



La Biomedicina es uno de los principales campos de aplicación del proyecto EGEE. Con 23 aplicaciones ya implantadas o en fase de transferencia, se subdivide en tres áreas: el procesamiento de imágenes médicas, la biomedicina, y el descubrimiento de medicamentos, todos ellos cuentan ya con numerosas aplicaciones individuales implantadas en la infraestructura EGEE.

Estas aplicaciones enfatizan el middleware con requisitos específicos, especialmente relacionados con la seguridad (confidencialidad de los datos), la gestión de la información (distribución y estructuras de datos complejas), y la ejecución de numerosos trabajos pequeños con grandes necesidades de datos. Las aplicaciones biomédicas se han convertido ahora en usuarios regulares de la infraestructura (con aproximadamente 15.000 trabajos ejecutados cada mes) y en un mes se completó un análisis de acoplamiento (docking) molecular computacionalmente intensivo dirigido al descubrimiento de medicamentos que requería 80 CPU/años.

A continuación se presenta un resumen de las aplicaciones biomédicas implantadas actualmente en la infraestructura EGEE.

El sector de la **imagen médica** se centra en el análisis de imágenes médicas digitales informatizadas. Incluye la federación de datos médicos, procedimientos médicos computacionalmente intensivos, el procesamiento de enormes conjuntos de datos y estudios estadísticos de grandes poblaciones.

- **GATE** es un simulador basado en el de Monte Carlo para planificar tratamientos de radioterapia basados en imágenes de los pacientes. Utiliza la infraestructura Grid de EGEE para reducir el tiempo necesario para completar simulaciones Monte Carlo a un valor razonable para el uso clínico.
- El Sistema de Ayuda a la Decisión Clínica (**CDSS**, por sus siglas en inglés) utiliza la clasificación de imágenes basada en conocimientos de experto para ayudar a tomar decisiones clínicas. El Grid se explota tanto para recopilar grandes conjuntos de datos, como para formar eficientemente un software de clasificación sobre estos grandes conjuntos de datos.
- La aplicación **Pharmacokinetics** estudia la difusión de un agente de contraste en el hígado a partir de secuencias de imágenes por resonancia magnética. Los artefactos, debido al movimiento del paciente, toman imágenes francamente incomparables. Sin embargo, los cálculos paralelizados del corregistro de imágenes que realiza el Grid permiten analizar la secuencia en un tiempo razonable.
- **SiMRI3D** es una simulación de Imágenes por Resonancia Magnética para producir imágenes 3D por Resonancia Magnética (RM) artificiales pero realistas para analizar imágenes de fuentes perfectamente conocidas, estudiar artefactos, además de seguir desarrollando y optimizando las secuencias RM.
- La aplicación **gPTM3D** permite la reconstrucción interactiva de imágenes médicas 3D, por ejemplo, para reconstruir el volumen de órganos grandes o complejos. La calidad de servicio requerida para la interactividad supone que algunos sitios del Grid tengan que definir una prioridad alta para esta clase de trabajos.
- **Bronze Standard** es una aplicación que sirve para evaluar algoritmos de registro de imágenes médicas. La cantidad de datos para manipular y el

Última actualización: 11/09/2006

coste de los cálculos están fuera del alcance de los ordenadores estándar, sin embargo la aplicación se puede distribuir fácilmente sobre un Grid.

- El paquete de software **SPM** lo utiliza la comunidad de investigación neurológica para el diagnóstico temprano del Alzheimer. Se basa en la comparación del caso del candidato con un gran número de casos normales. Las tecnologías Grid permiten un fácil acceso a los datos distribuidos, así como a los recursos computacionales distribuidos.

El sector de la **bioinformática** se centra en el análisis de secuencias genéticas. Incluye la genómica, la proteómica y la filogenia.

- Grid Protein Sequence Analysis (análisis de secuencias de proteínas mediante tecnología grid), **GPS@**, es un portal web que ofrece una interfaz de fácil manejo a estos recursos bioinformáticos basándose en el Grid de EGEE. Está disponible en red un prototipo del portal GPS@, funcionando con 13 programas para el grid, de los 46 que hay en el portal original.
- **xmipp\_MLrefine** se utiliza para el análisis 3D estructural de grandes complejos macromoleculares. En el proceso de reconstrucción se combinan muchas imágenes del microscopio electrónico correspondientes a distintas vistas de la muestra. No obstante, las imágenes grabadas suelen tener enormes cantidades de ruido, y por ello se necesitan muchas repeticiones para encontrar el modelo que mejor describa los datos experimentales.
- Las imágenes obtenidas con un microscopio electrónico se ven afectadas por diferentes tipos de anomalías. Matemáticamente, la diferencia entre una proyección teórica y la proyección experimental propiamente dicha se basa en la función de transferencia de contraste (CTF, por sus siglas en inglés). Para determinar la verdadera forma de la CTF que afecta a las imágenes experimentales, se necesita un método de simulación, **Xmipp\_assign\_multiple\_CTFs**.
- **SPLATCHE** (SPatial And Temporal Coalescences in Heterogeneous Environment) es una herramienta celular para el modelado de la evolución del genoma. Permite reconstruir la propagación global del hombre en el pasado en un paisaje genográfico realista, y generar la diversidad molecular de distintas poblaciones de humanos.

El sector del **descubrimiento de medicamentos** pretende ayudar a acelerar el proceso de búsqueda de nuevos medicamentos a través de simulaciones *in silico* de la estructura y la dinámica de las proteínas.

- La aplicación **WISDOM** realiza cálculos a gran escala para el descubrimiento de medicamentos *in silico* contra enfermedades emergentes y erradicadas. Estos cálculos de acoplamiento (docking) molecular determinan cómo de satisfactoriamente se incorporan ciertos medicamentos a puntos específicos en los virus objetivo— aquellos que se acoplan tienen más probabilidades de ser activos contra el virus. Se ha utilizado con éxito contra la malaria y la gripe aviaria, y se plantean otros objetivos para el futuro.
- **GridGRAMM** es una interfaz sencilla para realizar acoplamientos (docking) moleculares en la Web. Los resultados incluyen una puntuación de calidad y distintos métodos de acceso a la estructura 3D del complejo. El acoplamiento (docking) molecular se puede utilizar para estudiar interacciones moleculares, analizar interacciones enzima-sustrato, diseñar medicamentos y comprender el comportamiento patológico mutante.

Última actualización: 11/09/2006

- El objetivo de **GROCK** (Grid Dock) es proporcionar un modo fácil de realizar exploraciones masivas o poblacionales (mass screenings) de interacciones moleculares utilizando la Web permitiendo a los usuarios examinar una molécula frente a toda una base de datos de estructuras conocidas.

EGEE muestra un gran interés en considerar otras aplicaciones. Para más información sobre cómo participar, así como más información sobre las aplicaciones que funcionan con EGEE, visite el Portal de Usuarios y Aplicaciones en <http://egeena4.lal.in2p3.fr/>.