

ГРИД EGEE БОРЕТСЯ С МАЛЯРИЕЙ: ПРОГРАММА WISDOM

Первый в области биомедицины сеанс массовой обработки данных по открытию новых лекарств, проведенный на производственном гриде проекта EGEE с 11 июля 2005 до 19 августа 2005, признан успешным. В этом сеансе, названном WISDOM (*Wide In Silico Docking On Malaria*), исследовано свыше 46 миллионов посадочных лиганд – на одном персональном компьютере для этого потребовалось бы 80 лет. Обычно посадка *in silico* выполняется на классическом вычислительном кластере и ограничивается примерно 100 000 посадочными лигандами. Решить научную проблему такого рода было бы невозможно без грида – в сеансе одновременно использовалось 1000 вычислительных машин в 15 странах по всему миру.

Приложение Drug Discovery (поиск лекарств), предназначенное для ученых, которые используют посадку *in silico*, было инициировано и реализовано Институтом алгоритмов и научных вычислений им. Фраунгофера SCAI (Fraunhofer Institute for Algorithms and Scientific Computing) в Германии и Лабораторией корпускулярной физики в Клермон-Ферране, Франция (IN2P3). Приложение было поставлено на производственный грид EGEE в декабре 2004 года. Посадка *in silico* позволяет исследователям вычислять вероятность того, что предполагаемое лекарство соединится с целевым белком. Этот метод является одним из самых многообещающих подходов к ускорению процесса разработки (и уменьшению стоимости) новых лекарств для лечения таких заболеваний, как малярия. Успех программы WISDOM продемонстрировал, какую помощь может оказать грид-компьютинг в исследованиях по поиску лекарств, значительно ускоряя весь процесс разработки. Даже само количество полученных новых данных указывает на потенциальные выгоды от применения грид-компьютинга в открытии новых лекарств и, несомненно, в других приложениях, относящихся к науке о живом.

Успех первого биомедицинского сеанса обработки на производственном гриде EGEE является шагом в направлении создания функционально полной платформы для получения новых лекарств *in silico*, с помощью которой будут исследоваться методом посадки новые ингибиторы для целей, имплицированных в малярию. Развертывание приложения, которое генерирует большой поток данных - миллионы файлов, общим объемом в несколько терабайт (один миллион мегабайт, что примерно эквивалентно 1500 CD), – дало возможность успешно протестировать инфраструктуру и службы грида.

Доктор Мартин Хофман, ответственный за приложение Drug Discovery в SCAI, сказал: «Проведенный сеанс показал, что мы способны исследовать посадку впечатляющего количества лиганд только благодаря гриду EGEE и, конечно, заинтересованности и преданности делу медицинских работников, принимавших участие в этом проекте, а также сотрудничеству с нашими партнерами-институтами. Следующим шагом является анализ огромного количества результатов этого эксперимента, который потребует больших усилий по изучению данных.»

Следующие шаги в развитии приложения по поиску новых лекарств включают классификацию большого количества данных, чтобы идентифицировать потенциальные лекарства, используемые в лечении некоторых заболеваний, и сократить разрыв между виртуальным скринингом и традиционной разработкой лекарств.

«Мы уже создали консорциум исследователей *in silico* и фармацевтических лабораторий, имеющих опыт в этой области, и мы планируем химически синтезировать и протестировать по крайней мере некоторые из «виртуальных кандидатов в лекарства», которые мы получили виртуальным скринингом на гриде. Это может привести к появлению значительного числа физических молекул - кандидатов для лекарств, которые в дальнейшем могут быть доведены до уровня реальных терапевтических компонент. Сейчас захватывающее время в мире разработки лекарств» добавил доктор Мартин Хофман.

Приложение Drug Discovery было разработано для того, чтобы увеличить возможности доступа фармацевтических компаний и академических исследовательских институтов к разнообразной, сложной и распределенной информации о болезнях для совместных исследований и взаимной выгоды. Отсюда также вытекает возможное снижение того барьера, который нужно преодолеть, чтобы участвовать в такой важной деятельности, как создание более дешевых лекарств и инсектицидов, внося, тем самым, вклад в борьбу с болезнями, угрожающими развитию третьего мира.

Проект EGEE разработал международную вычислительную инфраструктуру грида, которая обеспечивает ученых доступом к основным вычислительным ресурсам всего мира. К настоящему времени проект EGEE предлагает большой портфель приложений, охватывающий широкую область промышленных и академических секторов, включая физику высоких энергий, науки о живом, науки о Земле, физику космических частиц и вычислительную химию. На гриде EGEE сейчас работает свыше 20 различных приложений.

Партнерами проекта WISDOM являются: IN2P3-LPC, CNRS, IN2P3, SCAI, проекты ACCAMBA и AUVERGRID. Следующие институты предоставили свои ресурсы: ASCC (Тайпей); IPP-BAS, IMBM-BAS и IPP-ISTF (Болгария); CYFRONET (Польша); ICI (Румыния); CEA-DAPNIA, CGG, IN2P3-CC, IN2P3-LAL, IN2P3-LAPP и IN2P3-LPC (Франция); SCAI (Германия); INFN (Италия); NIKHEF и SARA (Нидерланды); PSN (Россия); UCY (Кипр); AUTH FORTH-ICS и HELLASGRID (Греция); RBI (Венгрия); TAU (Израиль); CESGA, CIEMAT, CNB-UAM, IFCA, INTA, PIC и UPV-GryCAP (Испания); BHAM, Университет в Бристоле, IC, Ланкастерский Университет, MANHEP, Университет в Оксфорде, RAL и Университет в Глазго (Объединенное Королевство).

JB 24/08/05

Заметки для издателя:

1. Дополнительную информацию о программе Drug Discovery (поиск лекарств) можно найти в пресс-релизе на сайте <http://public.eu-egee.org/pr/>. Процесс поиска и разработки лекарства в настоящее время долг и дорог. Только одна лекарственная смесь из 10000 находит свой путь к рынку, и может потребоваться до 15 лет и 800 миллионов долларов для того, чтобы одно-единственное лекарство стало коммерчески выгодным. Целью проекта Drug Discovery является сокращение стоимости разработки лекарства, уменьшение времени прохождения пути от производства до рынка и увеличение вероятности успеха для наиболее многообещающих кандидатов.

2. Проект EGEE (Enabling Grids for E-sciencE) финансируется Европейской Комиссией. Целью проекта является обеспечить исследователей в науке и промышленности доступом к основным вычислительным ресурсам независимо от их географического положения. Дополнительную информацию о EGEE можно найти на сайте <http://public.eu-egee.org>.

3. Определение лиганды в нашем контексте: молекула как антитело, гормон или лекарство, которые подсоединяются к рецептору.

4. Самую общую информацию о EGEE можно получить у Joanne Barnett, уполномоченного по внешним связям EGEE, телефон +31 (0)20 530 4488 или email: Barnett@terena.nl;

5. Дополнительную информацию о WISDOM или других работающих в EGEE приложениях можно получить у Vincent Breton, менеджера приложений EGEE, telephone: +33 4 73 40 72 19 или email: Breton@clermont.in2p3.fr.