



**ПОЛИТЕХ**  
Санкт-Петербургский  
политехнический университет  
Петра Великого

## ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ И МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЛЯ РАЗРАБОТКИ ПЕРСПЕКТИВНЫХ ЛЕКАРСТВ И МАТЕРИАЛОВ

*Вычислительное моделирование является приоритетным инструментом решения научных и инженерных задач физики, техники, биологии, порождающим новые принципы ведения исследований и прикладных разработок.*

### Высокопроизводительные вычисления

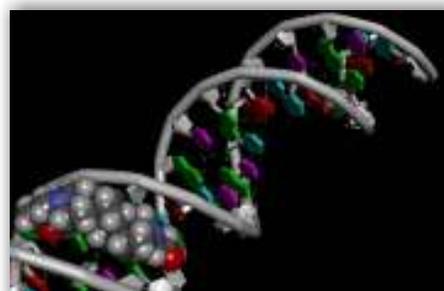
В СПбПУ ведутся исследования в области атомистически точного моделирования веществ, направленного на поиск новых идей и способов для достижения опережающего уровня работ в области создания новых биологически активных веществ и функционально отличающихся материалов различного назначения, например:

- Применение существующих и разработка новых методов моделирования нано- и биосистем;
- Прогнозирование биологической активности низкомолекулярных веществ, нано-кластеров углерода, взаимодействующих друг с другом и белками, нуклеиновыми кислотами, полисахаридами, мембранами и гетерогенными ансамблями биомолекул;
- Предсказательные оценки биологических рисков, связанных с использованием нано-частиц различной природы;
- Нанобионика и атомно-молекулярный дизайн нанобиомиметических систем и материалов;
- Молекулярный инжиниринг новой элементной базы для разделения и очистки веществ, оптоэлектронных устройств и нанотехнологий;
- Новые активные начала и платформы для избирательной доставки диагностических и лекарственных средств.

### Моделирования лекарственных средств

Мощные ПК, а тем более кластеры позволяют проводить расчеты кандидатов на роль лекарственных веществ, взаимодействующих с отдельными белками или другими функционально важными биомолекулами. Получаемые атомистически точные данные очень важны, но длительность вычислительного эксперимента часто сопоставима с временем реального испытания. Появление суперкомпьютеров существенно изменяет возможности поиска и конструирования лекарств:

1. появляется возможность опережающего моделирования целых «библиотек», т.е. сотен и тысяч веществ, способных взаимодействовать выбранной биомишенью, что критически снижает объемы избыточного химического синтеза и биологического скрининга веществ-кандидатов на роль лекарств;
2. появляется возможность опережающего моделирования целых «библиотек», т.е. сотен и тысяч веществ, способных взаимодействовать выбранной биомишенью, что критически снижает объемы избыточного химического синтеза и биологического скрининга веществ-кандидатов на роль лекарств; для отобранных кандидатов оказывается возможным предсказание взаимодействия, с сотнями различных мишеней. Появляется возможность картирования ожидаемых активностей кандидата, что качественно изменяет процедуры выявления перспективных сфер применения препаратов в лечении различных заболеваний, априорных оценок возможных биологических рисков;
3. возникают ранее отсутствовавшие возможности построения атомистически точных моделей взаимодействия препаратов с различными разрабатываемыми носителями и теми сложными ансамблями биомолекул, которые определяют процессы всасывания из места введения, транспорта в различные ткани химической биотрансформации выведения разрабатываемых веществ.



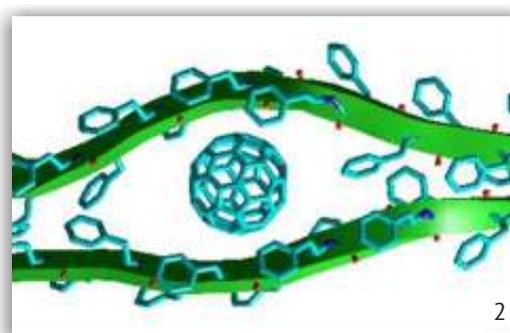
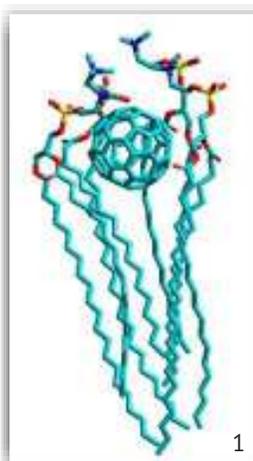
*Отечественный противоопухолевый препарат, взаимодействующий со своей мишенью – молекулой ДНК*



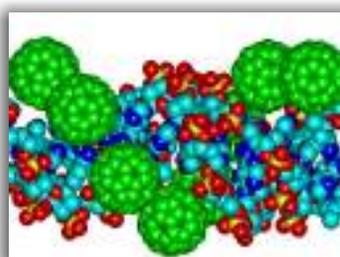
### Новые материалы

Современные методы компьютерного моделирования позволяют предсказывать многие свойства разрабатываемых материалов. Известны случаи, когда применение вычислительных испытаний снижает стоимость разработок в тысячи раз.

Внеэкспериментальный дизайн новых продуктов, обладающих заданными свойствами, и технологий их получения становится стандартом для отрасли материалов. Достаточно мощные кластеры способны «просматривать» и за недели «испытывать» коммерческие каталоги, включающие сотни тысяч веществ. К сожалению, при поиске композитов-материалов, состоящих из разных веществ, число комбинаций, требующих перебора, оказывается невообразимым



1. Молекула фуллерена C<sub>60</sub>, взаимодействующий с группой фосфолипидов мембран, как прообразовых фильтрующих материалов  
2. Гибридные белковые материалы, нагруженные C<sub>60</sub>



Производительность вычислений, способы и идеи объединения био/нано-подходов и уровень разработки многоуровневых и разномасштабных моделей от молекул до эксплуатационных макроскопических свойств снова становится необходимым фактором проводимых работ.

Гибридные материалы, сочетающие свойства нанокластеров углерода и биомолекул. Показан нуклеиновая кислота, нагруженная фуллеренами.

### Заключение

- Кто не считает, тот не считается (No compute, no compete) – это сложившийся лозунг современных исследований и разработок в науке и индустрии.
- Суперкомпьютерный кластер Политехник Торнадо РСК СПбПУ занимает 107 место мирового рейтинга TOP500.
- Возможность сочетания вычислительных мощностей, специалистов ЦПИ СПбПУ и Ваших потребностей может стать фактором рождения, отсутствующего в стране инженерного сектора инновационных услуг в области экспертизы, планирования и реализации проектов в области разработки отечественных лекарств, новых материалов медицинского или технического применения, поиска сфер и технологий их применения.

### Контакты:

ФГАОУ ВО СПбПУ,  
 Центр перспективных исследований  
 Козырев Сергей Васильевич  
 e-mail: cas@spbcas.ru  
 тел.: +7 (812) 534-95-13