

“Cloud Computation” na forma de serviços WEB para um banco de dados federativo STING_RDB.

NESHICH, Goran; *JARDINE, José Gilberto; *BERNARDES, Ricardo; *MAZONI, Ivan; MANCINI, Adauto; **da SILVEIRA, Carlos.

Unidade(s): *Embrapa Informática Agropecuária; ** UNIFEI, MG.

O STING é um produto – plataforma com interface para fácil análise de estruturas macromoleculares (proteicas e de DNA) baseado em um conjunto de pre-calculados descritores de estrutura 3-dimensional destas moléculas. Os descritores encontram-se em um banco relacional de dados, mantido automaticamente, atualizado em períodos regulares, acompanhando o crescimento de informações disponibilizadas publicamente pelos principais provedores e repositores mundiais, tais como: PDB, UNIPROT, HSSP, PROSITE, PROTHERM etc. Nossa proposta visa reformulação da maneira do trabalho e do desenvolvimento das principais ferramentas oferecidas para a comunidade científica: queremos fazer o STING um "(bio)logic programmable layer" em cima da "processing network layer" (composta por CENABIDs, e outros cluster e núcleos de alto processamento). A maior demanda no campo da Bioinformática é por SOFTWARE de qualidade e não como muitos acreditam, por número elevado de CPUs. As condições de nosso trabalho permitem montar um sistema genuinamente distribuído, fazendo uso mais racional dos hardwares já adquiridos. Isso possibilitará também que outros interessantes pacotes (a maioria ainda protótipos de uma ideia promissora) de bioinformática, desenvolvidos nos mais diversos rincões de pesquisas possam ser tirados do seu ostracismo e trazidos para a integração. Logo, a racionalização acabará abrangendo também os aplicativos. O STING pode ser esse componente aglutinador, possivelmente tornando-se um padrão de componentização: uma verdadeira plataforma para desenvolvimento de aplicações distribuída em bioinformática. O STING se tornará uma API (Application Programming Interface) capaz de manipular todos os parâmetros presentes no seu RDB. As WEB-APIs dos diversos centros brasileiros e dos outros países, estarão "virtualmente" integradas nos middlewares, e diferentes aplicações poderão ser montadas por diferentes usuários conforme os diferentes interesses.

“Cloud Computation” in form of WEB services applied to STING_RDB – a federative databank of protein structure descriptors

NESHICH, Goran; *JARDINE, José Gilberto; *BERNARDES, Ricardo; *MAZONI, Ivan; MANCINI, Adauto; **da SILVEIRA, Carlos.

*Embrapa Informática Agropecuária; ** UNIFEI, MG.

Sting is a software product – platform for macromolecular structure analysis based on the pre-calculated structure descriptors of protein and DNA 3-dimensional structures. Those descriptors are stored in a database which is regularly updated in synchrony with the constant increase in information volume offered by the main repositories such as: PDB, UNIPROT, HSSP, PROSITE, PROTHERM etc.. Our proposal aims to re-formulate the way we work, going toward the federative contributions to the development of principal tools offered to the academic community: we propose to make STING as a "(bio)logic programmable layer" operating above the "processing network layer" (composed by the CENABIDs, and other clusters of high performance computing). A general demand in the area of Bioinformatics is currently concentrated toward obtaining ever better SOFTWARE and its improved quality, contrary to what many believe, toward ever larger pool of available CPUs. The conditions of our work are allowing us to construct a genuinely distributed environment for optimized use of already installed hardware. This will also make possible that other contributions and software packages (still in its developmental stage) may be brought into an integrated development environment. Consequently, the optimization will reach the applications as well. STING is proposed to be this aggregating factor, turning into a standard for component development: we propose to create a real distributed platform for development in Bioinformatics. STING will become an API (Application Programming Interface) capable of manipulating and accessing all the parameters stored in its RDB. The other WEB APIs from other Brazilian and worldwide centers would be virtually integrated through middleware enabling users to construct their own applications according to their specific interests.