

Az élettudományok alkalmazási terület az EGEE projekt egyik jelentős felhasználási területét képezik. A közösség több mint 30 önálló telepített és portolás alatt álló alkalmazással rendelkezik. Ezen alkalmazások magas követelményeket támasztanak a köztesréteggel szemben a biztonság, a precíz adatkezelés és a nagyszámú kisméretű feladatok végrehajtása terén.

Az orvosbiológiai alkalmazások rendszeres használói az EGEE infrastruktúrának. Az orvosbiológiai virtuális szervezet (VO) a második legnagyobb felhasználója az erőforrásoknak, a 4 LHC kísérlet után. Az orvosbiológiai alkalmazások 3 területre csoportosíthatók: **orvosi képfeldolgozás, bioinformatika és gyógyszerkutató.**

Az **orvosi képfeldolgozási** szektor célja digitális orvosi képek számítógépes vizsgálata. Ehhez hozzátartozik az orvosi adatok integrációja, a számításigényes orvosi eljárások és a nagy populációkon végzett felmérések adatainak és statisztikáinak feldolgozása. Ilyen alkalmazások például:

- A **GATE**, ami egy Monte Carlo alapú szimulátor, amely segítséget nyújt a páciensek felvételei alapján a sugárterápiás kezelések megtervezésében. Az alkalmazás az EGEE Grid infrastruktúrát alkalmazza, hogy a lehető legrövidebb idő alatt elkészítsen egy Monte Carlo szimulációt, melynek eredményeit orvosi területen alkalmazni tudják.
- A Clinical Decision Support System (**CDSS**) tudásbázison alapuló képosztályozást használ, hogy segítse a klinikai döntések meghozatalát. A gridet a nagy mennyiségű adatok begyűjtésére és az osztályozó szoftver begyűjtött adatokkal történő tanítására használják.
- A **Pharmacokinetics** alkalmazás a kontrasztanyagok májban történő diffúzióját tanulmányozza mágneses rezonanciaképek (MRI) sorozata alapján. A páciens mozgása miatt a felvételeket lehetetlen közvetlenül összevetni, azonban a képek párhuzamosított feldolgozása révén a képek vizsgálata elfogadható időn belül végezhető el a griden.
- A **SiMRI3D** egy mágneses rezonanciás képalkotás szimuláció, amely mesterséges, ám valóságghú 3D mágneses rezonancián (MR) alapuló képeket állít elő, így téve lehetővé ismert forrásból származó képek analízisét, leletek tanulmányozását, és az MR felvételsorozatok további fejlesztését és optimalizálását.
- A **gPTM3D** alkalmazással 3D-s orvosi felvételek rekonstruálhatók interaktívan, akár komplex vagy nagy kiterjedésű szervekről is. Az interaktivitáshoz szükséges QoS paraméterek eléréséhez a Grid néhány pontján az ilyen típusú munkákhoz magas prioritást kell rendelni.
- A **Bronze Standard** alkalmazás orvosi képek nyilvántartási algoritmusait értékeli ki. A kezelt adat mennyisége és a folyamat számítási igénye még elérhetetlen hagyományos számítógépekkel, de a Grid könnyen megbirkózik a feladattal.
- Az **SPM** szoftvercsomagot a neurológiai kutatóközösség használja, hogy az Alzheimer-kórt a korai stádiumában felismerje. Működése a vizsgált eset és nagyszámú normál eset összevetésén alapul. A Grid-technológiákkal könnyű a hozzáférés az elosztott adatokhoz és a számítási erőforrásokhoz is.
- A **SEE++** egy szoftverprogram az emberi szem és izmainak biomechanikai 3D szimulációjához. Az általános szemizomsebészeti technikákat szimulálja grafikus, interaktív módon, amit a kancsalság diagnosztikájának alátámasztására és gyógyítására gyakran használnak a sebészek.
- A **This** egy terápiás besugárzási szimulátor, amely a GEANT4 eszközrendszeren alapszik. Az élő szövet besugárzását szimulálja fotonokkal, protonokkal vagy könnyű ion sugárnyalábokkal a rák kezeléséhez. A Monte Carlo szimuláció hatékonysági megfontolásokról párhuzamosan fut a GRID-es erőforrásokon.

Az alkalmazási szinten is fejlesztenek olyan szolgáltatásokat, melyek segítik a migrációt a Grid infrastruktúrába:

- A Medical Data Manager (**MDM**) egy magas szintű köztesréteg szolgáltatás, ami a gLite köztesréteghez szorosan kapcsolódva biztosítja a biztonságos orvosi adatkezelést. Ez egy DICOM-to-grid adatkezelési rendszerinterfész, ami orvosi meta adat kezelést és nagy biztonságot kínál.
- A **MOTEUR** egy adat érzékeny, gLite interfészű munkafolyamat kezelő, amely képek analízisére szolgáló folyamatok leírására, és a gridbe illesztésére alkalmas. Magas szintű interfészt hoz létre a griden a végfelhasználók számára, és transzparens módon kiaknázza az alkalmazás párhuzamosítási lehetőségeit a teljesítményoptimalizálás érdekében.

A **bioinformatika** az élő szervezet génjeit, proteinekét és más komponenseit tanulmányozza. Ez magában foglalja a rendszer-szemléletű biológia tanulmányozását a griden, molekuláris szintű rákkutatást, a betegségek génállomány szintű vizsgálatát, a sejtmag protein és DNA kötéseit és teljes génállomány összehasonlítását. Néhány példa a grides alkalmazásra:

- **A nukleoszómák rögzítése:** a nukleoszóma kialakulása és mozgása a DNS-en nagy biológiai jelentőséggel bír, mégis az egyik legkevésbé ismert aspektusa a genetikának. A legutóbbi kísérlet során háromszor futtattak le 142,336 programot, amivel 24 évnyi számítást végeztek el.
- **Metagenomika:** az egyik metagenomikával kapcsolatos kísérletben 13 beteg bélflóráját analizálták, több mint 300,000 szekvencia alapján.
- **A Grid Protein Sequence Analysis** egy bioinformatikai webes portál, ami egy felhasználóbarát interfészt szolgáltat a Grid biológiával kapcsolatos erőforrásaihoz. Az eszközök – mint a BLAST, FastA, ClustalW – és adatbankok – mint Swiss-Prot vagy TrEMBL – ezen a portálon keresztül integráltan érhetők el a gridben.
- Grid metódusok biomarkerek stabilitás analíziséhez: a **BioDCV** nagy áteresztőképességű és nagy számítási kapacitású technológiákra kialakított biomarkerek stabilitás analízisét végző termékszintű alkalmazás.
- **Nagyszabású Rendszerbiológia:** az anyagcsere hálózatok nagyléptékű modellezése, Grid oldalról párhuzamos megközelítéssel. A teszt célja a metabolikus hálózat kritikus paramétereinek, Monte Carlo módszerrel történő kikövetkeztetése, amely magában foglalja az alapvető reakciós konstansok kinetikus paramétereinek véletlenszerű becslését is. Egy egyszerű szimulációs sorozat egy standard számítógépen 4-5 órát vesz igénybe. Az EGEE Griden eddig 7,000 futott le.
- **A teljes genetikai állományra kiterjedő Asszociációs Tanulmányok** a komplex humán betegségekről: ez az első teljes genetikai állományra kiterjedő haplotípus analízis a szívkoszorúér-betegségekről. Ez egy csúszóablakos haplotípus módszer, amit egy 1988 eseten végzett tanulmányra és 3,004 irányítás 377,857 **egyedi nukleotid polimorfizmushoz** (SNP) való genotipizálására alkalmaztak.
- A széleskörű **génállomány összehasonlítás** a teljes protein adatbázis automatikus csoportosításával és kommentárjával foglalkozik. A kísérlet 599 gén összes protein szekvenciájának teljes (mindent mindennel) összehasonlítása.

A gyógyszerkutatási szektor célkitűzése az új gyógyszerek megtalálásának felgyorsítása, a fehérjék struktúrájának és dinamikájának in silico szimulációival.

- A **WISDOM** kezdeményezés nagyszabású számítási feladatokat végez az in silico gyógyszerkutatás számára a felbukkanó és eddig elhanyagolt betegségek ellen. Ezek a virtuális szűrési számítások meghatározzák, hogy az egyes valós gyógyszerek milyen jól kötődnek a vírus specifikus célterületeihez. A kísérletek azt mutatják, hogy azok, amelyek jobban kötnek, valószínűbb, hogy aktívabbak a vírussal szemben. A szoftver már sikeresen alkalmazásra került a malária és a madárinfluenza ellen, és újabb izgalmas eredmények vannak kilátásban.
- A **GridGRAMM** egy egyszerű webes felület molekuláris kötések szimulációjához. A molekula kvalitatív jellemzése mellett többféle hozzáférést nyújt a molekula 3D struktúrájához. A molekuláris kötések felhasználhatók a molekuláris kölcsönhatások tanulmányozására, az enzim-réteg kölcsönhatásainak elemzésére, valamint a gyógyszerek fejlesztésére és a morbid mutáns viselkedések megértéséhez.
- A **GROCK** (Grid Dock) célja a molekuláris kölcsönhatások megfigyelésének lehetővé tétele a weben keresztül. A felhasználó egy adott molekulát az ismert struktúrák teljes adatbázisával vethet össze.

Alkalmazások weboldalai

Az EGEE örömmel fogad további alkalmazásokat. A részvétellel kapcsolatos további információkért látogassa meg a következő weboldalt: <http://technical.eu-egee.org/index.php?id=392>.

Az EGEE-n futó alkalmazásokról való bővebb felvilágosításért látogassa meg az EGEE weboldalát: <http://technical.eu-egee.org/index.php?id=148>.

A csoport elérhetőségei

Drug Discovery
Medical Image Processing
Bioinformatics

Vincent Breton (IN2P3-LPC), email: breton@clermont.in2p3.fr
Johan Montagnat (I3S), email: johan@i3s.unice.fr
Christophe Blanchet (IBCP), email: christophe.blanchet@ibcp.fr