

EGEE beschleunigt Jagd nach neuer Malaria-Medizin

Die Entwicklung neuer Wirkstoffe zur Bekämpfung der Malaria ist das Ziel einer Anwendung aus dem Bereich der Arzneimittelforschung, die innerhalb des Enabling Grids for E-science (EGEE)-Produktionsservices betrieben wird.

Jährlich sterben eine Million Menschen an Malaria, mehr als 300 Millionen werden infiziert. Die Anzahl der Malariafälle und Todesopfer stieg in vielen Teilen der Welt, weil der meistgebrauchte Wirkstoff Chloroquine nutzlos wurde: die Erreger sind inzwischen resistent. Dazu kommt, dass auch die Anopheles-Mücke - sie ist eine Malaria-Überträgerin - gegen herkömmliche Insektizide resistent wurde. Durch molekularbiologische Forschungen konnten nun parasitäre Proteine nachgewiesen werden, die sich möglicherweise durch neue Wirkstoffe blockieren lassen. Dies weckt die Hoffnung auf die Entwicklung neuer Arzneimittel.

Die Rechneranwendung für den Bereich Arzneimittelforschung, mit der Wissenschaftler die Interaktion möglicher, potenzieller Wirkstoffmoleküle mit Zielproteinen simulieren, läuft seit Dezember 2004 auf dem EGEE Grid. Mit 'in silico' Docking errechnen die Forscher die Wahrscheinlichkeit, dass der potentielle Wirkstoff am Zielprotein andockt - in diesem speziellen Fall soll sich der neue Wirkstoff mit dem aktiven Zentrum des Proteins des Malariaerregers verbinden. Auf einem einzelnen Computer würde eine solche Studie mit 100.000 möglichen Wirkstoffen normalerweise mindestens sechs Monate dauern - durch EGEE wurde diese Arbeit in nur zwei Tagen geleistet. Im nächsten Schritt soll der Durchsatz der Anwendung verbessert werden und einige Millionen von Wirkstoffen in einigen wenigen Wochen durchgerechnet werden. Die Forscher erhoffen sich damit einen bedeutenden Fortschritt zur Behandlung dieser weitverbreiteten Krankheit, die jährlich Millionen von Menschen betrifft.

Zurzeit arbeiten die bioinformatische Abteilung sowie die Abteilung für Simulationsanwendungen des Fraunhofer-Instituts für Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen (SCAI), St. Augustin, und das französische Corpuscular Physics Laboratory, Clermont-Ferrand, mit dieser Anwendung. Sie kann jedoch auch von anderen Instituten genutzt werden, die die Behandlung von Krankheiten wie z.B. dem Dengue-Fieber erforschen.

Dr. Martin Hofmann, Supervisor der Arzneimittelforschungsanwendung: "Ohne das Grid wären solch großdimensionierte Studien sehr teuer und zeitraubend. Das Grid erlaubt es Biologen und Chemikern, sich bei ihrer experimentellen Arbeit auf die erfolgversprechendsten Wirkstoffe gegen Malaria oder andere Krankheiten zu konzentrieren." Martin Hofmann ergänzt: "Das Grid kann als Katalysator in der Arzneimittelentwicklung wirken. Es bringt die Akteure - Biochemiker, Physiker, Chemie-Computerspezialisten - zusammen und motiviert sie durch eine gemeinsame Zielrichtung."

Das EGEE-Projekt entwickelt eine internationale Computer-Grid-Infrastruktur, die Wissenschaftlern den Zugang zu wichtigen weltweiten Rechnerressourcen bietet. Bis heute hat das EGEE-Projekt ein breites Portfolio von Angeboten etabliert, die ein großes Gebiet im industriellen und wissenschaftlichen Bereich abdecken, z.B. Hochenergie-Physik, Bio- und Geowissenschaften, Astrophysik und computerbasierte Chemie. Zurzeit laufen über 20 verschiedene Anwendungen auf EGEE.

RB/23/05/05

Hinweise an die Redaktion:

1. Gegenwärtig ist der Prozess der Arzneimittelforschung und -entwicklung langwierig und teuer. Nur eine von 10.000 Möglichkeiten eignet sich zum Einsatz und es bedarf bis zu 15 Jahren und über 800 Million Euro, ein einziges Medikament auf den Markt zu bringen. Die Aufgabe der Arzneimittelforschungsanwendung ist es, die Kosten der Produktentwicklung zu reduzieren, die Zeit bis zur Marktreife zu verkürzen und die Erfolgchancen zu steigern.
2. Docking ist der erste Schritt zum 'in silico' Wirkstoffdesign. Im Wesentlichen gleicht das Docking die Bindungsenergie eines bestimmten Proteins mit einer Datenbank potentieller Wirkstoffe mit Hilfe eines Algorithmus ab. Betrachtet wird typischerweise ein Protein, das eine lebenswichtige Rolle in einem pathologischen Prozess spielt, z.B. im biologischen Kreislauf eines vorgegebenen Erregers (Parasit, Virus, Bakterie). Das Ziel ist die Identifizierung eines Moleküls, das an der aktiven Seite des Proteins andocken kann. Es legt die Aktivität des Proteins lahm und behindert damit den für den Erreger lebenswichtigen molekularen Prozess.
3. Das Enabling Grids for E-sciencE (EGEE) Projekt wird durch die Europäische Kommission gefördert. Das Projekt stellt Forschern aus Wissenschaft und Industrie den Zugang zu bedeutenden Rechnerressourcen zur Verfügung, unabhängig ihrer geographischen Lage. Weitere Informationen finden Sie unter <http://public.eu-egee.org/>
4. Für weitere Informationen zu den Anwendungen, die auf EGEE laufen, wenden Sie sich bitte an: Vincent Breton, EGEE Anwendungs-Manager, Tel: +33 4 73 40 72 19 oder email Breton@clermont.in2p3.fr
5. Für weitere Informationen über die Arzneimittelforschungsanwendung wenden Sie sich bitte an Martin Hofmann, Tel: +49 2241 14 2802 oder email martin.hofmann@scai.fhg.de
6. Für weitere Informationen zu EGEE wenden Sie sich in Deutschland bitte an Dr. Rüdiger Berlich, EGEE Pressebüro Deutschland, Tel: +49 7247 82 5678 oder email press@eu-egee.de .

In Österreich wenden Sie sich für weitere Informationen zu EGEE bitte an ao.Univ.Prof.Dr. Dieter Kranzlmüller, Institut für Graphische und Parallele Datenverarbeitung (GUP), Johannes Kepler Universität Linz, Altenbergerstrasse 69, A-4040 Linz, Tel: +43 732 24 68 94 99 oder email egee-na2@gup.jku.at