

Difusión restringida hasta el 4 de Mayo de 2006, 18:00 CCT (10:00 GMT, 12:00 MEST)

La infraestructura de Grid de EGEE ataca la gripe aviar

Durante el mes de abril, un grupo de laboratorios europeos y asiáticos ha analizado 300.000 posibles componentes farmacéuticos para combatir el virus H5N1 de la gripe aviar, utilizando para ello la infraestructura de Grid de EGEE. El objetivo era encontrar posibles compuestos que pudieran inhibir la actividad de una enzima de la membrana del virus de la gripe, conocida como neuraminidasa, subtipo N1. La utilización del Grid para identificar las pautas más prometedoras a la hora de realizar análisis biológicos podría acelerar el proceso de desarrollo de fármacos contra el virus de la gripe.

Uno de los objetivos de los fármacos disponibles hoy en día en el mercado es la neuraminidasa viral, una enzima que ayuda al virus a proliferar e infectar más células. Como se sabe que esa proteína, al ser tratada con fármacos, puede evolucionar dando lugar a nuevas variantes, se plantea el problema de su posible resistencia a los fármacos si se produce una pandemia de gripe.

El reto de las aplicaciones de desarrollo de nuevos fármacos *in silico* [N.d.T.: utilizando herramientas informáticas] es identificar las moléculas que pueden acoplarse a las zonas activas del virus para inhibir su actividad. Para estudiar el impacto en la resistencia a los fármacos que produciría una serie de mutaciones a pequeña escala, se analizó un gran número de compuestos, dirigidos contra la misma neuraminidasa, pero con estructuras ligeramente distintas. Con los resultados del análisis *in silico*, los investigadores pueden predecir qué compuestos y fragmentos químicos son más eficaces para inhibir la neuraminidasa activa si ésta experimenta mutaciones.

El proceso de desarrollo de fármacos se está acelerando significativamente gracias a la utilización de EGEE y de sus infraestructuras de computación en Grid. Para analizar el acoplamiento de 300.000 compuestos en 8 estructuras diferentes de neuraminidasa de gripe A, en abril se utilizaron 2.000 ordenadores durante cuatro semanas – el equivalente a 100 años en un solo ordenador. Se crearon más de 60.000 ficheros informáticos con resultados del experimento, con un volumen de datos de 600 Gigabytes, que fueron almacenados en una base de datos relacional. Los posibles compuestos farmacológicos contra la gripe aviar están ahora siendo identificados y clasificados en función de la capacidad de enlace de los distintos modelos de acoplamiento.

“Con la ayuda de la computación de alta velocidad y la capacidad de gestión de grandes cantidades de datos que ofrece el Grid, los posibles componentes de los fármacos pueden ser analizados y estudiados muy rápidamente por las aplicaciones de modelado por ordenador

existentes”, indica Ying-Ta Wu, biólogo del Centro de Investigación Genómica de la Academia Sinica de Taipei. “Esto permitirá liberar tiempo de los químicos médicos para que se centren en responder mejor a amenazas repentinas y a gran escala. Además, podemos concentrar nuestros ensayos biológicos de laboratorio en los componentes más prometedores, en los que esperamos que tengan mayor impacto”.

“Con estos resultados la infraestructura Grid demuestra que es una herramienta potente y fiable para los científicos, abriendo así el camino a nuevas posibilidades de investigación, y mejorando los métodos existentes” dice Viviane Reding, Comisaria Europea para la Sociedad de la Información. “Me es muy grato comprobar que el buque insignia de la infraestructura Grid europea está contribuyendo a la resolución de problemas actuales e importantes desde el punto de vista social como el de la gripe aviar”.

Aprovechando la experiencia adquirida en un proyecto previo de análisis de datos sobre malaria (WISDOM), el proceso *in silico* basado en Grid pudo ponerse en marcha en menos de un mes en tres infraestructuras de Grid diferentes: AuverGrid, EGEE y TWGrid, haciendo así posible el desarrollo de un servicio de análisis virtual de fármacos a gran escala. La mayor parte de la computación se realiza sobre la plataforma WISDOM. Para este proyecto se adoptó además una aplicación marco ligera denominada DIANE, que se utilizó para llevar a cabo una parte considerable de la actividad total para hacer posible el uso e integración eficaz de los recursos de computación. El próximo proyecto WISDOM, de análisis de datos sobre varias enfermedades desatendidas, tendrá lugar en otoño de 2006.

Esta aplicación de desarrollo de fármacos contra el virus de la gripe aviar fue desplegada conjuntamente por el Centro de Investigación Genómica de la Academia Sinica de Taiwán, por el equipo de Computación en Grid de la Academia Sinica de Taiwán, por el Laboratorio de Física Corpuscular de Clermont-Ferrand del CNRS/IN2P3 de Francia y por el Instituto de Tecnologías Biomédicas del CNR de Italia, en cooperación con el proyecto EGEE, el Grid regional de Auvergne, AuverGrid, y el TWGrid. Este proyecto se desarrolló en colaboración con la red de excelencia EMBRACE y con el proyecto BioInfoGrid.

Nota para editores:

1. Para acelerar y reducir el coste de desarrollo de nuevos fármacos, los investigadores utilizan algoritmos de acoplamiento de moléculas *in silico* para calcular la probabilidad de que posibles fármacos se acoplen a una proteína concreta. El análisis de fármacos *in silico* puede por tanto acelerar el desarrollo de nuevos y potentes

- inhibidores, ya que ayuda a minimizar el proceso no productivo de “prueba y error” en el laboratorio.
2. Para obtener más información sobre la aplicación de desarrollo de fármacos contra el virus de la gripe aviar, por favor contacte con Ying-Ta Wu (GRC, Academia Sinica), email: ywu@gate.sinica.edu.tw
 3. Para obtener más información sobre WISDOM (wide *in silico* docking against malaria – Acoplamiento *in silico* a gran escala contra la malaria), por favor consulte <http://wisdom.eu-egee.fr/> o contacte con Nicolas Jacq (CNRS/IN2P3), email: jacq@clermont.in2p3.fr.
 4. Para obtener más información sobre el proyecto EGEE (“Enabling Grids for E-science” – Habilitando Grids para E-Ciencia), por favor consulte <http://www.eu-egee.org/> o contacte con Hannelore Hammerle (CERN), Responsable de Relaciones Externas de EGEE, teléfono +41 22 767 4176 o email: hannelore.hammerle@cern.ch
 5. Para obtener más información sobre DIANE (Distributed Analysis Environment – Entorno de Análisis Distribuido) por favor consulte: <http://cern.ch/diane/>
 6. Para obtener más información sobre el Laboratorio de Física Corpuscular de Clermont-Ferrand del CNRS/IN2P3, por favor consulte <http://clrwww.in2p3.fr/>
 7. Para obtener más información sobre el Centro de Investigación Genómica de la Academia Sinica de Taiwan, por favor consulte <http://www.genomics.sinica.edu.tw/>
 8. Para obtener más información sobre el equipo de Grid de la Academia Sinica (Academia Sinica Grid Computing Team, ASGC) de Taiwan, por favor consulte <http://www.twgrid.org/>
 9. Para obtener más información sobre el Instituto de Tecnologías Biomédicas del CNR de Italia, por favor consulte <http://www.itb.cnr.it/>
 10. Para obtener más información sobre AuverGrid, por favor consulte <http://www.auvergrid.fr/>
 11. Para obtener más información sobre EMBRACE, por favor consulte <http://www.embracegrid.info>
 12. Para obtener más información sobre el proyecto BioinfoGrid, de Aplicaciones de Grid Bioinformática para Ciencias de la Vida, por favor consulte <http://www.itb.cnr.it/bioinfogrid>