

Gesundheitsrisiken im Computer berechnen - EU fördert neues GRID-Computing-Projekt

Fast 100.000 Chemikalien sind weltweit in der Industrie und in Haushalten in Umlauf, wobei für einen Großteil die gesundheitlichen und ökologischen Auswirkungen unbekannt sind. Das Ziel der REACH-Richtlinie der EU ist es, die Gesundheits- und Umweltrisiken von ca. 30.000 dieser Substanzen zu untersuchen. Klassische biologische und chemische Verfahren würden dazu die Leben von Millionen von Versuchstieren fordern. Neueste Erkenntnisse der Chemie und Biologie erlauben es jedoch, die Experimente aus den Laboren in die Computer zu verlagern („in silico“-Experimente). So wird beispielsweise erfolgreich versucht, Vorhersagen über die Toxizität von Stoffen aus mathematischen Modellen zu gewinnen. Dazu wird das bekannte Wissen über die biologische Wirkung von Teilen einer Chemikalie (zum Beispiel einer Molekülkette) auf das gesamte Molekül zu erweitern. Diese Berechnungen sind jedoch enorm zeitaufwendig.

Das Zentrum für Informationsdienste und Hochleistungsrechnen (ZIH) der TU Dresden wird im Projekt CHEMOMENTUM, das von der EU mit insgesamt 2,6 Millionen Euro gefördert wird, gemeinsam mit Chemikern, Biologen und anderen Informatikern ein so genanntes „GRID“ aufbauen, um derartige Untersuchungen im erforderlichen Ausmaß zu ermöglichen. Ein GRID verbindet geografisch verteilte Computer und Daten zu einer virtuellen Einheit, so dass es für die Wissenschaftler wie ein einziger großer Rechner erscheint, auf dem sie ihre Programme ausführen können.

Neben der Entwicklung von Software zum Management der großen verteilten Datenmengen wird das ZIH auch seine Computer-Ressourcen - wie den sich gerade in der Installation befindlichen 15 Millionen Euro teuren „Hochleistungsrechner/Speicherkomplex“ - im Projekt als Teilkomponente einbringen. Gemeinsam mit den Partnern aus Wissenschaft und Industrie (beteiligte Nationen sind Deutschland, Estland, Frankreich, Italien, Nordirland, Polen und die Schweiz) ist man sich dabei sicher, mit einem solchen System die enormen Kosten der Studien zur REACH-Richtlinie, die vermutlich mehrere Milliarden Euro betragen werden, signifikant reduzieren zu können. Des Weiteren sollen aber auch die Behörden mit einem Werkzeug zur Überprüfung der „in silico“-Experimente unterstützt werden.

Weitere Informationen:

Dr. Ralph Müller-Pfefferkorn, Dr. Hartmut Mix
Zentrum für Informationsdienste und Hochleistungsrechnen

Tel: 0351 463-39280

E-Mail: ralph.mueller-pfefferkorn@tu-dresden.de
hartmut.mix@tu-dresden.de

WWW: www.tu-dresden.de/zih