



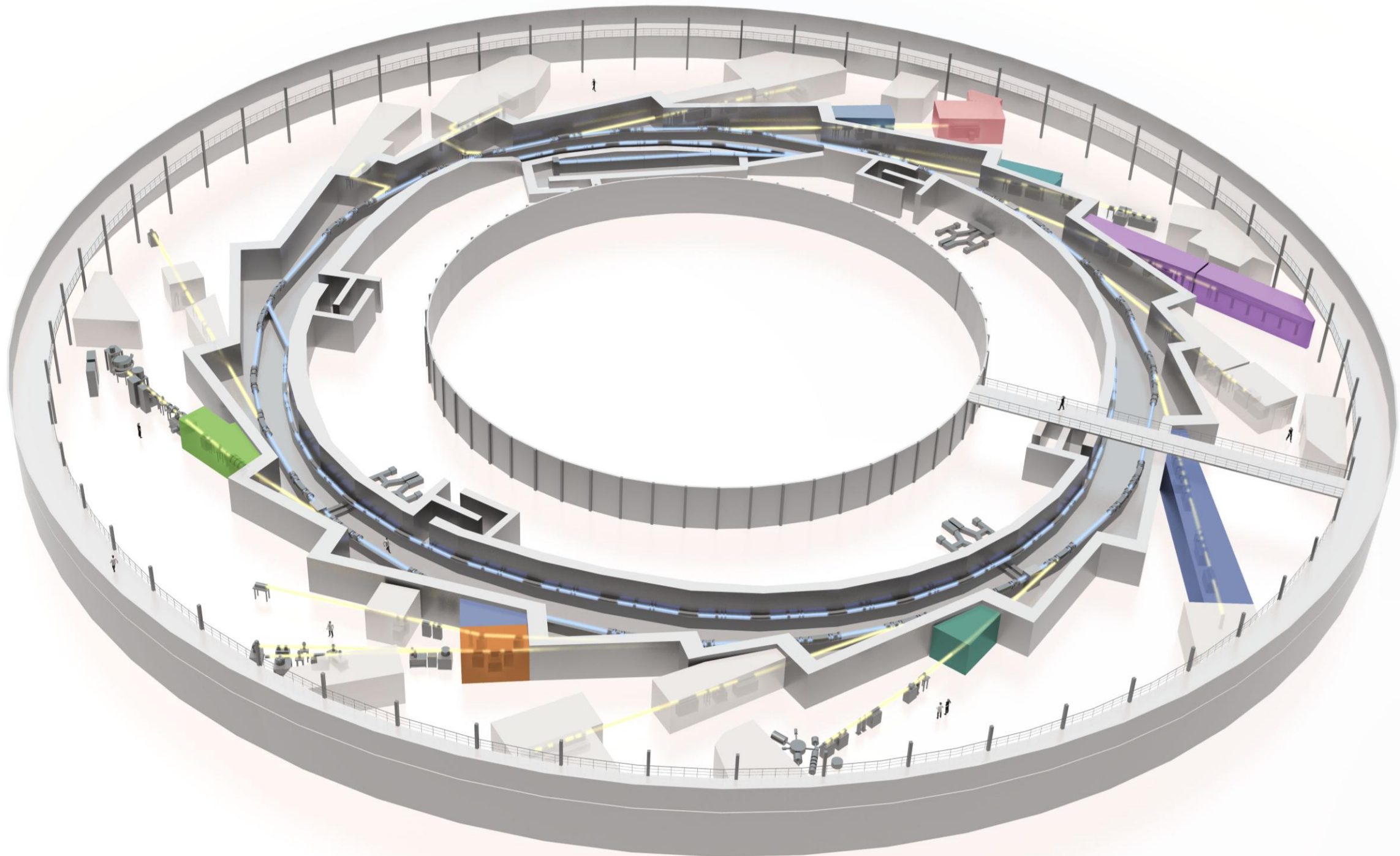
# De la adquisición de datos experimentales al procesado científico HPC en el Sincrotrón ALBA

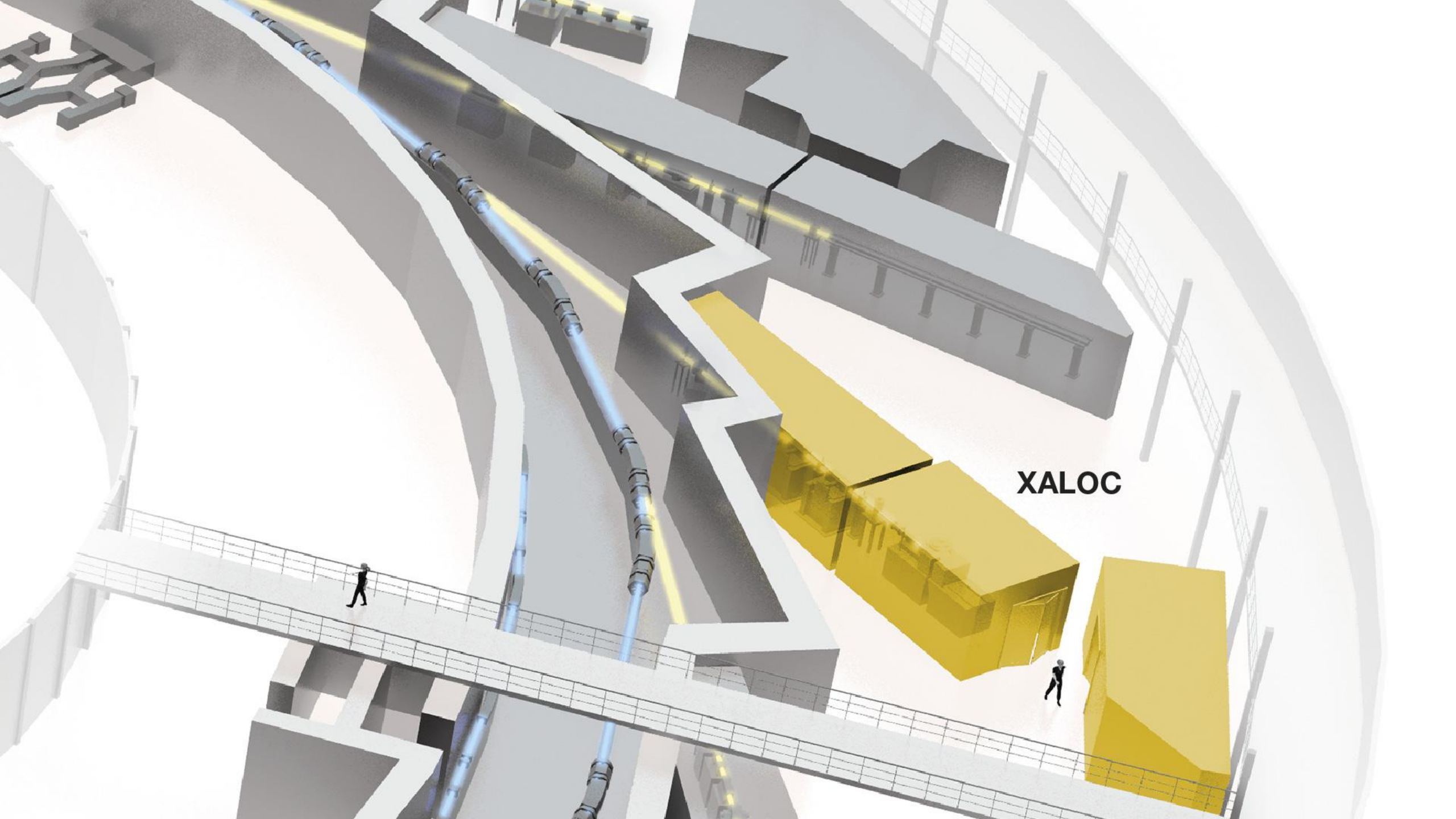


# Índice

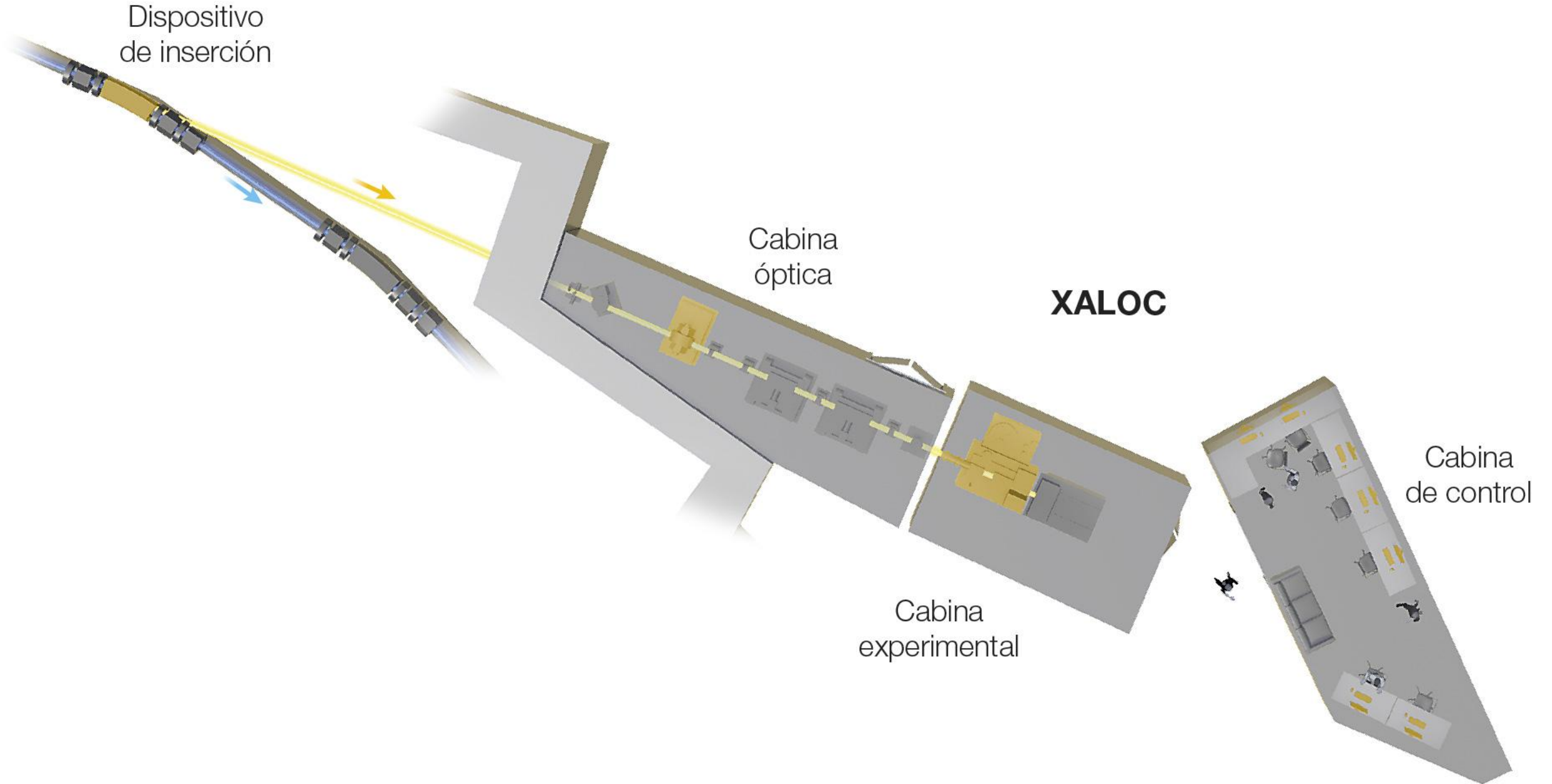
- **Que es un sincrotrón**
- **Procesado de datos en Xaloc y Xaira**
- **Microscopios electrónicos**
- **Procesado de datos en FaXToR**
- **Explosión exponencial de datos**



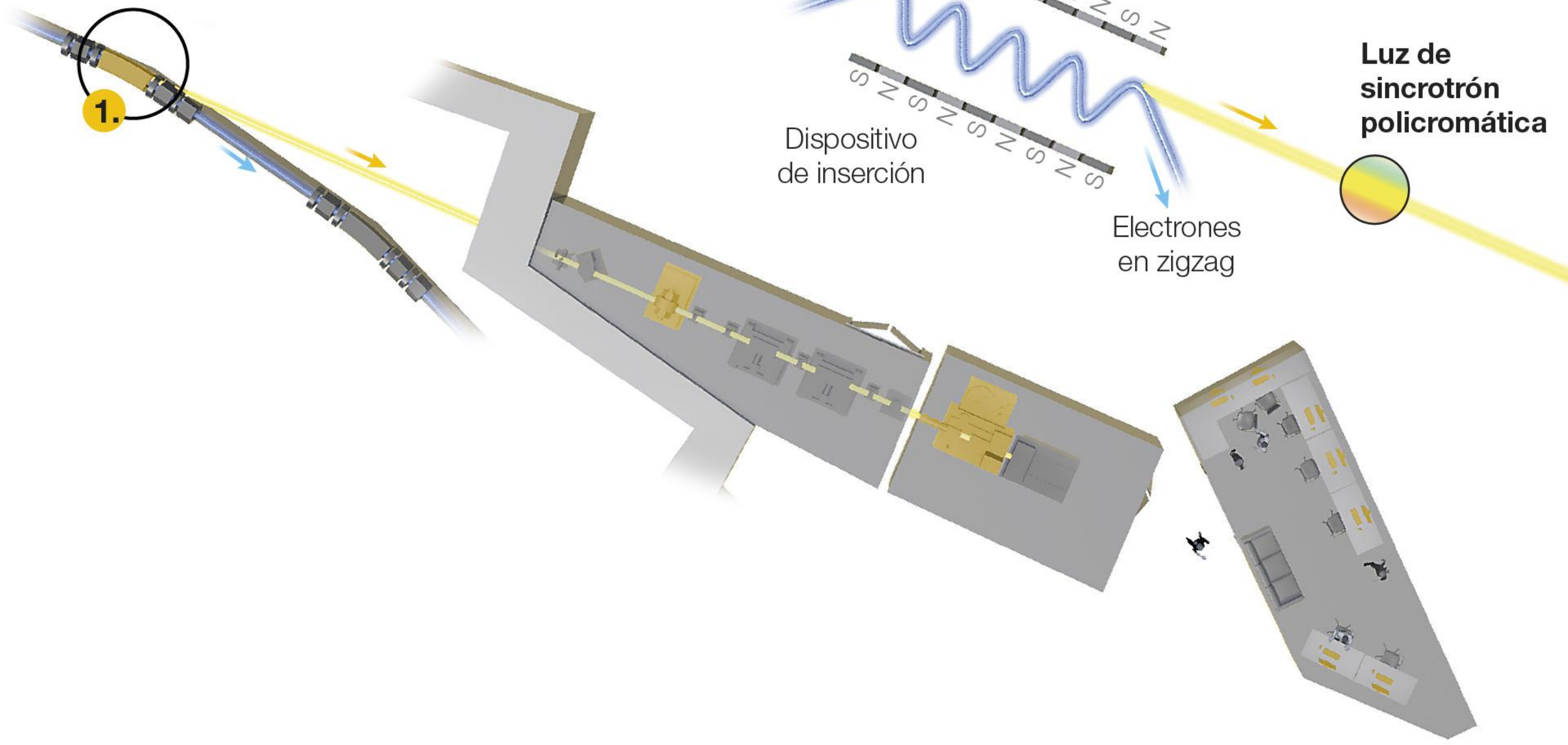




**XALOC**



# 1. EMISIÓN DE LA LUZ DE SINCROTRÓN



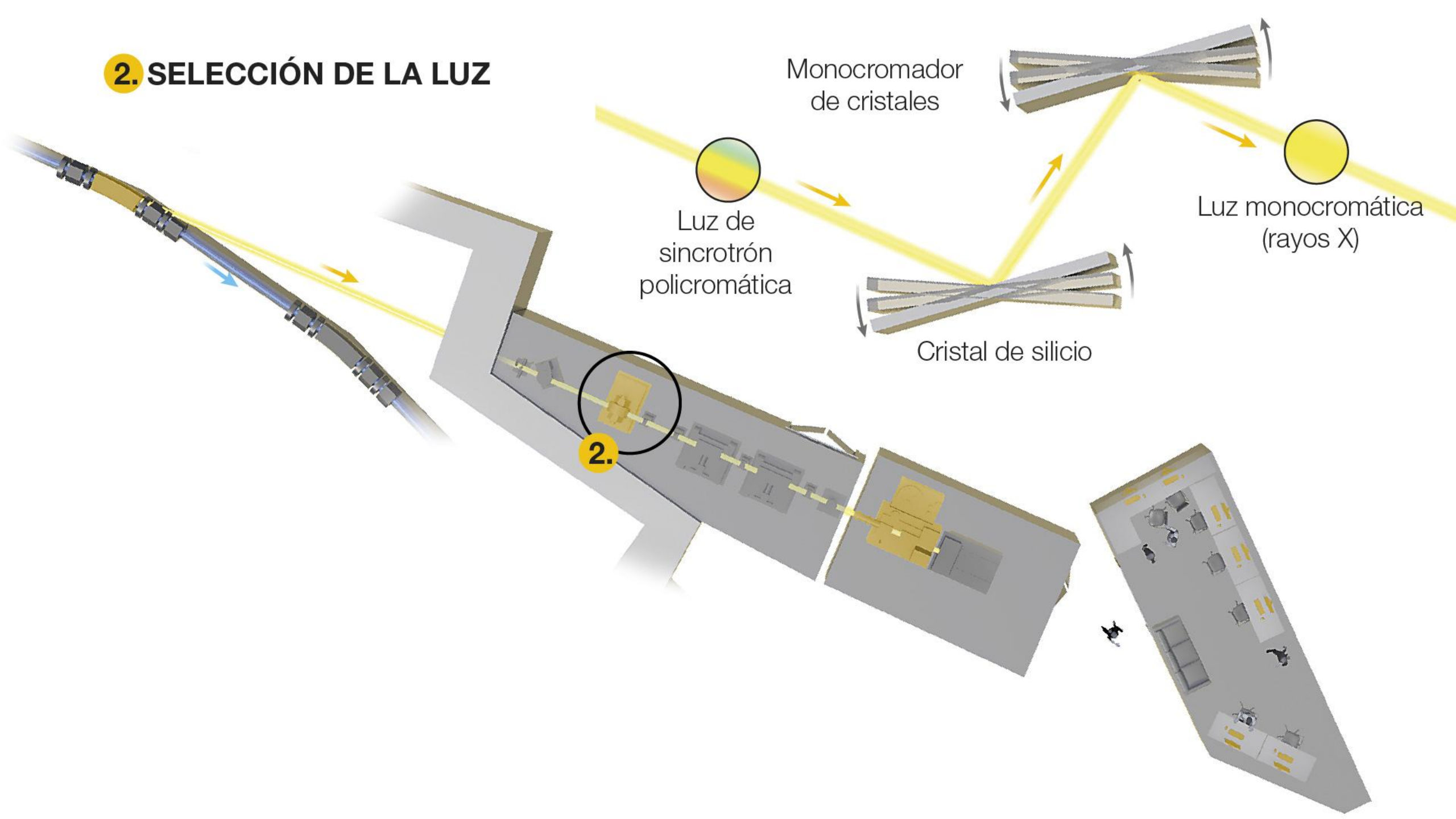
1.

Dispositivo de inserción

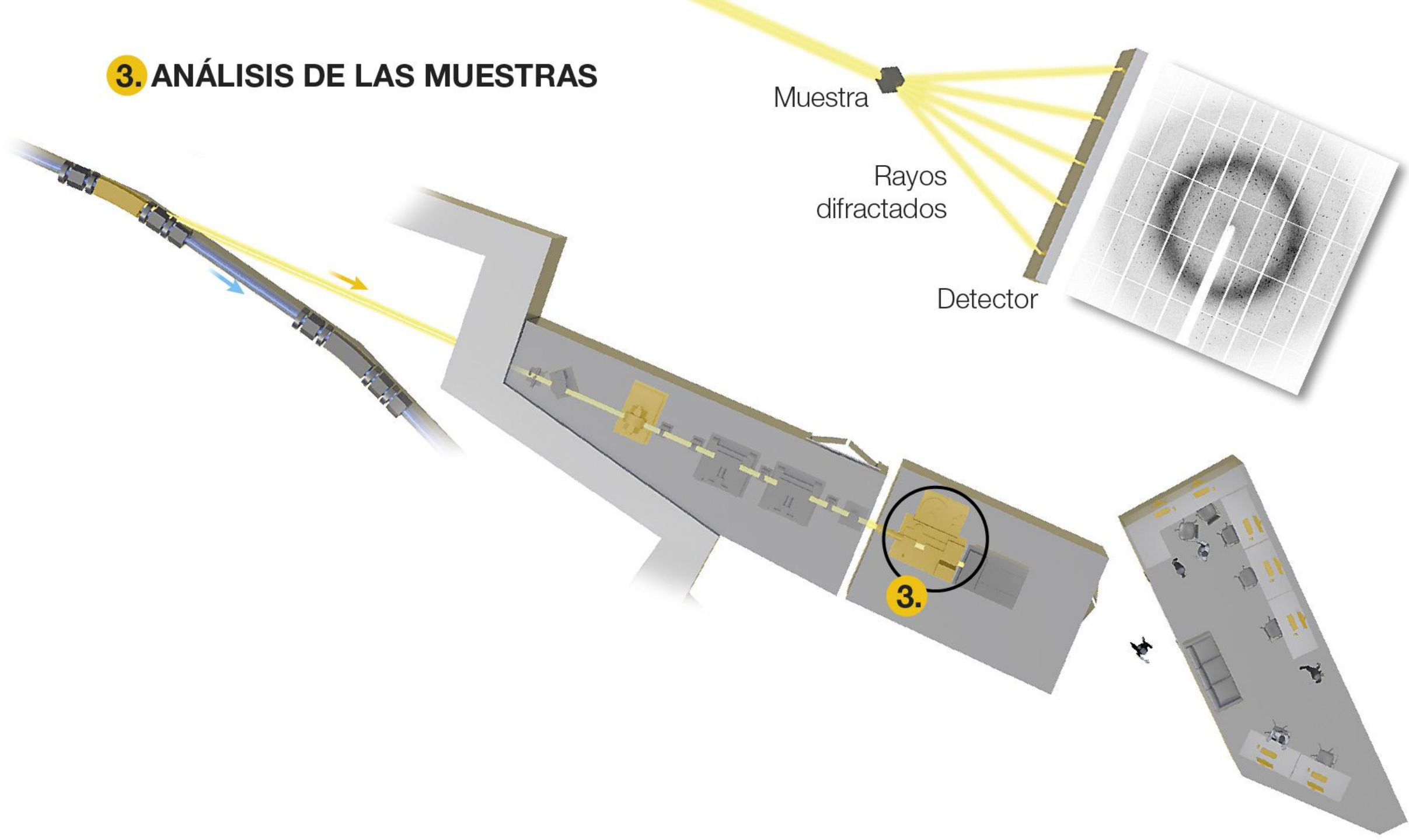
Electrones en zigzag

Luz de sincrotrón policromática

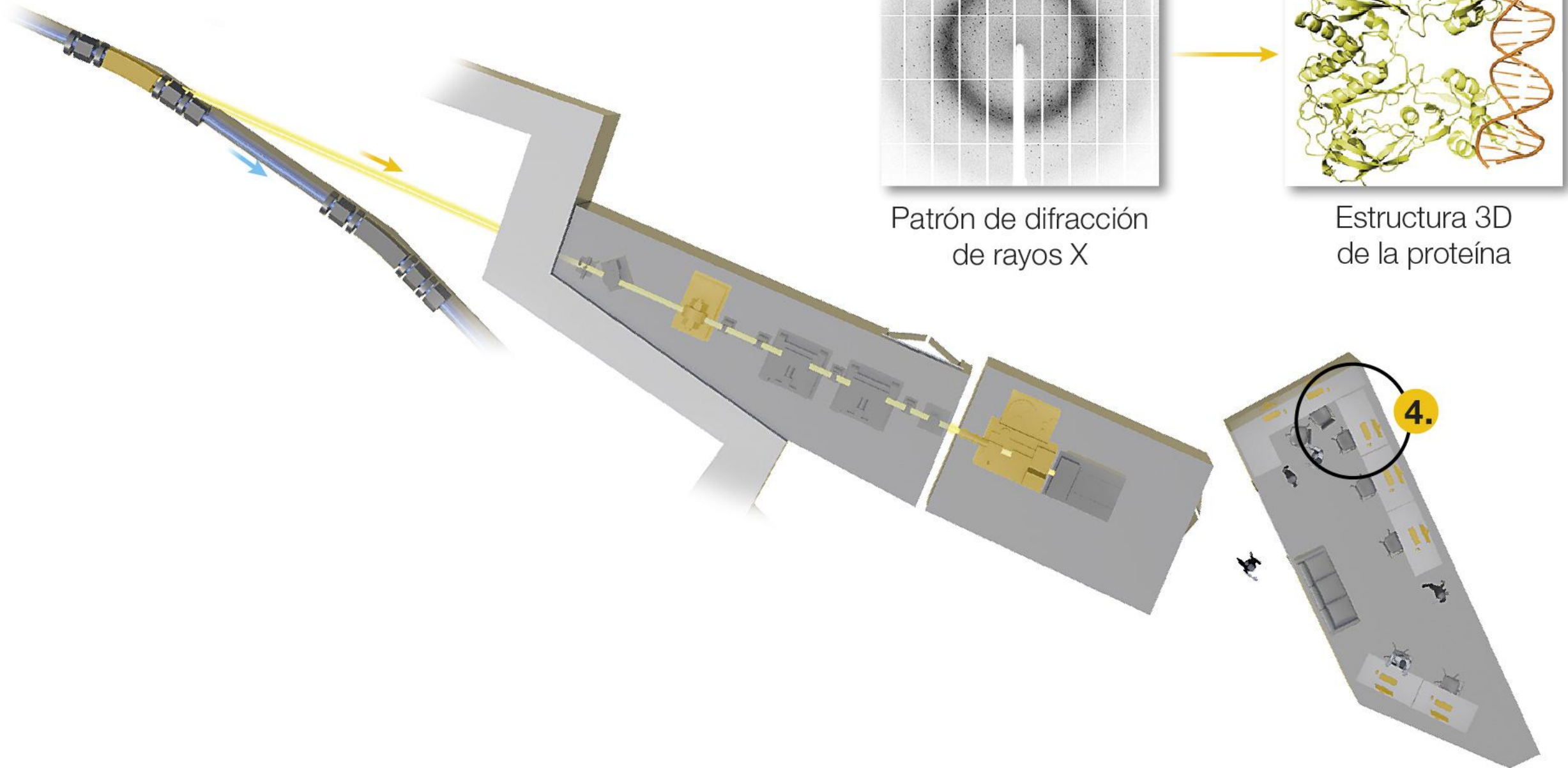
## 2. SELECCIÓN DE LA LUZ



### 3. ANÁLISIS DE LAS MUESTRAS

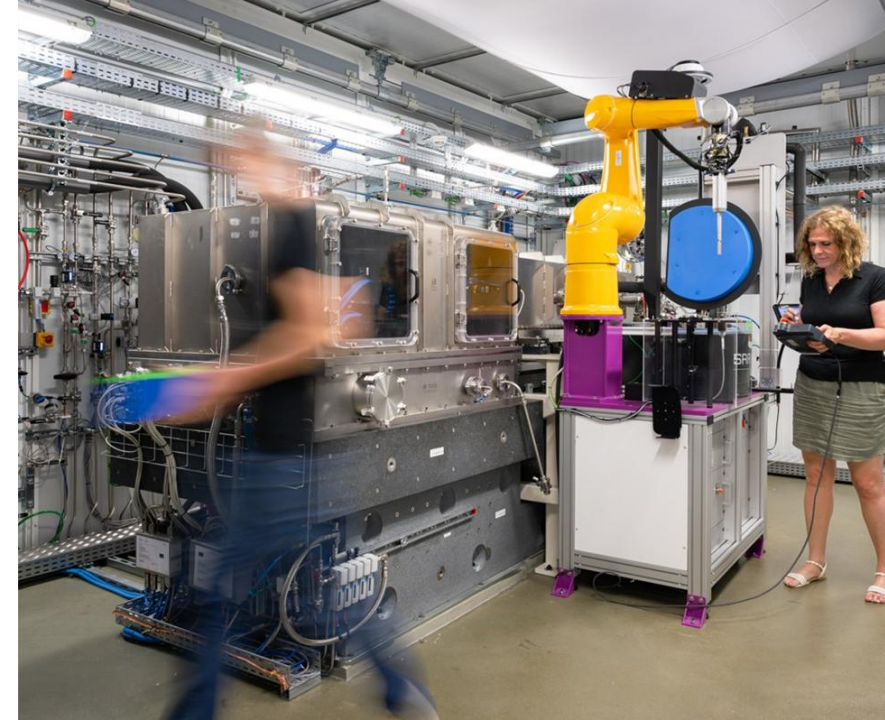
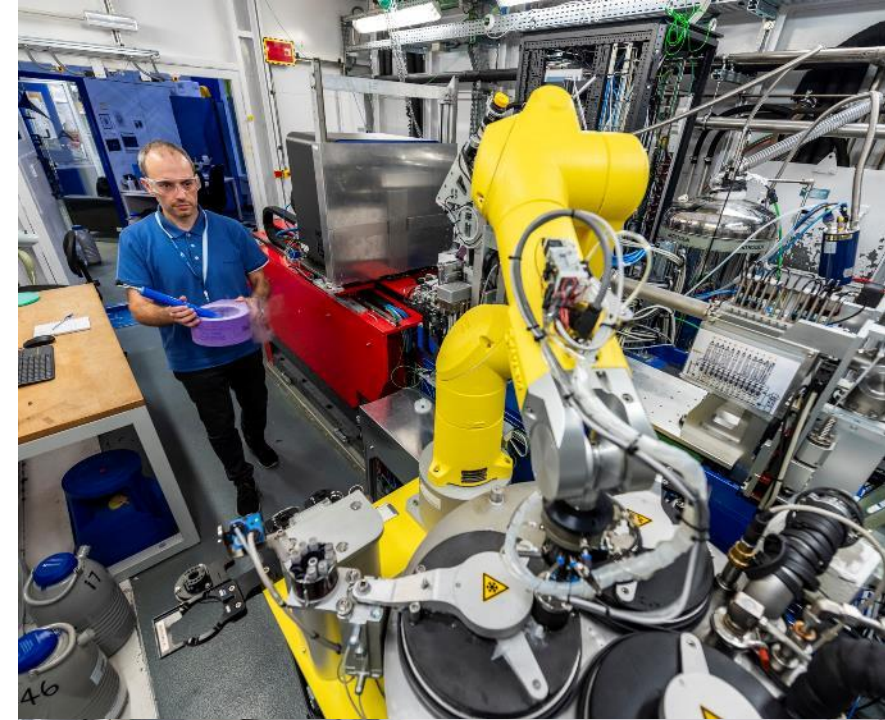


## 4. PROCESAMIENTO DE DATOS



# Procesado de datos en Xaloc y Xaira

- Beamlines altamente automatizadas y de alto rendimiento
- Una sesión de beamtime puede incluir cientos de muestras
- Intercambio robótico de muestras ( completado en 12 segundos )
- Recolección de datos de difracción en menos de 2 minutos por muestra



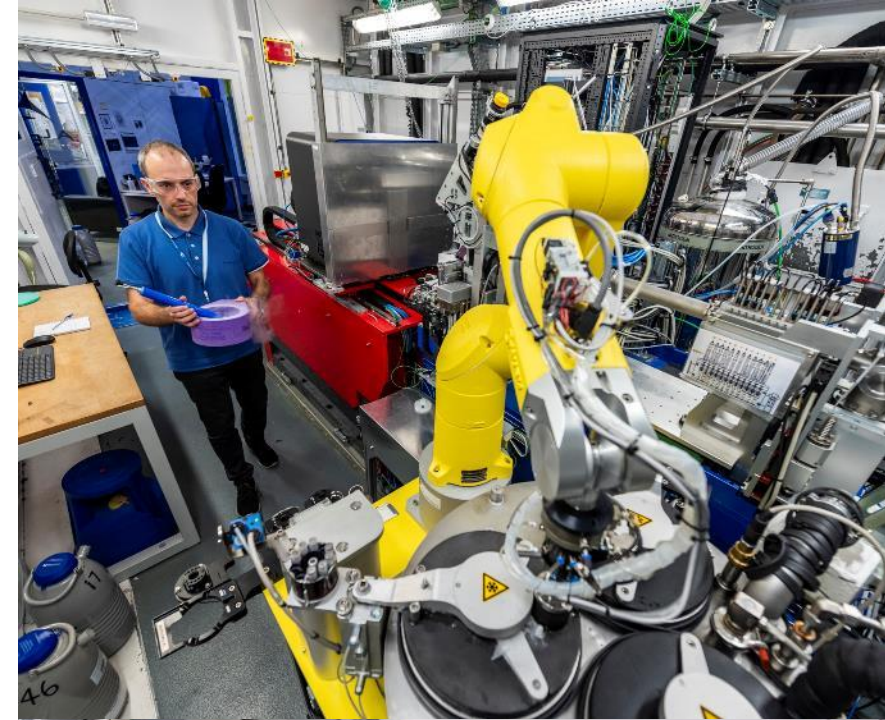
# Procesado de datos en Xaloc y Xaira

## Procesado rápido

- Resultados en segundos (máx. ~2 minutos)
- Feedback inmediato durante el beamtime
- Optimizado para velocidad, no para precisión final

## Procesado refinado

- Resultados más precisos y optimizados
- Tiempo de procesamiento aproximado: 30 minutos



# Procesado de datos en Xaloc y Xaira

Procesado en paralelo con múltiples pipelines

El éxito depende de la muestra y de la calidad de los datos

Por muestra:

3 pipelines de feedback rápido

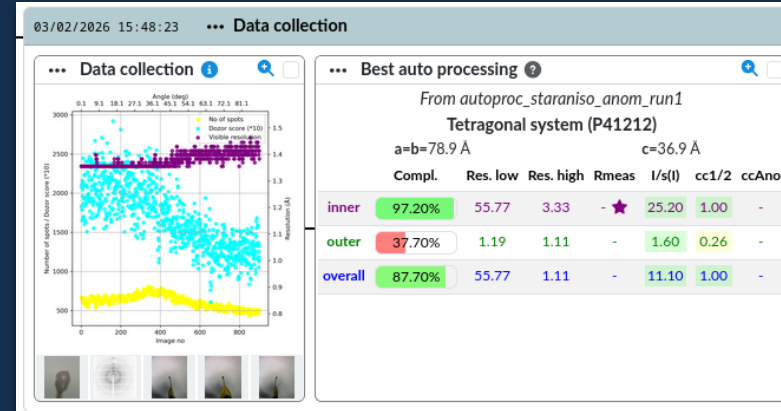
4 de procesamiento refinado

Infraestructura de computación

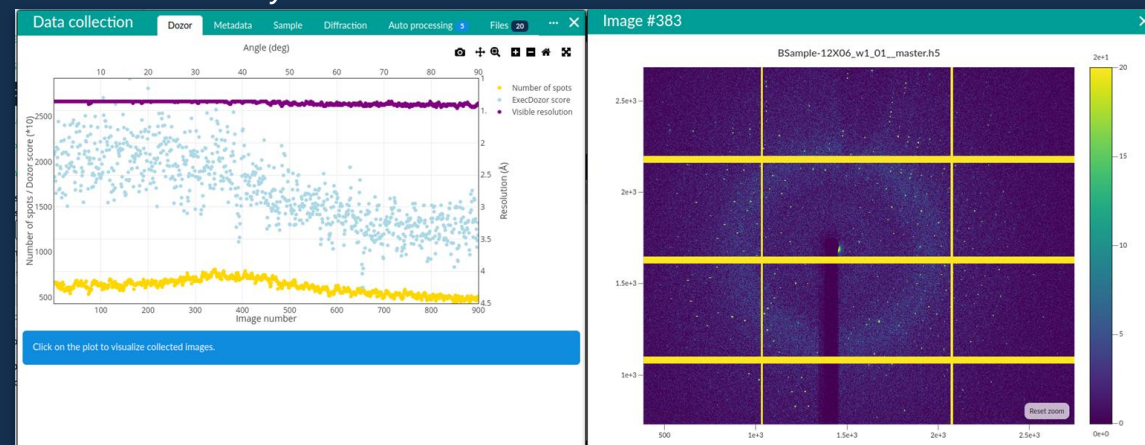
10 nodos de cómputo dedicados por beamline

Gestión automática mediante SLURM en el HPC de ALBA

Uso de GPUs nvidia A100 para Alphafold



fast-feedback analysis in 10 seconds



refined processing in 30 minutes

Auto processing ranking

Program	a,b,c (Å)	$\alpha,\beta,\gamma$ (°)	Compl.	Res. low	Res. high	Rmeas	I/s(I)	cc1/2	ccAno
03/02/2026 16:02 autoproc_staraniso_anom_run1 P41212	78.9 90.0 36.9	90.0 90.0 90.0	inner	97.20%	55.77	3.33	☆	25.20	1.00
			outer	37.70%	1.19	1.11	-	1.60	0.26
			overall	87.70%	55.77	1.11	-	11.10	1.00
03/02/2026 16:02 autoproc_anom_run1 P41212	78.9 90.0 36.9	90.0 90.0 90.0	inner	97.50%	55.77	3.13	☆	25.30	1.00
			outer	42.70%	1.17	1.15	-	1.30	0.43
			overall	91.20%	55.77	1.15	-	10.90	1.00
03/02/2026 16:00 xia2dials_noanom_run1 P41212	78.8 90.0 36.9	90.0 90.0 90.0	inner	98.68%	55.76	2.99	☆	70.17	0.99
			outer	5.11%	1.12	1.10	-	0.35	0.76
			overall	83.11%	55.69	1.10	-	14.80	0.99
03/02/2026 15:57 fastdp_anom_run1 P422	78.8 90.0 36.9	90.0 90.0 90.0	inner	95.00%	27.87	5.25	☆	42.50	1.00
			outer	65.70%	1.20	1.17	-	1.10	0.57
			overall	94.70%	27.87	1.17	-	14.80	1.00
03/02/2026 15:57 fastdp_noanom_run1 P422	78.8 90.0 36.9	90.0 90.0 90.0	inner	95.70%	27.87	5.25	☆	42.10	1.00
			outer	65.70%	1.20	1.17	-	1.10	0.58
			overall	94.70%	27.87	1.17	-	14.90	1.00

fast-feedback data proc in one minute

# Microscopios electrónicos

## Centro Conjunto de Microscopía Electrónica en ALBA (JEMCA)

- TEM de 200 kV, Glacios from ThermoFisher Scientific, para investigación en el ámbito de las Ciencias de la Vida
- (S)TEM de 300 kV, Spectra 300 from ThermoFisher Scientific, para investigación en el ámbito de la Ciencia de Materiales



## Instalación correlativa in situ para materiales energéticos avanzados (InCAEM)

- Microscopio Electrónico de Transmisión (S)TEM con sistemas de portamuestras, operando (gases, líquidos, refrigeración) y limpiador por plasma de H<sub>2</sub>
- STM / AFM equipamiento combinado con espectroscopía Raman amplificada por sonda (TERS) y un AFM avanzado in situ.
- Sistema para el almacenamiento, tratamiento y análisis de datos in situ
- Adaptación de líneas de luz de sincrotrón existentes en ALBA



ALBA

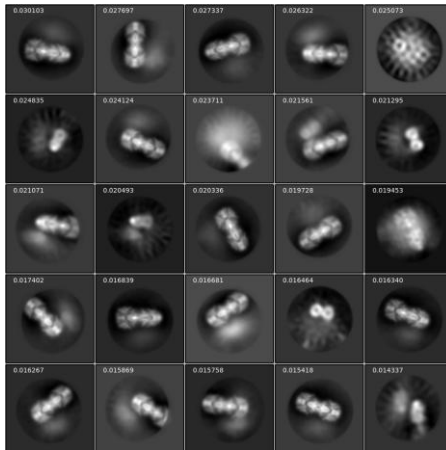
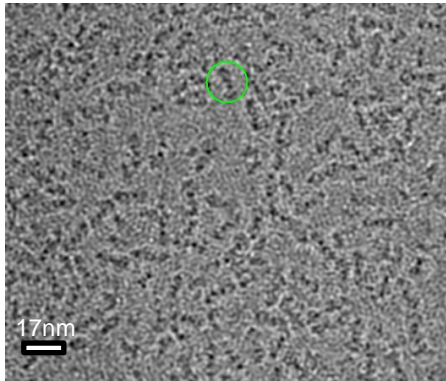


# Microscopios electrónicos

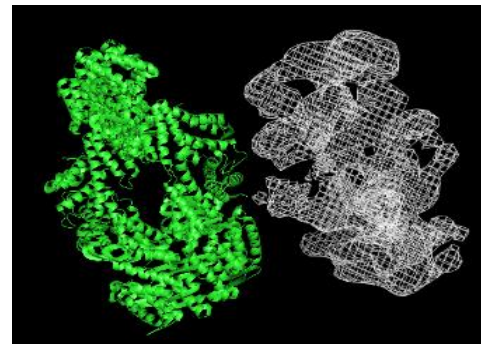
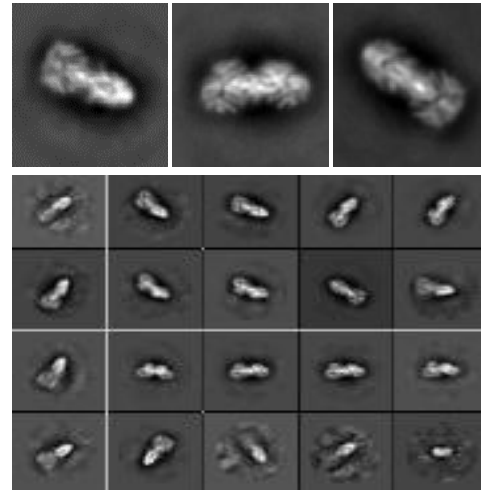
Cryo-EM, 200 KV - ALBA  
Glacios, Pablo Guerra

Cryo-EM, 300KV - DLS Titan,  
Pete Harrison

3D reconstruction with RELION

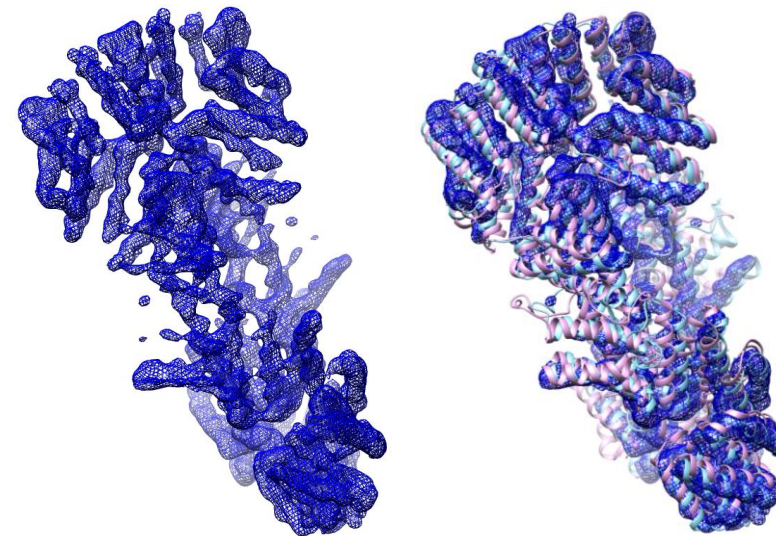
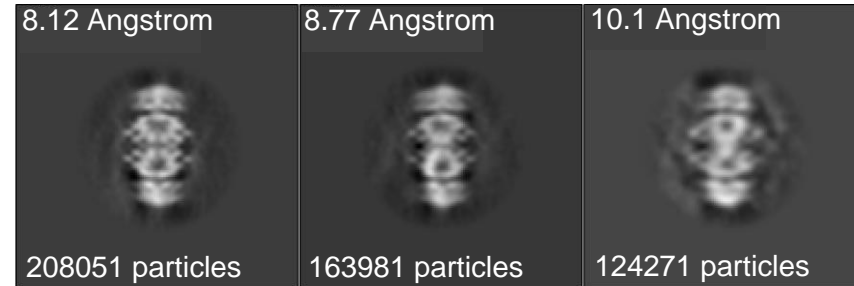


14nm \*Number indicates rel.distribution of the 2D class (0-1)



Results of automated processing pipeline  
EM map vs, X-ray structure (I.Crespo)

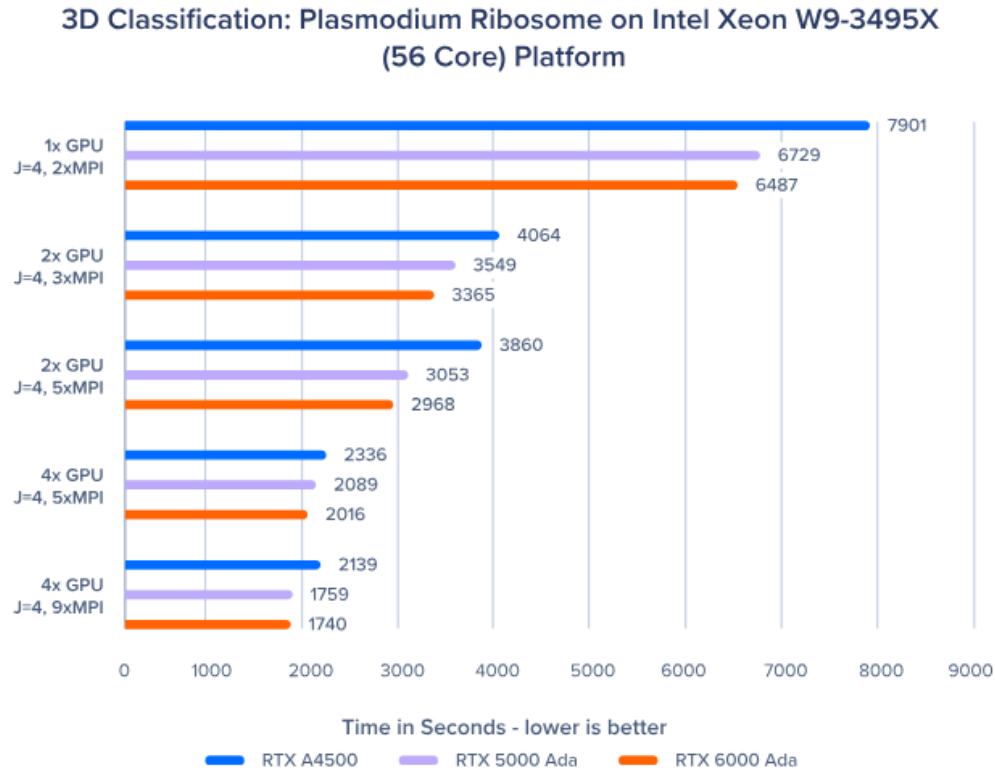
Cross-section of 3 best 3D classes, unmasked



EM masked map from best 3D class (4.33 Angstrom)  
X-ray structure in two different conformations (I.Crespo)

# Microscopios electrónicos

## RELION GPU Benchmarks for 3D Classification - NVIDIA RTX 6000 Ada, RTX 5000 Ada, RTX A4500 GPUs



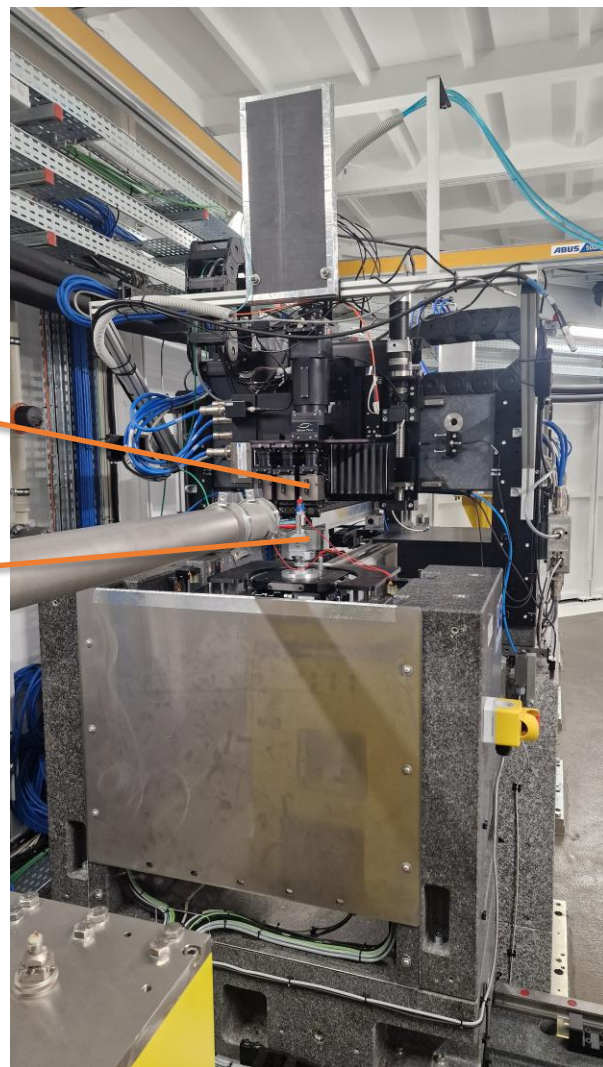
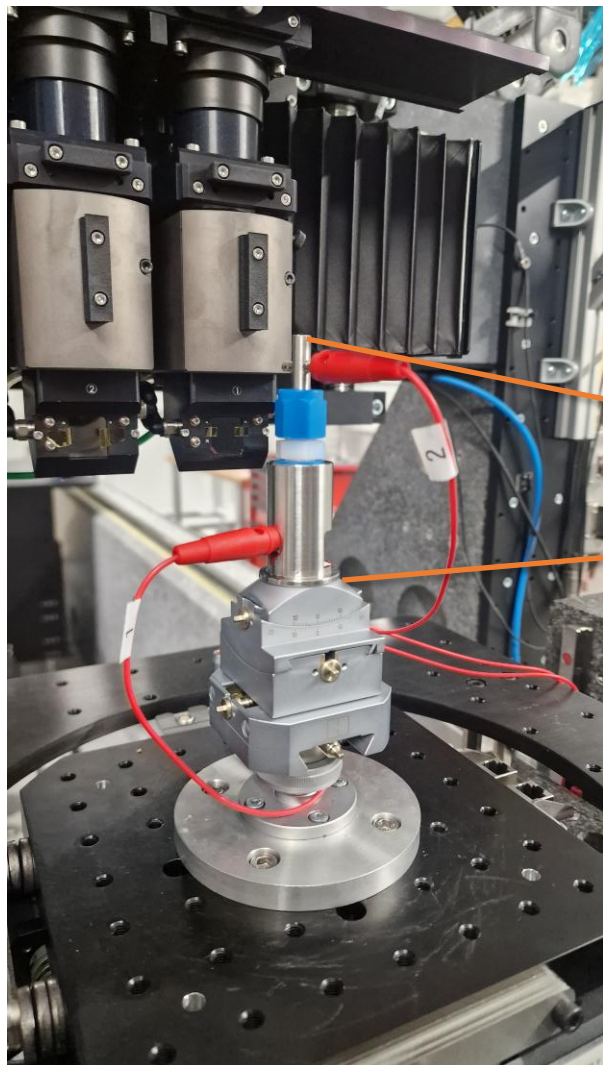
## Mejoras en el tiempo de procesamiento en Relion

- No mejora sustancialmente con la RAM disponible en la GPU
- No mejora sustancialmente con los cores disponibles en la GPU
- Mejora proporcionalmente al numero de GPUs

## Estrategia actual de procesamiento de datos

- GPU con suficiente RAM para cargar todo el dataset
- Seleccionamos Nvidia A16
- Tarjeta pcie con 4 GPUs discretas de 16GB cada una
- Muy buen ratio benchmark/euro
- En servidores con 4 slots para GPU puedes tener 16 GPUs discretas

# Procesado de datos en FaXToR



*Swagelok electrochemical cell mounted at FaxTOR (ALBA) by Valeria Blanco*





# Procesado de datos en FaXToR

## Recolección de datos FaXToR : alta velocidad y facilidad de uso

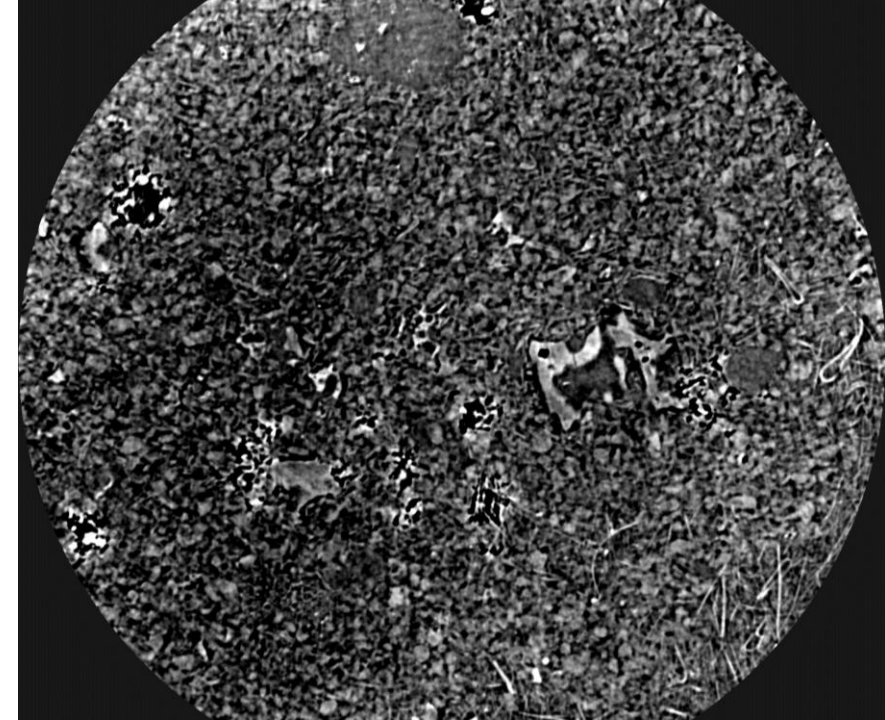
- Alta velocidad de adquisición:
  - Tomografía de alta resolución en < 1 minuto
  - Tomografía de baja resolución en ~150 ms
- El reto principal es el procesamiento y la gestión de datos a la misma velocidad que la adquisición

## Estrategia actual de procesamiento de datos

- Objetivo ideal: que la reconstrucción tomográfica siga el ritmo de adquisición
- Reconstrucción completa actual:
  - < 5 minutos por dataset (absorción + fase + eliminación de anillos)

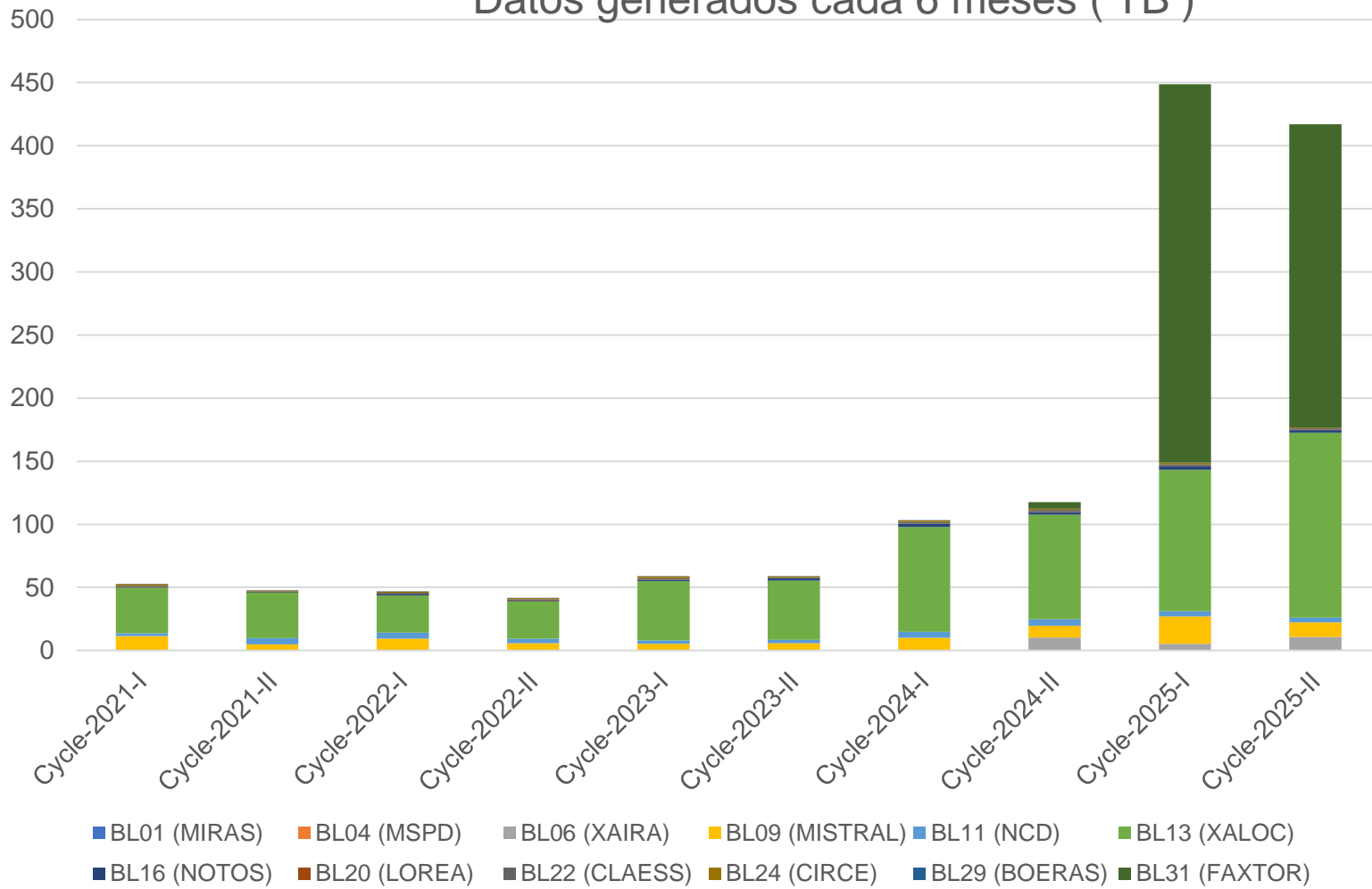
## Uso actual de los recursos de cómputo

- Apertura de múltiples GUIs de reconstrucción para trabajar en paralelo
  - 6 nodos HPC de reconstrucción con GPU Nvidia L40
  - Hasta 6 reconstrucciones en paralelo



# Explosión exponencial de datos

Datos generados cada 6 meses ( TB )

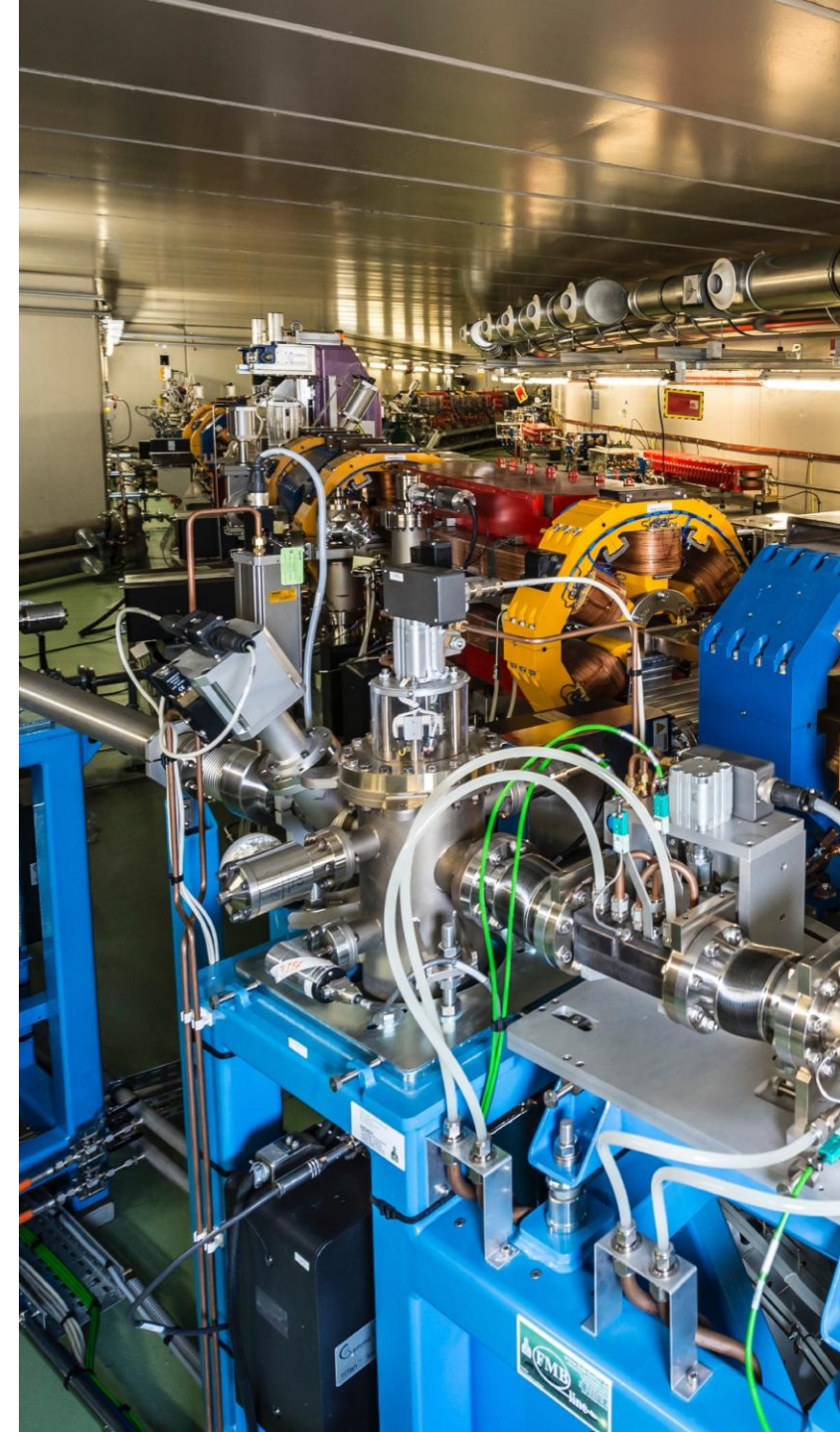
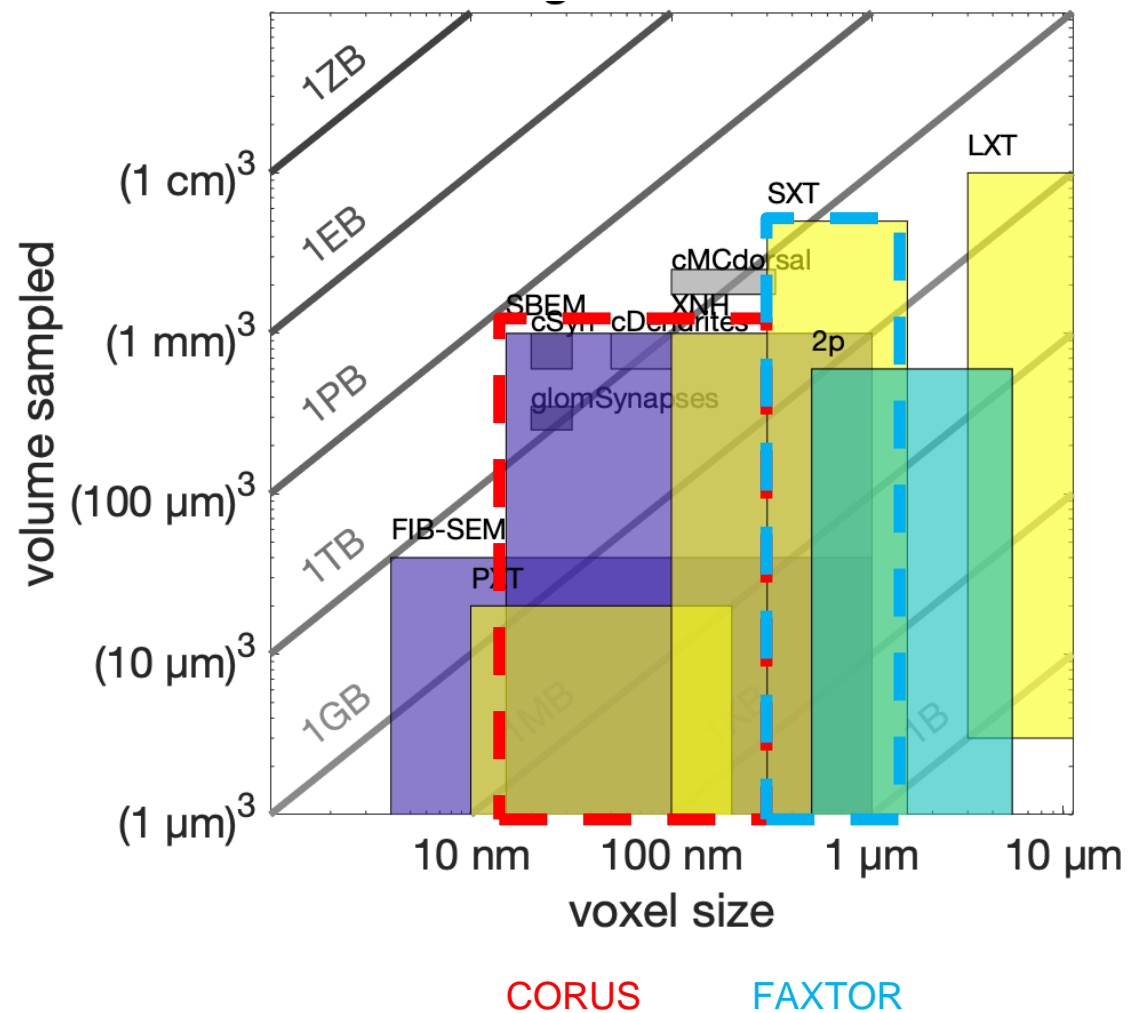


# Explosión exponencial de datos



# Explosión exponencial de datos

## Size of a single dataset



# Gracias

[jsalabert@cells.es](mailto:jsalabert@cells.es)

[pcarnicer@cells.es](mailto:pcarnicer@cells.es)

Carrer de la Llum, 2-26  
08290 Cerdanyola del Vallès  
Espanya

