



**КОРНЕЛЮК**  
**Олександр Іванович** — член-кореспондент НАН України, доктор біологічних наук, професор, завідувач відділу білкової інженерії та біоінформатики Інституту молекулярної біології і генетики НАН України

## КОМП'ЮТЕРНІ ГРІД-ТЕХНОЛОГІЇ ТА ЇХ ЗАСТОСУВАННЯ В МОЛЕКУЛЯРНІЙ БІОЛОГІЇ

За матеріалами наукової доповіді на засіданні  
Президії НАН України 12 вересня 2018 року

*У доповіді наведено огляд розвитку комп'ютерних ґрід-технологій та їх застосування в молекулярній біології. У рамках Українського національного ґриду створено віртуальну лабораторію MolDunGrid для вирішення завдань у галузях структурної біології та біоінформатики, зокрема моделювання молекулярної динаміки білків. Віртуальна організація VO:moldungrid інтегрована в EGI і є частиною її інфраструктури. На прикладі досліджень мутантних форм аміноацил-тРНК синтетаз, пов'язаних з нейродегенеративними захворюваннями, показано ефективність ґрід-технологій для моделювання динаміки білків. Коротко описано інші віртуальні організації біологічного та медичного профілю у складі Українського національного ґриду. Обговорено перспективи ґрід-технологій для розвитку нанобіотехнологій та створення нових біомедичних препаратів в Україні.*

**Ключові слова:** ґрід-технології, Український національний ґрід, MolDunGrid, моделювання білків, молекулярна динаміка.

Комп'ютерна біологія, або біологія *in silico* — це міждисциплінарна галузь науки, що використовує досягнення молекулярної біології, біофізики, генетики, інформатики, обчислювальної техніки, прикладної математики і статистики для вирішення біологічних проблем. На сьогодні методом рентгеноструктурного аналізу встановлено просторові структури понад 100 000 протеїнів та їх комплексів, які депоновані в базі даних Protein Data Bank (PDB, <http://www.rcsb.org/>). Однак координати молекул, отримані методом рентгеноструктурного аналізу, є статичними, а їх конформації в фізіологічних умовах у розчині та у складі макромолекулярних комплексів можуть суттєво відрізнятися одна від одної. У випадках, коли немає експериментальних даних щодо просторової організації досліджуваного протеїну або його структурного комплексу з субстратами, ефективною альтернативою стають методи комп'ютерної структурної біології, або біології *in silico*.

Комп'ютерна біологія і біоінформатика використовують комп'ютерні технології при аналізі та систематизації генетичної інформації, створенні баз даних, розробленні нових алгоритмів для аналізу інформації, закодованої в експериментальних даних геноміки, транскриптоміки, протеоміки та структурних базах білків. Важливою причиною інтенсивного розвитку біоінформатики стало завершення багатьох геномних досліджень, зокрема розшифровки геному людини, та перехід молекулярної біології в постгеномну еру. Структурна біоінформатика використовує методи комп'ютерного аналізу для моделювання просторової структури білків і складних макромолекулярних комплексів та для аналізу механізмів молекулярного впізнання. Важливою метою структурної біоінформатики є створення селективних модуляторів функціональної активності біополімерів, які можуть стати прототипами нових лікарських препаратів. Розвиток методів структурної біоінформатики зумовив появу можливостей для створення нових лікарських препаратів за допомогою комп'ютерного дизайну специфічних інгібіторів ферментів. Слід зазначити, що розроблення нового фармацевтичного препарату потребує близько 10 років, а його вартість у середньому становить приблизно 500 млн доларів. Застосування комп'ютерних методів дає змогу істотно прискорити процес створення нових лікарських препаратів та зменшити його вартість.

Комп'ютерні грид-технології широко застосовують у сучасній молекулярній біології для проведення обчислень, що потребують значних комп'ютерних потужностей та оперують великими об'ємами пам'яті [1, 2]. Грид — це інфраструктура засобів обчислень, яка складається з окремих географічно розподілених комп'ютерних ресурсів: процесорів, оперативної пам'яті, зовнішньої пам'яті, файлів та баз даних. Грид-інфраструктура забезпечує просторово розподілене операційне середовище з гнучким, безпечним і скоординованим розділенням ресурсів для виконання обчислень у віртуальних організаціях.

В Україні створено сучасну грид-інфраструктуру — Український національний грид

(УНГ) — у рамках виконання Державної цільової науково-технічної програми з впровадження і застосування грид-технологій на 2009–2013 роки (науковий керівник — академік НАН України А.Г. Загородній) [3]. Проведено системну інтеграцію елементів Української грид-інфраструктури у європейську і світову грид-інфраструктуру, українських науковців залучено до унікальних сучасних експериментів та комп'ютерної обробки їх результатів у віртуальних наукових співтовариствах. Для керування сегментом виділено спеціальні сервери, які підтримують такі сервіси, як реєстрація обчислювальних ресурсів, інформаційна служба ресурсів гриду, сервіс керування сертифікатами користувачів та обчислювальних ресурсів, система моніторингу грид-сегмента.

В Інституті молекулярної біології і генетики НАН України за підтримки Державної цільової науково-технічної програми з впровадження і застосування грид-технологій створено та успішно працює 360-процесорний обчислювальний кластер (рис. 1). Кластер ІМБГ НАН України функціонує під керуванням операційної системи Scientific Linux 6.2 Carbon x86-64, на якій інстальовано необхідне програмне забезпечення. Використовується елемент збереження даних uSystem ErgoLAN 6036T-3RF-36 об'ємом близько 100 ТБ. Кластер з'єднаний оптоволоконною лінією з пропускною здатністю 10 Гбіт/с через мережу UARNET.

Для розрахунків молекулярної динаміки [4] у грид використовують проміжне програмне забезпечення та інструментальні засоби Nordu-Grid ARC 2, на основі яких побудовано Українську національну грид-інфраструктуру. Організація ресурсів аналогічна застосованій у загальноєвропейському проєкті EU DataGrid. Кластер ІМБГ НАН України обслуговує як локальних користувачів, так і віртуальні організації учасників УНГ: VO:moldyngrid, VO:Ukraine, VO:dteam, VO:ops, VO:testbed.univ.kiev.ua, VO:sysbio, VO:medgrid та VO:compuchemgridua.

Для проведення досліджень з використанням грид-технологій в Інституті молекулярної біології і генетики НАН України створе-

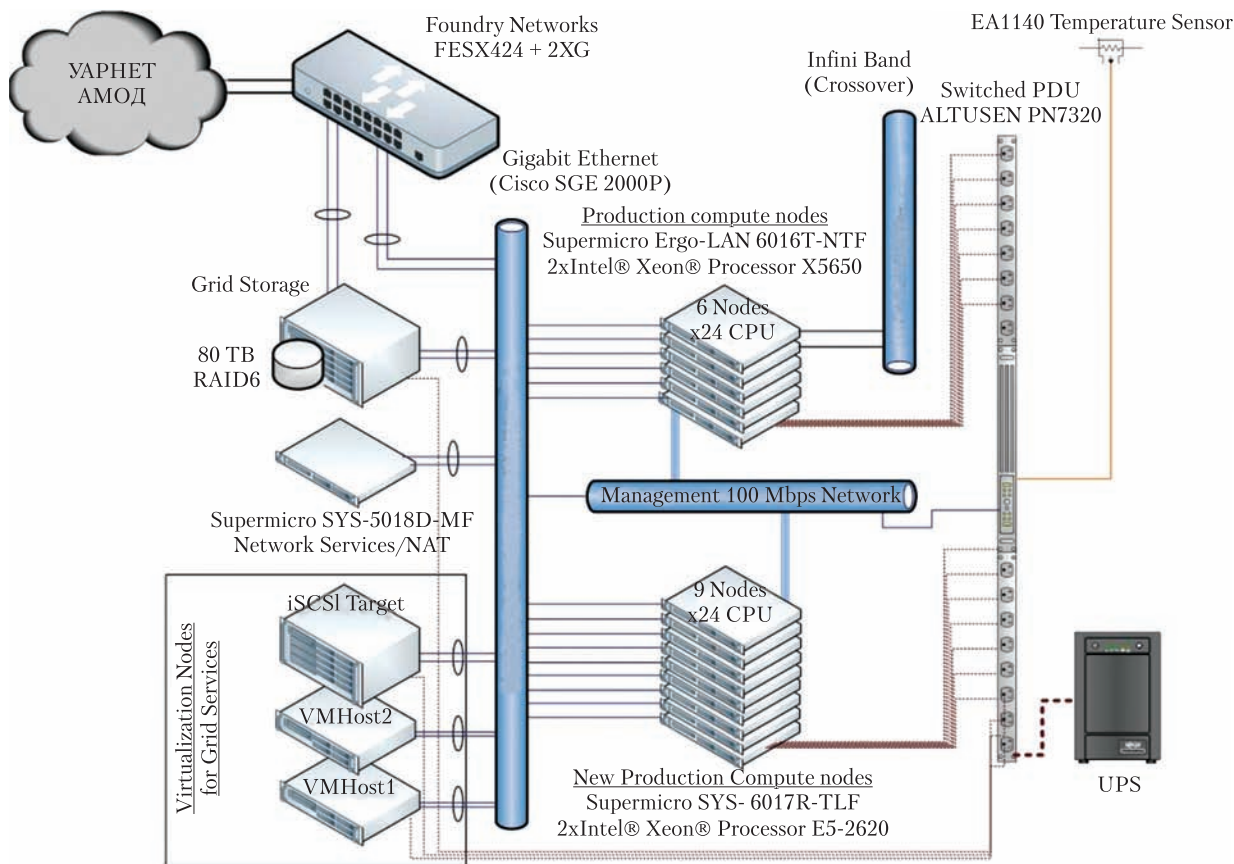


Рис. 1. Схема апаратної інфраструктури 360-ядерного обчислювального кластера ІМБГ НАН України

но віртуальну організацію VO:moldyngrid, що функціонує на базі обчислювального кластера Інституту. Її метою є розроблення ефективної інфраструктури для проведення розрахунків молекулярної динаміки біологічних макромолекул (протеїнів, нуклеїнових кислот та їх комплексів) у водно-іонному оточенні *in silico*. Для автоматизації високопродуктивних обчислень молекулярної динаміки та її аналізу створено віртуальну лабораторію MolDunGrid (<https://moldyngrid.org>) [5–7]. До віртуальної лабораторії MolDunGrid під'єднано 9 ресурсних центрів загальною кількістю 3500 процесорних ядер, а саме: Інститут сцинтиляційних матеріалів НАН України (ISMA); Київський національний університет імені Тараса Шевченка (KNU); Інститут харчової біотехнології та геноміки НАН України (IFBG); Інститут

молекулярної біології і генетики НАН України (ІМБГ); Головна астрономічна обсерваторія НАН України (МАО); НТУУ «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського» (КПІ); Інститут кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України (ICYB); LRZ Linux Cluster (EGI) – обчислювальний центр імені Лейбніца при Академії наук Баварії (ФРН); Федеративний «хмарний» ресурсний центр у Словаччині (EGI Federated Cloud) (рис. 2) [6–8, 10].

Завдяки міжнародній співпраці віртуальної лабораторії MolDunGrid з EGI комп'ютерні розрахунки виконувалися із залученням обчислювальних центрів країн ЄС, що дало змогу значно прискорити їх.

Веб-портал віртуальної лабораторії MolDunGrid містить 6 блоків: база даних протеїнів, розрахунковий блок, база даних обчислених

траєкторій, аналітичний блок, база даних ЯМР та навчальний блок. Використовується цей веб-портал як для проведення комп'ютерних розрахунків дослідниками, так і для навчання студентів та аспірантів.

Комп'ютерні розрахунки молекулярної динаміки в Українській національній гід-інфраструктурі (<http://ung.in.ua/>) виконуються з використанням сервісів віртуальної лабораторії MolDynGrid. Крім автоматизації постановки задач, особливу увагу приділено аналітичному блоку MolDynGrid. До складу програмного пакету GROMACS входять близько 80 аналітичних програм, більшість з яких не підтримують масштабування і використовують лише одне ядро центрального процесора при розрахунках (`g_gms`, `g_gmsf`, `g_gurate` та ін.). У віртуальній лабораторії застосовують підхід, який дає можливість провести розпаралелювання пакету однопроцесорних завдань для планувальника PBS (Portable Batch System). Для цього впроваджено систему автоматизації аналізу траєкторій молекулярної динаміки засобами створеного скрипту — DAS (Distributed Analyzer Script), який було апробовано локально на кластері IMBG та впроваджено у веб-порталі MolDynGrid [7]. У результаті користувач може автоматизувати цілий пакет одноядерних аналітичних програм, що значно зменшує час підготовки до аналізу.

Проведено інтеграцію віртуальної лабораторії MolDynGrid в Європейську гід-інфраструктуру. Віртуальну організацію VO:moldyngrid зареєстровано на порталі EGI, і офіційно вона є частиною її інфраструктури, що відкриває можливості для розширення міжнародної співпраці. У роботі VO:moldyngrid беруть участь науковці з країн Європейського Союзу. Співробітники віртуальної лабораторії MolDynGrid у свою чергу є учасниками Virtual Team GPGPU (General-Purpose computation on Graphics Processing Units) у рамках проекту EGI ([https://wiki.egi.eu/wiki/VT\\_GPGPU](https://wiki.egi.eu/wiki/VT_GPGPU)), метою якого є вивчення застосовності обчислень наукових задач на графічних прискорювачах (GPUs) у гід-середовищі. Було внесено низку практичних пропозицій щодо реалізації

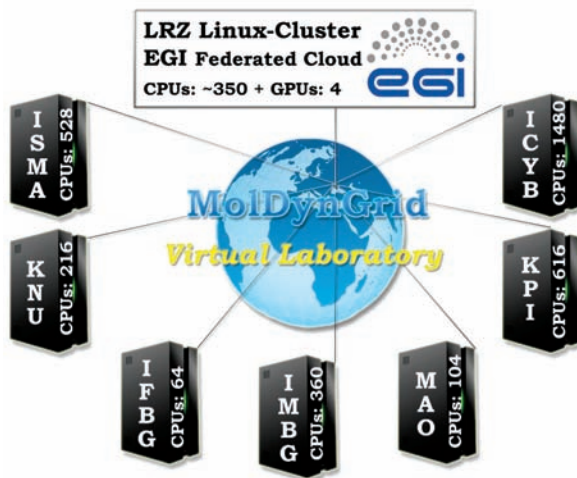
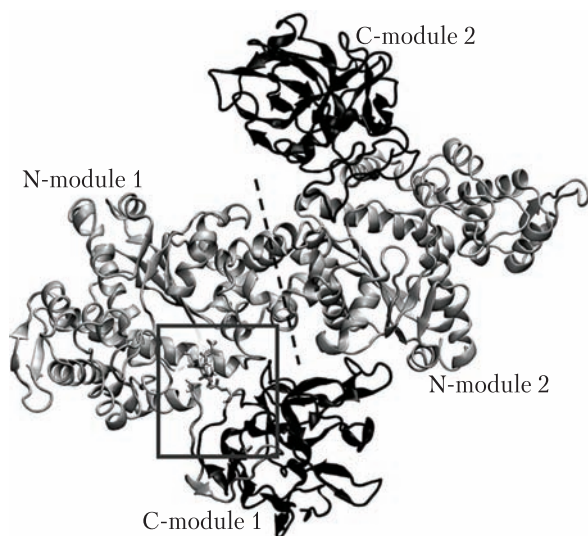


Рис. 2. Обчислювальні ресурси віртуальної лабораторії MolDynGrid

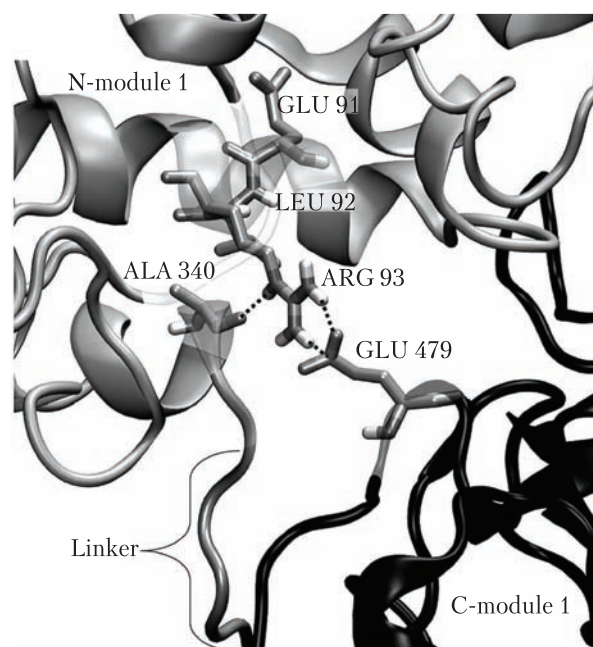
обчислень молекулярної динаміки в програмних пакетах GROMACS і NAMD для системи планування задач за підтримки графічних процесорів nVidia Tesla (CUDA). Набутий робочою групою досвід впроваджено у віртуальних лабораторіях MolDynGrid та WeNMR (A worldwide e-Infrastructure for NMR and structural biology).

З 2015 р. триває співпраця за темою JRA2.4 Accelerated Computing (<https://wiki.egi.eu/wiki/EGI-Engage>). Роботи виконуються в рамках програми EGI-Engage (Horizon 2020 EU, грант № 654142) з метою впровадження розрахунків з використанням графічних прискорювачів у «хмару» EGI та апробації результатів для програмного забезпечення обчислень молекулярної динаміки біополімерів. Накопичений досвід також впроваджено у віртуальну лабораторію MolDynGrid, що дало змогу відсилати задачі на обчислювальні ресурси EGI Federated Cloud з графічними прискорювачами.

У результаті проведеної апаратної модернізації та оновлення програмної інфраструктури на кластері IMBG з'явилася можливість отримувати траєкторії молекулярної динаміки біополімерів з відносно великими часовими інтервалами, зберігати та аналізувати дані, одержані для біополімерів у водно-іонному оточен-



**Рис. 3.** Формування асиметричної структури тирозил-тРНК синтетази людини в процесі молекулярної динаміки в інтервалі 100 нс



**Рис. 4.** Екранування цитокінового ELR-мотиву амінокислотними залишками С-модуля

ні [8–10]. Для автоматизації постановки задач та аналізу траєкторій молекулярної динаміки створено нові сервіси віртуальної лабораторії

MolDynGrid, інтегровані в УНГ та Європейську грід-інфраструктуру, що дало змогу задіяти більше обчислювальних ресурсних центрів та підвищити продуктивність розрахунків.

При проведенні досліджень у віртуальній лабораторії MolDynGrid використовують метод комп'ютерного моделювання молекулярної динаміки — теоретичний метод дослідження поведінки біологічних макромолекул та молекулярних систем [4, 9, 10]. В основу методу покладено чисельний розрахунок класичних траєкторій руху макромолекул у фазовому просторі координат та імпульсів їх атомів. Розроблений на засадах теоретичної фізики метод молекулярної динаміки широко використовують у комп'ютерній структурній біології та біофізиці. В останні 10 років одночасний розвиток комп'ютерних потужностей та вдосконалення алгоритмів розрахунків молекулярної динаміки спричинили безпрецедентний розвиток досліджень конформаційної рухливості білків, нуклеїнових кислот та макромолекулярних комплексів, у тому числі рибосоми, в наносекундному часовому інтервалі. Комбінація теоретичних розрахунків методами молекулярної динаміки з експериментальними дослідженнями приводить до глибокого проникнення в молекулярну природу біологічних процесів.

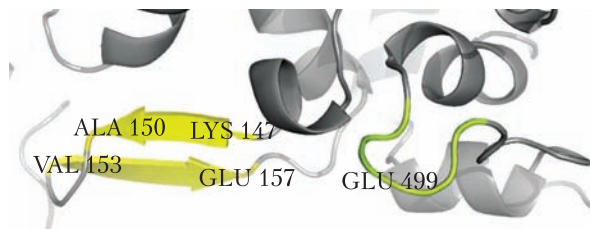
Інтенсивні дослідження конформаційної рухливості білків та їх комплексів методом моделювання молекулярної динаміки в Україні проводять, зокрема, в Інституті молекулярної біології та генетики НАН України. Оскільки для розрахунків молекулярної динаміки потрібні значні комп'ютерні ресурси, використання грід-технологій є оптимальним підходом.

Методом комп'ютерного моделювання вперше проведено реконструкцію просторової структури повнорозмірної тирозил-тРНК синтетази людини — ферменту апарату біосинтезу білка, який також виявляє неканонічні цитокінові властивості при розщепленні на окремі модулі (рис. 3) [8]. Аналіз даних молекулярної динаміки повнорозмірної *HsTyrRS* показав, що зв'язування С-модулів з каталітичним ди-

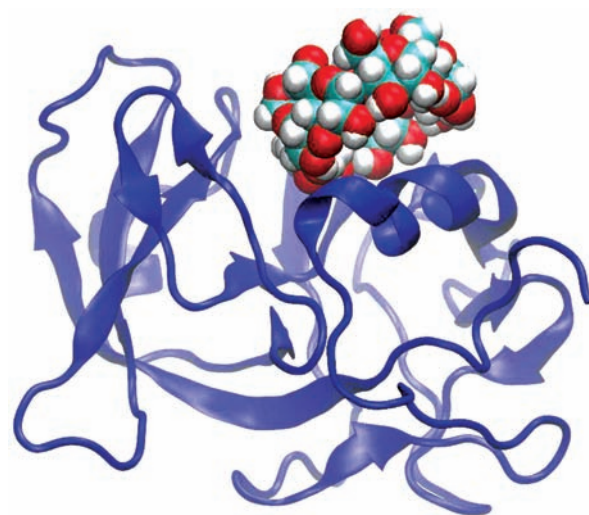
мером мініTyrRS є асиметричним з точки зору утворення інтерфейсів комплексів [9]. Сильне зв'язування одного з С-модулів приводить до різкого зниження його внутрішньої мобільності, другий С-модуль при цьому залишається відносно рухливим. Формування водневих зв'язків між залишком Arg93 цитокінового ELR-мотиву та залишками Ala340 і Glu479 С-модуля вперше було виявлено нами при аналізі даних молекулярної динаміки (рис. 4). Отримані дані підтверджують гіпотезу про те, що повнорозмірна *HsTyrRS* позбавлена цитокінової активності внаслідок прямих взаємодій між N- і С-кінцевим модулями та екранування цитокінового ELR-мотиву в компактній структурі.

З використанням сервісів MolDynGrid сьогодні проводять дослідження молекулярної динаміки аміноацил-тРНК синтетаз та їх мутантних форм, пов'язаних з нейродегенеративними захворюваннями [10]. Виявлено локальні конформаційні зміни з формуванням  $\beta$ -структурних елементів в CP1-вставці згортки Россмана для мутантних форм G41R і del153-156VKQV тирозил-тРНК синтетази людини, що асоційовані з нейрологічним захворюванням Шарко–Марі–Туса (рис. 5). Подібні динамічні конформаційні зміни виявлено вперше завдяки методу комп'ютерного моделювання динаміки білка в діапазоні 100 нс. На основі отриманих даних запропоновано нову роль неструктурованої петлі CP1-вставки у функціонуванні тирозил-тРНК синтетази [10].

З використання ресурсів віртуальної лабораторії MolDynGrid проведено комп'ютерне моделювання цитокіну ЕМАР II (ендотеліальний моноцит-активуєчий поліпептид II), який здатний модулювати низку властивостей ендотеліальних клітин, моноцитів і лейкоцитів *in vitro* і є потенційним протипухлинним препаратом [11]. Раніше експериментально було досліджено гальмування росту ксенографтів раку простати людини, імплантованих під капсулу нирки мишей під дією препарату ЕМАР II. У відділі білкової інженерії і біоінформатики ІМБГ НАН України вперше отримано нанокмпозитні комплекси цито-



**Рис. 5.** Формування  $\beta$ -структурних елементів в CP1-вставці згортки Россмана в процесі молекулярної динаміки в інтервалі 100 нс мутантної форми G41R тирозил-тРНК синтетази людини при нейрологічному захворюванні Шарко–Марі–Туса



**Рис. 6.** Стабілізація структури цитокіну ЕМАР II в нанокмпозитному комплексі з гідроксипропіл- $\beta$ -циклодекстрином за даними моделювання молекулярної динаміки

кіну ЕМАР II зі стабілізуючими сполуками, такими як циклодекстрини. Моделювання нанокмпозитного комплексу цитокіну ЕМАР II з гідроксипропіл- $\beta$ -циклодекстрином дало змогу з'ясувати механізм стабілізації цитокіну у складі комплексу (рис. 6). Встановлено, що гідроксипропіл- $\beta$ -циклодекстрин зв'язується з ділянкою поліпептиду, яка є неструктурованою, що в результаті приводить до підвищення стабільності структури цитокіну ЕМАР II.

Отже, застосування сучасних методів комп'ютерного моделювання біополімерів з ви-

користанням ґрид-технологій має важливе значення для пошуку і відбору ефективних терапевтичних білків та створення на їх основі нових наноконструктивних комплексів біомедичного призначення. Розвиток ґрид-інфраструктури та ресурсного потенціалу хмарних і ґрид-технологій для комп'ютерного моделювання терапевтичних білків є необхідною умовою розвитку вітчизняних біонанотехнологій.

У рамках Українського національного ґриду крім проекту MolDynGrid виконуються також інші проекти в галузі молекулярної біології та біофізики. У 2011 р. в Інституті харчової біотехнології та геноміки НАН України було створено віртуальну організацію CSLabGrid (CytoSkeleton Laboratory for Grid computations) для проведення досліджень молекулярної організації цитоскелета, механізмів клітинного поділу, а також пошуку молекулярних мішеней для біологічно активних сполук. Обчислювальні задачі, які розв'язує CSLabGrid, включають віртуальний високопропускний молекулярний скринінг, молекулярний докінг, обчислення молекулярної динаміки білків, задачі класичної біоінформатики.

У Фізико-технічному інституті низьких температур ім. Б.І. Веркіна НАН України (м. Харків) створено віртуальну організацію CompuChemGridUA, орієнтовану на використання ґрид-технологій для квантово-механічних розрахунків фізичних властивостей ДНК та її

комплексів з лігандами. Проведено квантово-механічні розрахунки впливу графену на фізичні характеристики біомолекул аденозину та 5-фторурацилу при утворенні їх комплексів з графеном.

В Інституті фізики конденсованих систем НАН України (м. Львів) створено віртуальну організацію Multiscale на базі обчислювального кластера Інституту, спрямовану на використання ґрид-обчислень для вирішення задач матеріалознавства та молекулярної біології. Запропоновано новий підхід до моделювання у комп'ютерному експерименті динамічних процесів згорання білків.

Важливе значення ґрид-технології мають у медицині. В Інституті програмних систем НАН України створено віртуальну організацію Medgrid для розв'язання обчислювальних задач у галузі медичних досліджень. Ця віртуальна організація передусім спрямована на виконання популяційних досліджень у галузі кардіології на постійно оновлюваній базі даних електрокардіограм пацієнтів.

Отже, в Україні сучасні комп'ютерні ґрид-технології широко застосовуються в молекулярно-біологічних та медичних дослідженнях. Ґрид-технології мають великі перспективи для міждисциплінарного співробітництва в рамках НАН України, особливо для розвитку нанобіотехнологій та створення нових препаратів для біомедицини.

## REFERENCES

### [СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ]

1. Gagliardi F., Jones B., Grey F., Bégin M.E., Heikkurinen M. Building an infrastructure for scientific Grid computing: status and goals of the EGEE project. *Philos. Transact. A Math. Phys. Eng. Sci.* 2005. **363**(1833): 1729. <https://doi.org/10.1098/rsta.2005.1603>
2. Milanesi L., Merelli I. High performance Grid based implementation for genomics and protein analysis. *Stud. Health Technol. Inform.* 2006. **120**: 374.
3. Zagorodny A.G., Svistunov S.Ya., Belous L.F., Golovinskiy A.L. UA-Grid: Ukrainian National Grid Program. In: *Parallel and Distributed Computing Systems: Proc. Int. Conf. PDCS'2013 (13-14 March, 2013, Kharkiv, Ukraine)*. [Загородний А.Г., Свистунов С.Я., Белоус Л.Ф., Головинский А.Л. UA-Grid: Украинская национальная ґрид-программа. В кн.: *Parallel and Distributed Computing Systems: матер. наук. конф. (13–14 березня 2013, Харків)*. С. 346–356.]
4. Karplus M., McCammon J.A. Molecular dynamics simulations of biomolecules. *Nature Structural Biology.* 2002. **9**: 646. <https://doi.org/10.1038/nsb0902-646>

5. Salnikov A.O., Sudakov O.O., Savytskyi O.V., Sliusar I.A., Kornelyuk A.I. The integrated environment of virtual laboratory MolDynGrid for calculations of molecular dynamics of biopolymers. *Medical informatics and engineering*. 2010. (1): 24.  
[Сальніков А.О., Судаков О.О., Савицький О.В., Слюсар Є.А., Корнелюк О.І. Інтегроване середовище віртуальної лабораторії moldyngrid для розрахунків молекулярної динаміки біополімерів. *Медицина інформатика та інженерія*. 2010. № 1. С. 24–32.]
6. Salnikov A.O., Sliusar I.A., Sudakov O.O., Savytskyi O.V., Kornelyuk O.I. MolDynGrid Virtual Laboratory as a part of Ukrainian Academic Grid infrastructure. *Proc. of IEEE International Workshop on Intelligent Data Acquisition and Advanced Computing Systems: Technology and Applications*. 2009. P. 237-240. <https://doi.org/10.1109/IDAACS.2009.5342989>
7. Salnikov A., Sliusar I., Sudakov O., Savytskyi O., Kornelyuk A. Virtual laboratory MolDynGrid as a part of scientific infrastructure for biomolecular simulations. *International Journal of Computing*. 2010. **9**(4): 294.
8. Yesylevskyy S.O., Savytskyi O.V., Odynets K.A., Kornelyuk A.I. Interdomain compactization in human tyrosyl-tRNA synthetase studied by the hierarchical rotations technique. *Biophysical Chemistry*. 2011. **154**(2-3): 90. <https://doi.org/10.1016/j.bpc.2011.01.005>
9. Savytskyi O.V., Yesylevskyy S.O., Kornelyuk A.I. Asymmetric structure and domain binding interfaces of human tyrosyl-tRNA synthetase studied by molecular dynamics simulations. *Journal of Molecular Recognition*. 2013. **26**: 113. <https://doi.org/10.1002/jmr.2259>
10. Savytskyi O.V., Kornelyuk A.I. Computational modeling of molecular dynamics of G41R mutant form of human tyrosyl-tRNA synthetase, associated with Charcot-Marie-Tooth neuropathy. *Ukr. Biochem. J.* 2015. **87**(6): 142. <https://doi.org/10.15407/ubj87.06.142>  
[Савицький О.В., Корнелюк О.І. Комп'ютерне моделювання молекулярної динаміки мутантної форми тирозил-тРНК синтази G41R, асоційованої з нейропатією Шарко-Марі-Туса. *Укр. біохім. журнал*. 2015. Т. 87, № 6. С. 142–153. <http://dx.doi.org/10.15407/ubj87.06.142>]
11. Malyna A., Kornelyuk O. Interaction of antitumor cytokine EMAP II with hydroxypropyl-beta-cyclodextrin, *Bulletin of the Taras Shevchenko National University of Kyiv. Biology*. 2015. **1**(69): 25.  
[Малина А.Е., Корнелюк О.І. Взаємодія протипухлинного цитокіна EMAP II з гідроксипропіл-бета-циклодекстрином. *Вісник КНУ імені Тараса Шевченка. Біологія*. 2015. Вип. 1(69). С. 25–29.]

A.I. Kornelyuk

Institute of Molecular Biology and Genetics  
of the National Academy of Sciences of Ukraine (Kyiv)

#### COMPUTATIONAL GRID TECHNOLOGIES AND THEIR APPLICATIONS IN MOLECULAR BIOLOGY

According to the materials of scientific report at the meeting  
of the Presidium of NAS of Ukraine, September 12, 2018

The article presents an overview of the development of computational grid technologies and their application in molecular biology. Within the framework of the Ukrainian National Grid, a virtual MolDynGrid laboratory has been set up to solve problems in the fields of structural biology and bioinformatics, in particular modeling of proteins molecular dynamics. Virtual organization VO:moldyngrid is integrated into EGI and is a part of its infrastructure. An example of the study of mutant forms of aminoacyl-tRNA synthetase associated with neurodegenerative diseases has shown the effectiveness of grid technologies for modeling the dynamics of proteins. Other virtual organizations of the biological and medical profile of the Ukrainian National Grid are briefly described. The prospects of grid technologies for the development of nanobiotechnologies and the creation of new biomedical drugs in Ukraine are considered.

**Keywords:** grid, Ukrainian National Grid, MolDynGrid, protein modeling, molecular dynamics.