



МОСКОВСКИЙ ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ (ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ)



Лаборатория суперкомпьютерных технологий

i-SCALARE

*Новые суперкомпьютерные технологии
для биомедицины, фармакологии и
малоразмерных структур*

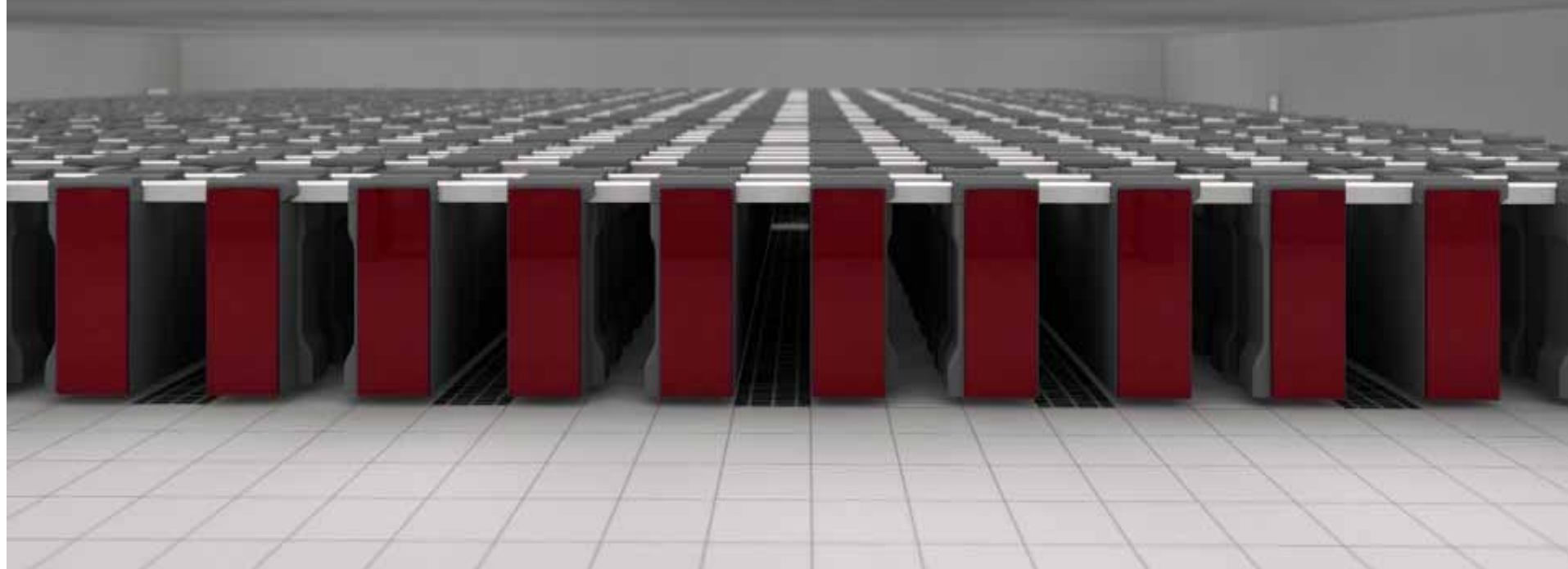


В 2010 году Московский физико-технический институт стал одним из победителей конкурса, проведенного в рамках постановления Правительства России N 220 "О мерах по привлечению ведущих ученых в российские образовательные учреждения высшего профессионального образования".

С 1 декабря 2010 года на Факультете радиотехники и кибернетики МФТИ создано новое структурное подразделение – Лаборатория супер-компьютерных технологий для биомедицины, фармакологии и малоразмерных структур (Intel Super-computer applications Laboratory for advanced research – i-SCALARE).

*Научным руководителем и заведующим лабораторией назначен автор проекта, Ведущий ученый, д.ф.-м.н., профессор **Пентковский Владимир Мстиславович** – выпускник ФРТК МФТИ 1970 года.*

Основная цель лаборатории – разработка новой архитектуры специализированного суперкомпьютера для прикладных задач биоинформатики и фармацевтики на базе структурного элемента такой системы – суперкомпьютерного кластера Intel в МФТИ.





1. Разработка и тестирование моделей супер вычислительных архитектур и систем на основе платформы Graphite (MIT)

Первоочередной задачей в рамках проекта является разработка общей модели вычислительного комплекса. Оптимальные конфигурации вычислителей для решения разного класса задач могут сильно различаться.

Таким образом, решение задачи построения оптимальной конфигурации вычислительного комплекса для решения определенного класса прикладных задач является актуальной для практического использования вновь создаваемых вычислительных систем.





2. Запуск и отладка 30 ТФ. Системы.

В лаборатории создан экспериментальный вычислитель мощностью 30ТФЛОПс на новейших процессорах с архитектурой Sandy Bridge на самых современных процессорах Intel Xeon 5680.

Уникальной особенностью установки является доступность 48 GB памяти на узел (4ГБ на ядро) и использование водяного охлаждения, что позволяет решать исключительно широкий класс задач, требующий большого объема памяти на ядро, а так же позволяет существенно повысить энергетическую эффективность всей системы (PUE =1,2 вместо 1.8-2.0 при воздушном охлаждении), сокращая количество необходимой для функционирования кластера электроэнергии на 60%.

Отметим, что это будет одна из первых вычислительных систем на этих процессорах в Европе.

3. Разработка пакетов прикладных программ для биомедицины, фармакологии и малоразмерных структур.



В качестве «целевых» были выбраны несколько прикладных вычислительных задач, связанных с моделированием вирусов, клеточных мембран и взаимодействия белков и внешних полей с клеточными мембранами.

Все эти задачи, с одной стороны, имеют большую практическую ценность, а с другой стороны, не могут быть решены на имеющихся вычислительных ресурсах и требуют новых подходов к архитектуре кластеров. До конца года планируется провести «сборку» этих задач, написать необходимые программы и провести их оптимизацию с использованием новейших инструментов оптимизации программ.

После этого полученные программы будут использованы созданным симулятором для проведения оптимизации архитектуры вычислителя.

Направление: Моделирование структуры оболочки вируса

Моделирование структуры оболочки вируса (мембрана + белок оболочки E) для целого вириона (диаметр порядка 50 нм, 180 субъединиц белка E) на атомном уровне. К настоящему времени имеются приблизительные карты криоэлектронной микроскопии (разрешение порядка 0,4 нм) для оболочки вириона в активном и неактивном состоянии.

Анализ процесса pH-зависимой активации вируса. Моделирование динамики перехода от неактивного к активному состоянию для целого вириона.

Строение вируса

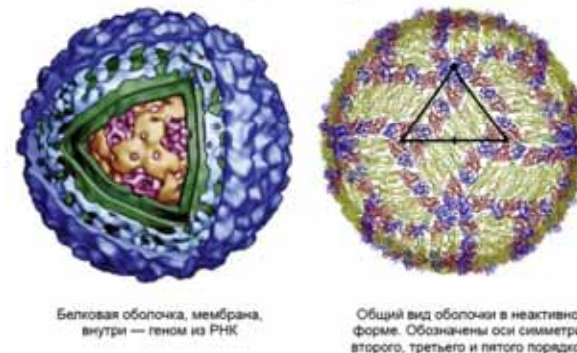
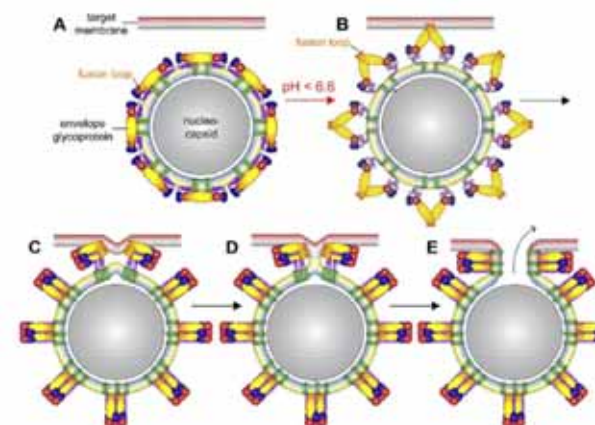


Схема слияния



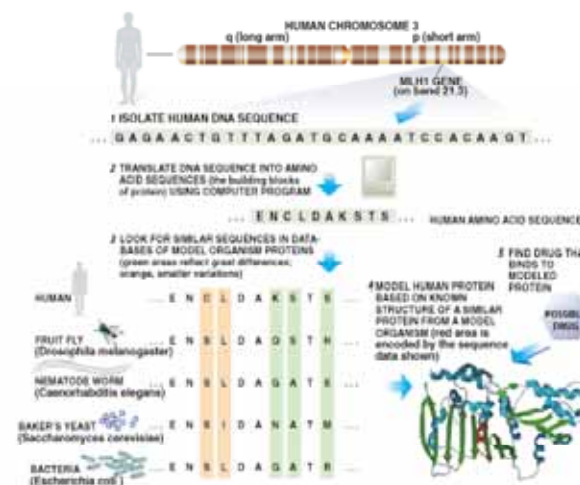
Направление: NMDA рецепторы как биомиметры для конструирования лекарств

Глутаминовая кислота играет важнейшую роль в процессах нервной деятельности (память, обучение и т.д.). Передача нервного импульса в ЦНС под действием “возбуждающих” аминокислот – глутаминовой кислоты.

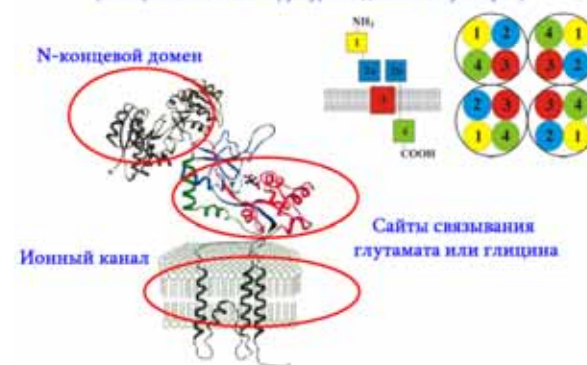
В рамках проекта планируется:

- построение полной модели NMDA-рецептора, моделирование молекулярной динамики для такой модели, включая моделирование функционирования рецептора (открытие-закрытие ионного канала под действием органических лигандов),
- виртуальный скрининг библиотек органических веществ с помощью моделей NMDA-рецептора
- дизайн новых органических соединений, управляющих работой NMDA-рецептора – потенциальных нейропротекторных препаратов.

От гена – к лекарству



Архитектура NMDA рецепторов (экспериментальные структурные данные отсутствуют)

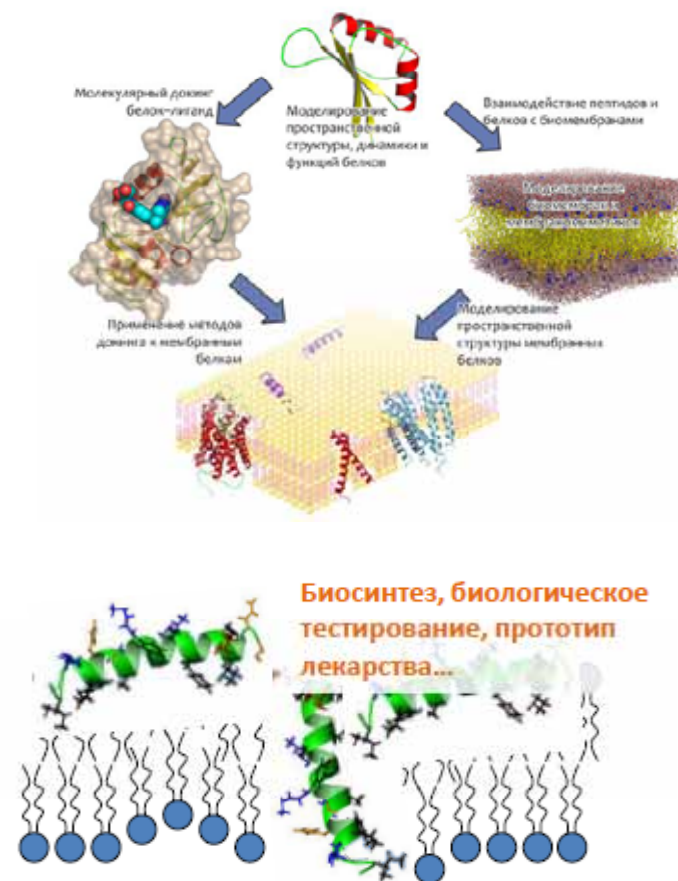


Направление: Рациональное компьютерное конструирование нового класса антибиотиков, действующих на мишени в мембранах грамположительных бактерий

Целью проекта является разработка и применение многоуровневого вычислительного подхода для изучения молекулярных аспектов взаимодействий антимикробных соединений с мембранами клеток.

1. Модели многокомпонентных мембран, имитирующих мембраны бактерий и эритроцитов человека
 - 288 липидов + 10000 H₂O / 80 нс @ GROMACS
 - Суперкомпьютер МВС-100К (36 × Intel Xeon)
 - ≈ 10 дней в режиме пакетной задачи
2. Изучение факторов, определяющих связывание пептида с мембраной
3. Компьютерный дизайн усовершенствованных аналогов антибиотиков
4. Биосинтез, биологическое тестирование, прототип лекарства.

Основные направления исследований:



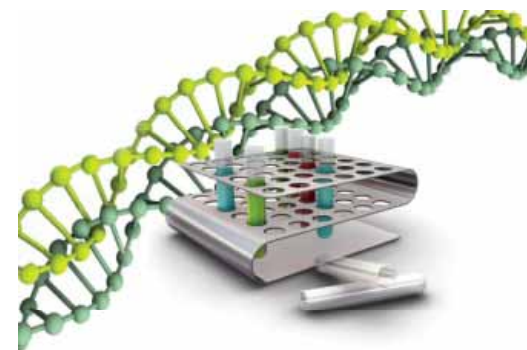
Направление: **Геномный проект МФТИ**

Целью проекта является создание уникального научного и бизнес-проекта по созданию инфраструктурной программной платформы и базы данных по генотипам человека.

Проект предусматривает накопление данных по ДНК человека, их обработку, анализ и предоставление возможностей пользователю воспользоваться биоинформационными сервисами.

В рамках проекта должна быть создана специализированная база данных и платформа для adaptive supercomputing высоко-производительных вычислений для анализа и сопоставления сотен тысяч геномов, в том числе по кастомизированным запросам пользователей.

В планах на 2012 год создание комплексной системы биомаркеров возраст-зависимых патологий и основы технологий систематизации массивов индивидуальной геномной и медицинской информации



Поддержка проекта



Направление: **Академический центр геномных технологий**

В 2012 году в рамках коммерциализации результатов инновационной деятельности лаборатории создано специализированное малое инновационное предприятие **ЗАО «Академический центр геномных технологий»** для применения результатов работы по поиску генетических маркеров развития многофакторных заболеваний и разработана база данных биомаркеров старения, в частности:

- разработка базы данных интерпретации генетической информации и вариаций генов в организме человека;
- создание российского геномного браузера с интуитивно понятным интерфейсом для работы с сырыми данными генотипирования (4 млрд. пар оснований и 25 тыс. генов);
- разработка бизнес-моделей и создания центров секвенирования и предоставления геномных услуг на базе научных центров.



академический
центр
геномных
технологий

Поддержка проекта





Суперкомпьютерный сегмент Интегрированного центра ИТ МФТИ



СуперЭВМ на процессорах nVidia

Моделирование геномов
и протеомов



СуперЭВМ на процессорах Intel.

Программа развития
совместно с Intel



СуперЭВМ на процессорах Эльбрус

Программа развития
совместно с МЦСТ

Применение суперкомпьютерных систем на основе GPU для:

- обработки биоинформационных сигналов;
- моделирования генома, протеома и эпигенома человека;
- обработки изображений зондовой микроскопии;
- визуализации результатов расчетов;

Совместное участие в выполнении конкретных работ по заказам биофармацевтических компаний;

Согласованное развитие суперкомпьютерных систем на базе процессоров nVidia и ГРИД-технологий.