



↘ POLITECNICO DI MILANO



# Computational Medicine: a Proteomics Example and Other Potentials

Giuseppe Baselli

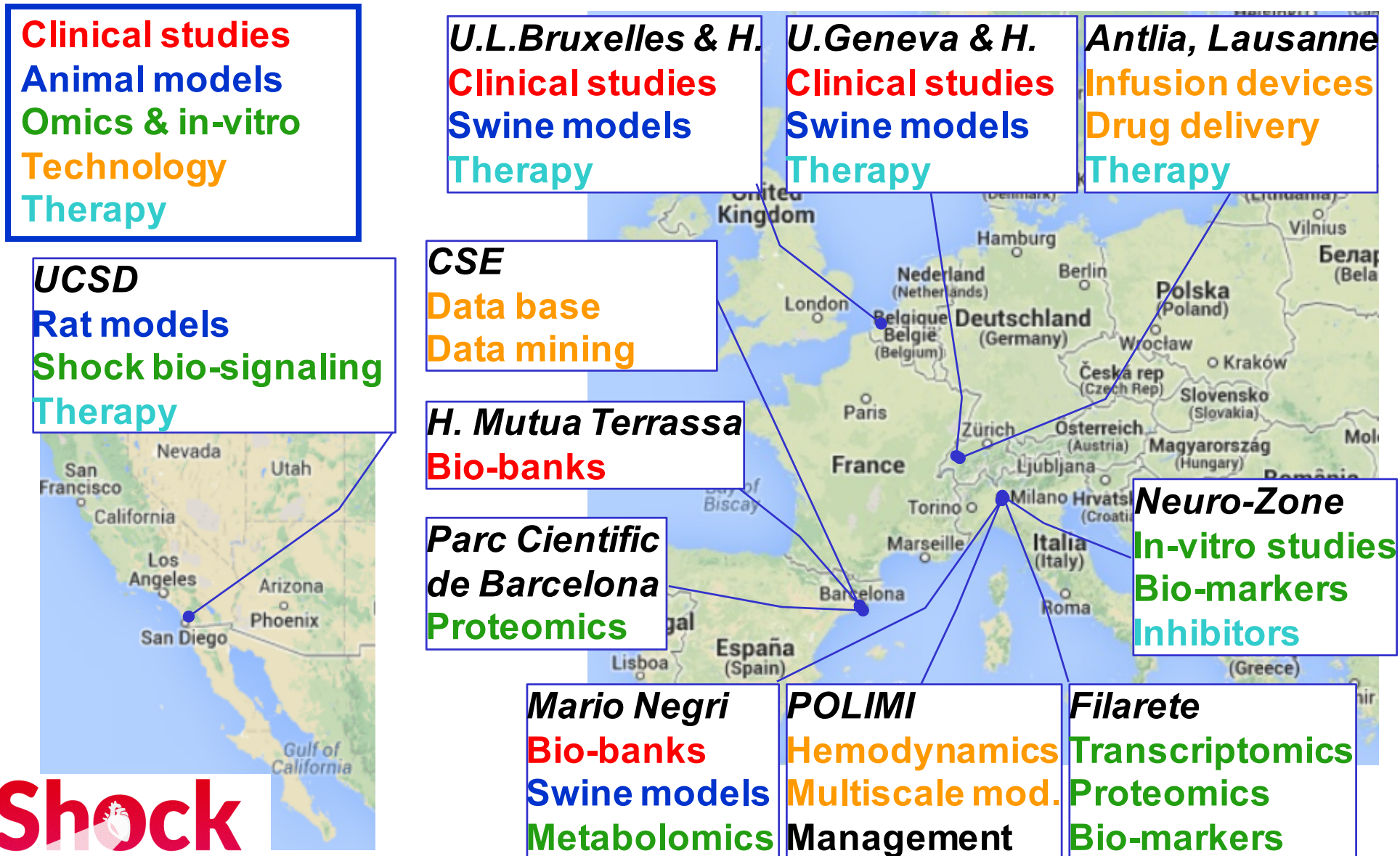


- Ricerca Biomedica → Calcolo intensivo su grandi moli di dati
- Pacchetti SW per PC sviluppati da laboratori primari
- Aperti in genere agli altri laboratori
- Contengono anni/uomo di know-how specifico e di sviluppo SW
- Sono considerati come standard per il confronto dei dati
- Difficile (o impossibile) trasporto su mainframe di supercalcolo
- Cluster di PC, in Cloud → tempi di calcolo sopportabili, accesso remoto
  
- Esempio 1 – Ora implementato su PoliCloud  
Progetto EC FP7 ShockOmics – Analisi Proteomica/Peptidomica  
Prof Gabriella Tedeschi e Dr. Armando Negri (UNIMI)  
***Si ringrazia: Giuseppe Serazzi, Alessandro Frossi, Letizia Tanca***
  
- Esempio 2 – Potenziale interesse per PoliCloud – Neuroimmagini  
Dr. Marcella Laganà (Fond. Don Gnocchi) e Ing. Laura Pelizzari (POLIMI)



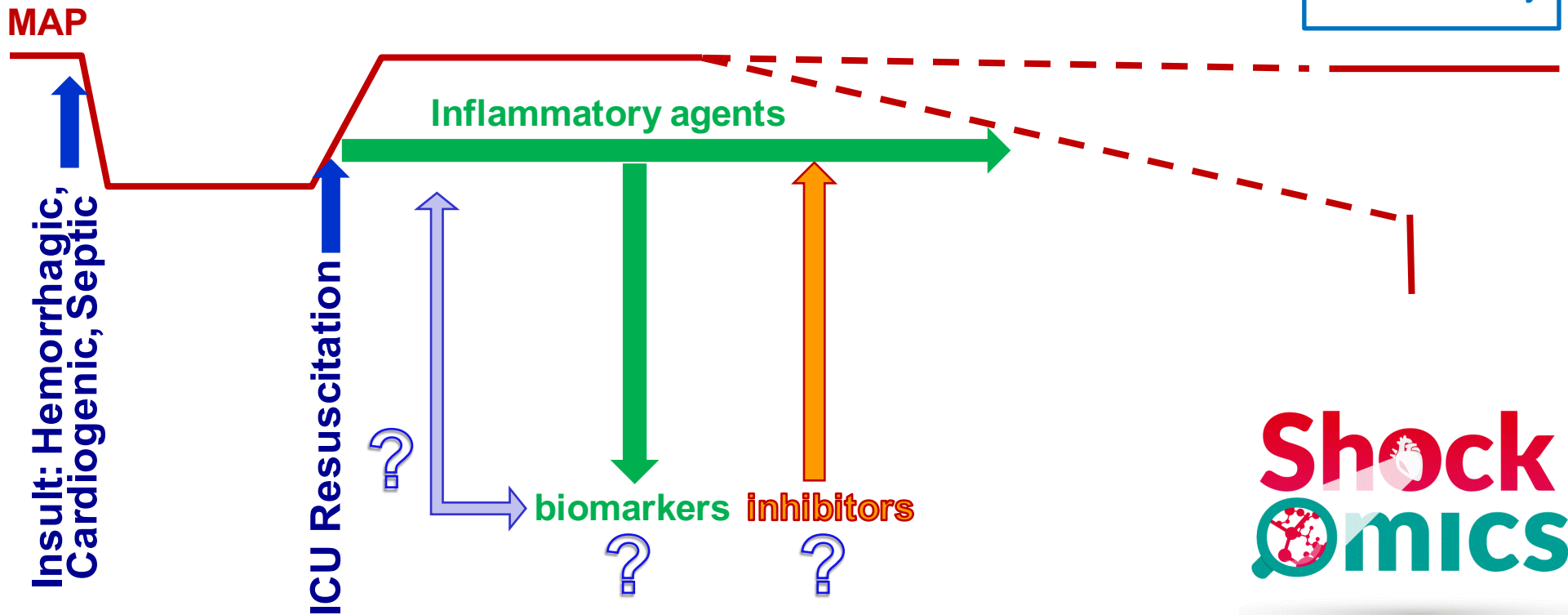
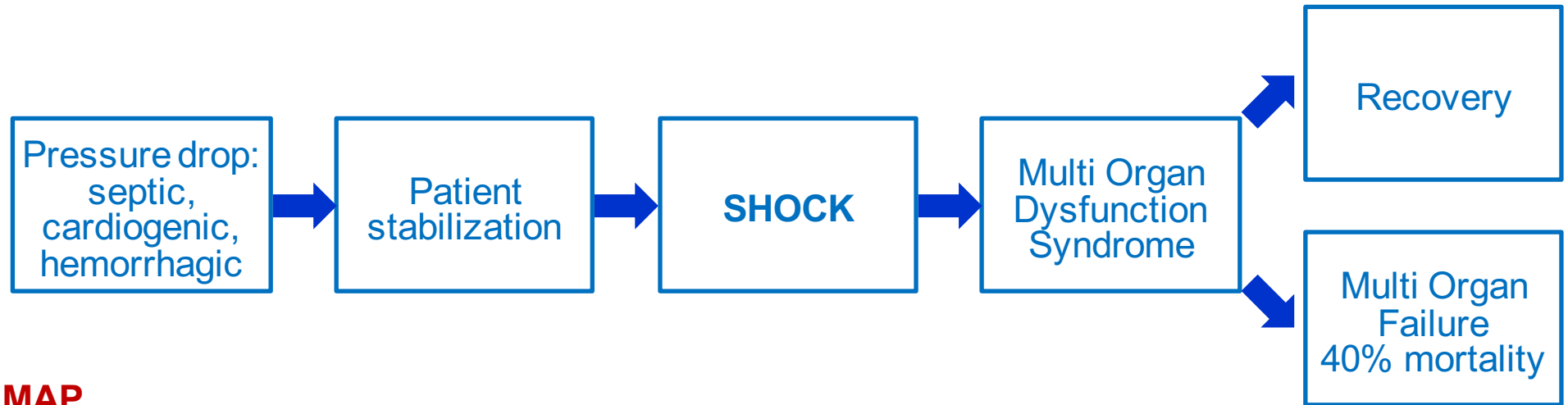
# Shockomics EU project

## Role of Partners – A Multidisciplinary Project





# The Problem of Shock (in one slide, as far as an engineer may understand)



## Progetto Schockomics

**Animal model**  
Hemorrhagic shock rats



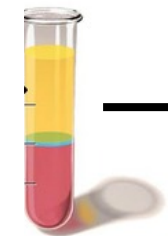
Plasma



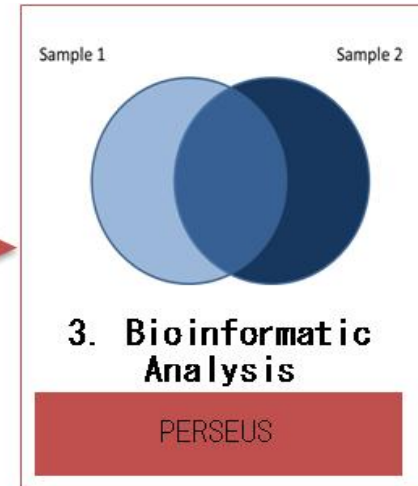
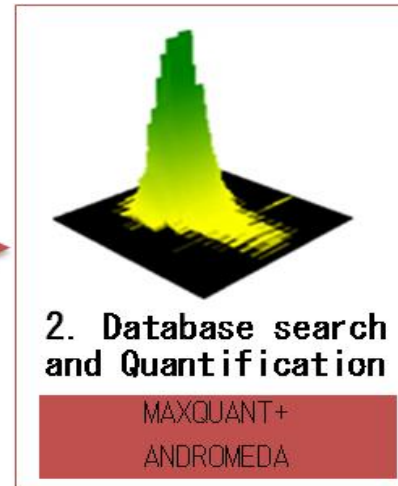
**Ipotesi:** durante shock emorragico si ha aumento di PEPTIDI nel sangue (prodotti da degradazione di proteine) in seguito a liberazione di enzimi proteolitici provenienti anche da apparato digerente

**Obiettivo:** identificazione e dosaggio di peptidi presenti nel sangue di animali in diverse condizioni: controllo (CTR)/shock emorragico non trattati (HS)/shock emorragico trattato con farmaci (HST) per VERIFICARE DIRETTAMENTE DIFFERENZE QUALITATIVE E QUANTITATIVE

**Metodo:** approccio «PEPTIDOMICO» basato su SPETTROMETRIA DI MASSA



Plasma



Spettrometro di massa (MS)  
Raw data file (~1 Gb per analisi)



**PoliCloud**  
Programma **Max Quant** :  
identificazione e quantificazione  
di tutti i peptidi

Tutti i files di un esperimento vanno analizzati contemporaneamente con **Max Quant**



### Esperimento precedente:

Gruppo CTR (controlli sani): 3 animali x 3 repliche tecniche = 9 analisi MS

Gruppo HS: 3 animali x 3 repliche tecniche = 9 analisi MS

Ogni analisi conteneva circa 30,000 spettri di massa generando un file di raw data di circa 1GB.

Analisi [Max Quant](#) di esperimento precedente (18 files) su **PC** (processore i7-3.4 GHz, 8 cores, 32 GB di RAM): durata **21 giorni**

Esperimenti in corso: numero maggiore di condizioni/animali (fino a 60 files da analizzare contemporaneamente): necessità di aumento della velocità di analisi

### **PoliCloud:**

macchina Windows Server 2012 R2 spazio computazionale per una VM con 20 core, 40 GB di RAM e 500GB di HDD





Prova eseguita per verificare fattibilità con Policloud:

6 files analizzati in parallelo su PC e server PoliCloud

	Durata analisi*	Numero proteine identificate
PC	80 ore	1636
PoliCloud	82 ore	1634

- (in questa prova le «opzioni» di ricerca sono state in parte semplificate per velocizzare le analisi)

Quindi: stesse prestazioni

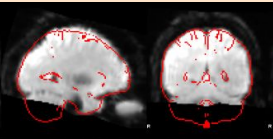
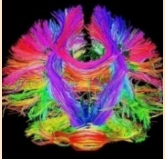
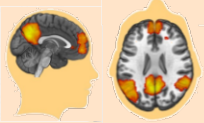
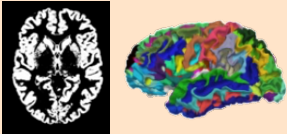
Poiché ogni file viene analizzato in parallelo su cores diversi, ci si aspetta un considerevole vantaggio in termini di durata quando, come nell'esperimento reale, i files da analizzare sono >8 (max numero di cores del PC usato finora).





# PoliCloud potential application in neuroimaging



Application	Tool Package	Operating system	Run time
<b>Registration</b> 	a) FSL (FMRIB, Oxford) b) ANTs (UPENN, UVA, U Iowa) c) Freesurfer (Martinos Imaging Center at MIT)	a,b,c) Linux a,b,c) Windows via a Virtual Machine a,b,c) macOS	From minutes to hours
<b>Fiber tracking</b> 	a) FSL (FMRIB, Oxford) b) Trackvis (Martinos Imaging Center at MIT) c) Freesurfer (Martinos Imaging Center at MIT)	a,b,c) Linux b) Windows a,b,c) Windows via a Virtual Machine a,b,c) macOS	Hours
<b>Resting state fMRI analysis</b> 	a) FSL (FMRIB, Oxford) b) SPM (UCL, London) c) Freesurfer (Martinos Imaging Center at MIT)	a,b,c) Linux a,b,c) Windows via a Virtual Machine a,b,c) macOS	From hours to days
<b>Segmentation</b> 	a) FSL (FMRIB, Oxford) b) Freesurfer (Martinos Imaging Center at MIT) c) ANTs (UPENN, UVA, U Iowa)	a,b,c) Linux a,b,c) Windows via a Virtual Machine a,b,c) macOS	From minutes to days



*THANK YOU*