



## 硅康医药利用谷歌云完成大规模虚拟筛选

美国马萨诸塞州波士顿，2017 年 5 月 22 日：近日，硅康医药 ( Silicon Therapeutics ) 的研究人员在为高难度的肿瘤免疫蛋白质靶点寻找新的活性分子的过程中，利用谷歌云完成了大规模虚拟筛选，并行使用 16000 个计算核心。此次筛选所利用的计算资源为 3 百万 CPU 小时，完成用时仅为一周，而如果采用传统方法只通过几百节点进行内部计算，则需要花费数月甚至几年时间。要正确解释蛋白质靶点的高度柔性，需要利用大规模计算能力——但是，由于计算成本的巨幅增加，这一点往往在虚拟筛选协议中被忽视。然而，硅康医药研发的 INSITE 平台具有一项关键优势，即能够在筛选工作流程中解释蛋白质柔性。研究人员结合使用硅康医药研发的开源、专有内部软件，实施了任务分配和云资源管理。

“这次筛选充分展示了硅康医药 INSITE 平台的优势及其高性能计算能力。”硅康医药的首席科学官伍迪·谢尔曼博士 ( Dr. Woody Sherman ) 表示，“在虚拟筛选中，蛋白质柔性经常被忽略或者得不到足够重视，从而导致大量活跃成分因无法适应坚韧的受体结构而不能被发现。通过将蛋白质柔性显式包含在虚拟筛选工作流程之中，我们比传统方式获得了更高的命中率。虽然这需要更多的计算资源，但是只要它能帮助我们找到更好的困难靶点结合位点，所有的付出都是值得的。在本次筛选中，我们发现了多个活性成分，并且已经通过生物化学和活性检测技术对它们进行了验证。我们期待着在接下来的几个月内完成这些成分的报告。”

### 硅康医药介绍

硅康医药是第一家完全集成计算医药研发公司，专注于新药研发，通过当前被传统方法视为困难的靶点为疾病治疗提供新途径。我们的 INSITE 平台使用精准的全原子模拟，能够详尽地表现靶点的真正动态性质，基于此，我们能够发现、设计并优化此前被视作“无法合成的”靶点化合物。我们的科学、我们的团队、我们的使命聚集于利用我们先进的计算技术来加速药物研发过程，从而为病患提供更多可选择的创新药物。硅康医药总部位于美国马萨诸塞州波士顿，在中国上海设有办公室。