

В рамках EGEE ускорена разработка новых лекарств от малярии

Приложение промышленного уровня Drug Discovery (поиск лекарств), работающее в рамках проекта EGEE (Enabling Grids for E-Science – "Развёртывание гридов для e-науки") создано для поиска принципиально новых лекарств от малярии – болезни, от которой миллион человек умирает ежегодно и страдают ещё 300 миллионов. Во многих регионах мира заболеваемость и смертность от малярии повысились – главным образом из-за того, что наиболее распространённое средство – chloroquine – фактически стало бесполезным вследствие усиления устойчивости болезни к этому препарату и повышения иммунитета к инсектицидам у насекомых, переносящих малярию. В ходе исследований в области молекулярной биологии удалось выявить паразитные белки – потенциальные цели для лекарств от малярии.

С декабря 2004 в рамках EGEE – среди сервисов промышленного уровня – работает приложение Drug Discovery (поиск лекарств), позволяющее учёным вести докинг *in silico*. Исследователи могут вычислять вероятность прямого контакта между потенциальным лекарством и белком-мишенью. В данном случае это вероятность того, что потенциальное лекарство войдёт в прямой контакт с активной частью одного из паразитных белков малярии. Исследование подобного масштаба – 100 тыс. потенциальных лекарств – потребовало бы полугода работы одного компьютера, но в гриде EGEE оно было проведено за два дня. Следующий шаг – повышение эффективности приложения и обсчёт миллиона потенциальных лекарств за несколько недель, что в гриде EGEE вполне возможно. Исследователи надеются, что такое развитие событий позволит найти новое лекарство от этой болезни, каждый год причиняющей страдания миллионам людей.

Приложение Drug Discovery сейчас используют Институт алгоритмов и научных вычислений им. Фраунгофера (Fraunhofer Institute for Algorithms and Scientific Computing, SCAI) в Германии и Лаборатория корпускулярной физики в Клермон-Ферране (Corpuscular Physics Laboratory of Clermont-Ferrand), Франция, но, в принципе, оно доступно и другим учреждениям, ведущим поиск лекарств от таких болезней, как, например, лихорадка денге.

Ответственный за приложение Drug Discovery в SCAI д-р Мартин Хофман (Martin Hofmann) сказал: "Без применения грида такие крупномасштабные исследования были бы намного дороже и продолжались бы намного дольше. Благодаря гриду, биологи и химики могут сосредоточить свою экспериментальную работу на самых перспективных потенциальных лекарствах, что ускорит разработку коммерческих лекарств от малярии и других болезней." Он также добавил: "Грид мог бы быть катализатором разработки лекарств, объединяя и направляя усилия всех участвующих в этой работе биохимиков, медиков, и специалистов в вычислительной химии."

В рамках EGEE уже создана глобальная инфраструктура грид-компьютинга, благодаря которой учёным стали доступны колоссальные всемирные компьютерные ресурсы. В EGEE работают свыше 20 приложений, охватывающих самые разные области научной и экономической деятельности, включая физику высоких энергий, биологические науки, науки о Земле, физику космических частиц, вычислительную химию.

Редакторам:

1. В настоящее время поиск и разработка лекарств – процесс долгий и дорогостоящий. Только одно соединение из 10 тыс. доходит до продажи, а коммерциализация одного лекарства может занять свыше 15 лет и обойтись более, чем в 800 млн. долларов. Приложение Drug Discovery создано для снижения себестоимости разработки, уменьшения времени выхода на рынок и повышения вероятности успеха лекарств в наиболее перспективных направлениях.
2. Докинг – первый шаг по пути *in silico* разработки лекарств. По существу это вычисление энергии связи белка-мишени с потенциальными лекарствами; используется алгоритм апробации. Мишенью обычно является белок, играющий ключевую роль в развитии патологического процесса – например, в биологических циклах данного патогена (паразита, вируса, бактерии). Задача состоит в определении того, какая молекула сможет удержаться на активном участке белка и ослабить его действие – таким образом будет оказано влияние на принципиальные молекулярные процессы в патогене.
3. Проект EGEE (Enabling Grids for E-SciencE – "Развёртывание гридов для е-науки") финансируется Европейской комиссией. Его цель – предоставить исследователям, занятым как в академических, так и в экономических областях, доступ к огромным компьютерным ресурсам, не зависящий от их взаимного географического расположения. Подробности можно узнать по адресу <http://public.eu-egee.org>
4. Подробности о EGEE в общем можно узнать у Джоан Барнетт (Joanne Barnett) – ответственной за внешние связи EGEE. Тел. +31 20 530 4488; e-mail: barnett@terena.nl
5. Подробности о работающих в рамках EGEE приложениях можно узнать у Винсента Бретона (Vincent Breton) – ответственного за приложения EGEE. Тел. +33 4 73 40 72 19; e-mail: Breton@clermont.in2p3.fr
6. Подробности о приложении Drug Discovery можно узнать у Мартина Хофмана (Martin Hofmann): тел. +49 2241 14 2802; e-mail: martin.hofmann@scai.fhg.de