

Грид-инфраструктурата на EGEE атакува птичия грип

През април чрез грид-инфраструктурата на EGEE бяха анализирани 300 000 потенциални лекарствени компоненти срещу вируса на птичия грип H5N1 в рамките на международно сътрудничество между азиатски и европейски лаборатории. Целта беше да се открият възможни съединения, които да възпрепятстват действието на ензим, намиращ се на повърхността на вируса на птичия грип, т.нар. [neuraminidase](#) подтип N1. Чрез направените симулации в грид-средата с цел разпознаване на най-обещаващите съединения, които да се използват в биологичните тестове, се ускори процесът за откриване на лекарства срещу вируса на птичия грип.

Една от целите на съществуващите на пазара медикаменти е да атакуват ензима neuraminidase, който помага на вируса да се размножава и да заразява повече клетки. Тъй като този протеин е известен със способността си да се модифицира в различни варианти под въздействието на лекарства, устойчивостта на съответния медикамент придобива изключителна важност в случай на грипна пандемия.

Предизвикателството пред приложението за откриване на нови медикаменти чрез подхода *in silico* е да се идентифицират онези молекули, които могат да се свържат с вируса, така че да се възпрепятства неговото действие. За да се изучи въздействието на малките изменения върху устойчивостта на медикаментите, беше изследван богат набор от съединения срещу същия ензим neuraminidase, но с разнообразни, сравнително различни структури. На основата на резултатите от наблюдението на свързването *in silico*, изследователите могат да прогнозират кои съединения и химически компоненти ще бъдат най-ефективни за блокиране на активните ензими neuraminidase в случай на мутации.

Процесът на откриване на лекарства се ускорява изключително много благодарение на съдействието от страна на проекта EGEE и използването на свързаните с него изчислителни грид-инфраструктури. За свързването на 300 000 съединения срещу 8 различни целеви структури на ензима neuraminidase на грипен вирус от тип A през април бяха използвани 2000 компютъра, чийто еквивалент е 100 години процесорно време на един компютър. Досега са генерирани повече от 60 000 изходни файлове с обем 600 гигабайта, които се съхраняват в съответните бази данни. Вече са идентифицирани потенциални компоненти срещу вируса на птичия грип и са класифицирани според енергията за свързване на моделите.

”Благодарение на възможностите на грид-технологиите, като извършване на високопроизводителни пресмятания и управление на голям обем от данни, потенциалните лекарствени компоненти могат да се изучават изключително бързо чрез наличните приложения в областта на компютърното моделиране”, каза Ying-Ta Wu, биолог в Genomics Research Center of the Academia Sinica в Тайпей. “Това ще открие пред специалистите от областта на медицинската химия възможности за по-добра ответна реакция срещу мащабни заплахи. Освен това, в лабораторията ще можем да се концентрираме върху биологичния анализ на съединения, които очакваме да имат най-голямо въздействие.”

“С тези резултати грид-технологията показва, че представлява мощен и надежден ресурс за учените, като отваря нови възможности за изследвания и подобрява съществуващите методи”, каза Вивиан Рединг, европейски комисар по въпросите на Информационното Общество и на Медиите. “Аз съм удовлетворена от факта, че водещата европейска грид-инфраструктура допринася за решаването на актуални проблеми от изключително значение за обществото като птичия грип.”

Използвайки опита, придобит по време на предишния експеримент WISDOM, представляващ предизвикателство относно съхраняването на генерирани данни

(свързани с проучванията на нови медикаменти срещу маларията), за по-малко от месец приспособеният за грид-среда процес на свързване *in silico* беше осъществен върху три различни грид-инфраструктури: AuverGrid, EGEE и TWGrid, откривайки пътя за виртуално наблюдение на експериментите в по-голям мащаб. По-голямата част от изчислителния процес се управляваше върху платформата на WISDOM. Нещо повече, опростената рамка на приложението, наречена DIANE, също беше включена в експеримента. Тя беше използвана за осъществяване на значителна част от процеса на интегриране и експлоатация на ефективни изчислителни ресурси. Следващото подобно предизвикателство в рамките на експеримента WISDOM (свързан с проучванията на нови медикаменти срещу пренебрегвани досега заболявания) ще се проведе през есента на 2006 година.

Това приложение за проучване на лекарствени препарати против птичия грип беше съвместно разработено от Genomics Research Center, Academia Sinica, Тайван, Academia Sinica Grid Computing Team, Тайван, Corpuscular Physics Laboratory of Clermont-Ferrand, CNRS/IN2P3, Франция, Institute for Biomedical Technologies, CNR, Италия, със съдействието на проекта EGEE, регионалната грид-инфраструктура [AuverGrid](#) в Auvergne и [TWGrid](#), а така също и проектите [EMBRACE](#) и проекта [BioInfoGrid](#).

Бележки:

1. С цел ускоряване на процеса и понижаване на цената за разработване на нови лекарства изследователите използват подходи на свързване *in silico*, за да предвидят вероятността за свързване на потенциалните съединения с целевия протеин. Така ще се съкрати процесът на проба-грешка в лабораторията, благодарение на предварителните компютърни симулации, при които ще се отделят най-подходящите съединения.
2. За повече информация за приложението за откриване на лекарства против птичия грип се свържете с Ying-Ta Wu (GRC, Academia Sinica), email: ywu@gate.sinica.edu.tw
3. За повече информация за експеримента WISDOM (wide *in silico* docking against malaria) посетете страницата <http://wisdom.eu-egEE.fr/> или се свържете с Nicolas Jacq (CNRS/IN2P3), email: jacq@clermont.in2p3.fr.
4. За повече информация за проекта Enabling Grids for E-science (EGEE) вижте <http://www.eu-egEE.org/> или се свържете с Hannelore Hammerle (CERN), EGEE External Relations Officer, telephone: +41 22 767 4176, email: hannelore.hammerle@cern.ch.
5. За повече информация за DIANE (Distributed Analysis Environment) посетете <http://cern.ch/diane/>.
6. За повече информация за Corpuscular Physics Laboratory of Clermont-Ferrand, CNRS/IN2P3 посетете <http://clrwww.in2p3.fr/>.
7. За повече информация за Genomics Research Center of Academia Sinica, Тайван, вижте <http://www.genomics.sinica.edu.tw/>.
8. За повече информация за Academia Sinica Grid Computing Team (ASGC), Тайван, посетете <http://www.twgrid.org/>.
9. За повече информация за Institute for Biomedical Technologies, CNR, Италия, вижте <http://www.itb.cnr.it/>.
10. За повече информация за AuverGrid вижте <http://www.auvergrid.fr/>.
11. За повече информация за проекта EMBRACE вижте <http://www.embracegrid.info>.
12. За повече информация за проекта Bioinformatics Grid Application for life science (BioinfoGRID) посетете <http://www.itb.cnr.it/bioinfogrid>.