

# Ημερίδα: Το πλέγμα και οι παραμελημένες ασθένειες

Όσοι ασχολούνται με τις λεγόμενες «παραμελημένες» ασθένειες θα έχουν σύντομα την ευκαιρία να συναντηθούν και να συζητήσουν τις νέες δυνατότητες που διανοίγονται στο αντικείμενο αυτό, έπειτα από τις πρόσφατες εξελίξεις στις τεχνολογίες Υπολογισμών Πλέγματος. Μια ημερίδα που αφορά το μέλλον του σχεδιασμού νέων φαρμάκων, με τη χρήση υπολογιστικών συστημάτων μεγάλης κλίμακας, πραγματοποιείται την Παρασκευή, 16 Δεκεμβρίου 2005 στο Διεθνές Κέντρο Τεχνολογίας της Πληροφορικής Bonn-Aachen, στη Βόννη της Γερμανίας.

Η ημερίδα ενδιαφέρει κυρίως άτομα που εργάζονται στους τομείς της Πλεγματικής έρευνας, της Μοριακής βιολογίας και μοριακής παρασιτολογίας, της οργανικής και φαρμακευτικής χημείας, καθώς και σε εθνικούς και διεθνείς οργανισμούς υγείας ή έρευνας, ή ιδιωτικές εταιρείες και ιδιωτικά ερευνητικά ιδρύματα που ενδιαφέρονται για την καταπολέμηση παραμελημένων ασθενειών.

Η ημερίδα συμπίπτει με την επιτυχημένη πραγματοποίηση των πρώτων δοκιμών in silico σχεδιασμού φαρμάκων, με χρήση ανοικτών υπολογιστικών υποδομών Πλέγματος, στο πλαίσιο του προγράμματος WISDOM (Wide In Silico Docking on Malaria) με χρήση της υπολογιστικής υποδομής Πλέγματος EGEE. Το in silico docking είναι το πρώτο βήμα σε μια από τις πιο υποσχόμενες προσεγγίσεις για την επιτάχυνση της ανάπτυξης νέων φαρμάκων και τη μείωση των εξόδων. Αντίστοιχες είναι και οι εφαρμογές DENGUE και AFRICA@home, οι οποίες επίσης κάνουν χρήση του Υπολογιστικού Πλέγματος και συνδυάζουν τεχνικές in silico, με πορίσματα από την πειραματική βιολογία και χημεία.

Ο Δρ Martin Hofmann, επιβλέπων της Εφαρμογής Ανακάλυψης Φαρμάκων στο Ινστιτούτο για Αλγόριθμους και Επιστημονικούς Υπολογισμούς (SCAI) του Fraunhofer, δήλωσε: «Αυτή η ημερίδα είναι η πρώτη από μια σειρά προγραμματισμένων ενεργειών για την ανάπτυξη ενός πλαισίου που θα συντονίζει και θα υποστηρίζει, τέτοιου είδους πρωτοβουλίες και προγράμματα. Συγκεκριμένα, στοχεύουμε στην ανάπτυξη εννοιών που θα καταστήσουν ικανή τη συνεργασία των πειραματικών εργαστηρίων βιολογίας και χημείας, ούτως ώστε να εξασφαλιστεί η σωστή συνέχεια της in silico εξέτασης στον πραγματικό κόσμο». Πρόσθεσε επίσης ότι «θέλουμε να φέρουμε σε επαφή ό-

λους τους ενδιαφερόμενους, για να συζητήσουμε τις προοπτικές των ερευνητικών μας δραστηριοτήτων, για την υγειονομική διαχείριση χώρων που επηρεάζονται από παραμελημένες ασθένειες».

Το Εργαστήριο Υπολογιστικών Συστημάτων Υψηλών Επιδόσεων του Πανεπιστημίου Κύπρου -ο συνεργάτης του προγράμματος EGEE στην Κύπρο- υποστήριξε τη Δοκιμαστική Εφαρμογή «Σχεδιασμός Φαρμάκων In Silico» παρέχοντας υπολογιστική ισχύ και αποθηκευτικό χώρο για την εκτέλεση εργασιών της εφαρμογής και φιλοξενώντας πάνω από 1200 υπολογιστικές εργασίες στο πλαίσιο του πειράματος.

Για εγγραφή στην Ημερίδα (χωρίς κόστος συμμετοχής) επισκεφτείτε το δικτυακό χώρο <http://www.scai.fraunhofer.de/index.php?id=1654&L=1>.

Για περαιτέρω πληροφορίες σχετικά με την ημερίδα: Δρ Martin Hofmann, e-mail: [martin.hofmann@scai.fraunhofer.de](mailto:martin.hofmann@scai.fraunhofer.de) και Δρ Nicolas Jacq, e-mail: [jacq@clermont.in2p3.fr](mailto:jacq@clermont.in2p3.fr).

Περισσότερες πληροφορίες για συμμετοχή στο πρόγραμμα EGEE μπορείτε να βρείτε στο δικτυακό χώρο <http://cygrid.org.cy>



Πλέγμα και ασθένειες