

# VRE for regional Interdisciplinary communities in Southeast Europe and the Eastern Mediterranean

Sistemet paralele në Shkencat e Jetës



Vi-SEEM

Ilir HUSHI

MSc. Inxhinieri Informatike

Universiteti Politeknik i Tiranës

- ❑ Avancimet në infrastrukturën kompjuterike në dekadat e fundit kanë mundësuar zhvillimin e analizimit të të dhënave biologjike për sasi të mëdha të dhënash dhe llogaritjet biologjike si metodologjinë kyçe në kërkimet shkencore.
- ❑ Përdorimi i kompjuterave në biologji ka mundësuar kuptim më mirë të aspekteve mekanike të shëndetit dhe sëmundjeve, si dhe kanë përshpejtuar zhvillimin e terapive të ndryshme.
- ❑ Në këtë projekt, kërkimet e komunitetit në zhvillimet e shkencave të jetës është zgjedhur për shkak të rolit kryesor në arritjen e përmirimit të jetës në zonën në SEEM.

- ❑ Një ndërmarrje e tillë kërkon përdorim të burimeve kompjuterike për:
  - ❑ a) prodhimin e të dhënave
  - ❑ b) analizimin e të dhënave
  - ❑ c) ruajtja e tyre
  - ❑ d) vizualizimi
- ❑ Sasi të mëdha të dhënash nevojiten të ruhen dhe të jenë në dispozicion të kërkuesve për procesim në qendrat e procesimit.
- ❑ Shpejtësi dhe infrastrukturë e besueshme e rrjetit është e rëndësishme për lëvizjen e sasive të mëdha të të dhënave nga arkivat e të dhënave në qendrat procesuese dhe gjithashtu transferimi i rezultateve të simulimeve në godita e zhvilluese për procesim të mëtejshëm dhe përvetsimin e rezultateve.

- Në termat e infrastrukturës kompjuterike, modeli dhe shërbimet që kërkohet të përdoret nga grupet e kërkuese:

- Kapacitet
- Aftësi llogaritëse
- Ndarjen e burimeve kompjuterike



## Sisteme Paralele

- Shembuj:

- NAMD
- NWCHEM



**SHKALLËZUESHMËRI  
DERI NË QINDRA E  
MIJËRA “CORE”**

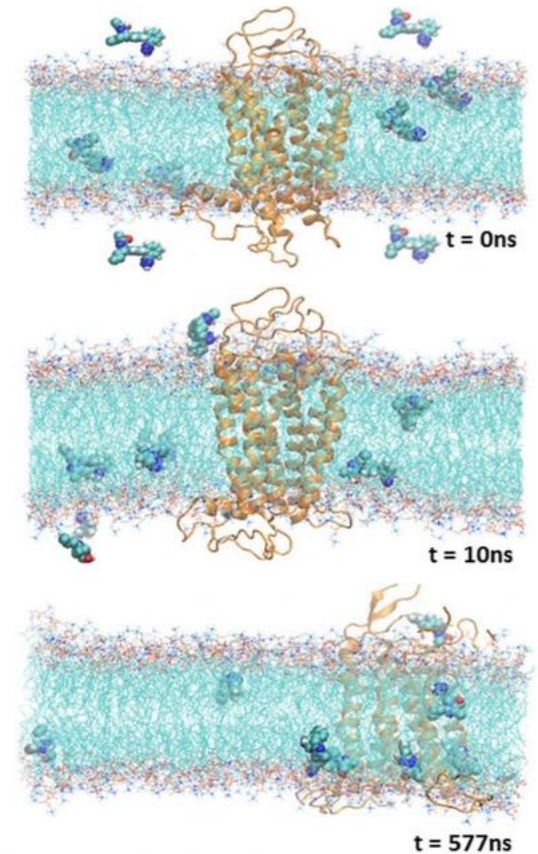
- ❑ Për vendosjen në punë të këtyre software-ve nevojiten:
  - ❑ Grid : HPC Clusters: IBMs BlueGene
  - ❑ Cloud IaaS



# DISA APLIKIME TË SISTEMEVE PARALELE

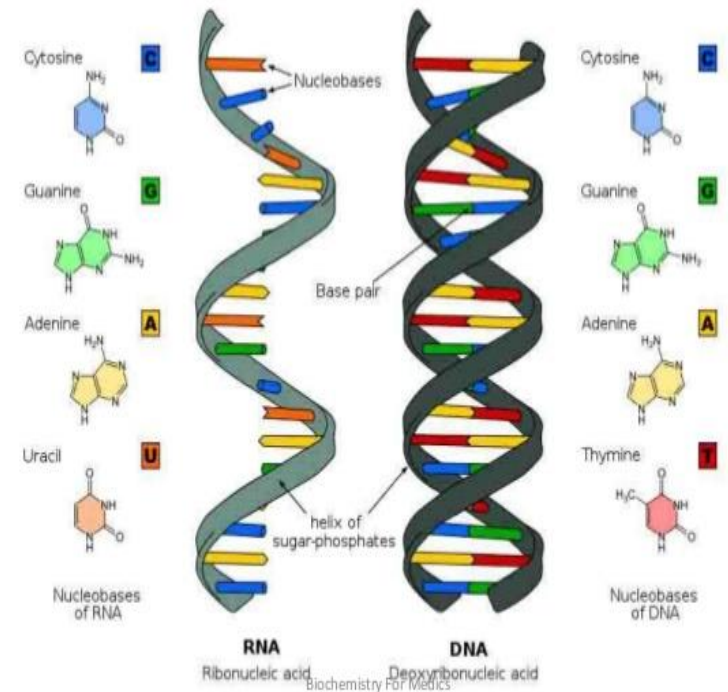
# Studimi i Molekulës dinamike të Proteinave, membranës së proteinave dhe modelit të membranës biologjike

- ❑ Këto tre bio-molekula janë përgjegjëse për përçimin e sinjaleve dhe janë të rëndësishme si target për ilaçet.
- ❑ Për të dizenuar në mënyrë më efikente ilaçet dhe për shpërdarjen në organizëm, kërkohet një kuptim më i mirë bashkëveprimeve fiziko-kimike që mbështjellin membranën dhe proteinat.



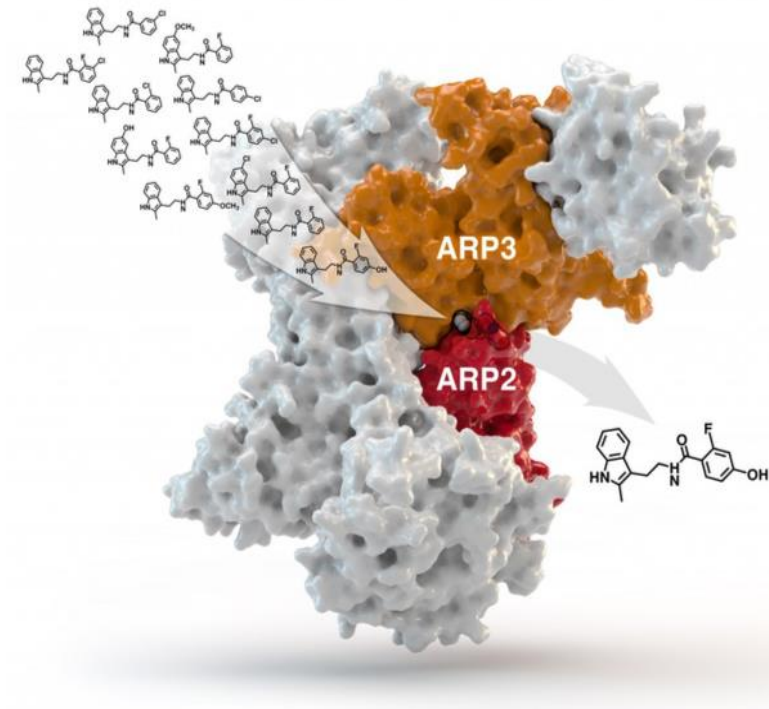
- Ndikimi i vetive termodinamike të çiftit ADN/ ADN dhe ARN/ADN në transkriptimit dhe procesimin e ARN.
- Sasia e madhe e llogaritjeve të qëndrueshmërisë së çiftit ADN/ADN dhe ARN/ADN së të gjithë gjenomës së organizmave eukarjotë dhe krahasimin e qëndrueshmërisë me shkallën e transkriptimit dhe procesimin e ARN
- Këto llogaritje kërkojnë High-Performance Computing dhe infrastruktura të mëdha të të dhënave

## RNA V/S DNA





- Duke përdorur metodat kompjuterike dhe modelimin 3D të proteinave, ne jemi në gjendje të vëzhgojmë në mënyrë të detajuar në nivel molekular bashkëveprimet të ligandeve (molekulave që lidhen së bashku): bashkëveprimin e proteinave dhe më pas interpretimin e rezultateve eksperimentale në detaje.

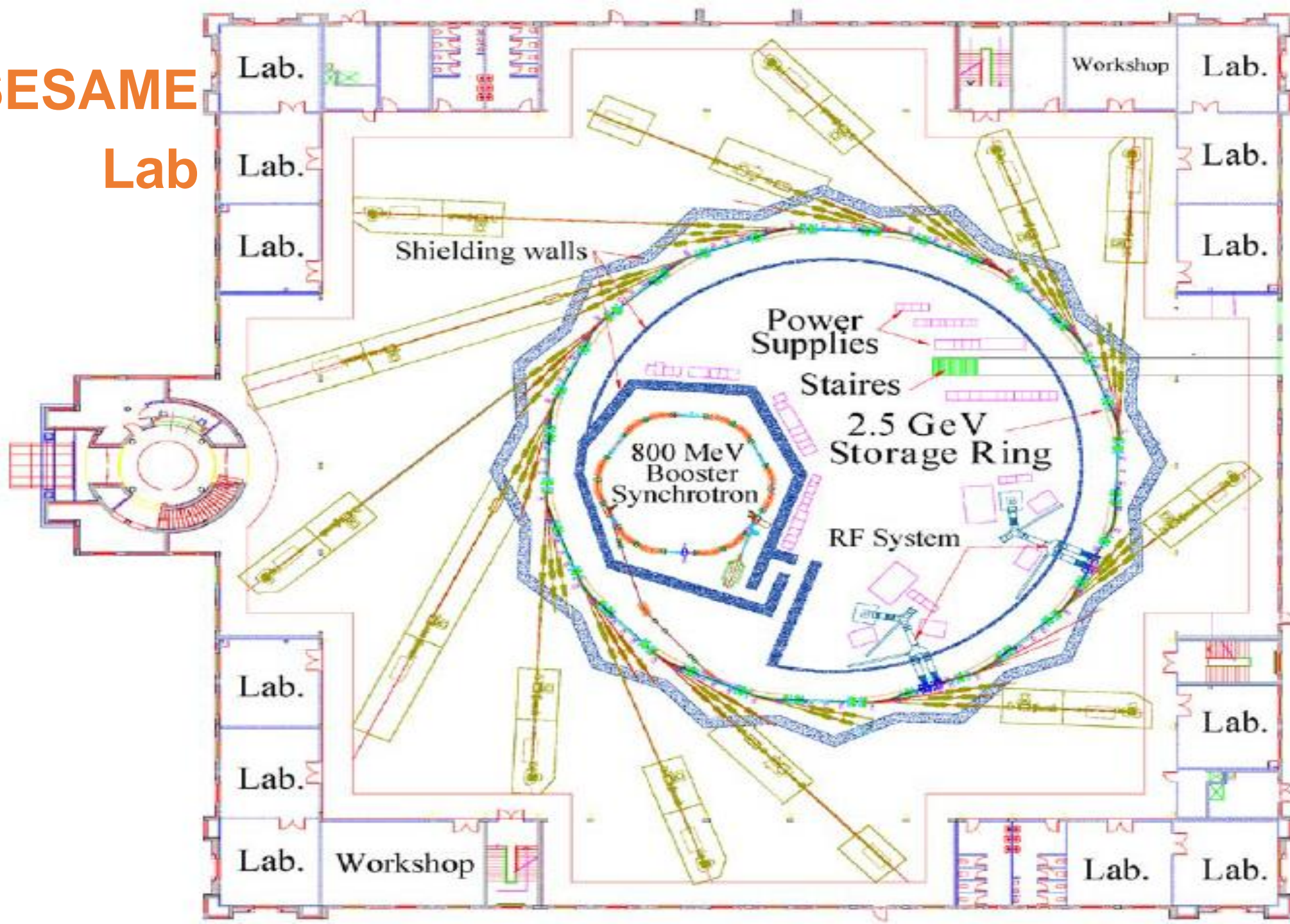


- ❑ Eksperimente të cilat kryhen në nivele mikroskopike të qelizave të gjallesave, të cila gjenerojnë imazhe me disa dhjetra GB për eksperiment.
- ❑ Imazhet e gjeneruara kërkojnë proçesim intensiv të tyre, si:
  - ❑ Regjistrimin
  - ❑ Korrigjim të gabimeve
  - ❑ Renderim të vëllimit
  - ❑ Renderim të sipërfaqes
  - ❑ Detektim të objekteve
  - ❑ Matje të formave gjeometrike
  - ❑ Gjurmime automatik të objekteve lëvizëse të qelizave në 3 dimensione
  - ❑ Etj.

- ❑ Fokuset në teknikat për diagnostikimet, menaxhimin dhe trajtimin e pacientëve me disa sëmundje të rralla dhe të zakonshme (fibrozë cistike, mangësi të antitripsia Alpha-1, sëmundjet kardiovaskulare, si dhe disa lloje të kancerit)
- ❑ Qëllimi i përgjithshëm është që të identifikohen rrugët e mekanizmave të sëmundjeve dhe dhënien e diagnozës së duhur pacientëve, vlerësimin e rrezikut për zhvillimin e sëmundjeve dhe terapi efikase.
- ❑ Grupi i kërkimeve shkencore ofron hulumtime të specializuara gjenetike, në këtë fushë me rritje të shpejtë, të diagnozës jo-invazive të paralindjes dhe në analizën gjenetike të fetusit.
- ❑ Të dhënat e gjeneruara përdoren për zbulimin e medikamenteve dhe zhvillimin e testeve të reja për zbulimin e anomalive gjenetike.

- ❑ SESAME është gjenerata e tretë e burimeve sinkrotron të dritës që prodhojnë pulses shumë intensive të dritës/ rrezeve X, me gjatësi valë dhe intensitetin që lejojnë studime të hollësishme të objekteve që variojnë në madhësi nga qelizat e njeriut, viruset e deri në nivel atomesh, me një saktësi që nuk është e mundur me mjete të tjera.
- ❑ Të dhënat e gjeneruara nga SESAME kanë nevojë për infrastrukturën të mëdha kompjuterike për t'u analizuar.

# SESAME Lab



# JU FALEMINDERIT