

ОБЗОР ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ БИОИНЖЕНЕРНЫХ И ХИМИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Каленчак Е. В.

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники
г. Минск, Республика Беларусь

Чураков А. В. – к.м.н., доцент

В статье рассматриваются сферы применения, достоинства и недостатки наиболее популярных в иностранных исследованиях и разработках программных платформы для биоинженерных и химических исследований.

Для обучения и проведения высокоточных инновационных исследований и преемственности с производством в каждой научно-практической области созданы и применяются свои собственные среды моделирования. Они включают различные модули для возможности решения специфических задач. Некоторые программные платформы (ПП) обладают большей универсальностью, некоторые меньшей, но при работе с ними исследователь должен иметь ясное представление о алгоритмах выполняемых задач и физико-математических или химико-биологических законах используемых в моделировании. Однако круг специалистов, знакомых с созданными для медицинского и биоинженерного моделирования биологических систем ПП и их возможностями достаточно ограничен, и данный краткий обзор ставит перед собой цель рассмотреть наиболее популярные из них и выделить достоинства и недостатки.

Наиболее универсальной является COMSOL Multiphysics, которая используется для компьютерного моделирования физических задач. Он содержит различные решатели, которые дают возможность быстро справиться даже с самыми сложными задачами, а простая структура приложения обеспечивает удобство и гибкость использования. Реализация любой задачи базируется на численном решении уравнений в частных производных методом конечных элементов. Спектр задач, которые поддаются моделированию в программе чрезвычайно широк. В данной платформе уже создана большая база моделей для медицинских исследований и технологий. Несмотря на значительное количество модулей, возможность специфического моделирования, интуитивно удобную реализацию помощи пользователю и галерею приложений на сайте значительной преградой становится наличие огромного количества параметров и действий, доступных пользователю. Это усложняет адаптацию к платформе.

Отдавая должное всем сильным сторонам и функциональности COMSOL Multiphysics «стоит обратить внимание на то, что в ней все подходы основываются на методах мультифизики, но они таким образом игнорируют свойства материалов на субмикронном уровне, полагаются и полагаются на параметры материалов вместо этого. Вычисления на наноуровне способствовали бы большей информативности о создаваемых микроскопических моделях» [1].

Платформа BIOVIA создана Dassault Systemes предназначена для моделирования химико-фармакологических исследований. Она обеспечивает научную среду для совместной работы в биологических, химических и материаловедческих исследованиях. [1]. Как и все ПП благодаря ей появляется возможность создания продуктов с большими скоростью и эффективностью. Она состоит из нескольких крупных модулей, каждый из которых позволяет сосредоточиться на требуемом результате:

- Chemical Modeling and Simulation дает возможность поиска, извлечения, анализа и регистрации различных химических реакций, структур, модифицированных биологических препаратов и образований. Также возможно осуществить сбор и анализ таких параметров как результаты испытаний, подсчета и д.р.;

- Discovery Studio как комплексное приложение позволяет предсказывать результаты биологической активности и синтезировать белки и разрабатывать технологию получения тел в 3D;

- Materials Studio как среда моделирования делает возможным предугадывать, анализировать и объяснять взаимосвязи молекулярной и атомной структур материалов с их поведением и свойствами [2].

Детальное мембранное моделирование в ней невозможно из-за числа вовлеченных атомов, и нет мембранного строителя. Также невозможно моделировать наночастицы за пределами простых молекул на основе углерода и правильно параметризовать ферромагнитные наночастицы, имитировать магнитные или ультразвуковые поля, и отсутствует модуль «Вычислительной динамики жидких сред» [1].

Компания Schrödinger является ведущим поставщиком передовых молекулярных симуляторов и корпоративных программных решений и услуг для ускорения и повышения эффективности поиска лекарств для своих клиентов, в число которых входят все крупные фармацевтические и биотехнологические компании по всему миру, а также ведущие исследователи материаловедения. У них создано множество программ, позволяющих работать и моделировать

различные химические процессы и вещества, такие как биологические исследования, создание лекарств, работа с «малыми молекулами» и д.р.[3]. Рассмотрим некоторые из них:

- Canvas – мощная вычислительная среда для хемоинформатики. Все большие объемы данных в химическом пространстве занимают открытые и создаваемые новые вещества. Методы хемоинформатики могут отсеивать миллионы соединений за считанные секунды; кластеризация дает возможность анализировать и улучшать содержимое реальных и виртуальных составных библиотек; анализ основных компонентов и самоорганизующиеся карты сводят сложную, многомерную информацию к легко визуализируемым взаимосвязям в небольшом количестве измерений; и контролируемые методы обучения предлагают количественные модели, которые дают представление о деятельности новых соединений.

- Maestro является универсальной средой молекулярного моделирования и интерфейсом для всего программного обеспечения Schrödinger. Она также помогает исследователям организовывать и анализировать данные.

- LiveDesign используется для совместной разработки лекарств. Данная платформа позволяет работать в режиме реального времени и собирать, анализировать, обмениваться и задавать приоритеты для возникших идей.

Schrödinger дает возможность моделировать химические системы на основе квантовой механики, проверять и оптимизировать их. Однако не существует способа моделировать наноструктур и произвести расчеты траектории и кинетики молекул химических веществ и препаратов ввиду отсутствия модуля «Вычислительной динамики жидких сред» [1].

Программный пакет MedeA® Material Design является ведущей средой для атомистического моделирования материалов и позволяет проводить вычисления, оптимизацию и моделирование. Также единственная из всех представленных платформ позволяет работать с наноразмерами. Моделирование MedeA охватывает кристаллические и аморфные твердые вещества, жидкие фазы и смеси жидкостей, а также границы разделов сред жидкости и твердого вещества, двух твердых веществ. Расчеты охватывают широкий спектр физических величин и химических явлений, охватывающих порядки величин в масштабе длины и времени. MedeA® также является модульной и включает модули в основную структуру с компонентами, которые могут быть распределены по сети компьютеров, включая крупномасштабные суперкомпьютеры, или установлены на единственной машине [1].

Стандартная среда MedeA включает в себя следующие модули:

- Builders (твердые тела, поверхности, полимеры, молекулы, слои и т.д.);
- Databases (открытая база данных кристаллографии);
- управление заданиями;
- анализ (геометрии, симметрии, пустот, траектории и т.д.);
- и д.р.

MedeA обладает большим количеством инструментов, призванных усовершенствовать прогнозирование и автоматизацию расчетов, а также использованием различных методов корреляции.

Из недостатков стоит отметить сложность для анализа свойств молекул большого размера и отсутствия модуля «Вычислительной динамики жидких сред».

Использование современных и специфичных сред моделирования позволяет расширить область исследований, оптимизировать и анализировать полученные значения, предсказывать наиболее оптимальные решения поставленных задач. Также отпала необходимость при получении ошибочных результатов в процессе работы начинать все с начала и повторно затрачивать временные, трудовые и денежные ресурсы. Резюмируя все данные про рассмотренным выше ПП стоит отметить, что для работы с биоинженерными технологиями оптимальны платформы COMSOL Multiphysics и MedeA® от Materials Design, но химико-фармакологические задачи полноценно можно решить в средах от Schrödinger, Dassault Systemes Biovia [1].

Список использованных источников:

1. Чураков, А.В. Современное программное обеспечение и методологические подходы для мультифизического моделирования медицинских и биоинженерных исследований / А.В. Чураков // Инновационные технологии в медицине. – 2018. – Т.6, №3. – С.250-258.
2. Dassault Systèmes [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://www.3ds.com/>. – Дата доступа: 23.03.2019.
3. Schrödinger [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://www.schrodinger.com/>. – Дата доступа: 214.03.2019.