

Evropská chemicko-biologická databáze již konečně zná svou domácí adresu

CZ-OPENSREEN, celým názvem Národní infrastruktura chemické biologie, je velká výzkumná infrastruktura provozována Ústavem molekulární genetiky AV ČR, v. v. i. CZ-OPENSREEN provozuje v rámci České republiky nejmodernější výzkumnou infrastrukturu v oblastech chemické biologie a genetiky s možností otevřeného přístupu externím uživatelům. CZ-OPENSREEN prezentuje Českou republiku v konsorciu evropské výzkumné infrastruktury EU-OPENSREEN ERIC, jehož první ustavující zasedání proběhlo 12. dubna 2018 v Berlíně.

CZ-OPENSREEN má v rámci EU-OPENSREEN nezastupitelnou a opravdu výjimečnou roli. Náročným procesem evaluace byl Ústav molekulární genetiky vybrán jako hostitelská instituce Evropské chemicko-biologické databáze (ECBD). Tato skvělá zpráva byla oznámena právě na výše zmíněném zasedání v Berlíně, a tak 12. duben 2018 je pro tento český uzel konsorcia dnem červeně zvýrazněným v kalendáři.

V databázi ECBD budou uloženy všechny výstupy z partnerských center konsorcia EU-OPENSREEN, jako jsou data z testování s vysokou propustností (HTS) či struktury chemických sloučenin. Všechna tato data budou zpřístupněna na bázi otevřeného přístupu široké vědecké veřejnosti. Než dojde k jejich zpřístupnění, budou procházet nezbytným procesem ověřování a kontrolou kvality, teprve poté budou vypuštěna do světa. O jejich validaci se postarají nejprve partnerské instituce, ve kterých budou tato data vznikat, a následně pražský ECBD tým. Přátelské uživatelské prostředí by mělo umožnit jednoduché i pokročilejší (s možností přesného nastavení parametrů) vyhledávání a identifikaci uživatelsky definovaných datových množin. Součástí databáze budou také nástroje pro analýzu nashromážděných dat, aby je jak začátečníci, tak pokročilí uživatelé byli schopni plně využít. Kromě běžné uživatelské podpory ECBD týmu bude ECBD web nabízet i interaktivního průvodce s přehledem hlavních funkcí a popisem zobrazovaných dat. Nastřádaná, ověřená data budou dále z ECBD předávána do databáze ChEMBL, za účelem zvýšení jejich dostupnosti. Je důležité poznamenat, že o hardwarové zázemí a bezpečné prostředí ECBD se bude starat CESNET - národní e-infrastruktura, která poskytuje široké spektrum služeb pro přenos, ukládání a zpracování dat, spravuje také velká datová úložiště pro ukládání a sdílení dat. Zapojení CESNETu do projektu ECBD je skvělým příkladem spolupráce Velkých infrastruktur na národní úrovni.

Nezbývá než popřát ECBD týmu hodně kvalitních dat a vědecké veřejnosti hodně nápadů, jak tato data využít pro další výzkum. Infrastruktury totiž existují především jako pomoc pro ty, kteří si náročné technologie a testování nemohou dovolit. Jejich úkolem je tyto věci umožnit a posouvat tak znalosti o našem světě dál až třeba k novým léčivům.

Infrastruktura CZ-OPENSREEN je podpořena z programu MŠMT: LM - Projekty velkých infrastruktur pro VaVal (2010-2017), číslo projektu LM2015063.

<https://www.openscreen.cz>

<http://www.eu-openscreen.eu>

<https://www.cesnet.cz>

<https://www.vyzkumne-infrastruktury.cz>