

英美科学家合作研究利用超性能计算机为病人“抓药”

日期: 2014年04月17日 科技部

科学家普遍认识到同种药物对不同病人的疗效存在很大差异, 并已开展相关研究, 致力于让计算机为病人选择个性化治疗药物。

英国伦敦大学学院和美国罗格斯大学的联合研究团队, 将基因测序技术和超级计算机技术相结合, 试图探索解决这一命题。研究人员把艾滋病(HIV)蛋白酶分子作为对象, 酶在不同人体中形状略有不同, 尤其是在蛋白质活动区, 在那里酶完成切片并构成了下一个病毒, 进而形成特定的病毒基因序列。如果知道了酶的形状, 就可以找到相应的药物来阻止这一过程。研究人员通过模拟人体中不同形状的艾滋病病毒感染的蛋白质, 演示了由计算机优化给出的多种艾滋病治疗药物疗效的排序清单。英国伦敦大学学院的皮特·柯文尼教授称:

“有可能通过病人的基因组序列, 推断出酶的形状, 构建准确的蛋白质三维结构, 筛选匹配药物, 并将结果告诉主治医生给出最优处方。”目前, 研究团队已采用这一思路, 对市场上在用的9种艾滋病治疗药物中的7种进行了排序验证。

科学家表示实际工作远比看起来复杂。目前他们建立的50多个模拟模型, 就要配有5000个处理器的计算机不停的计算12-18个小时, 还要对计算结果做大量的数据分析, 才能给出药物的排序。今天的通用计算机技术很难胜任这样的工作, 乐观的看, 依当前计算机技术发展速度看, 也许十年后真能实现计算机为病人“抓药”。

打印本页 ▶

关闭窗口 ▶