

Biomedicína patrí medzi hlavné aplikačné oblasti projektu EGEE. Z tejto oblasti už bolo prenesených na grid alebo je v štádiu prenosu 23 aplikácií, ktoré možno rozdeliť do troch podoblastí: spracovanie medicínskych snímkov, biomedicína a vývoj liekov. V každej z týchto podoblastí už bolo na infraštruktúre EGEE realizovaných mnoho individuálnych aplikácií.

Tieto aplikácie kladú na middleware špecifické požiadavky, hlavne na bezpečnosť (citlivé dáta), spravovanie dát (zložitá štruktúra dát a distribuovanosť) a spúšťanie veľkého počtu malých, ale dátovo intenzívnych úloh. Biomedicínske aplikácie sú v súčasnosti pravidelnými používateľmi infraštruktúry (približne 15000 úloh spúšťaných mesačne). V priebehu jedného mesiaca bola uskutočnená výpočtovo-náročná analýza dokovania molekúl zameraná na objavenie lieku, ktorá vyžadovala 80 rokov CPU.

Nižšie je uvedený prehľad biomedicínskych aplikácií, ktoré sú v súčasnosti rozvinuté na infraštruktúre EGEE.

Oblasť **medicínskeho spracovania obrazov** sa týka počítačovej analýzy digitálnych medicínskych snímkov. Obsahuje federáciu medicínskych dát, výpočtovo-náročné medicínske procedúry, spracovanie veľkých dátových množín a štatistické štúdie nad veľkými populáciami dát.

- **GATE** je simulátor založený na metóde Monte Carlo určený na plánovanie rádioterapie na základe snímkov pacienta. Gridovú infraštruktúru EGEE využíva na skrátenie času potrebného na simuláciu Monte Carlo na hodnotu prijateľnú na klinické použitie.
- Klinický systém na podporu rozhodovania (Clinical Decision Support System **CDSS**) využíva klasifikáciu obrazov založenú na expertných znalostiach na podporu klinického rozhodovania. Grid sa využíva na zbieranie veľkých dátových súborov a na účinný tréning klasifikačného softwaru nad týmito rozsiahlymi množinami dát.
- Aplikácia **Pharmacokinetics** študuje difúziu kontrastnej látky v pečeni na základe postupnosti snímkov magnetickej rezonancie. Artefakty spôsobené pohybom pacienta znemožňujú priame porovnávanie snímkov. Výpočet paralelizovanej ko-registrácie snímkov, ktorý beží na gride, umožňuje analýzu postupnosti v rozumnom čase.
- **SiMRI3D** je simulácia snímkov magnetickej rezonancie za účelom vytvorenia umelých ale realistických 3D snímkov magnetickej rezonancie (MR), ktoré umožnia analýzu snímkov zo známych zdrojov, študovať artefakty a ďalej vyvolávať a optimalizovať postupnosti MR.
- Aplikácia **gPTM3D** umožňuje interaktívnu rekonštrukciu medicínskych 3D snímkov, napr. na objemovú rekonštrukciu veľkých alebo zložitých orgánov. Aby bolo možné dosiahnuť kvalitu služby, ktorá je požadovaná pre interaktivitu, niektoré miesta na gride musia mať definovanú vysokú prioritu pre túto triedu úloh.
- **Bronze Standard** je aplikácia na vyhodnotenie algoritmov na registráciu medicínskych snímkov. Množstvo manipulovaných dát a cena výpočtov presahujú možnosti štandardných počítačov, avšak aplikácia môže byť jednoducho distribuovaná na gride.
- Softwarový balík **SPM** využíva neurologická výskumná komunita na včasnú diagnostiku Alzheimerovej choroby. Je založený na porovnávaní vyšetrovaného prípadu s veľkou množinou normálnych prípadov. Gridové technológie umožňujú ľahký prístup k distribuovaným dátam ako aj k distribuovaným výpočtovým prostriedkom.

Posledná modifikácia: 11.9.2006

Oblasť **bioinformatiky** sa týka analýzy génových sekvencií. Obsahuje genomiku, proteomiku a fylogénu.

- Gridová analýza proteínových sekvencií (Protein Sequence Analysis **GPS@**) je webový portál, ktorý poskytuje pre používateľa priateľský prístup k bioinformatickým prostriedkom na EGEE gride. Online prototyp portálu **GPS@** sprístupňuje 13 programov, ktoré sú už k dispozícii na gride, z celkového počtu 46 programov na originálnom portáli.
- **xmipp\_MLrefine** sa používa na 3D štruktúrnu analýzu veľkých makromolekulárnych komplexov. V rekonštrukčnom procese sa kombinuje mnoho snímok z elektrónového mikroskopu, ktoré korešpondujú s rôznymi pohľadmi na vzorku. Na nájdenie najpravdepodobnejšieho modelu, ktorý zodpovedá experimentálnym dátam, je potrebné urobiť veľa iterácií, pretože snímky sú často veľmi zašumené.
- Snímky získané z elektrónového mikroskopu sú ovplyvnené mnohými aberáciami. Matematicky je rozdiel medzi teoretickou projekciou a aktuálnou experimentálnou projekciou modelovaný ako prenosová funkcia kontrastu (contrast transfer function CTF). Na určenie aktuálneho tvaru CTF, ktorý ovplyvňuje experimentálne snímky, je potrebná simulačná metóda **Xmipp\_assign\_multiple\_CTFs**.
- **SPLATCHE** (SPatial And Temporal Coalescences in Heterogeneous Environment) je celulárny prostriedok na modelovanie rozvoja genómu. Umožňuje rekonštrukciu globálneho rozšírenia ľudí v minulosti v geograficky realistickej krajine a generovanie molekulárnej diverzity rôznych ľudských populácií.

Oblasť **objavovania liekov** má snahu urýchliť proces hľadania nových liekov prostredníctvom *in silico* simulácií proteínových štruktúr a dynamiky.

- Aplikácia **WISDOM** zbieha rozsiahle výpočty pre *in silico* objavovanie liekov proti novým a zanedbávaným chorobám. Výpočty molekulárneho dokovania určujú ako sa skúmané lieky spájajú so špecifickými miestami cieľového vírusu – snahou je nájsť liek, ktorý bude s najväčšou pravdepodobnosťou aktívny proti vírusu. Tento postup bol úspešne použitý proti malárii a vtácej chrípke a do budúcnosti sú plánované ďalšie podobné úlohy.
- **GridGRAMM** poskytuje jednoduchý prístup k molekulárnemu dokovaniu na webe. Výsledky obsahujú bodové hodnotenie kvality a rôzne metódy prístupu k 3D štruktúram komplexov. Molekulárne dokovanie možno použiť na štúdium molekulárnych interakcií, na analýzu interakcií enzým-substrát, na návrh liekov a na porozumenie morbidných mutácií.
- Cieľom **GROCK** (Grid Dock) je poskytnúť jednoduchý spôsob na uskutočnenie hromadného vyhľadávania molekulárnych interakcií prostredníctvom webu. Používateľ má možnosť porovnávať jednu molekulu s celou databázou známych štruktúr.

EGEE má záujem spolupracovať aj na ďalších aplikáciách. Navštívte, prosím, Používateľský a aplikačný portál <http://egeena4.lal.in2p3.fr/>, kde nájdete informácie o možnosti spolupráce, ako aj viac informácií o aplikáciách, ktoré v súčasnosti bežia na EGEE.