

## ΗΜΕΡΙΔΑ: ΤΟ ΠΛΕΓΜΑ ΚΑΙ ΟΙ ΠΑΡΑΜΕΛΗΜΕΝΕΣ ΑΣΘΕΝΕΙΕΣ

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, μετά τις πρόσφατες εξελίξεις στις τεχνολογίες Υπολογισμών Πλέγματος. Μια ημερίδα που αφορά το μέλλον του σχεδιασμού νέων φαρμάκων, με τη χρήση υπολογιστικών συστημάτων μεγάλης κλίμακας, θα πραγματοποιηθεί την Παρασκευή 16 Δεκεμβρίου 2005 στο Διεθνές Κέντρο Τεχνολογίας της Πληροφορικής Bonn-Aachen (the Bonn-Aachen International Centre for Information Technology), στη Βόννη της Γερμανίας.

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 (Enabling Grids for E-science). Το *in silico* docking είναι το πρώτο βήμα σε μια από τις πιο υποσχόμενες προσεγγίσεις για την επιτάχυνση και μείωση των εξόδων κατά την ανάπτυξη νέων φαρμάκων. Αντίστοιχη είναι και η εφαρμογή DENGUE, η οποία χρησιμοποιεί επίσης *in silico* docking για την ταυτοποίηση νέων πιθανών ενώσεων που μπορούν να χρησιμοποιηθούν ενάντια σε πρωτεΐνες οι οποίες λειτουργούν ως μεσάζοντες σε σημαντικές λειτουργίες που αφορούν προσβολή από ιούς τύπου dengue, όπως και την αναπαραγωγή τέτοιων ιών. Τέλος, η εφαρμογή AFRICA@home στοχεύει στην βελτίωση της επιδημιολογικής επίβλεψης της ελονοσίας στην Αφρική. Όλες αυτές οι εφαρμογές 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 την συνεργασία των πειραματικών εργαστηρίων βιολογίας και χημείας, ούτως ώστε να εξασφαλιστεί η σωστή συνέχεια της *in silico* εξέτασης στον πραγματικό κόσμο». Ο Δρ. Hoffman πρόσθεσε επίσης ότι «θέλουμε να φέρουμε σε επαφή όλους τους ενδιαφερόμενους, για να συζητήσουμε τις προοπτικές των ερευνητικών μας δραστηριοτήτων, για την υγειονομική διαχείριση στις χώρες που επηρεάζονται από παραμελημένες ασθένειες».

Η ημερίδα ενδιαφέρει κυρίως άτομα που εργάζονται στους ακόλουθους τομείς και οργανισμούς:

- 1 Πλεγματική έρευνα
- 2 Life science informatics
- 3 Μοριακή βιολογία και μοριακή παρασιτολογία
- 4 Οργανική και φαρμακευτική χημεία
- 5 Εθνικούς και διεθνείς οργανισμούς υγείας
- 6 Εθνικούς και διεθνείς οργανισμούς έρευνας
- 7 Ιδιωτικές εταιρείες που ενδιαφέρονται για την καταπολέμηση παραμελημένων ασθενειών
- 8 Ιδιωτικά ερευνητικά ιδρύματα που ενδιαφέρονται για την καταπολέμηση παραμελημένων ασθενειών

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

Για περισσότερες πληροφορίες σχετικά με την Ημερίδα, παρακαλώ επικοινωνήστε με τον Δρ. Martin Hofmann, email: [martin.hofmann@scai.fraunhofer.de](mailto:martin.hofmann@scai.fraunhofer.de) ή με τον Δρ. Nicolas Jacq, email: [jacq@clermont.in2p3.fr](mailto:jacq@clermont.in2p3.fr)

-Τέλος-

JB/8/11/05

### Προς τους εκδότες:

1. Για περισσότερες πληροφορίες σχετικά με το πρόγραμμα WISDOM, επισκεφτείτε το δικτυακό χώρο: <http://wisdom.eu-eggee.fr/> or <http://public.eu-eggee.org/files/battles-malaria-grid-wisdom.pdf> ή επικοινωνήστε με τον Δρ. Martin Hofmann, email: [martin.hofmann@scai.fhg.de](mailto:martin.hofmann@scai.fhg.de)
2. Για περισσότερες πληροφορίες σχετικά με το πρόγραμμα DENGUE, επισκεφτείτε το δικτυακό χώρο: [http://www.swissbiogrid.com/project\\_and\\_proof.html](http://www.swissbiogrid.com/project_and_proof.html) ή επικοινωνήστε με τον Torsten Schwede, email: [Torsten.Schwede@unibas.ch](mailto:Torsten.Schwede@unibas.ch)
3. Για περισσότερες πληροφορίες σχετικά με το πρόγραμμα AFRICA@home, επισκεφτείτε το δικτυακό χώρο: <http://www.africaathome.org/> ή επικοινωνήστε με τον Francois Grey, email: [Francois.Grey@cern.ch](mailto:Francois.Grey@cern.ch)
4. Το πρόγραμμα EGEE (Enabling Grids for E-sciencE) χρηματοδοτείται από την Ευρωπαϊκή Επιτροπή και στοχεύει να παραχωρήσει σε ερευνητές, τόσο ακαδημαϊκούς όσο και βιομηχανικούς, την πρόσβαση σε υπολογιστικές πηγές, ανεξάρτητα από την γεωγραφική τους θέση. Για περισσότερες πληροφορίες, επισκεφτείτε το δικτυακό χώρο: <http://public.eu-eggee.org/> ή επικοινωνήστε με την Joanne Barnett, EGEE External Relations Officer, στο τηλέφωνο: +31 20 530 4488, ή μέσω email: [barnett@terena.nl](mailto:barnett@terena.nl)