

Биомедицинские дисциплины – одна из важнейших областей проекта EGEE. Здесь размещены или находятся в процессе размещения более 20 приложений в следующих трёх секторах: обработка медицинских графических данных, биомедицинские дисциплины и разработка лекарств. Для каждого из них в инфраструктуре EGEE уже развёрнуто множество отдельных приложений.

Эти приложения предъявляют особые требования к промежуточному программному обеспечению, особенно в плане безопасности (чувствительность данных), управления данными (сложная структура и распределённость данных) и выполнения множества простых заданий, требующих интенсивной работы с данными. Биомедицинские приложения устойчиво работают в инфраструктуре EGEE в режиме нормальной эксплуатации. Виртуальные организации, ведущие исследования в области медицины и наук о жизни, являются крупнейшим потребителем ресурсов инфраструктуры EGEE после пользователей, связанных с четырьмя экспериментами на Большом адронном коллайдере (Large Hadron Collider(LHC)).

Ниже следует обзор биомедицинских приложений, размещённых в инфраструктуре EGEE.

Задача **сектора обработки медицинских графических данных** – компьютерный анализ цифровых медицинских изображений. В него входят: федерация медицинских данных; медицинские алгоритмы, требующие значительных компьютерных ресурсов; обработка больших объёмов данных; статистические исследования на больших выборках населения.

- **GATE** – моделирование на основе метода Монте-Карло и графических данных обследования пациента. Цель моделирования – планирование сеансов радиотерапии. Грид-инфраструктура EGEE используется для уменьшения времени, необходимого для получения достаточно достоверных результатов при моделировании методом Монте-Карло, до разумного с точки зрения клинической практики.
- **CDSS** (Clinical Decision Support System – "Система поддержки принятия клинических решений") классифицирует изображения на основе экспертных знаний с целью помощи врачам в принятии ими решений. Грид-инфраструктура EGEE используется как для набора больших объёмов данных, так и для эффективного "обучения" классифицирующего программного обеспечения на этих данных.
- **Pharmacokinetics** – изучение диффузии контрастных агентов в печени по последовательности изображений, полученных с помощью магнитного резонанса. Артефакты, связанные с движениями пациента, не позволяют напрямую сравнивать изображения. В грид-инфраструктуре, однако, можно за разумное время выполнить распараллеленный анализ последовательности изображений.
- **SIMRI3D** – моделирование на основе изображений, полученных с помощью магнитного резонанса (MP). Цель моделирования – получить искусственные, но реалистичные трёхмерные MP-изображения для анализа изображений от хорошо известных объектов, изучения артефактов и дальнейшего развития и совершенствования технологии MP-изображений.
- **gPTM3D** – интерактивное восстановление трёхмерных медицинских изображений: например, изображения всего объёма сложных органов. Требования к качеству интерактивной работы сервисов таковы, что некоторые сайты в грид-инфраструктуре должны установить высокий приоритет для таких задач.
- **Bronze Standard** – оценка алгоритмов получения медицинских изображений. Объём данных и стоимость вычислений недоступны обычным компьютерам, но в грид-инфраструктуре это приложение работает довольно легко.
- Пакет программного обеспечения **SPM** применяется в неврологических исследованиях для ранней диагностики болезни Альцгеймера. В его основе лежит сравнение данных пациента с большим набором данных от людей без этой патологии. Грид-технологии предоставляют лёгкий доступ к распределённым данным и распределённым вычислительным ресурсам.
- **SEE++** – трёхмерное моделирование биомеханики человеческого глаза и относящихся к нему мышц. Здесь в виде, знакомом опытному врачу, выполняется интерактивное графическое моделирование техники хирургического вмешательства, что помогает в постановке диагноза и лечении косоглазия.
- **ThIS** (Therapeutic Irradiation Simulator – "Симулятор терапевтического облучения") – комплект на основе GEANT4. Он моделирует облучение живых тканей пучками фотонов, протонов или лёгких ионов для лечения рака. Для повышения эффективности приложения симуляция методом Монте-Карло распараллелена по грид-ресурсам.
- **MDM** (Medical Data Manager – "Менеджер медицинских данных") – сервис промежуточного программного обеспечения (ППО) высокого уровня, тесно связанный с ППО gLite ("джи-лайт") для управления медицинскими данными с повышенным уровнем безопасности. Здесь

Последнее обновление: 20/09/2007

предлагается интерфейс для системы управления данными между DICOM и гридом, управление медицинскими метаданными и высокий уровень безопасности.

Область интересов сектора **биоинформатики** – исследования генов и белков; в частности, это геномика, протеомика и филогения. В режиме нормальной регулярной эксплуатации находится 21 приложение по биоинформатике. Главная цель сектора – формирование биоинформационного сообщества учёных, работающих в грид-инфраструктуре, и обеспечение ему доступа к общим биологическим базам данных и средствам на платформе EGEE. Сектор сотрудничает с родственными проектами: BIOINFOGRID (EU-FP6), EELA (EU-FP6), SwissBioGrid (NGA) – чтобы в промышленном гриде EGEE разместить широкий спектр их приложений, а также с европейской сетью EMBRACE (EU-FP6). Примерами совместной работы являются, например, размещение в гриде EGEE и эксплуатация приложения PyBioS для исследований в области системной биологии (коллаборация MPI-MG & CNRS IBCP) или уточнение структуры цельных белков в базе данных PDB (коллаборация CNRS LCP и IBCP, CMBI, SIB, университет г. Уппсалы).

- **GPS@** (Grid Protein Sequence Analysis – "Анализ белковых цепочек на основе грид-технологий") – веб-портал, предоставляющий удобный интерфейс с этими биоинформационными ресурсами в грид-инфраструктуре EGEE. Доступен также прототип этого портала, где есть интерфейс с 13 программами в грид-инфраструктуре из 46 программ оригинального портала.
  - **Systems Biology on the Grid.** PyBioS – платформа для моделирования. Она автоматизирует создание больших биологических сетевых моделей через интерфейс с обычными биологическими базами данных.
  - **BioDCV** – приложение для молекулярной онкологии. Микромассивы данных и протеомические данные анализируются с помощью векторных машин поддержки (Support Vector Machine (SVM)), выполняющих роль классификаторов.
  - **SPLATCHE** (SPatIAL And Temporal Coalescences in Heterogeneous Environment – "Пространственно-временные интеграции в разнородной окружающей среде") – приложение с сотовой структурой для моделирования эволюции генома человека. Оно позволяет восстановить расселение человека по Земле в географически правдоподобных ландшафтах и моделировать молекулярное разнообразие разных человеческих популяций.
  - **BiG** – грид-сервис для выполнения крупномасштабных задач BLAST через веб-портал или интерфейсы веб-сервисов. В качестве вычислительной машины используется mpiBLAST; возможен одновременный запуск задач BLAST для работы с разными базами данных.
  - **Superlink-online** – средство анализа сцепления генетических признаков; его разработка продолжается. Анализ сцепления генетических признаков нацелен на выявление генов, передающих заболевания.
  - **Malign2D** и **MLrefine3D** – ключевые приложения для грид-обработки изображений, полученных на электронных микроскопах. Они позволяют вести структурный анализ макромолекулярных образований, находящихся в разных функциональных состояниях.
- Работа сектора **разработки лекарств** сосредоточена на ускорении поиска новых лекарств посредством компьютерного моделирования структуры и динамики белков.
- **WISDOM** – расчёты, требующие значительных компьютерных ресурсов, для поиска лекарств от заболеваний, побеждённых в высокоразвитых странах, и от распространяющихся новых заболеваний. Цель этих расчётов пристыковки молекул (расчётов докинга) – определить, насколько эффективно конкретные лекарства присоединяются к определённым участкам вируса-мишени – то есть, идёт поиск лекарств, у которых участок пристыковки представляется наиболее эффективным против вируса. Успешными оказались приложения для поиска средств от малярии и птичьего гриппа: полученные многообещающие результаты подтверждены лабораторными исследованиями.
  - **GridGRAMM** – простой интерфейс для веб-расчёта пристыковки (докинга) молекул. Расчёты включают оценку качества пристыковки и разные методы доступа к трёхмерной структуре комплекса. Молекулярный докинг может применяться для изучения межмолекулярных взаимодействий, изучения взаимодействий между ферментами и субстратом, разработки лекарств и понимания патологических мутаций.
  - **GROCK** (Grid Dock) – очень удобная веб-реализация отбора межмолекулярных взаимодействий из огромного объёма информации. Пользователи могут исследовать одну молекулу относительно целой базы данных известных структур.

В EGEE приветствуются заявки на размещение новых приложений. Узнать подробнее о том, как включиться в проект, а также о приложениях, работающих в EGEE, можно на пользовательском портале о приложениях: <http://egeena4.lal.in2p3.fr/>

Последнее обновление: 20/09/2007