

Στήριξη και από το Πανεπιστήμιο Κύπρου

## Η EGEE κατά της γρίπης των πτηνών

**Κατά τη** διάρκεια του Απριλίου, μία συνεργασία Ασιατικών και Ευρωπαϊκών επιστημονικών εργαστηρίων ανέλυσε 300.000 συστατικά τα οποία θα μπορούσαν να χρησιμοποιηθούν στην παρασκευή φαρμακευτικού σκευάσματος κατά του ιού της γρίπης των πτηνών H5N1, κάνοντας χρήση της ευρωπαϊκής υποδομής Υπολογιστικού Πλέγματος EGEE. Στόχος ήταν να βρεθούν χημικές ενώσεις που να μπορούν να εμποδίσουν τη δράση ενός ενζύμου στην επιφάνεια του ιού της γρίπης, της λεγόμενης νευραμινιδάσης (neuraminidase) με υπότυπο N1. Η χρήση του Πλέγματος για την αναγνώριση των πιο υποσχόμενων σκευασμάτων για βιολογικές δοκιμές θα μπορούσε να επιταχύνει τη διαδικασία ανάπτυξης φαρμάκων εναντίον του ιού της γρίπης. Ένας από τους στόχους των φαρμάκων που κυκλοφορούν είναι η ιική νευραμινιδάση, ένα

ένζυμο που βοηθά τον ιό να επεκτείνεται και να μολύνει περισσότερα κύτταρα. Λόγω του ότι αυτή η πρωτεΐνη έχει την ικανότητα να εξελίσσεται σε διαφορετικούς τύπους όταν βρεθεί κάτω από φαρμακολογικό στρες, η αντοχή του ιού σε ενδεχόμενη φαρμακευτική αγωγή δημιουργεί ανησυχίες σε περίπτωση πανδημίας. Η πρόκληση της εφαρμογής ανακάλυψης φαρμάκων με τη μέθοδο in silico έγκειται στον προσδιορισμό των μορίων που μπορούν να συνδεθούν στις ενεργές πλευρές του ιού έτσι ώστε να εμποδίσουν τη δράση του. Για τη μελέτη των επιπτώσεων τις οποίες επιφέρουν μικρές κλίμακας μεταλλάξεις στην αντοχή έναντι των φαρμά-

των και την επιλογή των καταλληλότερων παρασκευασμάτων, ένα μεγάλο σύνολο χημικών ενώσεων δοκιμάστηκαν έναντι της νευραμινιδάσης με μικρές διαφορές στην μοριακή δομή. Με τα αποτελέσματα που λήφθηκαν από τη διαδικασία αυτή (in silico screening), οι ερευνητές είναι σε θέση να προβλέψουν ποια παρασκευάσματα και χημικές ενώσεις είναι πιο αποτελεσματικά για την αντιμετώπιση των ενεργών νευραμινιδάσεων στις περιπτώσεις μετάλλαξης. Η διαδικασία ανακάλυψης φαρμάκων επιταχύνεται σημαντικά με τη χρήση της υποδομής EGEE, καθώς και άλλων σχετικών υποδομών υπολογιστικών πλεγμάτων. Για την επίδραση 300.000

*Η διαδικασία ανακάλυψης φαρμάκων επιταχύνεται σημαντικά με τη χρήση της υποδομής EGEE*

ΠΟΛΙΤΗΣ

Παρασκευή, 5 Μαΐος 2006, p. 24





χημικών ενώσεων σε 8 διαφορετικές δομές-στόχους της ομάδας Influenza A νευραμινιδάση, έγινε χρήση 2000 υπολογιστών κατά τη διάρκεια 4 εβδομάδων μέσα στον Απρίλιο, το ισοδύναμο 100 χρόνων για ένα μόνο υπολογιστή. Παράχθηκαν περισσότερα από 60.000 αρχεία με συνολικό μέγεθος γύρω στα 600

Gigabytes. Πιθανά φαρμακευτικά σκευάσματα για χρήση ενάντια στον ιό της γρίπης των πτηνών αναγνωρίζονται και ιεραρχούνται με βάση την ενέργεια σύνδεσης που προκύπτει από τα μοντέλα σύνδεσης των υπό εξέταση βιοχημικών μερών. Το Πανεπιστήμιο Κύπρου στηρίζει την πλεγματική εφαρμογή κατά της

γρίπης των πτηνών μέσω της υποδομής CyGrid, με τη διάθεση συνεχούς υπολογιστικής ισχύος 16-24 επεξεργαστών και 150GB αποθηκευτικού χώρου καθ' όλη τη διάρκεια της έρευνας (Απρίλιος-Μάιος 2006).



ΠΟΛΙΤΗΣ

Παρασκευή, 5 Μαΐος 2006, p. 24

