**ВИСОКОПРОДУКТИВНІ ОБЧИСЛЕННЯ В БІОЛОГІЧНИХ ДОСЛІДЖЕННЯХ**

к.б.н. Савицький Олександр Вячеславович,

н.с. відділу білкової інженерії та біоінформатики ІМБГ НАН України

Просторова організація та конформаційні властивості молекул біополімерів лежать в основі практично всіх біологічних процесів. У зв’язку з цим, вирішення багатьох біологічних задач пов’язано саме з необхідністю вивчення тривимірної структури протеїнів і нуклеїнових кислот, а проблема їх просторової організації – є актуальною для молекулярної біології, біофізики, фармакології та медицини. З появою комп’ютерної техніки встановлено більш ніж сто тисяч тривимірних структур протеїнів та їх комплексів, які депоновано у базі даних Protein Data Bank (PDB, http://www.rcsb.org/). Однак координати молекул, отримані методом рентгеноструктурного аналізу, є статичними, а їх конформаційні властивості, за наявності фізіологічних умов розчинника, можуть суттєво відрізнятись. Одним із перспективних методів при експериментальних дослідженнях структури молекули в нативному стані є спектроскопія ЯМР (ядерного магнітного резонансу). У випадках, коли експериментальні дані просторової організації досліджуваного протеїну або його структурного комплексу з субстратами відсутні, ефективною альтернативою є методи комп’ютерної структурної біології. Дані методи ще називають комп’ютерним експериментом або експериментом *in silico*.

Розглянуто сучасні практичні підходи високопродуктивних обчислень у прикладних біологічних дослідженнях.