

ΤΟ EGEE ΕΠΙΤΑΧΥΝΕΙ ΤΗ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΑ ΕΞΕΥΡΕΣΗΣ ΝΕΩΝ ΦΑΡΜΑΚΩΝ ΓΙΑ ΤΗΝ ΚΑΤΑΠΟΛΕΜΗΣΗ ΤΗΣ ΕΛΟΝΟΣΙΑΣ

Η εφαρμογή ανακάλυψης φαρμάκων που τρέχει στις υπηρεσίες παραγωγής του Enabling Grids for E-sciencE (EGEE), στοχεύει στην ανεύρεση πιθανών νέων φαρμάκων για την καταπολέμηση της ελονοσίας, μιας ασθένειας που σκοτώνει εκατομμύρια ανθρώπους ετησίως και έχει επιπτώσεις σε περισσότερους από 300 εκατομμύρια. Ο αριθμός θανάτων και κρουσμάτων ελονοσίας έχει αυξηθεί σε πολλά μέρη του κόσμου, κυρίως επειδή το ευρύτατα διαδεδομένο φάρμακο (chloroquine) έχει πλέον αποδειχθεί αναποτελεσματικό, εφόσον τα κουνούπια *Anopheles* υπαίτια για την μετάδοση της συγκεκριμένης αρρώστιας, έχουν γίνει όλο και περισσότερο ανθεκτικά στα κοινά εντομοκτόνα. Από έρευνα προκύπτει ότι, έχουν αναγνωρισθεί πρωτεΐνες παρασίτων, ως πιθανοί στόχοι για φάρμακα ενάντια στην ελονοσία.

Η εφαρμογή ανακάλυψης φαρμάκων, κατά την οποία οι επιστήμονες πραγματοποιούν μια *'in silico'* εξομοίωση, έχει πραγματοποιηθεί πάνω στην υποδομή του EGEE, από τον Δεκέμβριο του 2004. Η *'in silico'* ενσωμάτωση, επιτρέπει στους ερευνητές να υπολογίσουν την πιθανότητα κάποιου φαρμάκου να συνδεθεί με την πρωτεΐνη αυτή, η οποία αποτελεί βασικό συστατικό αντιμετώπισης της ελονοσίας.

Σε έναν υπολογιστή, μια μελέτη όπως αυτή με 100.000 πιθανά φάρμακα θα απαιτούσε έξι μήνες για να ολοκληρωθεί - αλλά χάρη στις τεχνολογίες πλέγματος, όπως αυτή του EGEE, το εν λόγω κατόρθωμα επιτεύχθηκε μέσα σε δύο ημέρες. Το επόμενο βήμα λοιπόν, είναι να αυξηθεί η απόδοση της εφαρμογής και να υπολογιστούν τα εκατομμύρια των πιθανών φαρμάκων σε μερικές μόνο εβδομάδες χάρη στη δυνατότητα του Υπολογιστικού Πλέγματος του EGEE. Βάση αυτού του ρυθμού διεξαγωγής της μελέτης, οι ερευνητές ελπίζουν να κάνουν ένα σημαντικό βήμα προς την εύρεση ενός νέου φαρμάκου για την θεραπεία αυτής της ευρύτατα διαδεδομένης ασθένειας.

Η παραπάνω εφαρμογή χρησιμοποιείται αυτήν την περίοδο, από το Ινστιτούτο για Αλγορίθμους και Επιστημονικό Υπολογισμό, Fraunhofer (SCAI), στη Γερμανία καθώς και από το Εργαστήριο Σωματιδιακής Φυσικής Clermont-Ferrand, στη Γαλλία. Θα μπορούσε ενδεχομένως, να χρησιμοποιηθεί και από άλλα ιδρύματα, για την εύρεση θεραπειών και άλλων ασθενειών, όπως ο δάγκειος πυρετός.

Ο Δρ. Martin Hofmann, επόπτης της εφαρμογής ανακάλυψης φαρμάκων στο SCAI, ανέφερε χαρακτηριστικά μεταξύ άλλων: *"Χωρίς το Υπολογιστικό Πλέγμα, τέτοιες μελέτες μεγάλης κλίμακας θα ήταν ακριβές και χρονοβόρες. Το πλέγμα επιτρέπει σε βιολόγους και φαρμακοποιούς να επικεντρώσουν την πειραματική εργασία τους στα πιο πιθανά θεραπευτικά φάρμακα, μειώνοντας το χρόνο που απαιτείται για την ανάπτυξη εμπορικών φαρμάκων για την ελονοσία και άλλες ασθένειες."*

Ο Martin Hofmann προσθέτει: *«Το πλέγμα θα μπορούσε να διαδραματίσει καταλυτικό ρόλο στην ανάπτυξη φαρμάκων, φέρνοντας μαζί τους πρωταγωνιστές - βιοχημικούς, παθολόγους και υπολογιστικούς φαρμακοποιούς – δίνοντάς τους ώθηση προς την ίδια κατεύθυνση.»*

Το πρόγραμμα EGEE έχει αναπτύξει μια διεθνή υποδομή υπολογιστικού πλέγματος, το οποίο παρέχει στους επιστήμονες πρόσβαση σε σημαντικούς

πόρους παγκοσμίως. Μέχρι σήμερα, το πρόγραμμα EGEE έχει συγκεντρώσει ένα σεβαστό αριθμό εφαρμογών σε βιομηχανικούς και ακαδημαϊκούς τομείς συμπεριλαμβανομένης της Φυσικής υψηλής ενέργειας, τις Βιολογικές επιστήμες, την Γεωλογία, την Φυσική Αστροσωματιδίων και την Υπολογιστική Χημεία. Ενημερωτικά υπάρχουν πάνω από 20 διαφορετικές εφαρμογές, που τρέχουν αυτή τη στιγμή στο EGEE.

-Τέλος-

JB/18/05/05