

Biomedizin ist neben der Hochenergiephysik eines der Hauptanwendungsgebiete im EGEE Projekt. Mehr als 20 Anwendungen aus den Bereichen medizinische Bildverarbeitung, Biomedizin und Arzneimittelentwicklung befinden sich im Einsatz oder werden portiert.

Diese Anwendungen stellen hohe Anforderungen an die Middleware im Bereich Sicherheit (sensitive Daten), Datenmanagement (komplexe Datenstrukturen und -verteilungsmuster) und die Ausführung einer großen Anzahl kleiner datenintensiver Jobs. Die biomedizinischen Anwendungen gehören inzwischen zu den regulären Benutzern der Infrastruktur. Die Virtuelle Organisation gewinnt Benutzer aus den Bereichen Biowissenschaft und medizinische Forschung und ist einer der größten Nutzer der Infrastruktur-Ressourcen nach den vier LHC-Experimenten.

Nachfolgend ist eine Übersicht über die biomedizinischen Anwendungen, welche sich im Moment auf der EGEE Infrastruktur im Einsatz befinden.

Der Bereich der **medizinischen Bildverarbeitung** setzt sich die automatisierte Analyse von digitalen medizinischen Bilddaten zum Ziel. Dies beinhaltet das Zusammenführen medizinischer Daten, rechenintensive grafische Verarbeitungsschritte, das Verarbeiten und statistische Studien großer Datensätze.

- **GATE** ist eine Monte Carlo-basierte Simulation für das Planen von Röntgentherapien basierend auf Patientendaten. Durch die Nutzung der EGEE-Infrastruktur wird die Zeit, die für die Monte Carlo Simulation benötigt wird, auf eine Spanne reduziert, die einen klinischen Einsatz möglich macht.
- **CDSS**: Die klinische Entscheidungsunterstützung. CDSS benutzt Bildklassifikation, um basierend auf Expertenwissen bei klinischen Entscheidungen zu helfen. Das Grid wird sowohl für das Sammeln der großen Datensätze als auch zum effizienten Trainieren der Klassifikationssoftware mit diesen großen Datensätzen verwendet.
- Die **Pharmacokinetics** Anwendung untersucht die Verteilung eines Kontrastmittels in der Leber anhand einer Reihe von Magnetresonanzbildern. Artefakte, die durch die Bewegung des Patienten zwischen den Aufnahmen entstehen, machen den direkten Vergleich unmöglich. Jedoch wird durch parallelisierte Bilderkennungsberechnungen, die auf dem Grid laufen, eine Analyse in vernünftiger Zeit möglich.
- **SiMRI 3D** ist eine Simulation von 3D Magnetresonanzbildaufnahmen, um künstliche, jedoch realistisch wirkende 3D Magnetresonanzbilder zu erzeugen, welche verwendet werden können, um Bilder von genau bekannten Quellen zu analysieren, Artefakte zu studieren und Magnetresonanzsequenzen weiterzuentwickeln und zu optimieren.
- Die **gPTM3D** Anwendung erlaubt die interaktive Rekonstruktion von medizinischen 3D Bilddaten z.B. für die Volumensrekonstruktion von großen oder komplexen Organen. Die Anforderungen an die Interaktivität erfordern, dass Rechenzentren im Grid Aufträgen dieser Art eine höhere Priorität einräumen.
- **Bronze Standard** ist eine Anwendung zur Evaluierung medizinischer Bilderkennungsalgorithmen. Die Menge der zu bearbeitenden Daten und der Berechnungsaufwand sind weit ausserhalb dessen, was mit Standardrechnern bewältigt werden könnte, allerdings kann die Anwendung leicht auf das Grid verteilt werden.
- Das **SPM** Softwarepaket wird in der neurologischen Forschung benutzt, um Alzheimererkrankungen frühzeitig diagnostizieren zu können. Es basiert auf dem Vergleich von Patientendaten mit einer großen Anzahl von Daten gesunder Probanden. Der Einsatz des Grids ermöglicht sowohl den einfachen Zugriff auf die verteilten Daten als auch auf die verteilten Rechenressourcen.

- **SEE++** ist eine Software zur biomechanischen 3D Simulation des menschlichen Auges und dessen Muskeln. Sie simuliert übliche Techniken der Augenoperation in einer interaktiven graphischen Art, wie sie erfahrenen Chirurgen vertraut ist.
- **THIS** ist ein Simulator für therapeutische Bestrahlungen, basierend auf dem GEANT4 Toolkit. Er simuliert die Bestrahlung lebenden Gewebes mit Photonen, Protonen oder leichten Ionenstrahlen für die Krebstherapie. Um die Effizienz zu erhöhen wurde die Monte Carlo Simulation parallelisiert um auf Grid Ressourcen effizient verteilt werden zu können.
- Der Medizinische Daten Manager (**MDM**) ist ein high-level Middleware-Service das eng an die gLite Middleware gekoppelt ein sicheres Management von medizinischen Daten ermöglicht. Es besitzt eine DICOM-zu-Grid Datenmanagementschnittstelle, medizinische Metadaten und bietet hohe Sicherheit.

Die Bioinformatik Aktivitäten beschäftigen sich mit Gen- und Proteinanalysen und 21 Bioinformatikanwendungen sind laufen bereits regulär in Produktion im Grid. Hauptziel ist es, eine Gemeinschaft von Wissenschaftlern aufzubauen, die das Grid benutzen und ihnen gemeinsame Datenbanken biologischer Daten und Werkzeuge zur Verarbeitung dieser auf der EGEE Plattform bereitzustellen. EGEE kollaboriert mit den verwandten Projekten BIOINFGRID (EU-FP6), EELA (EU-FP6), SwissBioGrid (NGA) und auch mit dem European Network of Excellence EMBRACE (EU-FP6) um ein weites Spektrum ihrer Anwendungen auf das EGEE Produktions-Grid zu portieren. Die gemeinsame Arbeit beinhaltet die Portierung und den Betrieb der PyBioS Anwendung auf dem EGEE Grid (Coll. MPI-MG & CBRS IBCP) und das Verfeinern der gesamten Proteinstrukturen der PDB Datenbank (Coll. CNRS LCP und IBCP, CNBI, SIBm Uppsala Univ.).

- **GPS@: Grid Protein Sequence Analysis** ist ein Bioinformatik Web-Portal, das Biologen unterschiedliche Bioinformatik Ressourcen im Grid durch ein bewährtes Web-Interface von NPS@ zur Verfügung stellt. Die Komplexität des Grids wird für verschiedenste bekannte Datenbanken (SwissProt, TrEMBL, PROSITE) und Werkzeuge (BLAST, FASTA, Ssearch, ClustalW, ...) komplett versteckt.
- **System Biology on the Grid:** PyBioS ist eine Simulations- und Modellierungsplattform, die das Konstruieren von großen biologischen Netzwerkmodellen automatisiert.
- **BioDCV** ist eine Molekularonkologieanwendung, die die Analyse von Microarray- und Proteomdaten mittels Support Vector Maschinen (SVM) Klassifizierung erlaubt.
- **SPLATCHE** (Spatial And Temporal Coalescenes in Heterogenous Environments) ist ein Werkzeug zur Genomsevolutionsmodellierung, das es erlaubt die globale Ausbreitung der frühen Menschen in einer genographisch realistischen Landschaft zu rekonstruieren.
- **BiG** ist ein Grid-Service, das es erlaubt auf große BLAST Operationen mittels eines Web Portals zuzugreifen. Es verwendet mpiBLAST für seine Berechnungen und erlaubt es BLAST Operationen gleichzeitig auf verschiedenen Datenbanken durchzuführen.
- **Superlink-online** ist ein Werkzeug für die Analyse von genetischen Vernüpfungen, welcher der Suche nach Krankheitsverursachenden Genen dient.
- **Mlalign2D** und **Mlrefine3D** sind die Portierungen zweier wichtiger Bildverarbeitungsprogramme für die Elektronenmikroskopie. Sie erlauben

eine strukturelle Charakterisierung von makromolekularen Anordnungen in bestimmte Funktionszustände.

Der Sektor der **Arzneimittelsuche** setzt es sich zum Ziel, die Suche nach neuen Arzneimitteln zu beschleunigen indem *in silico* Simulationen von Proteinstrukturen und -dynamik durchgeführt werden.

- Die **WISDOM** Initiative führt groß angelegte Berechnungen für die *in silico* Arzneimittelsuche gegen aufkommende und Industrienationen vernachlässigte Krankheiten durch. Diese molekularen Andockungsberechnungen bestimmen, wie gut sich bestimmte Wirkstoffe an bestimmtem Stellen des Zielvirus anhängen und so dessen Vermehrung hemmen. Erfolgversprechende Kandidaten werden anschließend im Labor getestet. Die Suche wurde bereits für Malaria und den Vogelgrippevirus durchgeführt und die Resultate wurden *in vitro* nachgewiesen.
- **GridGRAMM** ist eine einfache Web Schnittstelle für molekulares Docking. Die Resultate beinhalten eine Qualitätsbewertung und verschiedenste Möglichkeiten auf die 3D Struktur des Komplexes zuzugreifen. Molekulare Andockung kann verwendet werden um die Interaktionen zwischen Molekülen zu untersuchen, um Enzym-Substrat Interaktionen zu analysieren und als Schritt in der Entwicklung von Arzneimitteln.
- Die Zeilsetzung von **GROCK** (Grid Dock) ist die komfortable und einfache Durchführung von Massen-*Screenings* bezüglich molekularer Interaktionen über eine Web-Schnittstelle. Es erlaubt den Benutzern ein Molekül gegen eine Datenbank von bekannten Strukturen zu vergleichen.

EGEE brennt darauf auch andere Applikationen zu evaluieren. Ein Formular zur Bewerbung einer neuen Applikation finden sie unter: <http://egeena4.lal.in2p3.fr/>

Weitere Informationen zum EGEE Projekt finden sie unter <http://www.eu-egee.org/> oder <http://www.gup.jku.at/egee> (in deutscher Sprache)