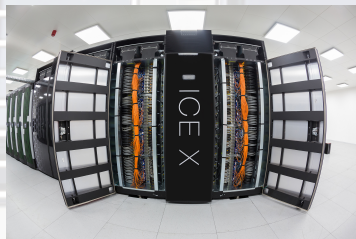


IT4Innovations

Superpočítače v lékařství

Tomáš Kozubek, Petr Strakoš



IT4Innovations
national01\$#&@
supercomputing
center@*01%101





Exascale Compound Activity Prediction Engines

Exascalové aplikace strojového učení na úlohy ve farmaceutickém průmyslu

Problém: Jak predikovat chování chemických sloučenin při vývoji nových léků?

Targets (bioassay)

?	?	?	?	?	?	?	?	?	?
?	?	?	?	?	?	?	?	?	?
?	?	?	?	?	?	?	?	?	?
?	?	?	?	?	?	?	?	?	?
?	?	?	?	?	?	?	?	?	?
?	?	?	?	?	?	?	?	?	?
?	?	?	?	?	?	?	?	?	?
?	?	?	?	?	?	?	?	?	?
?	?	?	?	?	?	?	?	?	?
?	?	?	?	?	?	?	?	?	?

Compounds



Chemogenomika,
modelování interakce
chemických sloučenin s
biologickými organismy

<http://excape-h2020.eu/>

- Multi-target, multi-feature
- Deep learning
- Matrix factorisation
- Conformal prediction



Machine Learning

Exascale
 10^{18}

Chemo-
genomics

- Compound activity
- Data preparation
- Benchmarking

High
Performance
Computing

- Cluster deployment
- Programming model



HyperLoom

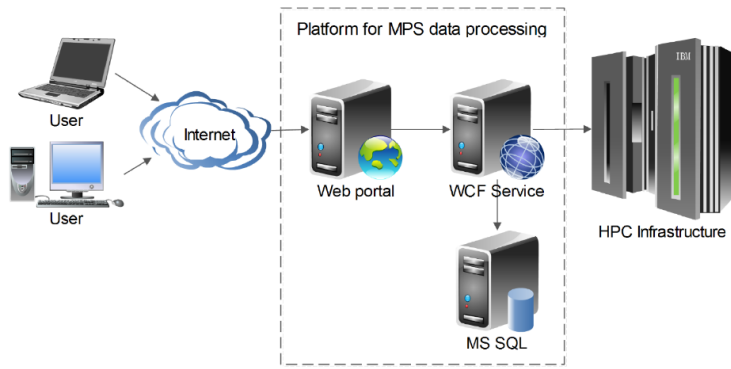
Centrum kompetence MOLDIMED

HPC platforma pro masivně paralelní sekvenování dat

&IT4I@&01

- Jednoduchý a intuitivní přístup k HPC prostředkům
- Modulární HPC architektura
- Integrace nástrojů bioinformatiky
- Anotační a analytické nástroje
- SW pro vyhodnocení NGS diagnostických výsledků

HPC-as-a-Service



Software for analysis of NGS data

Search...

Home

Custom pipelines

Visualization

Tools

- FastQC
- Trimomatic
- BWA
- GATK
- Picard tools
- SAM tools
- BCF tools

Annotations tool

File Upload

Feedback

Annotations

Storage files

Input files

- HaloPlex.fastq
- NA18507_sort_R1.fastq
- NA18507_sort_R2.fastq
- RPanel.fastq
- test.fastq
- select all

Copy Files to Input Delete Storage Files

Upload input files

This page must remain open until the end of the file upload.

Drop files here to upload or [select from your computer](#)

Annotations

Input files

- HaloPlex_NS_FM_CS_MD.vcf
- select all

Delete Input Files

VCF

- On clinvar_all
- On clinvar_diseases
- On clinvar_drug-response

Service response

Starting Annotations job ...

Job status: Configuring

Preparing file: HaloPlex_NS_FM_CS_MD.vcf

Job status: Running

Job status: Finished

Preparing output files ...

Downloading file: HaloPlex_NS_FM_CS_MD.vcf.annot.removed_duplicates.vcf.annot.gff.annot.go_all

Downloading file: HaloPlex_NS_FM_CS_MD.vcf.annot.vcf.annot.gff.annot.go_all.hpo_all.table.csv

User data cleaned.

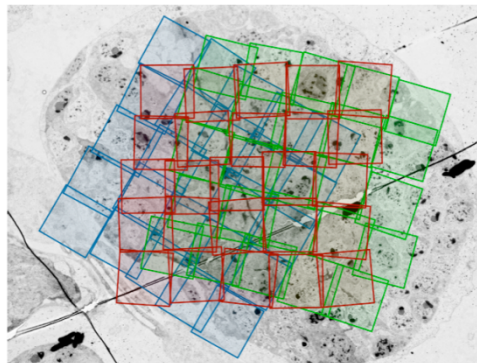
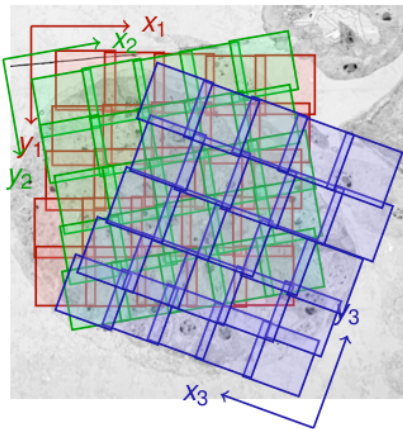
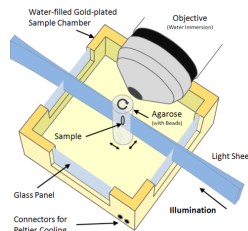
Job finished.



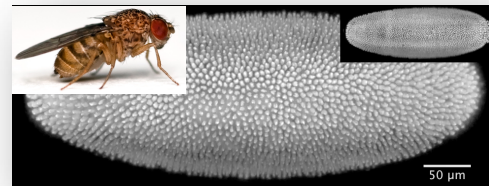
T A
Č R

HPC-as-a-Service pro pokročilé zobrazování v biologii a lékařství

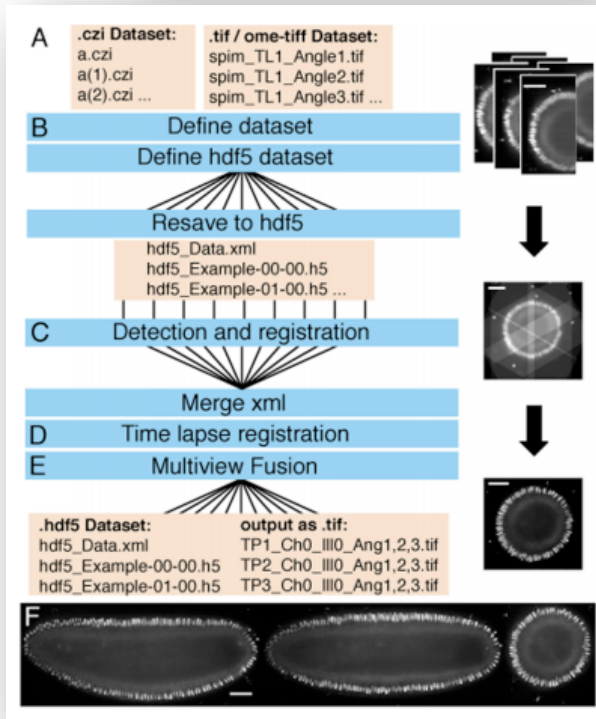
Fiji (Fiji Is Just ImageJ) open source software na zpracování obrazu odvozený od ImageJ



Registrace obrazu



Drosophila embryo



CBG

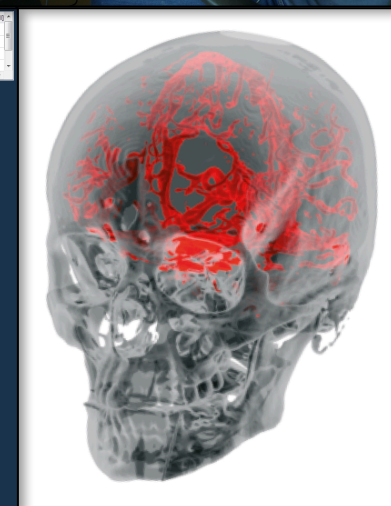
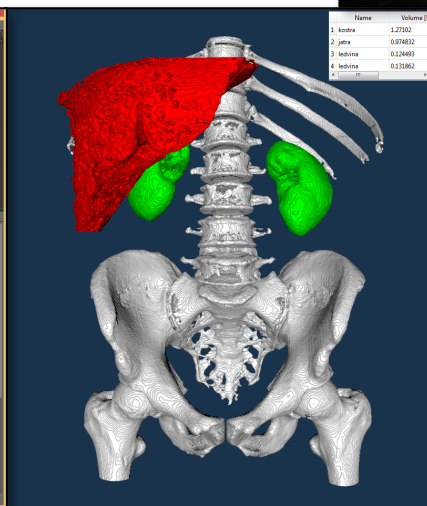
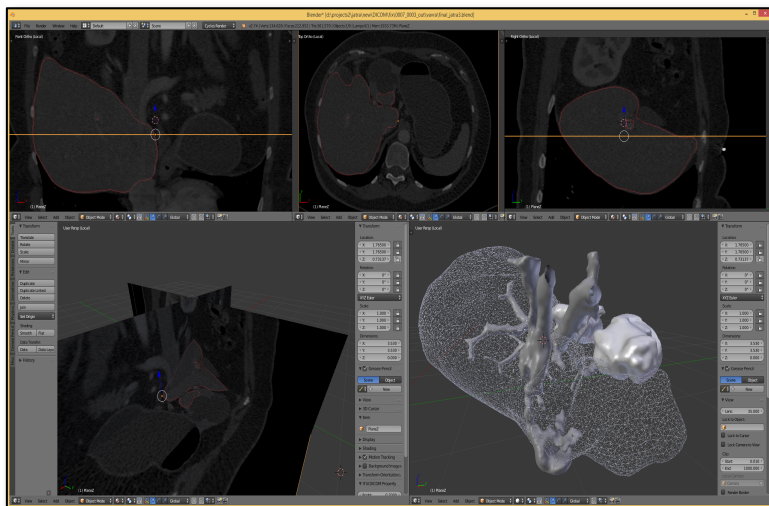
Max Planck Institute
of Molecular Cell Biology
and Genetics

**FIJI Hackathon proběhne na
IT4I 17-30. 1. 2019**

Vizualizace a Virtuální Realita

$IT4I

- Plánování operací (virtuální operace)
- Tvorba 3D modelů
- Vizuální interpretace medicínských dat ve VR
- Vizuální analýza výpočtů nad medicínskými daty



Rekonstrukce pomocí fotogrammetrie

- Rekonstrukce 3D modelu lebky ze sekvence fotografií
- Využití jako možná reference pro měření velikosti spodiny očnice z CT (probíhající spolupráce s FNO – MUDr. Timkovič)
- Případný přesah fotogrammetrie do jiných oborů, např. léčba popálenin

