

» Wirkstoffforschung bei Bayer HealthCare

s+c implementiert Linux-Cluster für die computergestützte Medikamentenforschung

Anforderung

Linux-Cluster-System mit übersichtlicher Struktur, hoher Ausfallsicherheit und einfacher Administration für virtuelle Screenings und computergestütztes Wirkstoffdesign.

Lösung

Konzeption, Installation und Integration des Linux-Clusters durch s+c. Installation mittels s.cluster von s+c. Betriebsunterstützung durch s+c.

Vorteil

Maßgeschneidertes System durch herstellerunabhängige Herangehensweise, einfache Verwaltung mit s.cluster, einfache Nutzung durch Common-Driver.

Die Division Pharma der Bayer HealthCare AG ist eine 100-prozentige Tochter der Bayer AG und arbeitet auf Therapiegebieten wie Infektionskrankheiten, Herz-Kreislauf-Risikomanagement, Urologie und Krebs. Aktuelle Präparate sind beispielsweise Adalat, Avelox, Ciprobay und Levitra. Unter anderem auf Grund der rasanten Hard- und Softwareentwicklung gewinnt das computergestützte Molecular Modelling im Bereich der chemischen Forschung immer mehr an Bedeutung:

Mit seiner Hilfe soll die **Effizienz der Forschung gesteigert** und dadurch die **Kosten gesenkt** werden. Die Division Pharma beschloss daher, den Bereich der computergestützten Forschung zu erweitern und die Mitarbeiterzahl am Standort Wuppertal deutlich zu erhöhen. Dr. Andreas Göller, Laborleiter in der chemischen Forschung, begann damit, den Aufbau eines Rechnersystems für virtuelle Screenings und computergestütztes Wirkstoffdesign zu planen.

Im sogenannten Screening wird jeweils eine chemische Substanz mit einem Protein in Verbindung gebracht und experimentell beobachtet, welche Wechselwirkung zwischen Substanz und Protein stattfindet. Diesen Vorgang wiederholen die Forscher circa anderthalb Millionen mal für alle Verbindungen in der Bayer-Substanzdatenbank. Bei den virtuellen Screenings wird dieselbe In-

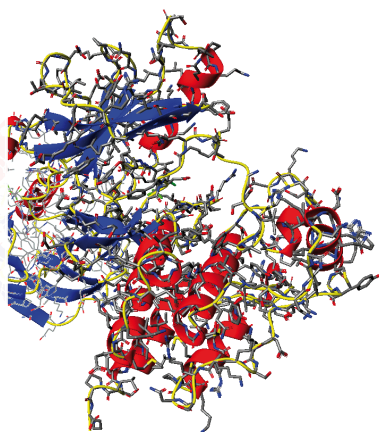
teraktion auf Basis der dreidimensionalen Röntgenstruktur der Proteine und der Molekularformeln der Substanzen im Computer simuliert.

Die Anforderung

Die Vergrößerung der Arbeitsgruppe und die Verwendung gänzlich neuer Simulationsmethoden machte die Anschaffung eines **extrem leistungsfähigen Rechnersystems** erforderlich. Da die Modelling-Software der Anbieter wie Tripos, Schrödinger und Accelrys unter Linux verfügbar waren, entschied sich Dr. Göller für die Anschaffung eines Linux-Clusters. Nur in dieser Variante konnte die benötigte Rechenleistung überhaupt realisiert werden.

Die Anforderungen an das neue System: **einfache Administration, übersichtliche Struktur und hohe Ausfallsicherheit**. Trotz umfangreicher Recherchen wurde jedoch kein System gefunden, das diese Anforderungen in der geforderten Qualität erfüllen konnte.

Daher wandte sich Dr. Göller an science + computing (s+c), um gemeinsam mit dem IT-Dienstleister ein für Bayer HealthCare maßgeschneidertes System zu konzipieren. *"s+c wurde mir von einem ehemaligen Studienkollegen empfohlen, der bei einem deutschen Life-Science-Unternehmen arbeitet"*, bemerkt Dr. Göller. *"Wichtig war uns, dass s+c herstellerunabhängig agiert, und wir daher die für uns optimale Lösung realisieren konnten."*





Bayer HealthCare

Die Lösung

Zunächst wurde ein Pilotprojekt aufgesetzt: s+c entwickelte anhand der Anforderungen einen Cluster-Prototypen mit 16 Prozessoren. Auf ihm wurden die Applikationen und typische Berechnungsjobs der Pharmaforscher hinsichtlich CPU-Leistung, Netzgeschwindigkeit, Arbeitsspeicher-Auslastung und Festplatten-Performance getestet. Die Ergebnisse entsprachen der Erwartung. s+c schrieb daraufhin das Konzept am Markt aus und bewertete die Angebote. Dr. Göller entschied sich für eine Cluster-Lösung von Sun Microsystems, da diese das beste Preis-Leistungsverhältnis bot. Der Cluster besteht aus 100 Knoten, die mit jeweils zwei 2,8 GHz-Prozessoren und zwei GB Hauptspeicher bestückt sind. Intern ist das System mit Fast-Ethernet vernetzt, da die Applikationen vor allem CPU-intensiv und weniger auf hohen I/O-Durchsatz angewiesen sind. Der Cluster wurde mit Hilfe von s.cluster, der Cluster-Management-Software von s+c, installiert. Zu diesem Zweck bereitete s+c die System-Installation in Tübingen vor, baute die Hardware in Wuppertal auf und installierte dort den Cluster inklusive aller Applikationen innerhalb von fünf Tagen. Nach positiven Tests implementierte s+c den Cluster mittels Sun Grid-Engine als Jobstart- und Lastverteilungssystem in die Berechnungsumgebung.

Der Nutzen

"Die Zusammenarbeit mit s+c hat sich äußerst unkompliziert gestaltet", schätzt Dr. Göller die Kooperation im Rückblick ein. *"Durch gute Vor-Ort-Präsenz von s+c konnten Probleme immer schnell gelöst werden."* Einige Vorzüge von s.cluster würden sich zudem erst in einiger Zeit auszahlen, so Dr. Göller weiter, wie zum Beispiel die automatisierte Re-Integration von ausgetauschten Compute-Knoten oder die effektiveren Administrationsmöglichkeiten. Auch die Common-Driver-Technologie von s+c wird ihren Nutzen erst in einem Jahr offenbaren, wenn die Anwender verschiedene Versionen eines Softwarepakets verwenden wollen und dann mittels eines einheitlichen Aufrufs auch problemlos einsetzen können.



Als Partner für die Betriebsunterstützung steht s+c den Pharmaforschern auch zukünftig noch zur Seite. *"Jetzt haben wir ein maßgeschneidertes, stabiles System, das genau die Rechenleistung bietet, die wir benötigen",* so Dr. Göllers Fazit.

Bayer HealthCare AG:

Die Bayer HealthCare AG, ein Teilkonzern der Bayer AG, gehört zu den weltweit führenden innovativen Unternehmen in der Gesundheitsversorgung mit Arzneimitteln und medizinischen Produkten und erzielte im Jahr 2003 einen Umsatz von etwa 8,9 Milliarden Euro. Das Unternehmen bündelt die Aktivitäten der Divisionen Animal Health, Biological Products, Consumer Care, Diagnostics und Pharma und beschäftigt weltweit 34.600 Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter. Ziel von Bayer HealthCare ist es, innovative Produkte zu erforschen, zu entwickeln, zu produzieren und zu vertreiben, um die Gesundheit von Mensch und Tier weltweit zu verbessern. Die Produkte dienen der Diagnose, der Vorsorge und der Behandlung von Krankheiten und leisten einen Beitrag zu einer besseren Lebensqualität.



science + computing ag
 Hagellocher Weg 73
 72070 Tübingen
 Telefon 07071 9457-0
 info@science-computing.de

Über science + computing

Die science + computing ag (s+c) ist ein IT-Service- und Softwarehaus für technisch-wissenschaftliche Konstruktions- und Simulationsumgebungen (CAD/CAE/CAT). s+c konzentriert sich auf die optimale Gestaltung von offenen und verteilten Rechnersystemen und hat jahrelange Erfahrung in Betrieb und Administration komplexer Unix-, Linux- und Windows-Umgebungen. Derzeit arbeiten 250 Mitarbeiter an den vier Standorten Tübingen, München, Düsseldorf und Berlin. Kunden von s+c sind beispielsweise Audi, BMW, Bosch, Daimler, Porsche oder Infineon Technologies. Das Unternehmen kooperiert mit Vertriebspartnern in Frankreich, Italien, Japan und USA.

- IT-Services
- Betriebskonzepte
- Sicherheitslösungen
- Linux-Cluster-Computing
- Systemmanagement
- Linux-Migration
- Rechenlastverteilung
- Open Software
- Software-Consulting
- Backup-Lösungen
- Workflowmanagement
- Strömungsvisualisierung
- FEM-Preprocessing
- Engineering Portale

