

4 Mayıs 2006, 18:00 CCT (10:00 GMT, 12:00 MEST) 'e kadar yayını yasaktır.

## EGEE GRID KUŞ GRİBİNE SALDIRIYOR

Nisan ayı boyunca, Asya ve Avrupa laboratuvarları işbirliği, EGEE Grid altyapısını kullanarak kuş gribi virüsü H5N1'e karşı 300,000 olası ilaç bileşenini analiz etti. Amaç, N1 tipi kuş gribi virüsünün yüzeyindeki, neuraminidase adlı enzimin faaliyetlerine engel olabilen potansiyel bileşenlerin bulunmasıydı. Biyolojik testler için en çok gelecek vaat eden yol göstericilerin tanımlanması amacıyla Grid' in kullanılması kuş gribi virüsüne karşı ilaçların geliştirilmesi sürecini hızlandırabilirdi.

Günümüzdeki mevcut ilaçların hedeflerinden birisi virüsün hızla çoğalmasına ve daha fazla hücreye bulaşmasına yardımcı olan bir viral neuraminidase enzimidir. Bilindiği gibi bu protein ilaç stresi altında farklı değişkinlere dönüşebilmektedir ve bu direnç evrensel kuş gribi salgını durumunda başlıca endişe odağı haline gelmektedir

*In silico* ilacının keşfedilmesi uygulamalarındaki güçlük, virüsün aktif bölgelerine ulaşarak onun faaliyetlerini engelleyebilecek moleküllerin teşhis edilmesidir. Küçük ölçekli genetik değişimlerin ilaç direnci üzerindeki etkisini incelemek amacıyla, aynı fakat birbirleri arasında çok az farklılıklar bulunan çeşitli yapılara sahip neuraminidase hedefine karşı geniş bir bileşenler kümesi gözlemlenmiştir. *In silico* gözlemlerinden elde edilen sonuçlarla, araştırmacılar genetik değişim durumunda aktif neuraminidaseleri engellemede en etkili olacak bileşenleri ve kimyasal parçacıkları tahmin edebilirler.

İlacın keşfedilmesi süreci EGEE ve ilişkili hesaplama Grid altyapılarının kullanılmasıyla büyük ölçüde hızlandırılmış durumdadır. 8 farklı Grip A neuraminidaseleri hedef yapısına karşı 300,000 bileşenin havuza sokulması amacıyla Nisan'da 4 hafta boyunca 2000 bilgisayar kullanıldı ki bu tek bir bilgisayarda 100 yıla eşittir. 600 Gigabytes işlem hacmine sahip 60000'den fazla çıktı dosyası yaratıldı ve bunlar ilişkisel veritabanında saklandı. Kuş gribine karşı potansiyel ilaç bileşenleri şu anda teşhis edilmekte ve havuza alınan modellerin bağlayıcı enerjilerine göre sıralanmaktadır.

Academia Sinica' nın Taipei'daki Genomics Araştırma Merkezi' nde bir biyolog olan Ying-Ta Wu şöyle söylemiştir: “ Grid' in yüksek hızda hesaplama ve çok sayıda veri yönetimi olanaklarının yardımıyla, olası ilaç bileşenleri mevcut bilgisayarlı modelleme uygulamalarıyla çok çabuk gözlemlenebilmekte ve incelenebilmektedir.” Bu tıbbi kimyagerlerin zamanlarını ani, büyük ölçekli tehditlere karşı daha iyi cevap verebilmeleri için serbest bırakmaktadır. Ayrıca, laboratuvarındaki biyolojik çözümleme örneklerimizi en çok gelecek vaat eden bileşenler üzerine yoğunlaştırabiliriz.

Bilgi, toplum ve medyadan sorumlu Avrupa Komisyonu üyesi Viviane Reding şöyle söyledi: “ Bu sonuçlarla, Grid yeni araştırma olanakları açarak ve mevcut metodları geliştirerek bilim adamları için güçlü ve güvenilir bir kaynak olduğunu göstermiştir. Avrupa Grid altyapısının, kuş gribi gibi güncel ve sosyal açıdan önemli problemlerin çözümüne katkıda bulunduğunu görmekten çok minnettarım.”

Grid, sıtma hakkında elde edilen önceki verilerden yararlanarak, *in silico* sürecinin bir aydan kısa bir sürede üç farklı grid altyapısında(AuverGrid, EGEE, ve TWGrid) uygulanmasını sağladı ve bu büyük ölçekli sanal ilaç gözlemleme hizmeti için bir yol açtı. Hesaplamanın çoğu WISDOM platformunda yapılmaktadır ve bu mücadelede buna ek olarak DIANE denilen bir hafif ağırlıklı uygulama çerçevesi kabul edildi. DIANE, hesaplama kaynaklarının verimli entegrasyonu ve kullanımını sağlamak için toplam faaliyetin büyük bir kısmını gerçekleştirmek için kullanıldı. İhmal edilen hastalıkların çeşitli hedeflerine karşı bir sonraki WISDOM verisi mücadelesi 2006 sonbaharında gerçekleşecek.

Kuş gribine karşı bu ilaç keşiflerinin uygulanması stratejisi Genomics Research Center, Academia Sinica, Tayvan; Academia Sinica Grid Computing Team, Tayvan; Corpuscular Physics Laboratory of Clermont-Ferrand, CNRS/IN2P3, Fransa; EGEE projesinin, Auvergne'deki bölgesel grid olan AuverGrid'in ve TWGrid'in işbirliği ile Institute for Biomedical Technologies, CNR, İtalya tarafından birlikte tertiplenmiştir. Bu iş EMBRACE ağının ve BioInfoGrid projesinin işbirliği ile gerçekleştirildi.

#### Yayımcılar için notlar:

1. Yeni ilaçların geliştirilmesini hızlandırmak ve maliyetleri düşürmek için, araştırmacılar *in silico* algoritmasını kullanırlar ve potansiyel ilacın hedef proteine etki etme olasılığını hesaplarlar. *In silico* ilaç gözlemlemesi laboratuvarlardaki verimsiz deneme-yanılma uygulamalarını minimize ederek yeni ve kuvvetli inhibitörlerin keşfini hızlandırabilir.
2. Kuş gribi virüsüne karşı ilaç keşif uygulamaları hakkında daha fazla bilgi için lütfen İrtibata geçiniz: Ying-Ta Wu (GRC, Academia Sinica), email: [ywu@gate.sinica.edu.tw](mailto:ywu@gate.sinica.edu.tw)
3. WISDOM (wide *in silico* docking against malaria) hakkında daha fazla bilgi için lütfen <http://wisdom.eu-eggee.fr/> sitesini ziyaret ediniz ya da Nicolas Jacq (CNRS/IN2P3), email: [jacq@clermont.in2p3.fr](mailto:jacq@clermont.in2p3.fr) ile irtibata geçiniz.
4. Enabling Grids for E-science (EGEE) projesi hakkında daha fazla bilgi için lütfen <http://www.eu-eggee.org/> sitesini ziyaret ediniz ya da Hannelore Hammerle (CERN), EGEE External Relations Officer, telefon: +41 22 767 4176 ya da email: [hannelore.hammerle@cern.ch](mailto:hannelore.hammerle@cern.ch) ile irtibata geçiniz.
5. DIANE (Distributed Analysis Environment) hakkında daha fazla bilgi için lütfen bakınız: <http://cern.ch/diane/>
6. Corpuscular Physics Laboratory of Clermont-Ferrand, CNRS/IN2P3 hakkında daha fazla bilgi için lütfen bakınız: <http://clrwww.in2p3.fr/>
7. Genomics Research Center of Academia Sinica, Tayvan hakkında daha fazla bilgi için lütfen bakınız: <http://www.genomics.sinica.edu.tw/>
8. Academia Sinica Grid Computing Team (ASGC), Tayvan hakkında daha fazla bilgi için lütfen bakınız: <http://www.twgrid.org/>
9. Institute for Biomedical Technologies, CNR, İtalya hakkında daha fazla bilgi için lütfen bakınız: <http://www.itb.cnr.it/>
10. AuverGrid hakkında daha fazla bilgi için lütfen bakınız: <http://www.auvergrid.fr/>
11. EMBRACE, hakkında daha fazla bilgi için lütfen bakınız: <http://www.embracegrid.info>
12. Canlı organizmalar bilim dalı projesi için bir uygulama olan Bioinformatics Grid (BioInfoGRID) hakkında daha fazla bilgi için lütfen bakınız: <http://www.itb.cnr.it/bioinfogrid>

TUBITAK-ULAKBİM