مشارکت در پژوهش‌های جسمانی

محاسبات توزیعی

مرجان ویسی‌زاده
دبیر شیمی منطقه ۲ تهران

اشاره

در شـمارهٔ قبل دربارهٔ محاسبات توزیع شده، توضیح دادیم و یکی از این محاسبات را معرفی کردیم. همان‌طور که ذکر شد، از محاسـبات توزیع شده برای حل مسائلی استفاده می‌شود که آن‌قدر پیچیده و بزرگ هسـتند که حل آنها به تعداد بسیار زیادی محاسبه نیاز دارد و این امر خارج از حد توان یک رایانه یا یک فرد در مدت زمانی قابل قبول اسـت. بنابرایـن از توان زمان بی‌کاری CPU رایانه‌های داوطلبان در سراسـر جهان برای انجام این محاسـبات اسـتفاده می‌شود. در این شـماره یکی دیگر از این محاسبات در حوزهٔ زیست‌شناسی و پزشکی معرفی می‌شود.

Rosetta@Home

از جملـه پروژه‌هـای محاسـباتی توزیعی اسـت کـه برای پیش‌گویـی سـاختمان پروتئینـی، بـا اسـتفاده از نرم‌افـزار، «BOINC» و توسـط آزمایشـگاه «Baker» در دانشگاه واشـنگتن در حال انجام اسـت. هدف این پـروژه پیش‌گویی چگونگی درگیری پروتئین بـا پروتئین و طراحی پروتئین‌های جدید با کمک بیش از ۸۱ هزار رایانهٔ داوطلب اسـت. هم‌چنین از طریـق طراحی بازی‌های ویدیویی می‌کوشـد به پیش‌گویی مذکور کمک کند.

پـروژهٔ فـوق پیرامـون تحقیقات مالاریـا، آلزایمر و سـایر بیماری‌های پاتولژیک نیز به‌کار می‌رود. شبیه به سایر پروژه‌های «BOINC» پـروژهٔ Rosetta@Home از رایانه‌هـای داوطلب اسـتفاده می‌کند و هر رایانه به صـورت انفرادی و به عنوان یک «بخش‌کاری»[1] از کل مجموعهٔ محاسـبات، ایفای نقـش می‌کند. نتایج به دسـت آمده از رایانه‌هـای انفرادی به «server» مرکزی فرسـتاده می‌شـود تا صحت و درستی و تجزیه و تحلیل داده‌های پروژه تأیید شود.

افـرادی کـه در ایـن پـروژه مشـارکت دارنـد. می‌توانند میـزان پیشـرفت پـروژه را در «Screen Saver» مربوط بـه پـروژهٔ خـود ببینند. روش‌هـای جدیـد دیگری نیـز ابداع شـده‌اند که در حل مشـکلات کاربردی با اسـتفاده از نرم‌افزار Rosetta @ Home به کمک می‌آیند؛ از آن جمله می‌توان از «Rosetta Dock» و «Rosetta Bar» نام برد.

اهمیت پروژه

با افزایش تعـداد پروژه‌های مربوط به تعیین سـکانس‌های ژنوم‌انسانی، امکان استنتاج نحوهٔ قرارگیری سکانس اسید آمینه و یا ساختار اول بسیاری از پروتئین‌هایی که مسئول عملکردهای متفاوت در سـلول هستند، فراهم شده اسـت. برای فهم بهتر عملکرد پروتئین به منظور طراحی و سـاخت داروهای مناسب، دانشمندان نیازمند دانستن ساختار سه بعدی پروتئین (ساختمان سوم پروتئین) هستند. در حال حاضر، ساختار سه بعدی پروتئین در آزمایشـگاه و با استفاده از روش‌های «کریستالوگرافی اشعهٔ x»[2] و یا «طیف سـنجی رزونانس مغناطیسی هسته»[3] انجام می‌شود. این فرایندها دو اشکال عمده دارند:

اگر علاقه مندید که شما هم رایانه تان را در اختیار دانشمندان قرار دهید ودر پیشرفت علم سهیم شوید، باید وارد شبکه شوید و اعلام آمادگی کنید. که از رایانه تان استفاده شود

اول این‌کــه فرایندهــای آزمایشــگاهی فوق آهســته انجام می‌شوند. به عبارت دیگر، کریستاله شدن پروتئین‌ها، هفته‌ها و گاهی ماه‌ها طول می‌کشد.

دوم این‌کــه قیمت تمام شــده برای انجام فرایند بالاســت. (حدود ۱۰۰هزار دلار به ازای تعیین ساختمان هر پروتئین!)

مســئلهٔ بســیار مهم این که نسبت ســکانس‌های پروتئینی که شــناخته می‌شوند، خیلی خیلی بیشــتر از مقدار تعیین شدهٔ ساختار سوم پروتئین اســت. $\frac{۷،۴۰۰،۰۰۰}{۵۲،۰۰۰}$ یکی از اهداف پروژهٔ Rosetta@Home، پیش‌گویی ساختار پروتئین‌ها با همان وقتی است که در روش‌های آزمایشگاهی کریستالوگرافی اشعهٔ X و طیفی سنجی NMR انجام می‌شود؛ با این تفاوت که در مدتی کوتاه‌تر و با هزینه‌ای کمتر قابل انجام است.

پروژهٔ Rosetta @ Home هم چنین توانســته اســت روش‌هایی را توسعه دهد که توسط آن‌ها می‌توان ساختار و نحوهٔ درگیری پروتئین‌هایی غشایی[۴] را به دست آورد. این کار توسط «NMR» و یا کریستالوگرافی اشعه بسیار مشکل و این امر خود مؤید آن است که این دسته از پروژه‌ها چه نقش ارزشمندی در تولید داروهای جدید برای درمان بیماری‌های صعب العلاج دارند. عــلاوه بر تحقیقــات پایه در پیش‌گویی ســاختار پروتئین، این پروژه در تحقیقات پیرامون بیماری‌هایی که ناشی از اختلال در ساختار پروتئین‌های متفاوت هستند نیز مؤثر است. از جملهٔ این بیماری‌ها می‌توان به بیماری‌هــای آلزایمر، آنتراکس، ویروس تب‌خال، ایدز و مالاریا اشاره‌کرد.

نــام برنامــهٔ کاری«Rosetta»، برگرفتــه از نــام «Rose ttastone» است؛ مردی که تلاش داشت تا مفهوم واقعی ترتیت «ســکانس»های[۵] آمینواســید را در یابد و ارتباط آن را با ســاختار پروتئین پیدا کند. هفت سال بعد از تلاش‌های اولیــه Rostta، پــروژهٔ Rosetta @ Home در ۶ اکتبر سال ۲۰۰۵ شکل گرفت. بسیاری از دانشجویان فارغ‌التحصیل و سایر محققانی که درگیر قسمت‌های اولیهٔ پروژهٔ Rosetta بودند، به سایر دانشگاه‌ها و مؤسسات تحقیقی رفتند و در نتیجه این گونــه بود که بخش‌های گوناگون پــروژهٔ Rosetta در مکان‌های متفاوت شکل گرفت و توسعه یافت.

چطور به پروژه بپیوندیم؟

اگر علاقه مندید که شما هم رایانه تان را در اختیار دانشمندان قرار دهید ودر پیشرفت علم سهیم شوید، باید وارد شبکه شوید و اعلام آمادگی کنید. که از رایانه تان اســتفاده شود. خودشان شــما را وارد شبکه می‌کنند. یک ســری از پروژه‌ها مثل پروژه ایــدز و مالاریا اصطلاحاً پروژه‌های باز هســتند و هر زمانی هر کسی خواست می‌تواند وارد بشود و مشارکت داشته باشد.

پی‌نوشت

1.work unit
2. x - ray cristalography
3. Nuclear Magnetic Resonance (NMR)
4. Membrane Protin Docking
5. Databse