

День открытых дискуссий: грид-технологии и болезни, распространённые в развивающихся странах

Те, кто имеет отношение к борьбе с болезнями, распространёнными в развивающихся странах, теперь имеют возможность пообщаться с широким кругом своих коллег и обсудить новый уровень грид-компьютинга. Грид-технологии стали главной движущей силой в развитии новых методик в крупномасштабных научных исследованиях, основанных на больших коллаборациях. 16 декабря 2005 в Бонн – Аахенском Международном центре информационных технологий (Германия) пройдёт день открытых дискуссий, где будут обсуждаться перспективы грид-технологий – в частности, их применение в разработке лекарств.

В биомедицинских областях благодаря грид-компьютингу уже начаты несколько крупномасштабных проектов по скринингу препаратов в режиме *in silico*. Проект WISDOM (Wide In Silico Docking on Malaria, докинг *in silico* в широком диапазоне для поиска средств от малярии) – один из первых общедоступных проектов, в которых в инфраструктуре EGEE (Enabling Grids for E-science, "Развёртывание гридов для развития е-науки") в широком диапазоне в режиме *in silico* выполняется докинг для моделирования взаимодействия потенциальных лекарств с белками-мишенями. Докинг в режиме *in silico* – первый шаг в процессе виртуального скрининга, который является одним из наиболее перспективных путей ускорения разработки новых лекарств и понижения её себестоимости. Докинг *in silico* ведётся также в рамках проекта DENGUE, чтобы найти новые соединения для поражения белков вируса лихорадки денге, отвечающих за важнейшие функции и размножение вируса. Основанный на грид-технологиях проект AFRICA@home нацелен на улучшение эпидемиологического мониторинга малярии в Африке. Эти проекты, основанные на грид-технологиях, вполне могут превратиться в настоящую е-науку, где исследования *in silico* объединятся с экспериментальными биологией и химией.

Руководитель разработок лекарств в Институте алгоритмов и научного компьютеринга им. Фраунгофера (Fraunhofer Institute for Algorithms and Scientific Computing, SCAI) д-р Мартин Хофманн (Martin Hofmann) сказал: "Этот день открытых дискуссий – первое событие в ряду мероприятий, направленных на создание структуры для согласования и поддержки подобных инициатив и проектов. В частности, мы намерены разработать концепцию интеграции биологических и химических лабораторий, чтобы за скринингом, проведённым *in silico*, последовали соответствующие практические шаги в реальном мире." Он также отметил: "Более того, мы хотим, чтобы все заинтересованные стороны совместно обсудили перспективы наших исследований применительно к здравоохранению в странах, страдающих от побеждённых в развитом мире болезней."

День открытых дискуссий будет особенно интересен представителям следующих направлений:

- Исследования в области грид-технологий
- Информатика для биологических и смежных наук
- Молекулярная биология и молекулярная паразитология
- Органическая химия и фармацевтическая химия
- Национальные и международные медицинские организации
- Национальные и международные исследовательские организации

- Частные предприятия, заинтересованные в борьбе с болезнями, распространёнными в развивающихся странах
- Частные исследовательские фонды, заинтересованные в борьбе с болезнями, распространёнными в развивающихся странах

Регистрация для участия в Дне открытых дискуссий бесплатна; зайдите на сайт

<http://www.scai.fraunhofer.de/index.php?id=1654&L=1> .

Подробнее о Дне открытых дискуссий могут рассказать д-р Мартин Хофманн (Martin Hofmann), e-mail: martin.hofmann@scai.fraunhofer.de или д-р Николя Жак (Nicolas Jacq), e-mail: jacq@clermont.in2p3.fr

JB/8/11/05

Редакторам:

1. Подробнее о проекте WISDOM: <http://wisdom.eu-egEE.fr/> или <http://public.eu-egEE.org/files/battles-malaria-grid-wisdom.pdf> . Можно связаться с Мартином Хофманном (Martin Hofmann), e-mail: martin.hofmann@scai.fhg.de .
2. Подробнее о проекте DENGUE: http://www.swissbiogrid.com/project_and_proof.html . Можно связаться с Торстеном Шведе (*Torsten Schwede*), e-mail: Torsten.Schwede@unibas.ch .
3. Подробнее о проекте AFRICA@home: <http://www.africaathome.org/> . Можно связаться с Франсуа Греем (Francois Grey), e-mail: Francois.Grey@cern.ch .
4. Проект EGEE (Enabling Grids for E-sciencE, "Развёртывание гридов для развития е-науки"), финансируемый Европейской комиссией (European Commission), направлен на то, чтобы мир науки и разные области экономики получили доступ к основным компьютерным ресурсам независимо от их географического расположения. Подробнее – см. <http://public.eu-egEE.org/> . За подробностями о EGEE можно также обратиться к ответственной за внешние связи EGEE Джоан Барнетт (Joanne Barnett, EGEE External Relations Officer): тел: +31 20 530 4488; e-mail: barnett@terena.nl .