

Requisito fino al 4 maggio 2006, 18:00 CCT(10:00 GMT, 12:00 MEST)

INFLUENZA AVIARIA

In aprile, una collaborazione dei laboratori asiatici ed europei ha analizzato 300.000 componenti medici possibili contro il virus dell'influenza aviaria H5N1 utilizzando l'infrastruttura Grid EGEE. Lo scopo era quello di trovare componenti potenziali che potessero inibire l'attività di un enzima in apparenza del virus dell'influenza aviaria, il così chiamato neuraminidase, sottotipo N1.

Usando la Grid al fine di identificare i più promettenti esempi per i test biologici si è potuto accelerare ulteriormente il processo di sviluppo per i farmaci contro l'influenza aviaria.

Uno dei target dei farmaci esistenti oggi nel mercato è il neuraminidase, un'enzima che aiuta il virus a proliferare ed infettare più cellule. Questa proteina è conosciuta per svilupparsi in varianti se è posta sotto stress farmaceutico, la resistenza farmaceutica diventa un potenziale riferimento in caso di una pandemia influenzale.

La sfida nella scoperta delle applicazioni *in silico* è di identificare queste molecole le quali possono avere un procedimento di docking molecolare sulle parti attive del virus in modo da inibire la sua azione. Per studiare l'impatto della mutazione in piccola scala sulla resistenza del farmaco, una grande varietà di componenti è stata protetta contro lo stesso neuraminidase ma con differenti strutture. Con i risultati ottenuti dallo screening *in silico*, i ricercatori possono predire quali componenti o frammenti chimici hanno più effetto per bloccare l'attività del neuraminidase in caso di mutazioni.

Il processo di scoperta del farmaco sta grandemente accelerando grazie all'utilizzo di EGEE associato all'infrastruttura di Grid. Per il docking di 300.000 componenti a fronte di 8 differenti strutture di influenza sono stati usati 2000 computer durante le 4 settimane di aprile - l'equivalente di 100 anni per un singolo computer. Più di 60 000 file di uscita con una grandezza di 600 GB sono stati creati così velocemente ed immagazzinati in un database relazionale. Componenti farmaceutici potenziali contro l'influenza aviaria adesso sono stati identificati e classificati in accordo alle energie di legame dei modelli.

“Con l'aiuto del computing ad alta velocità e dell'enorme capacità di storage della Grid, i componenti farmaceutici possono essere monitorati e studiati in modo rapido grazie alle applicazioni disponibili” ha detto Ying-Ta Wu, biologo al centro di ricerca Genomica dell'Accademia Sinica”. Questo libererà il tempo necessario ai chimici farmaceutici per migliorare le reazioni all'istante, trattamenti su larga scala. Inoltre possiamo concentrare i nostri campioni biologici in laboratorio nei più promettenti componenti, dai quali ci aspettiamo di avere un grande impatto.”

Prendendo vantaggio dall'esperienza acquisita con la precedente sfida alla malaria, la grid-enabled nel processo *in silicio* è stata implementata in meno di un mese in tre diverse infrastrutture grid: AuverGrid, EGEE e TWGrid, spianando la strada per uno screening virtuale dei componenti su larga scala. La prossima sfida WISDOM contro i tanti obiettivi delle malattie trascurate prenderanno spazio nell'autunno 2006.

Questa applicazione contro il virus dell'influenza aviaria è stato congiuntamente impiegato dal Centro di Ricerca Gnomica, Accademia Sinica, Taiwan; Il team della Grid dell'accademia Sinica, Taiwan; Il laboratorio di fisica corpuscolare di Clermont-Ferrand, CNRS/IN2P3, Francia; Istituto per le tecnologie biomediche, CNR, Italia, in collaborazione con il progetto EGEE; La grid regionale AuverGrid in Auvergne e il TWGrid. Questo lavoro prende spazio in collaborazione con il network di eccellenza EMBRACE ed il progetto BioInfoGrid.

Note :

1. Per velocizzare e ridurre i costi di sviluppo di nuovi farmaci, i ricercatori usano gli algoritmi del docking *in silicio* per elaborare la probabilità che potenziali componenti possano dock con un target di proteine. Lo screening del silicio può piuttosto accelerare la scoperta di un potente inibitore per minimizzare la non-produttiva sperimentazione in laboratorio.
2. Per ulteriori informazioni sull'applicazione di scoperte di farmaci contro il virus dell'influenza aviaria, contatta Ying-Ta Wu (GRC, Accademia Sinica), email: ywu@gate.sinica.edu.tw
3. Per ulteriori informazioni riguardo a WISDOM visita: <http://wisdom.eu-egee.fr/> o contatta Nicolas Jacq (CNRS/IN2P3), email: jacq@clermont.in2p3.fr.
4. Per ulteriori informazioni sul Enabling Grids per E-science (EGEE) progetto guarda <http://www.eu-egee.org/> or contatta Hannelore Hammerle (CERN), EGEE Funzionario Relazioni Esterne, telefono: +41 22 767 4176 o email: hannelore.hammerle@cern.ch
5. Per ulteriori informazioni sul Laboratorio di Fisica Corpuscolare di Clermont-Ferrand, CNRS/IN2P3 guarda <http://clrwww.in2p3.fr/>
6. Per ulteriori informazioni sul Centro di Ricerca Genomica dell'Accademia Sinica, Taiwan, guarda <http://www.genomics.sinica.edu.tw/>
7. Per ulteriori informazioni sull'Accademia Sinica Grid Computing Team (ASGC), Taiwan, guarda <http://www.twgrid.org/>
8. Per ulteriori informazioni sull'Istituto di Tecnologie Biomediche, CNR, Italia, guarda <http://www.itb.cnr.it/>
9. Per ulteriori informazioni su AuverGrid visita <http://www.auvergrid.fr/>
10. Per ulteriori informazioni su EMBRACE, visita <http://www.embracegrid.info>
11. Per ulteriori informazioni sull'applicazione grid Bioinformatica per la vita della scienza (BioInfoGRID), visita <http://www.itb.cnr.it/bioinfogrid>