

Эффективный современный инструмент для медицины

Биомедицинские науки представляют сегодня другое основное сообщество пользователей Грид-технологий. Эта сфера – одна из важнейших областей приложений проекта EGEE, она достаточно четко делится на три области: обработка медицинских графических данных, биомедицинские дисциплины и разработка лекарств.

Первая из них – не что иное, как компьютерный анализ цифровых медицинских изображений. Он опирается на интегрированные мировые медицинские данные и алгоритмы, требующие значительных компьютерных ресурсов, на обработку больших объемов данных и статистические исследования на больших выборках населения.

Построение медицинских изображений включает работу многих связанных друг с другом систем. Некоторые из них требуют значительных вычислительных ресурсов и выполняют параллельную регистрацию изображений. В результате появляются такие технологии, как «виртуальные биопсии» для диагностики рака без хирургического вмешательства, что повышает качество жизни пациентов и помогает снизить стоимость лечения. Компьютерное моделирование дает возможность планировать сеансы радиотерапии на основе результатов графических данных обследования пациента, а Грид-инфраструктура используется для уменьшения времени, необходимого для получения более достоверных результатов. Клинические системы используют классификацию изображений для того, чтобы помочь врачам при принятии решений о выборе методов лечения. Отдельные приложения изучают распространение контрастного вещества в печени и других органах, используя последовательность изображений, полученных методом магнитного резонанса. Движения пациента во время этой процедуры делают невозможным непосредственное сравнение изображений. Однако специальная корректирующая обработка изображений (на основе нахождения подобных фрагментов) позволяет конструктивно анализировать такую последовательность изображений за разумное время.

Интерактивное формирование трехмерных изображений всего объема сложных органов можно осуществить с помощью пакета специализированных программ. Еще один пакет программного обеспечения применяется в нейробиологических исследованиях для ранней диагностики болезни Альцгеймера. В его основе лежит сравнение данных пациента с большим набором

Владимир Кореньков, Вадим Бедняков Перспективы Грид-технологий в промышленности и бизнесе

данных от людей, не имеющих этой патологии. «Бронзовый стандарт» (Bronze Standard) – это исследовательский проект, «оценивающий» алгоритмы получения медицинских изображений. Объем данных, которыми при этом приходится манипулировать, превышает возможности одиночных стандартных компьютеров, но приложение может легко быть распределено по ресурсам Грид и выполнено за приемлемое время.

Вторая область Грид-технологий в биомедицине – биоинформатика. Она охватывает широкий круг систем, куда входят как приложения, позволяющие устранять эффекты аберрации в изображениях с микроскопов и тому подобное, так и специализированные порталы, где Грид-инфраструктура доступна пользователям для анализа, например, белковых цепочек. Здесь также ведется работа со сложными алгоритмами оптимизации обработки биологических данных. Сфера интересов биоинформатики включает в себя геномику, протеомику и филогению.

Так, например, выполняется трехмерный структурный анализ больших макромолекулярных комплексов. В процессе восстановления их структуры используется множество разных изображений исследуемого образца. Эти изображения, однако, часто подвержены различным фоновым воздействиям, что заметно усложняет анализ. Поэтому для составления наиболее адекватной экспериментальным данным модели необходимо сделать много последовательных приближений, что требует значительных Грид-ресурсов. С помощью другого приложения возможно проводить моделирование эволюции генома человека. Оно позволяет восстановить исторический процесс расселения человека по Земле в географически правдоподобных ландшафтах и моделировать молекулярное разнообразие разных человеческих популяций.

И третье. Грид-инфраструктура используется для ускорения поиска молекул с целью создания препаратов от различных болезней, создания новых лекарств посредством компьютерного моделирования структуры и динамики белков. Используя основанные на Грид-технологиях программы расчета пристыковки молекул (молекулярного докинга), исследователи быстро просматривают многие тысячи вариантов и отбирают наиболее перспективные соединения, что снижает стоимость разработки препаратов.

Цель расчетов для поиска – определить, насколько эффективно конкрет-

ные лекарства присоединяются к определенным участкам вируса-мишени. Успешными оказались приложения для поиска средств от малярии и птичьего гриппа. Планируется поиск лекарств и от других вирусов.

В этом направлении в год выполняется около 15 тысяч различных исследований. Так, например, в ходе разработки одного лекарства за месяц был проведен анализ молекулярного докинга, который потребовал бы почти 100 лет работы обычного компьютера.

Часть 4.

Науки о Земле и другие приложения

В области наук о Земле Грид-технологии сформировали ряд специализированных приложений в гидрологии, в сфере наблюдений за поверхностью Земли со спутников, в климатологии (например, прогнозирование наводнений), физике суши (твердой Земли), в области мониторинга атмосферы и океана и так далее. В рамках специализированной виртуальной организации ESR (Earth Science Research – «Исследования в области наук о Земле») развернуто несколько исследовательских приложений, где Грид-инфраструктура на базе спутниковой информации помогает вести анализ характеристик озонового слоя, а также поиск и обнаружение утечек нефти. В работе ESR важное место занимают приложения в области физики суши, которые сосредоточены на оперативном анализе механизмов землетрясений, а также на численном моделировании условий землетрясений в сложных трехмерных геологических моделях. Очевидно, что результаты этой работы помогут научному сообществу лучше понять природу этих разрушительных природных явлений. В области гидрологии с помощью Грид-технологий изучается характер проникновения морской воды в прибрежный водоносный слой в бассейне Средиземного моря, обусловленный хозяйственной деятельностью человека.

Один из способов предсказания извержения вулканов основан на преобразовании геофизической информации о поведении вулканов в звуковые волны. Картина звуковых волн анализируется, и это позволяет предугадывать поведение вулканов в близком будущем, в том числе предсказывать извержения.

Грид-технологии также активно используются в таких областях, как термоядерный синтез (проект ITER), ас-

трофизика (международные проекты MAGIC, Planck, ANTARES, NEMO), молекулярное моделирование (проекты вычислительной химии CHARON, CompChem), нанотехнологии, археология и в других направлениях. Везде глобальная Грид-инфраструктура упрощает сотрудничество между географически распределенными сообществами и позволяет им совместно пользоваться компьютерными ресурсами и данными. Именно поэтому число Грид-проектов в образовании, промышленности, медицине и бизнесе быстро растет.

Действительно, на основе Грид-технологий можно создать бизнес-среду для организации распределенных вычислений в таких коммерческих приложениях, как электронный бизнес, распределенное производство, коллективное проектирование сложных объектов, исследование и сбор данных, системы обработки с высокой пропускной способностью, распределенный супермаркетинг и тому подобное. Задачей любой коммерческой структуры является получение прибыли при минимизации издержек. Поэтому любая компания, нуждающаяся в ресурсоемких вычислениях, должна быть заинтересована в применении технологии, позволяющей получить более высокопроизводительные мощности с меньшими затратами.

Часть 5.

Грид и бизнес-среда

Учитывая радикальное различие между наукой и бизнесом, очевидно предположить, что Грид-среда для бизнеса будет отличаться от научно-вычислительной. У Грид-решений для бизнеса видится как минимум одно важное свойство – это экономически более эффективная модель получения результата. Все предыдущие «вычислительные идеи» в этой области сводились, главным образом, к построению инфраструктуры информационных технологий за счет «повторного» использования вычислительных ресурсов при изменении бизнес-процессов и упрощения системы администрирования.

Владелец или управляющий предприятием обычно далеко не компетентен в информационных технологиях и лишь в самых общих чертах может понять, почему нельзя черпать вычислительные ресурсы из розетки, как электроэнергию, или платить только за использованные ресурсы, как, например, за телефон или воду. Почему мощный сервер ему нужен в момент составления годового отчета, а платить за этот сервер он должен в течение всего года?

Как и всякая новая концепция, Грид для бизнеса часто воспринимается упрощенно. Многие технические специалисты полагают, что достаточно соединить несколько компьютеров в ре-

шетку, и они получат Грид-систему. Это неверно как для бизнес-Грида, так и для вычислительных Грид-систем. Фактически, бизнес-Грид – это распределенная система обработки данных с единым центром управления, в которой вычисления выполняются на группе связанных между собой компьютеров. При этом нагрузка на серверы автоматически распределяется таким образом, чтобы соответствовать текущему потреблению вычислительных ресурсов.

В настоящий момент различные компании, включая такие гиганты индустрии информационных технологий, как Sun, Oracle, HP, IBM, предлагают свои решения, основанные на их понимании Грид-технологий. Главная проблема, однако, заключается в том, что, в отличие от научной сферы, в этой области пока еще не все стандартизовано и каждая компания реализует Грид-концепцию в бизнесе по своему усмотрению. Основная задача состоит в том, чтобы такие системы стали универсальными и могли адаптироваться к любым изменениям бизнес-процессов компании.

В Европе и Америке уже накоплен заметный опыт применения Грид-технологий для решения достаточно широкого класса задач, в том числе бизнес-приложений. Один из ярких примеров – это европейский проект BEinGRID (Business Experiments in Grid – «Эксперименты по применению Грид-технологий в бизнесе»), главная цель которого – содействие распространению Грид-технологий следующего поколения.

Для этого планируется создать специальный язык верхнего уровня для управления программным обеспечением. В рамках BEinGRID будет проведен ряд целевых пробных бизнес-экспериментов для внедрения и распространения Грид-технологий в самых разных секторах европейского бизнеса (финансы, экономика, текстильная и химическая промышленность, розничная торговля, развлечения, игры и др.). Чтобы свести к минимуму разработку новых Грид-компонентов, BEinGRID планирует разворачивать инновационные решения в области Грид-технологий, используя существующие Грид-компоненты Европейского союза и других регионов.

Однако в настоящее время в России потенциал такого рода практически нигде не используется, его не видно в промышленности, бизнесе, его нет и в государственном управлении.

Часть 6.

Грид в России

Чтобы активизировать деятельность по бизнес-Гриду, в России следует создать Грид-портал для реализации заказов по адаптации компьютерных приложений к работе в среде Грид, в

первую очередь – бизнес-приложений (методика, инструментальные средства, обучение, поддержка в рабочем состоянии и т.п.). Эту общую деятельность можно условно разделить на три главных направления. Во-первых, это исследование и тестирование различных Грид-систем, во-вторых, разработка и внедрение Грид-решений для клиентов на основе существующих продуктов, и, в-третьих, адаптация бизнес-приложений для Грид-среды.

По первому поводу напомним, что, различные компании предлагают свои Грид-продукты. И каждый из них, безусловно, рекламируется как «самое замечательное решение для вашего бизнеса», что почти всегда неверно. Необходимо знать реальные возможности той или иной системы и, конечно же, потребности конкретного заказчика. Для этого следует проводить качественное тестирование и исследование возможностей предлагаемых на рынок Грид-систем.

Второе направление деятельности, очевидно, связано с требованиями клиентов к системе и с учетом результатов исследования и тестирования различных Грид-систем.

Наиболее важна, пожалуй, в настоящее время деятельность по адаптации бизнес-приложений для Грид-среды. Сам по себе Грид как таковой не представляет особого коммерческого интереса, но исключительно важны преимущества, которые он дает по сравнению с другими вычислительными технологиями. Для компаний чрезвычайно ценны выигранное время при использовании подобного рода решений и уменьшение затрат на информационно-технологическую инфраструктуру. Грид же можно считать некоторой «ускоряющей подложкой» под эти бизнес-приложения, которые вряд ли изначально разрабатывались под Грид-платформу. И основная задача в этом направлении деятельности – как раз переработка бизнес-приложений, или создание дополнительного слоя программного обеспечения, позволяющих запускать конкретные приложения заказчиков, но уже в Грид-среде, в полной мере используя все неоспоримые преимущества Грид-технологий.

Итак, развитие и совершенствование Грид-технологий, создание Грид-инфраструктур различного уровня (национальных, региональных, проблемно-ориентированных, корпоративных и т.п.) – это задачи, стратегически важные как для развития промышленного потенциала страны, укрепления ее обороноспособности и безопасности, так и для обеспечения участия России в решении глобальных задач планетарного масштаба: мониторинг, анализ и прогноз развития политических, экономических, географических, климатических и социальных процессов на нашей планете.