

EGEE ускорява разработването на нови медикаменти за лечение на малария

Върху грид-инфраструктурата в рамките на проекта EGEE вече се изпълнява приложението "Разработване на нови медикаменти", чиято цел е откриване на нови лекарства срещу маларията – болест, от която годишно умират един милион души, а повече от 300 милиона се разболяват. В много части на света броят на заболялите и на смъртните случаи нараства. Основната причина за това е, че най-използваното лекарство (Chloroquine) стана безполезно поради устойчивостта на болестта към него, а също така и поради повишената издръжливост на маларичния комар (*Anopheles*), преносител на малария, към инсектициди. В процеса на изследванията в областта на молекулярната биология бяха идентифицирани паразитни протеини, които са потенциални цели за лекарствата против малария.

От декември 2004 в рамките на проекта EGEE се изпълнява приложението "Разработване на нови медикаменти", в което учените използват подхода на силикатно ('in silico') свързване. Този подход дава възможност на изследователите да пресметнат вероятността за контакт между потенциалните лекарства и протеините-мишени. Ако се използва само един компютър, провеждането на едно подобно изследване, включващо 100 000 потенциални медикаменти, би отнело шест месеца, но в грид-инфраструктурата на EGEE то беше завършено само за два дни. Следващата стъпка е да се повиши ефективността на приложението, така че само за няколко седмици да се изследват милиони потенциални медикаменти, което е една реално постижима цел с помощта на EGEE грид-инфраструктурата. Работейки с такива темпове, изследователите се надяват да постигнат значителен напредък в борбата срещу тази широко разпространена болест, която засяга милиони хора всяка година.

Засега това приложение се използва от Fraunhofer-Institute for Algorithms and Scientific Computing (SCAI) в Германия и Corpuscular Physics Laboratory of Clermont-Ferrand във Франция, но е възможно да се включат и други институти с цел откриване на ефикасни медикаменти срещу болести като например тропическа треска.

Ръководителят на приложението в SCAI д-р Мартин Хофман (Martin Hofmann) казва: *"Без грид-инфраструктурата едно такова мащабно изследване би отнело много финансови средства и време. Грид-инфраструктурата позволява на биолози и химици да съсредоточат експерименталната си дейност върху най-многообещаващите потенциални лекарства, като по този начин се ускорява процеса на откриване на ефикасни лекарства срещу малария и други болести."*

Той добавя още: *"Грид-инфраструктурата би могла да бъде катализатор за разработването на лекарства, като обединява и подпомага усилията на участниците в тази дейност – биохимици, лекари, специалисти по изчислителна химия."*

Проектът EGEE създаде международна изчислителна грид-инфраструктура, която осигурява на учените достъп до значителни компютърни ресурси. Досега в рамките на проекта EGEE вече е утвърден пакет от над 20 приложения с широк спектър в индустриалната и академичната сфера, сред които Физика на високите енергии, Биологични науки, Науки за Земята, Физика на космическите частици, Изчислителна химия.

Бележки:

1. В момента процесът на разработване на медикаменти е твърде дълъг и скъпоструващ. Само едно от 10 000 съединения стига до продажба, като комерсиализацията му може да отнеме повече от 15 години и 800 милиона долара. Предимствата на приложението "Разработване на нови медикаменти" се състоят в намаляване на разходите за експерименти и изследвания, ускоряване на процеса на подготовка за продажба и увеличаване на вероятността за успех на лекарството.
2. Свързването (docking) е първата стъпка към разработката на силикатни медикаменти (in silico). По същество това представлява пресмятане на енергията, необходима за свързването на целевия протеин с набор от потенциални лекарства. Мишената обикновено е протеин, който играе водеща роля в развитието на патологичния процес, например в биологичните цикли на даден патоген (паразит, вирус, бактерия). Целта е да се разпознаят молекулите, които биха се задържали в активния участък от протеина, за да отслабят неговото действие, като по този начин се повлияе върху молекулните процеси в патогена.
3. Проектът EGEE е финансиран от Европейската комисия. Неговата цел е да се осигури на изследователите както от академичната, така и от промишлената сфера, достъп до значителни изчислителни ресурси, независимо от географското им разположение. За повече информация вижте <http://public.eu-egee.org/>.
4. За повече информация за проекта EGEE, можете да се свържете с Joanne Barnett, EGEE External Relations Officer, на телефон +31 20 530 4488 или email; barnett@terena.nl.
5. За повече информация за приложенията върху EGEE грид-инфраструктурата, можете да се свържете с Vincent Breton, Ръководител на EGEE Приложенията, на телефон +33 4 73 40 72 19 или email: Breton@clermont.in2p3.fr.
6. За повече информация за приложението "Разработване на нови медикаменти", можете да се свържете с Martin Hofmann на телефон +49 2241 14 2802 или email: martin.hofmann@scai.fhg.de.