建構亞洲流行性疾病之高效能藥物篩選計算服務

High Throughput Virtual Screening Service against the Epidemic Diseases in Asia

Hsin-Yen Chen[1] His-Kai Wang[1] Eric Yen[1] Ying-Ta Wu[2] Simon C. Lin[3]

[1] Academia Sinica Grid Computing Center, Taiwan [2] Genomic Research Center, Academia Sinica, Taiwan [3] Institute of Physics, Academia Sinica, Taiwan

Abstract

In the modern biomedical drug discovery, molecular docking simulation is a common method for predicting potential interacting complexes of small molecules on protein binding sites. However, searching all optimal conformations of a compound could be a time-consuming process. GAP Virtual Screening Service (GVSS), large scale in-silico protein-ligand virtual screening service, provides a production system to speed-up the searching process. We demonstrated how this high throughput in-silico massive molecular docking service benefits from state-of-the-art Grid technology to the activities for Avian Flu drug refinement and Dengue Fever drug discovery on EUAsiaGrid infrastructure since March 2009. Furthermore, these activities also facilitates more biomedical e-Science applications in Asia, such as other diseases and compounds profiling.

Key Word Drug Discovery、Molecular simulation、Grid Computing、High throughput computing、e-Science

陳信言 男

職　　稱： 中研院 資訊科技創新研究中心 研究助理

職　　務： 中研院 網格計算團體 專案經理

研究領域： Grid Computing、Computational Physics、High Performance Computing

聯絡電話： 886-2-27898306

聯絡郵箱： hychen@twgrid.org

王璽凱 男

職　　稱： 中研院 資訊科技創新研究中心 研究助理

職　　務： 中研院 網格計算團體 專案工程師

研究領域： Grid Computing、High Performance Computing

聯絡電話： 886-2-27898309

聯絡郵箱： hsikai.wang@twgrid.org

吳盈達 男

職　　稱： 中研院 基因體研究中心 副研究技師

研究領域： High Throughput Screening、Cheminformatics

聯絡電話： 886-2-27871237

聯絡郵箱： ywu@twgrid.org

嚴漢偉 男

職　　稱： 中研院 資訊科技創新研究中心 副研究技師

研究領域： Cloud & Grid Computing、Digital Library、Geospatial Informatics

聯絡電話： 886-2-27898375

聯絡郵箱： Eric.Yen@twgrid.org

林誠謙 男

職　　稱： 中研院 物理研究所 副研究員

職　　務： 中研院 網格計算團體 計畫主持人

研究領域： Grid & Cloud Computing、Computational Sciences、Information Physics

聯絡電話： 886-2-27896793

聯絡郵箱： Simon.Lin@twgrid.org