

Биомедицинские дисциплины – одна из важнейших областей проекта EGEE. Здесь размещены или находятся в процессе размещения 23 приложения в следующих трёх направлениях: 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: в год выполняется около 15 тыс. заданий, а в ходе разработки одного лекарства за месяц был проведён анализ молекулярного докинга, который потребовал бы 80 лет работы ЦПУ.

Ниже следует обзор биомедицинских приложений, размещённых в инфраструктуре EGEE.

**Задача сектора обработки медицинских графических данных** – компьютерный анализ цифровых медицинских изображений. В него входят: интегрированные медицинские данные; 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 нейрологических 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.

Последнее обновление: 11/09/2006

Сектор **биоинформатики** занимается анализом последовательностей генов. В сферу его интересов входят геномика, протеомика и филогения.

- **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.
- **xmipp\_MLrefine** – трёхмерный структурный анализ больших макромолекулярных комплексов. В процессе восстановления структуры комплексов совместно используется множество разных изображений исследуемого образца. Эти изображения, однако, часто страдают от сильного шума; в результате для составления наиболее соответствующей экспериментальным данным модели надо сделать много итераций.
- Изображения, полученные на электронном микроскопе, страдают разными формами аберрации. Различие между теоретическим и экспериментальным изображением-проекцией математически описывается функцией контрастного переноса (ФКП). **Xmipp\_assign\_multiple\_CTFs** – приложение, выполняющее моделирование для нахождения ФКП.
- **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.

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; планируется поиск лекарств и от других вирусов.
- **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) – несложная веб-реализация отбора межмолекулярных взаимодействий из огромного объёма информации. Пользователи могут исследовать одну молекулу относительно целой базы данных по известным структурам.

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: 11/09/2006