



**Université Blaise Pascal**

**Service de la communication**

Stéphanie LAMAISON

Tél 04 73 40 62 88

Fax 04 73 40 64 31

**Communiqué de presse du 4 Mai 2006**

**L'Auvergne à la pointe de la lutte contre la grippe aviaire**

**Grâce à l'infrastructure régionale Auvergrid, le Laboratoire de Physique Corpusculaire (LPC), unité mixte de recherche de l'Université Blaise Pascal et du CNRS-IN2P3 a démontré l'impact des nouvelles technologies de l'information pour combattre les maladies émergentes en testant en un mois seulement plus de 300 000 médicaments potentiels pour le traitement de la grippe aviaire dans le cadre d'une collaboration entre laboratoires asiatiques et européens.**

Dans le cadre de la recherche sur les maladies émergentes telles que la grippe aviaire, des nouvelles stratégies pour accélérer la découverte de médicaments sont à l'étude. L'une d'elle repose sur la mesure par ordinateur de la probabilité que des molécules sélectionnées comme médicaments potentiels se lient à une protéine cible, altérant par la même son activité biologique. Cette approche permet de faire gagner du temps et de l'argent aux chimistes et aux biologistes dans la mesure où les calculs sur ordinateur sont moins coûteux et plus faciles à mettre en œuvre que les tests biologiques. Les scientifiques concentrent alors les tests biologiques sur les composés chimiques les plus prometteurs, ceux dont on attend la plus grande efficacité. Par contre, elle demande des ressources de calcul considérables que les grilles informatiques mettent précisément aujourd'hui à la disposition des communautés scientifiques.

Auvergrid, première grille régionale en Europe qui place l'Auvergne parmi les régions françaises les mieux équipées en matière de puissance de calculs scientifiques, a mobilisé plusieurs centaines d'ordinateurs en avril pour trouver les inhibiteurs potentiels de la neuraminidase de sous-type N1, enzyme localisée à la surface du virus H5N1 de la grippe aviaire. La neuraminidase N1 est une enzyme qui aide le virus à proliférer et à infecter d'autres cellules. Elle est la cible des médicaments actuels utilisés pour le traitement de la grippe aviaire. Cependant, cette protéine est connue pour sa capacité à développer des mutations qui affectent l'efficacité des médicaments. Le défi de la recherche de nouveaux médicaments *in silico* est d'identifier les molécules qui peuvent s'accrocher sur les sites actifs des enzymes du virus pour inhiber son action. Pour étudier l'impact de petites mutations sur l'efficacité des médicaments, la probabilité d'accrochage d'une large collection de composés chimiques sur la même neuraminidase a été calculée en faisant seulement varier la structure sur quelques points. Grâce à ces résultats, les chercheurs peuvent prédire quels composés chimiques sont les plus actifs pour bloquer l'action des neuraminidases mutées.

Grâce à l'expérience acquise dans le précédent déploiement de calculs d'accrochage de molécules à grande échelle sur la malaria (cf. communiqué de presse du 23/09/05), le processus de recherche de nouveaux médicaments sur grille a été mis sur pied en moins d'un mois sous la coordination du Laboratoire de Physique Corpusculaire (UMR 6533 CNRS-IN2P3 Université Blaise Pascal) sur trois infrastructures de grille ; le grille européenne EGEE, la grille nationale de Taïwan TWGrid, et la grille régionale Auvergrid en Auvergne. Le calcul des probabilités d'ancrage de 300 000 composés chimiques sélectionnés sur 8 structures différentes de la neuraminidase de sous-type N1 a mobilisé environ 2000 ordinateurs dans le monde entier pour fournir l'équivalent de 100 années de calculs pendant le mois d'avril. Les résultats obtenus ont été stockés au LPC Clermont-Ferrand et à l'Académie des Sciences de Taiwan pour être analysés.

**Contact :**

Vincent Breton – Tél. 04 73 40 72 19 – 06 86 32 57 51

Nicolas Jacq – Tél 04 73 40 53 24 – 06 15 28 85 04

Jean Salzemann – Tél 04 73 40 78 49 – 06 23 93 50 54