

# NARAVOSLOVJE

## Področje: 1.07 – Računsko intenzivne metode in aplikacije

### VRANA

VRANA (Vzporedni Računalnik za Akceleracijo Numeričnih Algoritmov)



- \* VRANA 1 (1998): 4 × 2 Intel Pentium II 400 MHz; Ring
- \* VRANA 2 (1999): 16 Intel Pentium II 450 MHz; Torus
- \* VRANA 3 (1999): 32 Intel Celeron 466 MHz; Torus
- \* VRANA 4 (2000): 32 Athlon 700 MHz; Hypercube
- \* VRANA 5 (2001): 16 × 2 AMD Athlon MP-1600+; Hierarchical Hypercube
- \* VRANA 6 (2002): 8 × 2 AMD Athlon MP-1900+; Hierarchical Hypercube
- \* VRANA 7 (2002): 2 MD-GRAPe II Computers; Gigabit Link
- \* VRANA 8 (2003): 64 × 2 AMD Athlon MP-2200; Hierarchical Hypercube
- \* VRANA 9 (2005): 64 × 2 AMD Opteron 242; Gigabit Switches
- VRANA 10 (2006): 37 × 2 AMD Dual-core Opteron 265; Gigabit Switches
- VRANA 11 (2007): 46 × 8 Intel XEON 1.9 GHz; Gigabit Switches
- VRANA 12 (2010): 77 × 8 Intel XEON 2.3 GHz; Gigabit Switches
- VRANA 13 (2011): 14 × 16 + 12 × 32 AMD 2.0 GHz; Gigabit Switches

Računsko intenzivne metode in aplikacije (RIMA) je področje, na katerem z uporabo superračunalnikov in računalniških gruč rešujemo najzahtevnejše računske probleme pri teoretskih in aplikativnih raziskavah v naravoslovnih in tehničnih znanostih. Ukvarjamo se z reševanjem vrste problemov, kot so npr. struktura in dinamika molekul, snov v gmoti, kemijske in biokemijske reakcije ter razvoj novih zdravil. Razvoj novih računskih metod je tesno povezan tako z razvojem novih algoritmov kot z razvojem najmodernejših računalnikov.

RIMA je izjemno propulzivno področje z rezultati v samem svetovnem znanstvenem vrhu. RIMA je žal finančno najbolj podhranjeno področje v naravoslovju v okviru ARRS. Financiranje tega področja ni v skladu z našo znanstveno izjemnostjo, ki jo med drugim predstavljajo A<sup>2</sup> objave - najpomembnejši dosežki na področju:

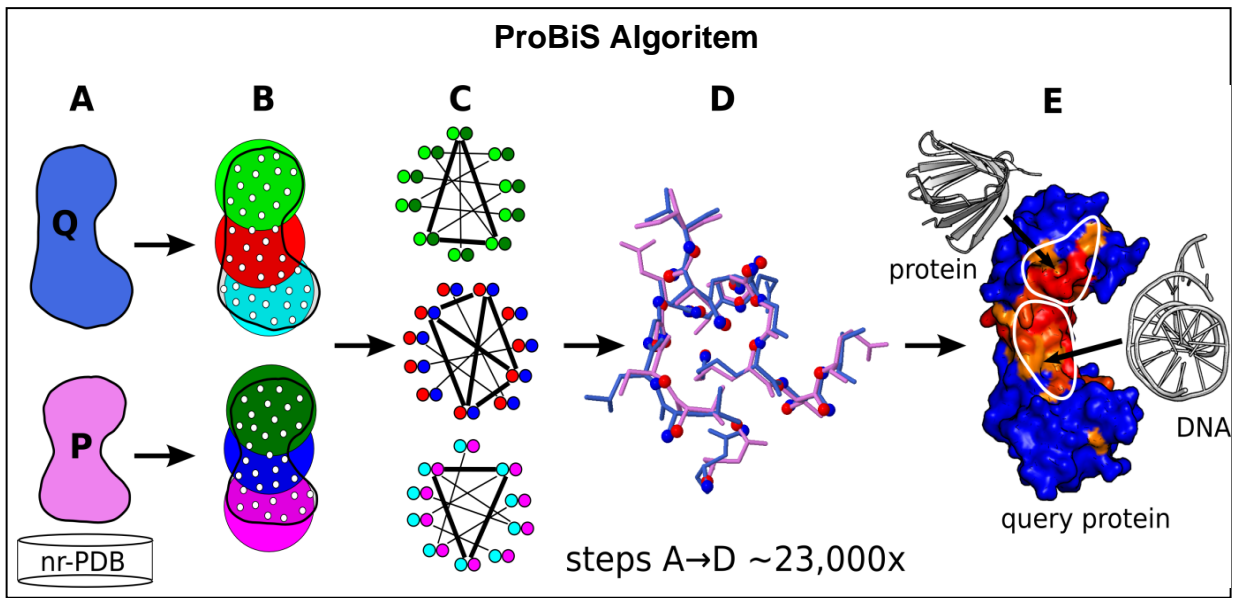
- Konc J, Janežič D, ProBiS algorithm for detection of structurally similar protein binding sites by local structural alignment, *Bioinformatics*, **2010**, 26, 1160-1168, IF= 4,877, SE: 2/37.
- Carl N, Konc J, Vehar B, Janežič D, Protein-protein binding site prediction by local structural alignment, *Journal of chemical information and modeling*, **2010**, 50, 1906-1913, IF= 3,822, SE: 2/93.
- Kutnar K, Marušič D, Janežič D, Fullerenes via their automorphism groups. *MATCH Commun. Math. Comput. Chem. (Krag.)*, **2010**, 63, 267-282, IF=3,291, SE: 1/92.
- Posebej izpostavljamo tudi visoko citiranost naših člankov.

Na sliki je vzporeden računalniški sistemi VRANA (<http://www.sicmm.org/vrana>) s superračunalniško zmogljivostjo, ki ga pod vodstvom prof.dr. D. Janežič gradijo na KI.

# NARAVOSLOVJE

## Področje: 1.07 – Računsko intenzivne metode in aplikacije

**Dosežek 1:** Nov algoritem za napovedovanje vezavnih mest na proteinih ProBiS  
Vir: *Bioinformatics*, **2010**, 26, 1160-1168 (IF= 4,877, mathematical & computational biology ; 2/37).



Poznavanje vezavnih mest na proteinih je predpogoj za razvoj novih inhibitorjev proteinskih interakcij. Avtorja (Janez Konc in Dušanka Janežič, Kemijski inštitut), ki sta kot prva pokazala, da so proteinska vezavna mesta strukturno ohranjena, sta razvila nov algoritem za napovedovanje vezavnih mest na proteinih ProBiS (Protein Binding Sites) objavljen v reviji *Bioinformatics*, na osnovi katerega sta razvila spletni strežnik ProBiS in ga objavila v *Nucleic Acids Research*, **2010**, 38, W436–W440, Web Server issue (IF=7.479), visoko citirani reviji na področju biokemije in molekularne biologije. S tem dosežkom sta se postavila ob bok najbolj upoštevanim sorodnim raziskovalnim skupinam s celega sveta.

ProBiS strežnik (<http://probis.cmm.ki.si>) je namenjen napovedovanju vezavnih mest na proteinih, ki jih najde prek iskanja lokalno strukturno podobnih proteinov v PDB (Protein Data Bank, <http://www.rcsb.org>) bazi. Na povabilo avtorjev te baze, so spletni strežnik ProBiS uvrstili na listo orodij za analizo proteinskih struktur na RCSB Protein Data Bank spletni strani

[http://www.rcsb.org/pdb/static.do?p=general\\_information/web\\_links/](http://www.rcsb.org/pdb/static.do?p=general_information/web_links/)

Tu so na enem mestu zbrani najbolj uspešni programi, ki se uporabljajo za klasifikacijo novih, še neopredeljenih proteinov, predvsem tistih, iz projektov strukturne genomike.