

EGEE 'BOOSTE' LA RECHERCHE DE MÉDICAMENTS ANTI-MALARIA

L'application « Drug Discovery » actuellement déployée dans le service de production du projet d'infrastructure de grille EGEE (Enabling Grids for E-SciencE) a pour finalité la découverte de nouveaux médicaments qui combattent la malaria, une maladie qui chaque année tue un million de personnes et atteint 300 millions de nouvelles personnes. Le nombre de victimes de la malaria a augmenté dans de nombreuses régions du monde, principalement en raison de la résistance développée par la maladie au remède le plus répandu (la chloroquine), devenu dès lors inactif, et parce que le moustique *Anopheles* porteur de la malaria devient lui aussi de plus en plus résistant aux insecticides classiques. La recherche en biologie moléculaire a permis d'identifier des protéines du parasite de la malaria qui sont des cibles potentielles pour de futurs médicaments.

L'application « Drug Discovery », dans laquelle des scientifiques effectuent des amarrages moléculaires (ou docking) *in silico* (c'est-à-dire par ordinateurs), est déployée dans le service de production d'EGEE depuis décembre 2004. Ces amarrages moléculaires *in silico* permettent aux chercheurs d'estimer la probabilité que des médicaments potentiels viennent se lier à une protéine cible – dans notre cas particulier, au site actif de l'une des protéines du parasite de la malaria. Sur un unique ordinateur, une telle étude comportant 100 000 médicaments potentiels nécessite normalement 6 mois de calcul, mais sur la grille d'EGEE elle a été réalisée en seulement deux jours. La prochaine étape est l'amélioration des performances de l'application dans le but d'évaluer des millions de médicaments potentiels en seulement quelques semaines – objectif tout à fait réalisable sur la grille d'EGEE. En avançant à ce rythme, les chercheurs espèrent faire un véritable pas en avant dans la recherche d'un nouveau médicament qui permettra de traiter cette maladie largement répandue, affectant des millions de gens chaque année.

L'application est actuellement utilisée par le SCAI (Institute for Algorithms and Scientific Computing) en Allemagne et le Laboratoire de physique corpusculaire de Clermont-Ferrand en France. Mais elle pourrait aussi potentiellement être utilisée par d'autres instituts afin de trouver des traitements contre des maladies telles que la fièvre de dengue.

Le Docteur Martin Hofmann, responsable de l'application « Drug Discovery » au SCAI, a déclaré : « Sans la grille, d'aussi vastes études seraient onéreuses et très longues. La grille permet aux biologistes et chimistes de concentrer leur travail expérimental sur les médicaments potentiels les plus prometteurs, réduisant ainsi le temps requis pour développer des médicaments contre la malaria et d'autres maladies. » Et Martin Hofmann d'ajouter : « La grille pourrait être le catalyseur du développement de médicaments qui permettra de réunir les différents acteurs – biochimistes, médecins et chimistes informaticiens - et les poussera dans la même direction. »

Le projet EGEE a développé une infrastructure internationale de grille de calcul fournissant aux scientifiques un accès aux principales ressources informatiques mondiales. Aujourd'hui, le projet EGEE a développé un large portefeuille d'applications concernant de nombreux secteurs industriels et académiques, incluant la physique des hautes énergies, les sciences de la

vie, les sciences de la terre, l'astrophysique et la chimie informatique. Actuellement, on compte plus de 20 applications déployées dans EGEE.

-FIN-

Notes :

1. Le procédé de découverte et de développement d'un médicament est aujourd'hui long et cher. Seulement un composé sur 10 000 atteindra le stade de la mise sur le marché, et commercialiser un seul médicament nécessite parfois plus de 15 années pour un coût d'environ 800 millions de dollars. Le challenge pour l'application « Drug Discovery » est de réussir à réduire les coûts de développement, diminuer le temps conduisant à la mise sur le marché, et accroître la probabilité de succès des pistes les plus prometteuses.
2. L'amarrage moléculaire est la première étape de la modélisation *in silico* de médicaments. Estimer l'amarrage moléculaire revient à calculer l'énergie de liaison entre une protéine cible et un panel de médicaments potentiels en utilisant un algorithme de calcul. La cible est typiquement une protéine qui joue un rôle essentiel dans un processus pathologique, par exemple dans les cycles biologiques d'un pathogène donné (parasite, virus ou bactérie). L'objectif est d'identifier quelles molécules pourraient se lier aux sites actifs de la protéine cible, dans le but d'annihiler son action et donc d'interférer avec les processus moléculaires essentiels pour le pathogène.
3. Le projet Enabling Grids for E-sciencE (EGEE) est financé par la Commission Européenne. Le projet a pour objectif de fournir aux chercheurs issus d'académies ou d'industries un accès aux principales ressources informatiques, indépendamment de leur situation géographique. Pour plus d'informations, voir <http://public.eu-egee.org/>
4. Pour obtenir des informations supplémentaires sur le projet EGEE, contacter Joanne Barnett, EGEE External Relations Officer, tel : +31 20 530 4488, email : barnett@terena.nl
5. Pour obtenir des informations supplémentaires sur les applications déployées dans EGEE, contacter Vincent Breton, Responsable du groupe des Applications d'EGEE, tel : +33 4 73 40 72 19, email : breton@clermont.in2p3.fr
6. Pour plus d'informations concernant l'application « Drug Discovery », contacter Martin Hofmann, tel : +49 2241 14 2802, email : martin.hofmann@scai.fhg.de

18/05/05