

*Pod embargom do 4. svibnja 2006., 18:00 CCT (10:00 GMT, 12:00 MEST)*

## **EGEE GRID NAPADA PTIČJU GRIPU**

Tijekom travnja suradnjom azijskih i europskih laboratorija proučeno je 300.000 mogućih sastojaka za lijek protiv virusa ptičje gripe H5N1 rabeći EGEE Grid infrastrukturu (splet grozdova kompjutora). Cilj je bio naći potencijalne spojeve koji mogu inhibirati djelatnost jednoga površinskoga enzima virusa gripe, tzv. neuraminidaze, podtipa N1. Uporaba Grida za prepoznavanje najviše obećavajućih bioloških provjera mogla bi bitno ubrzati razvoj lijekova protiv virusa gripe.

Jedna je od meta za danas dostupne lijekove viralna neuraminidaza, enzim koji pomaže virusu da se razmnoži i zarazi više stanica. Kako je poznato da ovaj protein razvija inačice pod stresom lijekova, u slučaju pandemije gripe otpor na lijekove postaje mogući problem.

Izazov aplikacije za otkrivanja lijekova pomoću kompjutora prepoznavanje je onih molekula koje se mogu spojiti na djelatna mjesta virusa kako bi spriječili njegovo djelovanje. Da bi se proučio utjecaj malih mutacija na otpornost na lijekove ispitan je veliki skup kemijskih spojeva na istoj neuraminidazi, ali s raznim blago različitim strukturama. Pomoću rezultata računarske provjere, istraživači mogu predvidjeti koji su spojevi i kemijski fragmenti najdjelotvorniji u blokiranju djelatnih neuraminidaza u slučaju mutacija.

Postupak otkrivanja lijekova bitno se ubrzava uporabom EGEE i pridruženih računskih Grid infrastruktura. Da bi se ispitalo spajanje 300.000 spojeva na 8 različitih ciljanih struktura neuramidaza gripe A, 2000 je kompjutora radilo tijekom 4 tjedana u travnju – ukupno 100 godina rada na jednome kompjutoru. Stvoreno je više od 60.000 izlaznih datoteka, ukupnoga opsega 600 gigabajta, što je sve pohranjeno u relacijsku bazu podataka. Mogući lijekovi protiv ptičje gripe sada se identificiraju i rangiraju po vezivnoj energiji spojenoga modela.

“Uz pomoć visokobrzinskoga računarstva i sposobnosti Grida za rukovanje ogromnim količinama podataka, moguće komponente za lijek mogu biti ispitane i proučene veoma brzo pomoću postojećih aplikacija za kompjutorsko modeliranje”, kaže Ying-Ta Wu, biolog pri Istraživačkome centru za genomiku na tajvanskome institutu Academia Sinica u Taipeiu. “Ovo će rasteretiti medicinske kemičare da mogu bolje odgovoriti na iznenadne prijetnje širokih razmjera. Osim toga možemo usredotočiti naša laboratorijska biološka istraživanja na komponente koje najviše obećavaju, one za koje očekujemo da će imati najviše učinka.”

“S ovim ishodima, Grid se pokazuje moćnim i pouzdanim sredstvom za znanstvenike, otvarajući nove mogućnosti u istraživanju i poboljšavajući postojeće metode”, kaže Viviane Reding, europska povjerenica zadužena za informacijsko društvo i medije. “Veoma sam zadovoljna

videći da vodeća europska Grid infrastruktura pridonosi rješavanju aktualnih društveno važnih problema, poput ptičje gripe.”

Iskoristivši iskustvo stečeno u prethodnome WISDOM podatkovnome izazovu o malariji, postupak kompjutorske simulacije uporabom Grida implementiran je u manje od mjesec dana na tri različite Grid infrastrukture: AuverGrid, EGEE i TWGrid, utirući put usluzi virtualnoga ispitivanja velikih razmjera. Većina računanja obavlja se na WISDOM platformi; uz to, za ovaj je izazov usvojen i 'lagani aplikacijski okvir' (eng.: light-weight application framework) DIANE, koji se rabio za obavljanje popriličnoga dijela ukupne djelatnosti, kako bi se omogućila djelotvorna integracija i uporaba kompjutorskih resursa. Slijedeći WISDOM podatkovni izazov protiv nekoliko zanemarenih bolesti održat će se u jesen 2006.

Ovu aplikaciju otkrivanja lijekova protiv virusa ptičje gripe zajednički su postavili Istraživački centar za genomiku, Academia Sinica, Tajvan; Academia Sinica Skupina za grid računarstvo, Tajvan; Laboratorij za čestičnu fiziku, Clermont-Ferrand, CNRS/IN2P3, Francuska; Institut za biomedicinske tehnologije, CNR, Italija, u suradnji s EGEE projektom, regionalnim Gridom AuverGrid u Auvergne, i TWGridom. Ovo istraživanje odvijalo se u suradnji s mrežom izvrsnosti EMBRACE i BioInfoGrid projektom.

#### Bilješke urednicima:

1. Da bi ubrzali i smanjili troškove proizvodnje novih lijekova, istraživači rabe računске simulacijske algoritme spajanja molekula da bi izračunali vjerojatnost spajanja mogućih lijekova s ciljnim proteinom. Kompjutorsko ispitivanje lijekova tako može ubrzati otkrivanje novih snažnih inhibitora minimiziranjem neproduktivnoga pristupa pokušaja i pogreške u laboratoriju.
2. Za više obavijesti o aplikaciji za otkrivanje lijekova protiv virusa ptičje gripe, molimo stupite u vezu s g. Ying-Ta Wu (GRC, Academia Sinica), email: [ywu@gate.sinica.edu.tw](mailto:ywu@gate.sinica.edu.tw)
3. Za više obavijesti o WISDOM (*wide in silico* docking against malaria, široko kompjutorski simulirano spajanje protiv malarije), molimo posjetite: <http://wisdom.eu-egee.fr/> ili stupite u vezu s Nicolasom Jacqom (CNRS/IN2P3), email: [jacq@clermont.in2p3.fr](mailto:jacq@clermont.in2p3.fr).
4. Za više obavijesti o Enabling Grids for E-science (EGEE) projektu, molimo pogledajte <http://www.eu-egee.org/> ili stupite u vezu s Hannelore Hammerle (CERN), glasnogovornicom EGEE-a za odnose s javnošću, telefon: +41 22 767 4176 ili email: [hannelore.hammerle@cern.ch](mailto:hannelore.hammerle@cern.ch)
5. Za više obavijesti o DIANE (Distributed Analysis Environment, distribuirana okolina za analizu), molimo posjetite: <http://cern.ch/diane/>
6. Za više obavijesti o Laboratoriju za čestičnu fiziku, Clermont-Ferrand, CNRS/IN2P3 molimo pogledajte <http://clrwww.in2p3.fr/>
7. Za više obavijesti o Istraživačkom centru za genomiku, Academia Sinica, Tajvan, molimo pogledajte <http://www.genomics.sinica.edu.tw/>
8. Za više obavijesti o Academia Sinica Skupina za Grid računarstvo (ASGC), Tajvan, molimo pogledajte <http://www.twgrid.org/>
9. Za više obavijesti o Institutu za biomedicinske tehnologije, CNR, Italija, molimo pogledajte <http://www.itb.cnr.it/>
10. Za više obavijesti o AuverGridu molimo pogledajte <http://www.auvergrid.fr/>
11. Za više obavijesti o EMBRACE, molimo pogledajte <http://www.embracegrid.info>
12. Za više obavijesti o Bioinformatics Grid Application for life science (BioInfoGRID) projektu, molimo pogledajte <http://www.itb.cnr.it/bioinfogrid>