



Az EGEE felveszi a harcot a maláriával

2005. július 11. és augusztus 19. között futott le az első sikeres orvosbiológiai kutatás az EGEE (Enabling Grids for E-sciencE) projekt Grid infrastruktúráján. A WISDOM (Wide In Silico Docking On Malaria) alkalmazás segítségével 46 millió olyan különböző vegyületet vizsgáltak meg, melyek potenciálisan felhasználhatók a malária ellen. Az ilyen számítógépes algoritmusokat általában hagyományos klasztereken futtatják, amelyekkel kb. 100 ezer kötést tudnak megvizsgálni. A jelenleg elvégzett számítás egy egyszerű PC-n 80 évig tartott volna, azonban a Grid infrastruktúrájának köszönhetően – melyben 1000 számítógép dolgozott egyszerre 15 különböző országban – alig több mint egy hónap alatt eredmény született.

Ez a gyógyszerkutatói alkalmazást a németországi Fraunhofer Institute for Algorithms and Scientific Computing (SCAI), valamint a franciaországi Corpuscular Physics Laboratory (IN2P3) of Clermont-Ferrand kezdeményezte és valósította meg. Az EGEE infrastruktúráján már 2004 decembere óta futtatható ez az alkalmazás, mely lehetővé teszi a kutatók számára, hogy kiszámolják annak a valószínűségét, hogy az egyes gyógyszerek milyen kötéseket létesítenek az adott fehérjével. A molekulakapcsolatok számítógépes keresése egyike a legígértesebb újításoknak az új gyógyszerek kifejlesztésének gyorsításában és a kutatás költségeinek csökkentésében, olyan betegségeknél, mint például a malária. A WISDOM számítási feladatai megmutatták, hogyan segíthet a Grid felgyorsítani az egész gyógyszerkutatói folyamatot. A nagy mennyiségű adat keletkezése igazolja a Grid számítás potenciális előnyeit a gyógyszerkutatásban, s egyéb élettan-kutatási területeken.

Az EGEE segítségével végrehajtott orvosbiológiai kutatási kísérlet egy nagy lépés egy teljes számítógépes gyógyszerkutatói platform felé, amely képes új gyógyszerek felkutatására a malária ellen. A kísérlet rámutatott, hogy a Grid képes támogatni azokat az alkalmazásokat, melyek hatalmas mennyiségű adatot generálnak, akár fájlok millióit is.

Dr. Martin Hofmann, az SCAI-tól (Society for Cardiovascular Angiography and Interventions) a következőket mondta: „A kísérlet megmutatta, hogy képesek vagyunk jelentős számú kötést megvizsgálni az EGEE Grid infrastruktúrája, valamint a projekt orvosbiológiai kutatóinak és intézményeinek lelkes és elkötelezett munkája révén. A következő lépés, hogy analizáljuk azt a nagy mennyiségű adatot, melyet a kísérlet eredményezett, s amely feldolgozása komoly adatbányászati munkát igényel majd.”

Az alkalmazás fejlesztésének következő lépéseit a különböző betegségek potenciális gyógyszereinek eme nagy adathalmazból történő kiválogatása, valamint a virtuális és valós világbeli gyógyszerkutatás közötti lyuk csökkentése alkotja.

“Már létrehoztunk egy konzorciumot, mely “in silico” kutatókból és ezen területen tapasztalattal rendelkező gyógyszerészeti laboratóriumokból áll, továbbá tervezünk kémiai szintetizálni és tesztelni legalább néhány virtuálisan felfedezett lehetséges gyógyszert. Ez jelentős számú ténylegesen lehetséges gyógyszert eredményezhet, melyek később igaz gyógyászati készítményekben fejleszthetők tovább. Ezek nagyon érdekes idők a gyógyszerkutatásban” tette hozzá Dr. Martin Hofmann.

Ezt a gyógyszerkutatói alkalmazást azért fejlesztették ki, hogy növeljék a lehetőségét a gyógyszeripari vállalatok és az akadémiai kutató intézetek közötti együttműködésnek, teret

adva változatos, komplex és elosztott információk megosztására egy adott betegség esetén, a közös felfedezés és haszon céljából. Ez hozzájárul ahhoz is, hogy a gyógyszer- és vegyszergyárak olcsóbb gyógyszereket, rovarölőszereket gyártsanak, és így olyan betegségeket kezeljenek, melyek a harmadik világ fejlődését érintik.

Az EGEE projekt olyan nemzetközi Grid infrastruktúrát hozott létre, mely a kutatók számára biztosítja egy hatalmas számítási erőforráshoz való hozzáférést szerte a világon. Napjainkig az EGEE projekt különböző alkalmazások széles skáláját fejlesztette ki, melyek olyan ipari és akadémiai területeket ölelnek fel, mint például nagy erejű részecskefizika, élettani kutatások, Astroparticle Physics, és Computational Chemistry. Jelenleg több, mint 20 különböző alkalmazás fut az EGEE infrastruktúráján.

A WISDOM adatkihívás partnerei: IN2P3-LPC, CNRS, IN2P3, SCAI, ACCAMBA és AUVERGRID projektek. A következő intézmények számítási erőforrásokat osztották meg: ASCC (Taipei); IPP-BAS, IMBM-BAS and IPP-ISTF (Bulgária); CYFRONET (Lengyelország); ICI (Románia); CEA-DAPNIA, CGG, IN2P3-CC, IN2P3-LAL, IN2P3-LAPP and IN2P3-LPC (Franciaország); SCAI (Németország); INFN (Olaszország); NIKHEF, SARA and Virtual Laboratory for e-Science (Hollandia); PSN (Oroszország); UCY (Ciprus); AUTH FORTH-ICS and HELLASGRID (Görögország); RBI (Magyarország); TAU (Izrael); CESGA, CIEMAT, CNB-UAM, IFCA, INTA, PIC and UPV-GryCAP (Spanyolország); BHAM, University of Bristol, IC, Lancaster University, MANHEP, University of Oxford, RAL and University of Glasgow (Nagy-Britannia).

Ends-

JB 25/08/05

Note to Editors:

1. A DRUG DISCOVERY alkalmazással kapcsolatos további információkért, és sajtó hírekért látogassa meg: <http://public.eu-egee.org/pr/> . Jelenleg a gyógyszerkutatás folyamata nagyon költséges. Csak minden tízezredik készítmény jut el a piacig, s akár 15 évbe s 800 millió dollárba is belekerülhet, hogy kereskedelmi forgalomba kerüljön. A DRUG DISCOVERY alkalmazás célja, hogy csökkentse a fejlesztési költségeket, piacra jutási időt, és növelje az ígéretesebb kutatások sikerességének valószínűségét.
2. Az EGEE projekt az Európai Bizottság által támogatott projekt. A projekt célja az akadémiai és ipari kutatók hozzáférjenek egy Grid alapú hatalmas számítási erőforráshoz, függetlenül tartózkodási helyüktől. Az EGEE-vel kapcsolatos további információkért látogassa meg a következő oldalt: <http://public.eu-egee.org>
3. A ligandum definíciója ebben a környezetben: egy molekula, mint antitest, hormon, vagy gyógyszer, amely egy receptorhoz kötődik.
4. Az EGEE-vel kapcsolatos további információkért forduljon a következő személyhez: Joanne Barnett, EGEE External Relations Officer, telefonszám: +31 (0)20 530 4488 vagy email: Barnett@terena.nl ;
5. A WISDOM-mal, vagy más EGEE alkalmazással kapcsolatos további információkért forduljon a következő személyhez: Vincent Breton, EGEE Applications Manager, telefonszám: +33 4 73 40 72 19 vagy email: Breton@clermont.in2p3.fr .