学原理
- 弦论的发展史
- 时间与物理学
- 矩阵分析 霍恩 (Roger A. Horn) 著

[更多>>](#)

[关于我们](#) | [网站声明](#) | [服务条款](#) | [联系方式](#) | 中国科学报社 京ICP备07017567号-12 京公网安备110402500057号

Copyright © 2007-2018 中国科学报社 All Rights Reserved

地址: 北京市海淀区中关村南一条乙三号

电话: 010-62580783