

Infraestructure to support biomedical applications

Francisco Abel Cedrón Santaefemia



XUNTA
DE GALICIA



UNIÓN EUROPEA



UNIVERSIDADE DA CORUÑA

galicia

De donde sale

- BioCAI surge del proyecto Red Gallega de Investigación Biomédica en el año 2008
- Se identifica un clarísimo potencial de la investigación en Galicia para la investigación en biomedicina.
- Limitada por el procesado de los datos
- Por lo que se solicita un proyecto al ministerio (Resolución definitiva en 2012)
- Creación de un cluster dedicado a la investigación en biomedicina

Usos

- Análisis de secuenciación de moléculas
- Análisis de proteínas
- Análisis de interacciones complejas basadas en potenciales
 - Docking
 - Virtual Screening
- Aplicación de técnicas de Computación Evolutiva y redes neuronales en el desarrollo e identificación de fármacos o enfermedades
- Etc...

Needleman-Wunsch

- Es un algoritmo que sirve para analizar las similitudes y diferencias entre dos secuencias
- El objetivo del algoritmo es alinear dos cadenas
- $s_1 = \text{GAATTCAGTTA}$
- $s_2 = \text{GGATCGA}$

El alineamiento sería

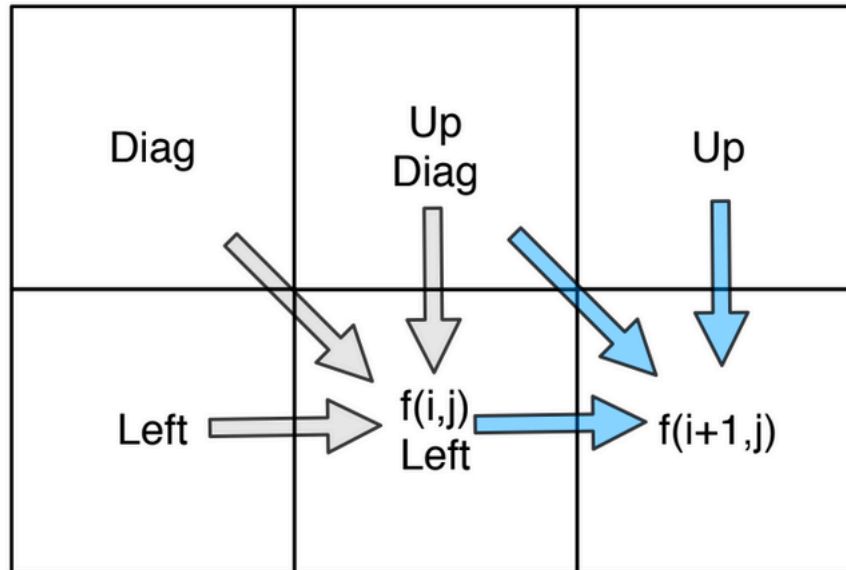
GAATTCAGTTA

GGAT-C-G--A

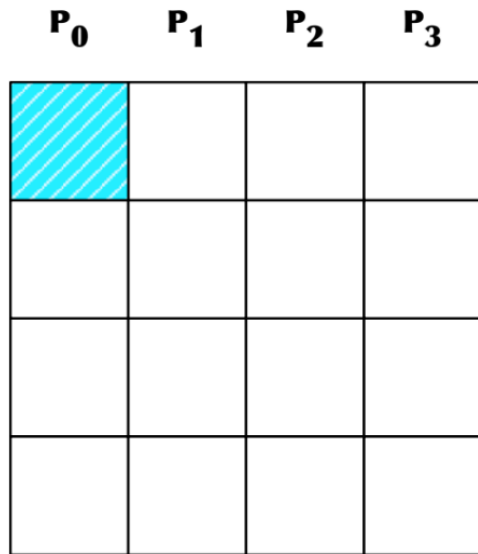
Needleman-Wunsch

		A	G	A	C	T	A	G	T	T	A	C
	0	-5	-10	-15	-20	-25	-30	-35	-40	-45	-50	-55
C	-5	-3	-8	-13	-6	-11	-16	-21	-26	-31	-36	-41
G	-10	-6	4	-1	-6	-9	-12	-9	-14	-19	-24	-29
A	-15	0	-1	14	9	4	1	-4	-9	-14	-9	-14
G	-20	-5	7	9	9	6	3	8	3	-2	-7	-12
A	-25	-10	2	17	12	7	16	11	6	1	8	3
C	-30	-15	-3	12	26	21	16	11	11	6	3	17
G	-35	-20	-8	7	21	23	20	23	18	13	8	12
T	-40	-25	-13	2	16	29	24	19	31	26	21	16

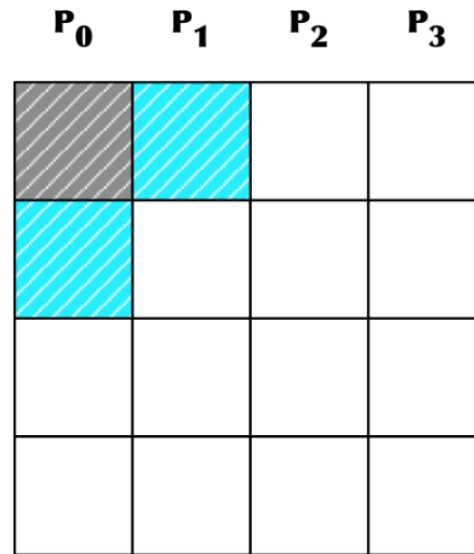
Needleman-Wunsch



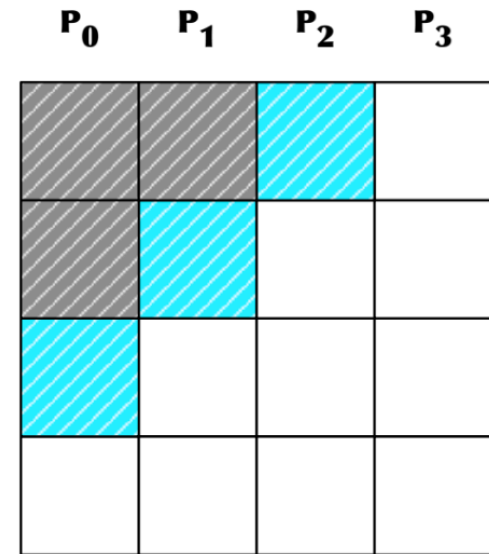
Needleman-Wunsch



Instante 1

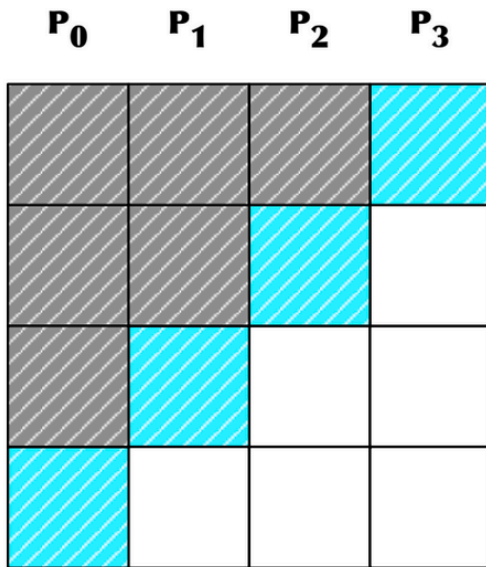


Instante 2

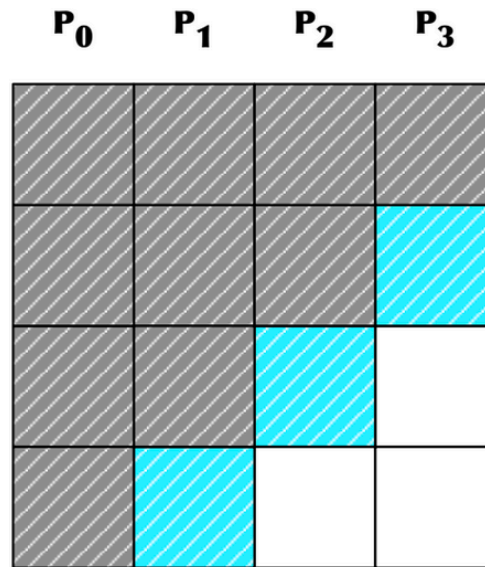


Instante 3

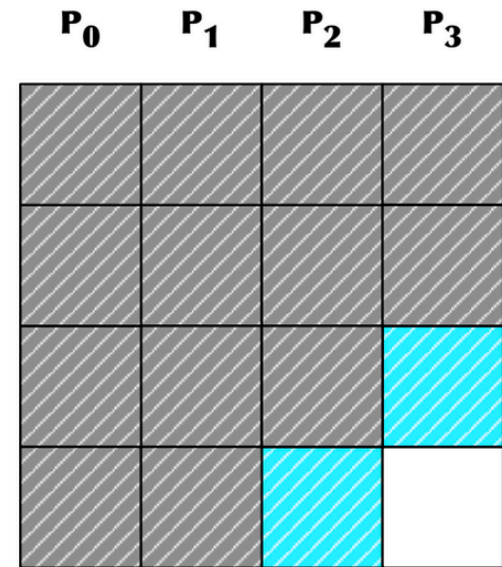
Needleman-Wunsch



Instante 4

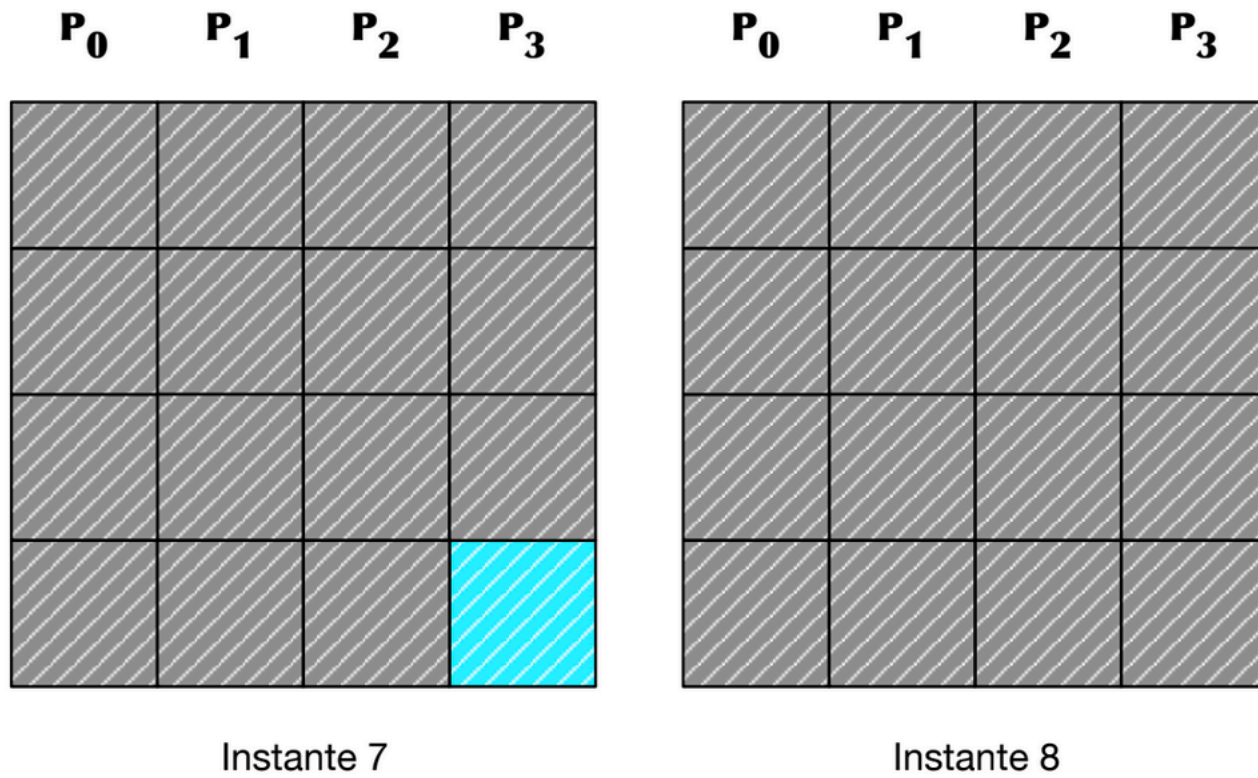


Instante 5

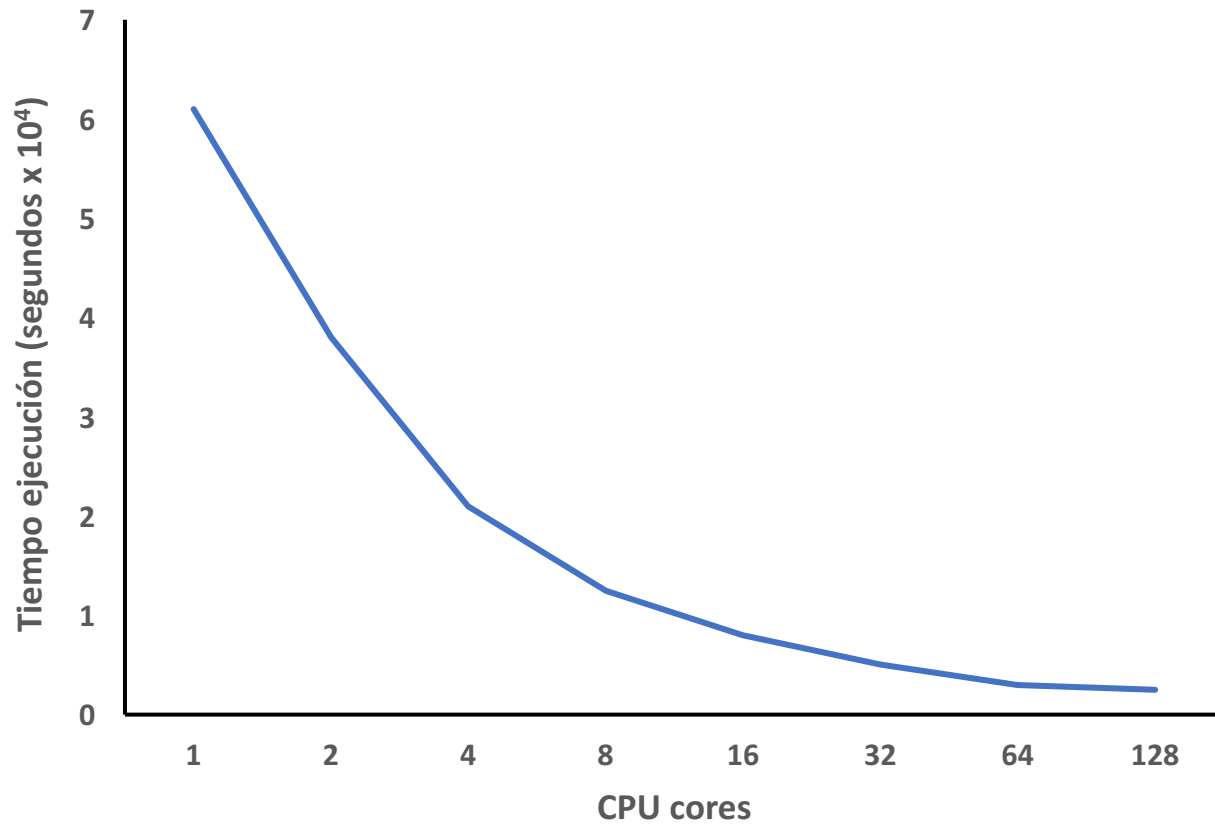


Instante 6

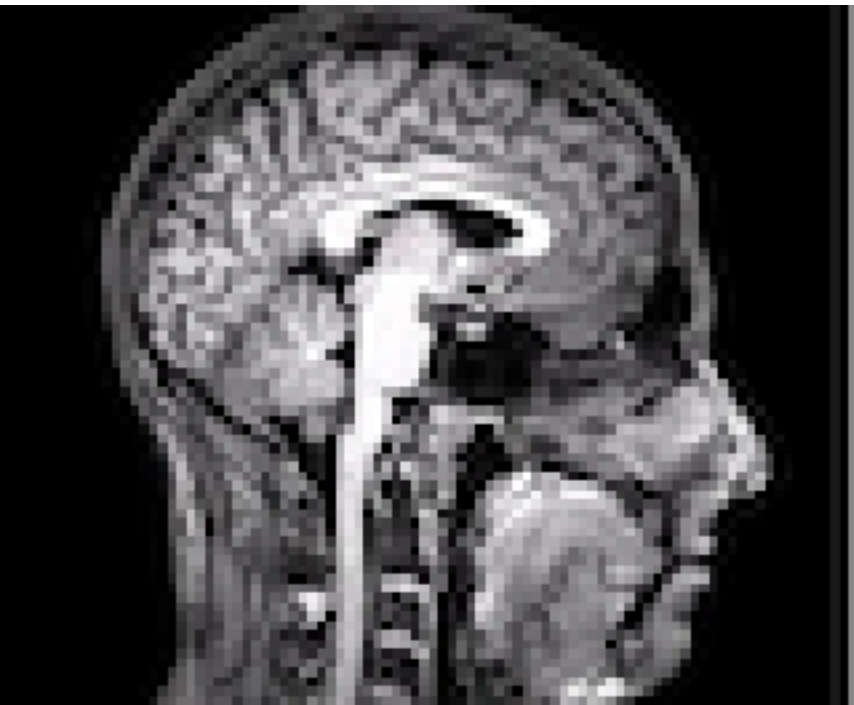
Needleman-Wunsch



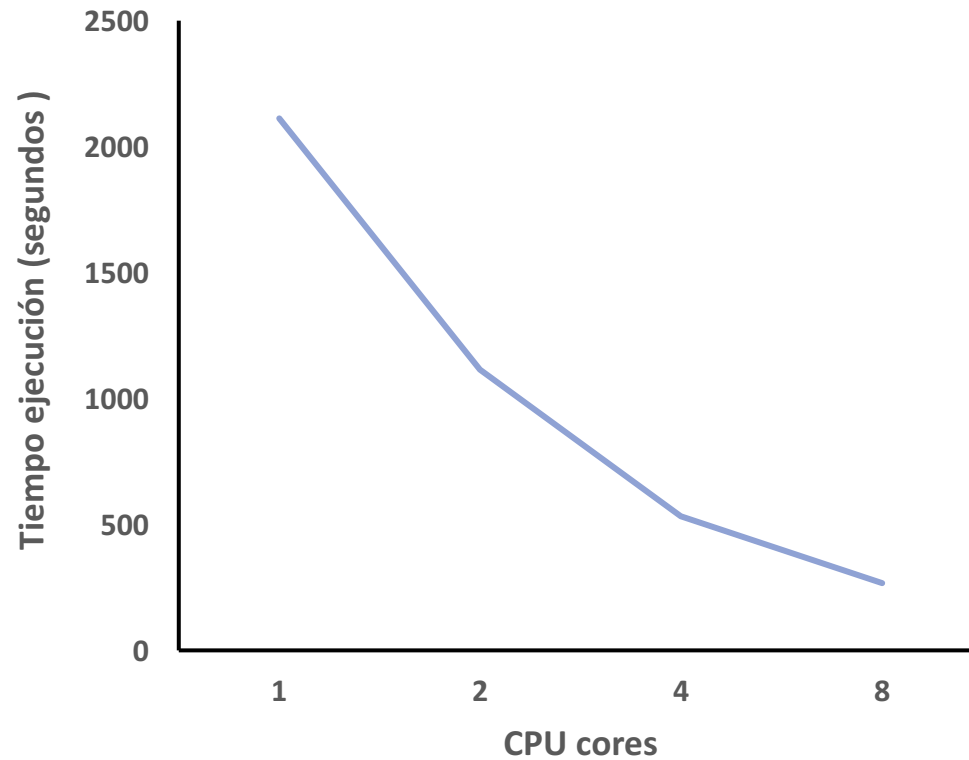
Needleman-Wunsch



Escalado de imágenes



Escalado de imágenes



Características

- Información técnica
 - 200 cores de cómputo
 - Interconexión a 56 Gb/s
 - 40 TB de almacenamiento
- Software adaptado para HPC
 - SLURM
 - Instalación por módulos

GRACIAS
ARIGATO
SHUKURIA
JUSPAXAR
DANKSCHEEN
TASHAKKUR ATU
YAQHANYELAY
SUKSAMA
EKHMET
TINGKI
BI'YAN
SHUKRIA
THANK
YOU
BOLZİN
MERCI
GRAZIE
MEHRBANI
PALDIES
GOZAIMASHITA
EFCHARISTO
KOMAPSUNIDA
MAAKE
MAKOTON