LIGATE

Ligand Generator and portable drug discovery platform at Exascale

Programm / Ausschreibung	IKT der Zukunft, EuroHPC, IKT der Zukunft - EuroHPC 2019	**Status**	abgeschlossen
Projektstart	07.10.2022	**Projektende**	30.04.2024
Zeitraum	2022 - 2024	**Projektlaufzeit**	19 Monate
Keywords	HPC; drug discovery; computer vision simulation		

Projektbeschreibung

Heute wird die digitale Transformation einen wichtigen Einfluss auf die Arzneimittelindustrie haben, indem sie den Prozess der Arzneimittelentwicklung erleichtert und das Investitionsrisiko reduziert. Die Verfügbarkeit von leistungsfähigen Computerressourcen, neuen numerischen Modellen für Simulationen und künstlicher Intelligenz erhöht die Genauigkeit und Vorhersagbarkeit des computergestützten Arzneimitteldesigns (CADD) und reduziert die Kosten und die Zeit für das Design und die Produktion eines neuen Medikaments.
Im Rahmen von LIGATE wollen wir die besten europäischen Open-Source-Komponenten zusammen mit proprietären (europäischen) geistigem Eigentum (deren Entwicklung bereits durch frühere H2020-Projekte mitfinanziert wurde) integrieren und mitentwickeln, um die weltweite Führung bei CADD-Lösungen zu behalten, die die Ressourcen der heutigen High-End-Supercomputer und der zukünftigen Exascale-Ressourcen nutzen.
Die vorgeschlagene LIGATE-Lösung ermöglicht es, in einem vollautomatischen Arbeitsablauf das Ergebnis einer Medikamentenentwicklungskampagne in einer vorgegebenen Zeit und mit vorgegebenen Ressourcen zu liefern, wobei die Parameter der Lösungen automatisch so angepasst werden, dass sie den Zeit- und Ressourcenbeschränkungen entsprechen. Diese Vorhersagbarkeit, zusammen mit der vollständigen Automatisierung der Lösung und der Verfügbarkeit des Exascale Systems, wird es ermöglichen, die komplette in silico Drug Discovery Kampagne in weniger als einem Tag durchzuführen, um umgehend auf eine weltweite Pandemie-Krise zu reagieren und die Risiken der Investitionen, die im Falle der digitalen Prozesse meist mit der Unsicherheit der Zeit und der Ressourcen verbunden sind, deutlich zu reduzieren.
Da die Entwicklung der HPC-Architekturen in Richtung Spezialisierung und extremer Heterogenität geht, einschließlich zukünftiger Exascale-Architekturen, konzentriert sich die LIGATE-Lösung auch auf die Code-Portabilität mit der Möglichkeit, die CADD-Plattform auf jeder verfügbaren Architekturart einzusetzen.
Das Projekt plant, der Forschungsgemeinschaft die Ergebnisse einer abschließenden Simulation zur Verfügung zu stellen, die darauf abzielt, eine neuartige Behandlung zur Bekämpfung pandemischer Viren oder zur Bekämpfung gesundheitsbezogener Notfälle, wie z.B. pharmakoresistente Viren, zu entdecken.

Abstract

Today digital transformation will have an important impact on the drug industry by easing the drug discovery process,

reducing the risk of investment. The availability of powerful computing resources, new numerical models for simulations, and artificial intelligence increase the accuracy and predictability of Computer-Aided Drug Design (CADD), reducing the costs and time for the design and the production of a new drug.

In LIGATE, we aim at integrating and co-design best in class European open-source components together with proprietary (European) Intellectual Properties (whose development has already been co-funded by previous H2020 projects) to keep worldwide leadership on CADD solutions exploiting today high-end supercomputer and tomorrow Exascale resources.

The proposed LIGATE solution, in a fully automated workflow, enables to deliver the result of a drug discovery campaign in a predetermined amount of time and resources, autotuning the parameters of the solutions to meet the time and resource constraints. This predictability, together with the fully automation of the solution and the availability of the Exascale system, will let run the full in silico drug discovery campaign in less than one day to respond promptly to worldwide pandemic crisis and to reduce significantly the risks over the investments, that in the case of the digital processes are mostly related to the uncertainty of the time and the resources.

Since the evolution of HPC architectures is heading toward specialization and extreme heterogeneity, including future Exascale architectures, the LIGATE solution focuses also on code portability with the possibility to deploy the CADD platform on any available type of architecture.

The project plans to make available to the research community the outcome of a final simulation that aims to discover a novel treatment to fight either pandemic viruses or to fight health-related emergencies, such as pharmacoresistant.

Projektpartner

- PH3 GmbH