

Las ciencias de la vida es el área de mayor aplicación del proyecto EGEE (Enabling Grids for E-science – Habilitando el Grid para la e-Ciencia). Más de 30 aplicaciones distintas se están usando o comenzado a migrarse. Estas aplicaciones requieren alta demanda sobre el middleware con estrictos requerimientos de seguridad, una administración intensiva de datos y la ejecución de un gran número de pequeños trabajos.

Las aplicaciones de ciencias de la vida usan frecuentemente la infraestructura de EGEE. La Organización Virtual de Biomedicina es la segunda mayor consumidora de los recursos de la infraestructura, después de los cuatro experimentos del LHC. Las aplicaciones de ciencias de la vida en la infraestructura de EGEE están subdivididas en tres áreas: **procesado de imagen médica**, **bioinformática**, y **descubrimiento de fármacos**.

El objetivo del sector de **imagen médica** es el análisis informatizado de imágenes médicas digitales. Esto incluye datos de la federación médica, procedimientos médicos computo-intensivos, procesado de grandes conjuntos de datos y estudios estadísticos sobre grandes poblaciones. Incluye las siguientes aplicaciones específicas:

- **GATE** es un simulador basado en Monte Carlo para planificar tratamientos de radioterapia basados en imágenes de pacientes. Usa la infraestructura grid de EGEE para reducir el tiempo necesario para completar las simulaciones de Monte Carlo relevantes para el uso clínico.
- El Sistema de Soporte de Decisión Clínica (**CDSS - Clinical Decision Support System**) utiliza una clasificación de imágenes basada en el conocimiento de expertos para ayudar a tomar decisiones clínicas. El grid se aprovecha tanto para reunir un gran conjunto de datos como para entrenar eficientemente un software de clasificación para ese gran conjunto de datos.
- La aplicación **Pharmacokinetics** estudia la difusión de un agente de contraste en el hígado desde secuencias de imágenes de resonancia magnética. Los artefactos producidos por el movimiento del paciente hacen que las imágenes no sean directamente comparables. Sin embargo, el co-registro de forma paralela de las imágenes informatizadas ejecutándose en el grid permite el análisis de la secuencia en un tiempo razonable.
- SiMRI3D es un simulador de Imágenes de Resonancia Magnética para la producción de unas imágenes artificiales pero realistas de Resonancia Magnética (MR) en 3D para analizarlas desde fuentes perfectamente conocidas, estudiar los artefactos, y además desarrollar y optimizar las secuencias de MR
- La aplicación **gPTM3D** permite la reconstrucción interactiva de imágenes médicas en 3D, como por ejemplo volúmenes de reconstrucción de órganos grandes o complejos. La calidad del servicio requerida para la interactividad significa que varios sitios en el grid tienen que definir una prioridad mayor para este tipo de trabajos.
- El **Bronze Standard** es una aplicación para evaluar los algoritmos de registro de imagen médica. La cantidad de datos que se manipulan y el coste de computación están fuera del rango de los ordenadores estándar, sin embargo la aplicación puede ser distribuida fácilmente sobre el grid.
- El conjunto de software SPM se usa por la comunidad de investigación neurológica para el diagnóstico temprano de la enfermedad de Alzheimer. Se basa en la comparación de casos candidatos con un gran número de casos normales. Las tecnologías grid permiten acceder fácilmente a los datos distribuidos así como a los recursos computacionales distribuidos.
- SEE++ es un programa de software para simulaciones biomecánicas en 3D del ojo humano y sus músculos. Simula técnicas quirúrgicas comunes del musculo del ojo de una forma grafica interactiva de manera que sea familiar para un cirujano experto el diagnóstico y tratamiento del estrabismo.
- THIS (Therapeutic Irradiation Simulator) es un Simulador de Irradiación Terapéutica basado en la herramienta GEANT4. Este simula irradiaciones de tejidos vivos con fotones, protones o haces de iones ligeros para la terapia del cáncer. La simulación de Monte Carlo se paraleliza sobre los recursos grid para ser más eficiente.

También se desarrollan servicios en el campo de las aplicaciones para ayudar la migración de estas a la infraestructura grid:

- El Administrador de Datos Médicos (**MDM - Medical Data Manager**) es un servicio de middleware de alto nivel, fuertemente acoplado con el middleware g-Lite, para la administración segura de datos médicos. Propone una interface del sistema de administración de datos DICOM-to-grid, administración de metadatos médicos y alta seguridad.

- MOTEUR es un administrador de flujo de trabajo intensivo de datos, a través del interface de g-Lite, que es idóneo para describir y representar la distribución de análisis de imágenes en el grid. Produce una interface de alto nivel para los usuarios finales del grid y aprovecha el paralelismo de la aplicación para optimizar su función.

El campo de la bioinformática estudia los genes, proteínas y otros componentes de organismos vivos. Esto incluye estudios de biología de sistemas en el grid, oncología a nivel molecular, estudios de asociación con genotipificación total del genoma de enfermedades, enlace de las proteínas y el ADN en el núcleo de las células y comparaciones completas del genoma. Varios ejemplos de aplicaciones habilitadas en el grid son:

- **Anclando el nucleosoma:** la formación de un nucleosoma y el movimiento en el ADN, de gran significancia biológica, es uno de los aspectos mas desconocidos del control de genes. El ultimo experimento fueron unas tres ejecuciones de 142.336 trabajos cada una, para un total de 24 años de computación.
- **Metagenomics:** uno de los experimentos esta relacionado con el análisis del metagenoma del microbiota intestinal de 13 pacientes y controles, para un máximo de 300.000 secuencias.
- El Análisis Grid de Secuencias de Proteínas es un portal Web de bioinformática que proporciona un interface amigable al usuario de los recursos grid biológicos. Herramientas como BLAST, FastA, CLustalW, y bancos de datos como Swiss-Prot o TrEMBL están disponibles e integrados en el grid a través de este portal.
- Métodos grid para la estabilidad de análisis de biomarcadores: **BioDCV** es una versión en producción para predecir perfiles en tecnologías de alto rendimiento con procedimientos computacionales para la completa validación del control de la desviación de la selección en análisis de estabilidad de listas de biomarcadores
- **Sistemas biológicos** investiga el comportamiento de sistemas complejos de componentes que interactúan. Esta aplicación ha explorado la fiabilidad de la simulación del comportamiento de un gran sistema (530.000 trabajos, 1.000.000 de ficheros de resultados, 102 años acumulados de tiempo de computación), incluyendo múltiples vías de señalización relevantes para el cáncer humano, y puede usarse como plantilla para la simulación a gran escala de sistemas biológicos.
- Estudios de asociación con genotipificación total del genoma de enfermedades humanas complejas: para el primer análisis de genotipificación de haplotipos en enfermedades de arterias coronarias, una ventana corrediza al acercamiento de haplotipos se ha aplicado al estudio de casos-control de 1988 casos y 3004 controles genotípicos para 377.857 Polimorfismos de Nucleótido Unico (SNPs - Single Nucleotide Polymorphisms)
- La comparación del genoma a gran escala esta tratando con la clusterización automática y anotación de una base de datos completa de proteínas. El experimento es una comparación de "todos contra todos" de todas las secuencias de proteínas de 599 genomas.

El sector de descubrimiento de fármacos pretende ayudar a acelerar el proceso de buscar nuevos fármacos a través de simulaciones in silico de estructuras y dinámicas de las proteínas.

- La iniciativa WISDOM ejecuta computaciones a gran escala para el descubrimiento de fármacos in silico contra enfermedades emergentes y abandonadas. Estos cálculos de exploración virtual determinan con mayor certeza los fármacos para atacar lugares específicos sobre el virus específico - aquellos con más probabilidad de activarse contra el virus. Esto ha sido desarrollado con éxito contra la malaria y la gripe aviar, con grandes resultados confirmados in vitro.
- **GridGRAMM** es un sencillo interface para hacer acoplamiento molecular en la web. Los resultados incluyen lograr calidad y varios métodos de accesos a estructuras 3D del complejo. El acoplamiento molecular puede usarse para el estudio de interacciones moleculares, para analizar interacciones sustrato-enzimas, para diseño de fármacos y para entender el comportamiento patológico mutante.
- El objetivo de **GROCK** (Grid Dock) es proporcionar una forma sencilla para exploraciones en masa de interacciones moleculares usando la web permitiendo a los usuarios examinar una molécula frente a toda una base de datos de estructuras conocidas.



## Páginas Web de la Aplicación

EGEE está muy interesado en considerar nuevas aplicaciones. Para obtener más información acerca de cómo participar visite: <http://technical.eu-egee.org/index.php?id=392>

Para obtener más información sobre las aplicaciones que actualmente se están ejecutando en EGEE visite el siguiente link:

<http://technical.eu-egee.org/index.php?id=148>

## Contactos del Grupo

**Descubrimiento de Fármacos: Vincent Breton (IN2P3-LPC)**, email: [breton@clermont.in2p3.fr](mailto:breton@clermont.in2p3.fr)

**Procesado de Imágenes Médicas: Johan Montagnat (I3S)**, email: [johan@i3s.unice.fr](mailto:johan@i3s.unice.fr)

**Bioinformática: Christophe Blanchet (IBCP)**, email: [christophe.blanchet@ibcp.fr](mailto:christophe.blanchet@ibcp.fr)