

Vest dostupna od 4. maja 2006, 12:00 CET (10:00 GMT)

## **EGEE Grid napada ptičiji grip**

Tokom aprila konzorcijum laboratorija iz Azije i Evrope je koristio EGEE Grid infrastrukturu u analizi efekata 300 hiljada farmaceutskih komponenti na H5N1 virus ptičijeg gripa. Cilj je bio da se pronađu potencijalne kombinacije komponenti koje mogu da dovedu do inhibicije aktivnosti specifičnog enzima (tzv. neuraminidaze podvrste N1) na površini virusa gripa. Korišćenjem Grid-a za identifikaciju potencijalno najkorisnijih kombinacija, koje bi se zatim isprobale standardnim biološkim ispitivanjima, bi se mogao ubrzati procesa razvoja lekova za borbu protiv virusa gripa.

Jedna od meta lekova koji se već mogu naći na tržištu je virijalna neuraminidaza, enzim koji pomaže virusu da se umnožava i inficira više ćelija. Poznato je da ovaj protein evoluirao u više varijanti pod dejstvom lekova, te je iz ovog razloga pitanje stvaranja otpornosti na lekove od potencijalnog interesa u slučaju izbijanja pandemije gripa.

Izazov da se lekovi otkrivaju *in silico*, odnosno korišćenjem računarskih aplikacija, je da se identifikuju oni molekuli koji mogu da se zalepe za aktivna mesta na virusu i time inhibiraju njegovo dejstvo. Da bi se ispitivao uticaj mutacija na malim skalama na otpornost prema lekovima bilo je potrebno napraviti skrining velikog broja komponenti na istu metu neuraminidaze no sa donekle različitim strukturama. Uz pomoć ovakve *in silico* procedure istraživači su u stanju da predvide komponente i hemijske fragmente koji najefikasnije blokiraju aktivnu neuraminidazu u slučaju mutacija.

Proces stvaranja lekova je suštinski ubrzan korišćenjem EGEE i njemu pridruženih Grid infrastruktura. Za lepljenje 300 hiljada komponenti na 8 različitih struktura meta na Influenca A neuraminidazi je korišćeno 2000 računara u toku 4 nedelje u aprilu, što je ekvivalent od 100 godina na jednom jedinom računaru. Kreirano je više od 60 hiljada izlaznih fajlova sa 600 Gigabajta podataka koji su bili skladišteni u relacionoj bazi podataka. Potencijalne komponente leka protiv ptičijeg gripa se sada identifikuju i rangiraju prema odgovarajućim energijama vezivanja.

“Sposobnost Grid-a da brzom obradom i masivnim skladištenjem podataka omogućava brzo pretraživanje i analizu velikog broja komponenti leka korišćenjem postojećih računarskih modela i aplikacija,” kaže Jing-Ta Vu (Ying-Ta Wu) biolog na Istraživačkom centru za genomiku Kineske akademije (Genomics Research Center, Academia Sinica). “Ovo će osloboditi medicinske hemičare da mogu da bolje reaguju na trenutačne izazove velikih razmera. Šta više, ovo nam omogućava da koncentrišemo naša biološka ispitivanja u laboratoriji na samo potencijalno najkorisnije komponente od kojih očekujemo da imaju najveći efekat.”

Koristeći se ranijim iskustvima stečenim u prethodnim izazovima vezanim za malariju, Grid-om omogućeni *in silico* proces je bio implementiran za manje od mesec dana na tri različite grid infrastrukture: AuverGrid, EGEE, i TWGrid, čime je otvoren put za virtuelno ispitivanje lekova velikog obima. Sledeći WISDOM izazov usmeren na neke mete do sada zanemarenih bolesti će se dogoditi u toku jeseni 2006. godine.

Ova aplikacija za iznalaženje lekova protiv ptičijeg gripa je zajednički realizovana od strane Istraživačkog centra za genomiku Kineske akademije na Tajvanu; Grid tima Kineske akademije; Laboratorije za fiziku čestica Clermont-Ferrand, CNRS/IN2P3, iz Francuske; Instituta za biomedicinske tehnologije, CNR iz Italije, u saradnji sa EGEE projektom, regionalnim gridom AuverGrid iz Auvergne-a (Overne), kao i TWGrid-om. Istraživanje je izvedeno uz saradnju sa mrežom izvrsnosti EMBRACE i projektom BioInfoGrid.

## Napomene za urednike:

1. Da bi se ubrzao i pojeftinio proces razvoja novih lekova, istraživači koriste nove *in silico* (u silicijumu, tj. pomoću računara) algoritme vezivanja da bi računali verovatnoće da se potencijalni lek veže za protein metu. *In silico* pretraživanje može da ubrza proces otkrivanja novih moćnih inhibitora smanjenjem neproduktivnog pristupa centriranog na velikom broju nasumičnih laboratorijskih proba.
2. Za više informacija vezanih za aplikacije za otkrivanje lekova protiv ptičijeg gripa molimo da kontaktirate Jing-Ta Vu na email: [ywu@gate.sinica.edu.tw](mailto:ywu@gate.sinica.edu.tw)
3. Više informacija o WISDOM (wide *in silico* docking against malaria – dakle, široko *in silico* vezivanje protiv malarije) je moguće dobiti na sajtu: <http://wisdom.eu-eggee.fr/> ili kontaktiranjem Nicolas Jacq (Nikolas Žak) sa CNRS/IN2P3 na email: [jacq@clermont.in2p3.fr](mailto:jacq@clermont.in2p3.fr).
4. Više informacija o EGEE projektu (Enabling Grids for E-science, odnosno Osposobljavanje Grid-ova za e-nauku) možete dobiti na <http://www.eu-eggee.org/> ili kontaktiranjem Hannelore Hammerle (Hanelore Hamerle) iz CERN-a (osoba zadužena za veze sa EGEE projektom) telefonom na: +41 22 767 4176 ili preko email-a: [hannelore.hammerle@cern.ch](mailto:hannelore.hammerle@cern.ch)
5. Detaljnije informacije o Laboratoriji za fiziku čestica Clermont-Ferrand, CNRS/IN2P3 se nalaze na <http://clrwww.in2p3.fr/>
6. Detaljnije informacije o Istraživačkom centru za genomiku Kineske akademije na Tajvanu se mogu naći na sajtu: <http://www.genomics.sinica.edu.tw/>
7. Detaljnije informacije o Grid timu Kineske akademije na Tajvanu se mogu naći na <http://www.twgrid.org/>
8. Detaljnije informacije o Institutu za biomedicinske tehnologije, CNR u Italiji se nalaze na <http://www.itb.cnr.it/>
9. Više informacija o AuverGrid-u možete naći na <http://www.auvergrid.fr/>
10. Više informacija o EMBRACE-u se nalaze na sajtu <http://www.embracegrid.info>

11. Informacije o BioinfoGRID projektu se mogu naći na sajtu:  
<http://www.itb.cnr.it/bioinfoGRID>