

Biomedicína je hlavní aplikační oblastí projektu EGEE. V této oblasti již bylo nasazeno nebo je sem právě převáděno 23 aplikací. Oblast se dělí na tři podoblasti: zpracování lékařských obrazových materiálů, biomedicína a výzkum léčiv. V každé podoblasti již bylo na bázi infrastruktury EGEE realizováno mnoho jednotlivých aplikací.

Tyto aplikace zatěžují middleware specifickými požadavky, které se týkají především bezpečnosti (citlivost dat), správy dat (komplexní datové struktury a distribuce) a realizace velkého množství náročných malých úloh. Biomedicínské aplikace se již staly pravidelnými uživateli infrastruktury (za měsíc je realizováno zhruba 15 000 úloh) a výpočetně náročná analýza přichytávání molekul („molecular docking“), sloužící k výzkumu nových léků, která by vyžadovala 80 let výpočtů na jednom procesoru, byla vyřešena za jediný měsíc.

Níže naleznete přehled aplikací z oblasti biomedicíny, které právě běží na infrastruktuře EGEE.

Sektor **pořizování a zpracování lékařských obrazových materiálů** zahrnuje počítačovou analýzu digitálních lékařských obrazových materiálů. Patří sem sdílení lékařských dat, výpočetně náročné lékařské procedury, zpracování velkých datových sad a statistické studie u velkých populačních vzorků.

- **GATE** je simulátor fungující na principu Monte Carlo, který umožňuje plánovat radioterapii na základě snímků pacienta. Gridovou infrastrukturu EGEE využívá ke snížení času potřebného k realizaci Monte Carlo simulací na úroveň, která by měla z klinického hlediska smysl.
- Systém **CDSS** (Clinical Decision Support System) využívá obrazovou klasifikaci založenou na odborné znalosti k tomu, aby pomohl při klinických rozhodnutích. Grid je využíván ke shromažďování velkých objemů dat i k efektivnímu učení klasifikačního softwaru na základě těchto rozsáhlých datových vzorků.
- Aplikace **Pharmacokinetics** studuje difúzi kontrastního činidla v játrech pomocí sekvence snímků získaných magnetickou rezonancí. Artefakty způsobené pohybem pacienta znemožňují přímé srovnání snímků. Paralelizované výpočty návaznosti snímků řešené pomocí gridu však dovolují sekvenci analyzovat v rozumném čase.
- **SiMRI3D** je simulace obrazových materiálů získaných magnetickou rezonancí. Slouží k tvorbě umělých, ale realistických trojrozměrných snímků, které mohou být použity při analýze snímků z dokonale známých zdrojů, ke studiu artefaktů a k dalšímu rozvoji a optimalizaci sekvencí magnetické rezonance.
- Aplikace **gPTM3D** umožňuje interaktivní rekonstrukci trojrozměrných lékařských snímků, např. objemovou rekonstrukci velkých nebo složitých orgánů. Kvalita služeb potřebná pro interaktivitu znamená, že v některých místech gridu musí být pro tuto třídu úloh definována vysoká priorita.
- **Bronze Standard** je aplikace, která vyhodnocuje algoritmy řešící registraci (přenos mezi různými souřadnými soustavami) lékařských obrazových materiálů. Objem zpracovávaných dat a cena výpočtů jsou mimo možnosti standardních počítačů, ale aplikaci lze snadno distribuovat v prostředí gridu.
- Softwarový balík **SPM** používá komunita neurologického výzkumu pro včasnou diagnózu Alzheimerovy choroby. Základem je srovnávání kandidátského případu s velkým množstvím normálních případů. Gridová

Poslední aktualizace: 11. 9. 2006

technologie dovoluje snadný přístup k distribuovaným datům i distribuovaným výpočetním prostředkům.

Sektor **bioinformatiky** se zabývá analýzou genových sekvencí. Zahrnuje genomiku, proteomiku a fylogenezi.

- Grid Protein Sequence Analysis, **GPS@**, je webový portál, který poskytuje uživatelsky přívětivé rozhraní bioinformatickým prostředkům v gridové infrastruktuře EGEE. Prototyp portálu **GPS@** je již on-line a poskytuje rozhraní pro 13 programů s podporou gridové infrastruktury z celkových 46 programů původního portálu.
- **xmipp\_MLrefine** slouží k trojrozměrné strukturální analýze velkých makromolekulárních komplexů. V rekonstrukčním procesu je zkombinováno mnoho obrazových materiálů získaných elektronovou mikroskopií, které odpovídají různým pohledům na vzorek. Snímky však obvykle trpí vysokou hladinou šumu, a proto je k nalezení nejpravděpodobnějšího modelu, jenž popisuje experimentální data, potřeba mnoho iterací.
- Snímky získané elektronovým mikroskopem podléhají vlivu mnoha forem aberace. Matematicky je rozdíl mezi teoretickou projekcí a skutečnou experimentální projekcí modelován pomocí přenosové funkce kontrastu (Contrast Transfer Function – CTF). Chceme-li zjistit skutečný tvar funkce CTF, která ovlivňuje experimentální snímky, je třeba použít simulaci – metodu **Xmipp\_assign\_multiple\_CTFs**.
- **SPLATCHE** (SPatial And Temporal Coalescences in Heterogeneous Environment) je buněčný nástroj pro modelování evoluce genomu. Umožňuje rekonstruovat globální šíření prapůvodního člověka v geograficky realistické krajině a generovat molekulární diverzitu různých lidských populací.

Sektor **výzkumu léků** se snaží přispět ke zrychlení procesu hledání nových léčiv pomocí počítačových (*in silico*) simulací proteinových struktur a dynamiky.

- Aplikace **WISDOM** realizuje velkoobjemové výpočty v rámci počítačového (*in silico*) výzkumu léků proti nově vznikajícím a opomíjeným chorobám. Tyto výpočty přichytávání molekul určují, jak dobře určité léky přilnou na specifická místa cílových virů – u těch, které se přichytí dobře, je vyšší pravděpodobnost, že budou vůči virům aktivní. Výpočty již byly úspěšně realizovány v případě malárie a ptáčích chřipky a do budoucna jsou plánovány další cílové choroby.
- **GridGRAMM** je jednoduché rozhraní pro realizaci molekulárního přichytávání na webu. Výsledky zahrnují kvalitativní skóre a různé metody přístupu k trojrozměrné struktuře komplexu. Molekulární přichytávání lze využít ke studiu molekulárních interakcí a tedy k analýze interakcí mezi enzymem a substrátem. To je užitečné pro návrh léčiv a snahu porozumět patologickým mutacím.
- Cílem projektu **GROCK** (Grid Dock) je poskytnout jednoduchý způsob, jak provádět masový rozbor molekulárních interakcí pomocí webu. Uživatelé mají možnost analyzovat jednu molekulu vůči celé databázi známých struktur.

Infrastruktura EGEE bude ochotně sloužit dalším možným aplikacím. Více informací o tom, jak se zúčastnit, a další informace o aplikacích, které běží na infrastruktuře EGEE, naleznete na portálu pro uživatele a aplikace na adrese <http://egeena4.lal.in2p3.fr/>.

Poslední aktualizace: 11. 9. 2006