

*Projekt podpory vedeckých pobytov v organizácií
CERN, a podieľanie sa na vývoji GRIDovského prostredia
pre uchádzačov pôsobiacich na
Technickej univerzite, Fakulta elektrotechniky a informatiky, Katedra kybernetiky a
umelej inteligencie v Košiciach*

Doba riešenia projektu: 01.02. 2010 – 31.07. 2010

Projekt predkladá: Dr.h.c.Prof. Ing. Anton Čižmár, CSc.
rektor TUKE v Košiciach

Žiadateľ o podporu: Technická univerzita v Košiciach,
Fakulta elektrotechniky a informatiky,
Katedra kybernetiky a umelej inteligencie

*Projekt podpory vedeckých pobytov v organizácii
CERN,
pre uchádzačov pôsobiacich na
**Technickej univerzite, Fakulta elektrotechniky a informatiky, Katedra kybernetiky a
umelej inteligencie v Košiciach**
Individuálna schéma vedeckého pobytu uchádzača*

Meno, tituly: Lucia Vaľová (rod. Jancurová), Ing.

Dátum narodenia: 04. 05. 1982

Miesto narodenia: Svidník

Tel. č.: +421 904 463 577

email: lucia.jancurova@cern.ch

Pozícia: doktorand

Škola: Technická univerzita v Košiciach
Fakulta elektrotechniky a informatiky,
Katedra kybernetiky a umelej inteligencie

Školiteľ: doc. Ing. Ján Jadlovský, CSc.

Prezentácia projektu MS SR
CD-2009-35521/37347-1:11

1. Základné informácie o projekte

- **Názov projektu:** *Projekt podpory vedeckých pobytov v organizácií CERN pre uchádzačov pôsobiacich na* Technickej univerzite, Fakulte elektrotechniky a informatiky, Katedre kybernetiky a umelej inteligencie v Košiciach.
- **Základné informácie o žiadateľovi:** Fakulta elektrotechniky a informatiky TUKE, Katedra kybernetiky a umelej inteligencie,

adresa organizácie: Letná 9, 042 00 Košice,

IČO:00397610

príslušnosť k rezortu: MŠ SR

typ organizácie: verejná vysoká škola

sektor výskumu a vývoja: sektor vysokých škôl

Kontaktná osoba : doc. Ing. Ján Jadlovský, CSc, školiteľ,

tel.+421903 606 807, e-mail.jadlovsky@kybernetika.sk

Štatutárny zástupca: Dr.h.c. Prof. Ing. Anton Čižmár, CSc. - rektor

- Zámery, ciele a anotácia projektu

Zámerom a cieľom projektu je podieľať sa na vývoji GRID-ovského prostredia AliEn a počítať simulácie pomocou balíka PROOF, ktorý umožní experimentátorom analyzovať reálne dáta. Vzhľadom na to, že pohyb elementárnych častíc vo vonkajšom magnetickom poli je v programovom prostredí CERN veľmi dobre zvládnutý, je toto prostredie a programové vybavenie modifikované na výpočet pohybu nanočastíc vo vonkajšom magnetickom poli ako prostriedok pre cieleňý transport liečív. Dané výsledky prezentovať na domácich i zahraničných konferenciách, zvýšiť publikačné výstupy, zvýšiť vývoj a výskum na škole.

- Globálny rozpočet projektu žiadateľa

16 590 eur

- Doba trvania projektu

01/02/2010-30/09/2010

- Zoznam uchádzačov a ich školiteľov /odborných garantov v členení:

Tabuľka č. 1:

Č.	Uchádzač ¹ (meno, priezvisko, tituly)	Pozícia uchádzača (doktorand, postdoktoran d, študent)	Školiteľ (odborný garant) uchádzača (meno, priezvisko, tituly)	Doba trvania vedeckého pobytu uchádzača (od – do: dd/mm/rrrr – dd/mm/rrrr)	Miesto vedeckého pobytu uchádzača (názov pracoviska - laboratória, mesto, štát)	Celkové náklady na uchádzača ² (v eur)
1	Lucia Vaľová (rod. Jancurová), Ing	<i>doktorand</i>	Ján Jadlovský, Ing, CSc.	22/02/2010- 21/08/2010	CERN, 13R-008, Ženeva, Švajčiarsko	16 590
SPO LU		—	—	—	—	16 590

2. Individuálna schéma vedeckého pobytu uchádzača

2.1 Informácie o vedeckom pobyte uchádzača:

Meno, priezvisko, akademické a vedecké tituly uchádzača:

Lucia Vaľová, rod.(Jancurová), Ing

Osobné údaje uchádzača:

škola: TU FEI / KKUI,

dátum a miesto narodenia: 04.05.1982, Svidník

adresa trvalého bydliska: Wuppertálska 55, 040 23 Košice

kontakty: tel.+421904 463 577, e-mail:lucia.jancurova@cern.ch

- Väzba odbornej špecializácie projektu uchádzača, riešeného v rámci vedeckého pobytu na predmet poskytnutia dotácie

Doktorandka sa posledné tri roky venuje GRID-ovskému prostrediu AliEn, ktorý je vytvorený pre experiment ALICE v CERN-e. Pripravila ROOT-ovské prostredie (TAlienJDL), ktorým je možné zapustiť “job“ priamo z programu ROOT. Program sa nachádza v adresári “alien“ programu ROOT.

Vytvorila makrá, ktoré sú potrebné na zlučovanie ROOT-ovských súborov v prípade, že si spustíte “job“ v AliEn-e, ktorý je rozdelený na niekoľko “subjobov“.

V budúcnosti by sa doktorandka chcela naďalej podieľať na vývoji GRID-ovského prostredia AliEn a počítať simulácie pomocou balíka PROOF. Jej cieľom by bolo nastaviť PROOF cluster v spolupráci so storage elementom typu XROOTD, ktorý jej umožní riešiť konkrétne úlohy, ktoré súvisia s témou jej dizertačnej práce, ako tiež umožní experimentátorom analyzovať reálne dáta.

.Zdôvodnenie opodstantnenosti vedeckého pobytu uchádzača

Cieľom doktorandkinej dizertačnej práce bude vytvoriť počítačovú simuláciu prúdenia krvi s rozptýleným magnetickým liečivom v programe ROOT a pre rôzne typy magnetov vypočítať silu pôsobiacu na tieto častice a nájsť podmienky, kedy to bude možné zachytiť v požadovanej oblasti a udržať tak, aby liečivo po svojom uvoľnení mohlo vykonať svoju terapeutickú úlohu.

Vzhľadom na časovú náročnosť riešenia takýchto simulácií, bude v budúcnosti využívať GRID-ovské prostredie a využije podobnosť úloh spojených s pohybom elementárnych častíc vo vonkajšom magnetickom poli, t.j. úlohy ktoré sú riešené na urýchľovači LHC.

- Osobné údaje školiteľa doktoranda
Ján Jadlovský, Ing, CSc., TUKE FEI, Katedra kybernetiky a umelej inteligencie,
Letná 9, 042 00 Košice, tel.: 0903 606 807, E-mail: jadlovsky@kybernetika.sk
- Dátum nástupu uchádzača na vedecký pobyt
01/02/2010
- Dátum ukončenia vedeckého pobytu uchádzača
30/09/2010
- Prijímacia organizácia (pracovisko/laboratórium)
CERN
IT Department 31-R-012
CH-1211 Ženeva 23

- Vedúci riešiteľského tímu v prijímajúcej organizácii

Fabrizio Furano, Dr.

IT Department 31-R-012

CH-1211 Ženeva 23

+41764875911, fabrizio.furano@cern.ch

- Časový harmonogram vedeckého pobytu uchádzača

P.č	Názov etapy	Začiatok	Koniec	Náklady
1	Oboznámenie sa s nastavením programu PROOF	02/2010	03/2010	5440 eur
2	Oboznámenie sa so storage elementom typu XROOTD	04/2010	05/2010	5440 eur
3	Uvedenie PROOF clastera do prevádzky a simulácia konkrétnych úloh	06/2010	07/2010	5440 eur

2.2 Informácie o výskumnom projekte uchádzača riešenom počas vedeckého pobytu

a. Vecný zámer výskumného projektu uchádzača riešeného počas vedeckého pobytu

- Anotácia projektu uchádzača:

Zámerom tohto projektu je poskytnúť fyzikom možnosť analyzovať veľké množstvo dát spoľahlivo a dostatočne rýchlo. Jednou z možností je zapustiť svoj program v GRID-ovskej štruktúre, kde sa nám náš „job“ rozdelí na viac počítačov. Druhou možnosťou je umožniť fyzikom analyzovať interaktívne na farmách.

Jednou z možností ako analyzovať interaktívne a paralelne je nastavenie PROOF clusteru, ktorý nám ponúka všetky tieto možnosti.

- Kľúčové slová: CERN, ALICE, grid, AliEn, Root, Proof, MonaLisa

•Odôvodnenie potreby riešenia danej problematiky v súčasnosti:

S uvedením do prevádzky Large Hadron Collider (LHC), každý z detektorov - ALICE, ATLAS, CMS, LHCb bude produkovať veľké množstvo dát. Na týchto detektoroch sa budú sledovať zrážky častíc v doteraz nedostupnej oblasti energií, čo umožní získať nové unikátne fyzikálne poznatky o mikrosvete.

Na uloženie a analyzovanie tohto množstva dát, je potrebné mať veľa úložného priestoru (disky, pásky) a mnoho počítačových fariem. GRID, zgrupovanie týchto fariem do jedného systému, bol vytvorený pre tento účel. Hlavným softvérom pre GRID je program gLite. Združenie ALICE experiment, ktorého som členom, používa softvér s názvom AliEn, ktorý je nadstavbou programu gLite prispôbený pre požiadavky ALICE. Na monitorovanie AliEnu je použitý softvér Monalisa. Fyzici taktiež budú analyzovať dáta pomocou balíku PROOF, ktorý je súčasťou analyzovacieho programu ROOT. PROOF (The Parallel ROOT Facility) je balík, ktorý umožňuje fyzikom analyzovať dáta paralelne a interaktívne.

Mojou úlohou bude nastaviť PROOF cluster v spolupráci so storage elementom typu XROOTD, ktorý umožní experimentátorom analyzovať reálne dáta. Tento PROOF cluster by som chcela využiť taktiež na simulovanie dráh magnetických častíc.

Charakteristika predpokladaných výstupov

Účasť na odborných seminároch Proof, TF ALICE Offline meeting, skvalitnenie a prehĺbenie vlastného vedeckého potenciálu, získanie nových kontaktov, nadviazanie užšej spolupráce s medzinárodnou vedeckou komunitou, práca v tíme, nové know-how, jedna až dve vedecké publikácie.

•Popis infraštruktúry pracoviska prijímajúceho riešiteľa:

CERN je najväčšie laboratórium fyziky elementárnych častíc na svete založené v r. 1954. Toho času je v CERN-e 20 členských krajín. Hlavným poslaním CERN-u je poskytnúť urýchľovače elementárnych častíc a inej infraštruktúry potrebnej pre výskum v oblasti fyziky vysokých energií. V rámci CERN-u je prevádzkované najväčšie a najvýkonnejšie výpočtové centrum v Európe prednostne pre analýzu experimentálnych údajov. Toho času je Slovensko zapojené do dvoch veľkých programov CERN-u: ATLAS a ALICE.

b. Ciele a výstupy projektu uchádzača

Cieľom projektu bude podieľať sa na vývoji GRID-ovského prostredia AliEn a počítať simulácie pomocou balíka PROOF. Nastaviť PROOF cluster v spolupráci so storage elementom typu XROOTD, ktorý umožní experimentátorom analyzovať reálne dáta. Dané výsledky prezentovať na domácich i zahraničných konferenciách, zvýšiť publikačné výstupy, zvýšiť vývoj a vývin na škole. Nadviazanie užšej spolupráce s cieľom pracovať na spoločných prácach aj v budúcnosti.

Očakávané výstupy riešenia:

Publikácie v karentovaných časopisoch 1

Práce publikované v zahraničných časopisoch 2

Práce publikované na domácich a zahraničných konferenciách 2

Softwarový produkt-program, ktorý bude simulovať dráhy magnetických častíc v prostredí.

2.3 Rozpočet individuálnej schémy vedeckého pobytu uchádzača

Bežné priame náklady na vedecký/é pobyt/y uchádzača : spolu: 16 590 EUR

Náklady na stravné a ubytovanie uchádzača:
mesačné náklady: 2 720,- EUR
- stravné: 1 618,- EUR
- ubytovanie 1 102,- EUR
náklady za 6 mesiacov spolu: 16 320,- EUR

Cestovné výdavky uchádzača počas vedeckého pobytu : 270,-EUR

Náklady za 6 mesiacov spolu: 16 590,-EUR

Súhrnné vyhodnotenie vrátane zúčtovania prostriedkov so štátnym rozpočtom

Číslo dokladu	Dátum	Druh výdavku	Základ	DPH	Spolu
1. 116-2010	30.9.2010	cestovné	270,-	0,-	270,-
2. 1900100083	30.9.2010	stravné	13 845,31	0,-	13 845,31
Spolu	X	X	14 115,31		14 115,31

Bolo vrátených 2 474,69 EUR

2.4 Doplnujúce informácie o uchádzačovi

- Téma a stručná anotácia dizertačnej práce

Téma dizertačnej práce: Počítačová simulácia cieleného transportu liečiv pomocou magneticky značených liečiv a vonkajšieho magnetického poľa

- Anotácia dizertačnej práce:

Cieľom doktorandkinej dizertačnej práce bude vytvoriť počítačovú simuláciu prúdenia krvi s rozptýleným magnetickým liečivom v programe ROOT a pre rôzne typy magnetov vypočítať silu pôsobiacu na tieto častice a nájsť podmienky, kedy to bude možné zachytiť v požadovanej oblasti a udržať tak, aby liečivo po svojom uvoľnení mohlo vykonať svoju terapeutickú úlohu.

V práci bude prevedená počítačová simulácia uvedeného procesu v závislosti od rýchlosti prúdenia toku krvi v rôznych cievach od konkrétneho magnetického poľa, ktoré môže byť generované rôznymi typmi magnetov. Všetky tieto výsledky budú spracované vo forme vizualizácie a v súčasnej dobe už môžu byť porovnané s experimentálnymi metódami ako je napr. Magnetická rezonancia, ktorá umožňuje tento proces zviditeľniť.

•Zoznam citácií :

•Členstvo v medzinárodných organizáciách, radách a komisiách so zameraním na časticovú fyziku:

nie je

•Prehľad riešených projektov

FEI TUKE Grant VEGA 1/0617/08,

Spolupráca v rámci témy: „Information, Computer and Network support of JINR`s ” - 05-6-1048-2003/2010 Protokol č. 3920-6-09/10.

•Doteraz dosiahnuté výstupy výskumu a vývoja uchádzača:

Doktorandka pripravila ROOT-ovské prostredie (TAlienJDL), ktorým je možné spustiť “job“ z priamo z programu ROOT. Program sa nachádza v adresári “alien“ programu ROOT.

Vytvorila makrá, ktoré sú potrebné na zlučovanie ROOT-ovských súborov v prípade, že si zapustíte “job“ v AliEn-e, ktorý je rozdelený na niekoľko “subjobov“.

Výsledky dosiahnuté počas projektu

- Bol zostrojený PC klaster zo 4 pc, na ktorých bol naištalovaný operačný systém:

Linux Gentoo (v2:0:1)

a program

ROOT (v5:26:00), ktorý zahŕňa v sebe balík PROOF (parallel ROOT facility)

Nastenie PROOF-u

- AAF PROOF klaster JRAF
SKAF

Výsledky dosiahnuté počas projektu

zmapovali sme magnetické pole a jeho profil použili pri výpočtoch

	Stehenná tepna	Karotická tepna
B_0 [T]	0.195	0.234
u_0 [m/s]	0.462	0.841
u_{exp} [m/s]	0.05 – 0.35	0.1 – 0.6
F_m [kN/m ³]	5.992	105.025
dB/dx [T/m]	7.747	107.824
M [mT]	0.975	1.170

B_0 [T] je magnetické pole v mieste záchytu,

u_0 [m/s] je vypočítaná hodnota rýchlosti pomocou simulácií.

u_{exp} [m/s] je experimentálna hodnota

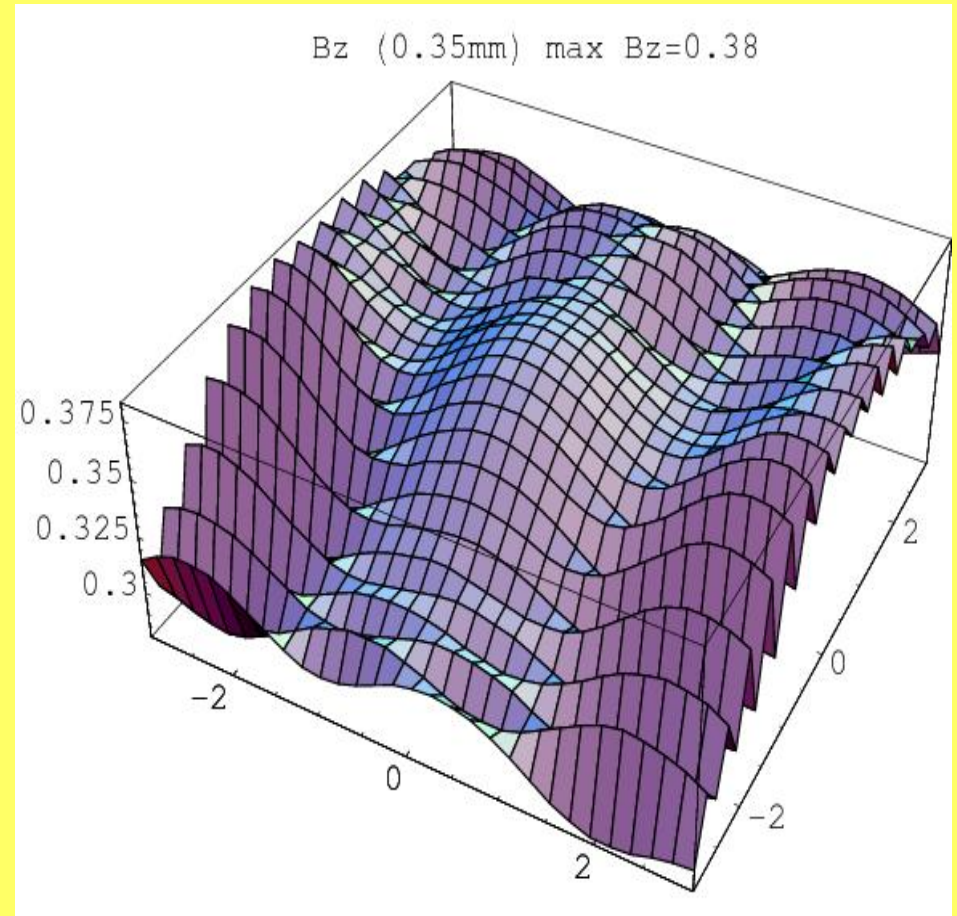
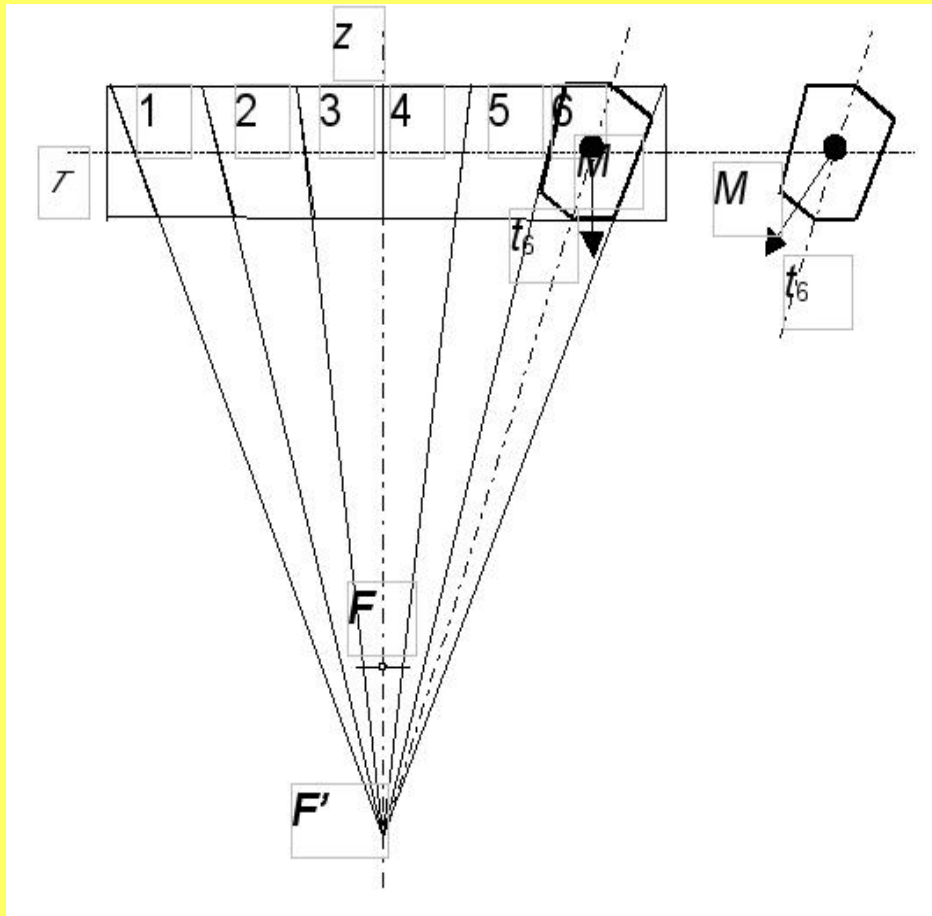
F_m [kN/m³] objemová magnetická sila potrebná na udržanie magnetického liečiva,

dB/dx [T/m] je gradient magnetického poľa v mieste záchytu

M [mT] je magnetizácia použitej magnetickej kvapaliny.

Porovnanie vypočítaných hodnôt s experimentálne nameranými hodnotami rýchlosti v toku krvi pre dve tepny

Výsledky dosiahnuté počas projektu



Priečny prierez fokusovaného magnetu

Profil magnetického poľa generovaného fokusovaným magnetom

Výsledky dosiahnuté počas projektu

$$B_x \quad <-3; 3 >$$

$$B_y \quad <-3; 3 >$$

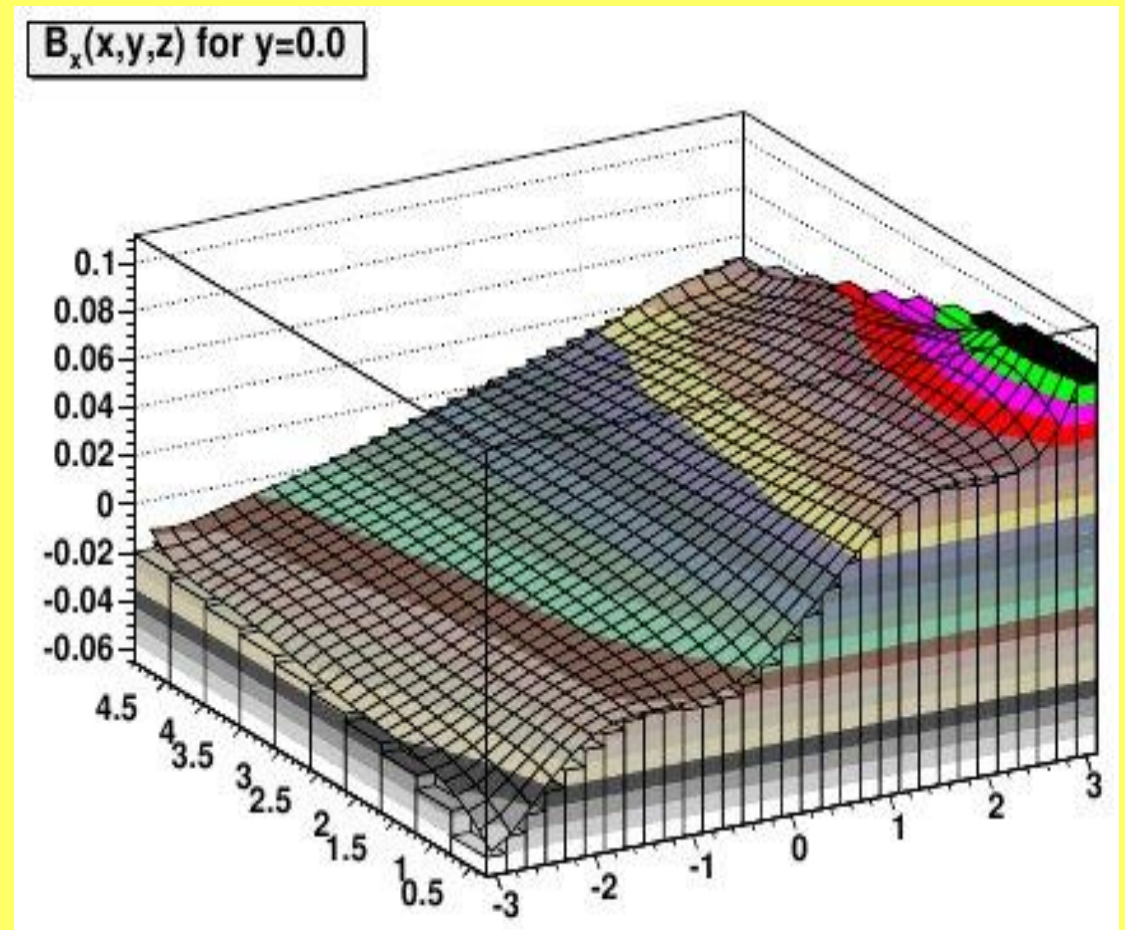
$$B_z \quad < 0,35; 4,85 >$$

na mriežke s krokom

$$h_x = 0,2$$

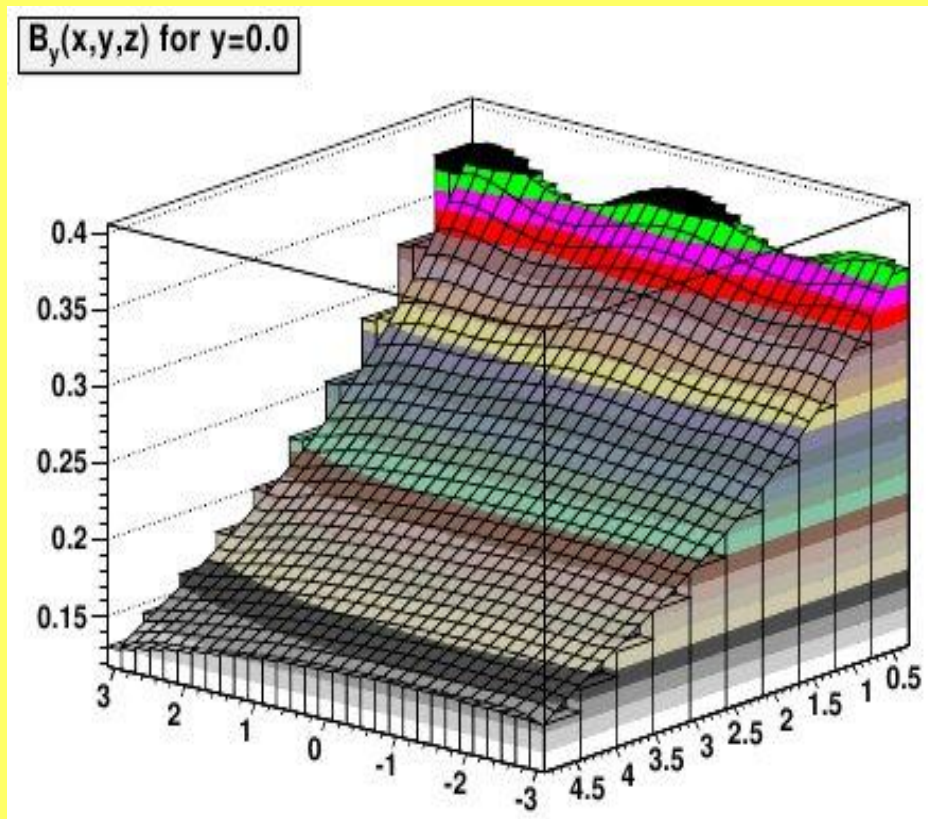
$$h_y = 0,2$$

$$h_z = 0,5$$

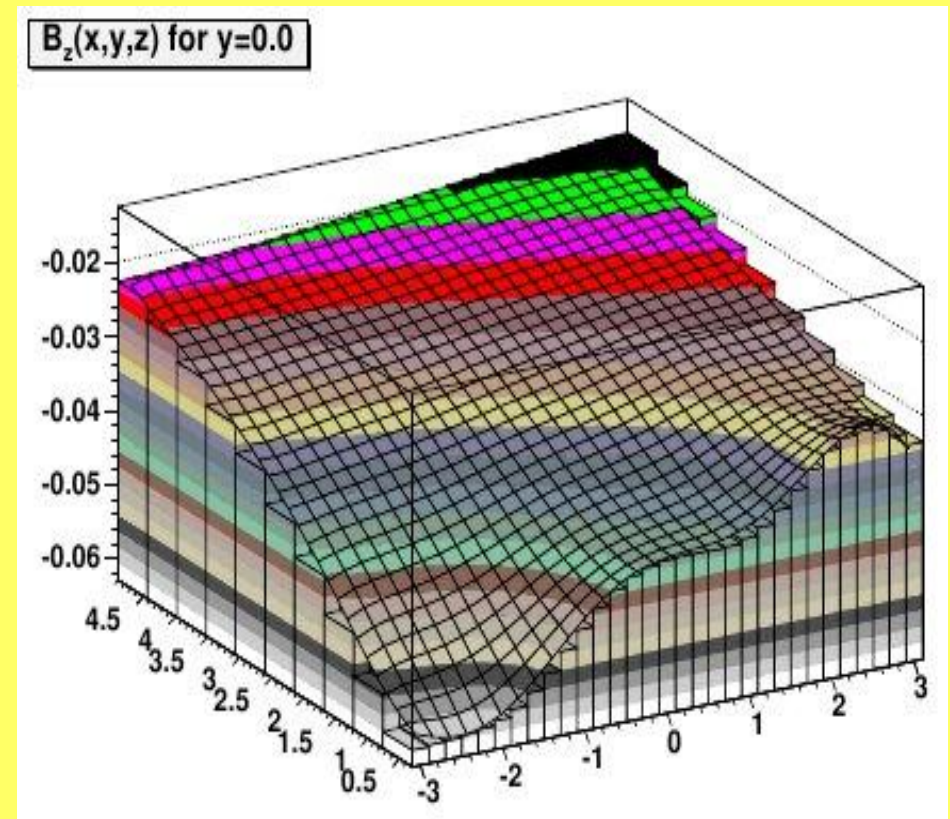


Zložky magnetického poľa B_x

Výsledky dosiahnuté počas projektu



Zložky magnetického poľa B_y



Zložky magnetického poľa B_z

Záver

Predchádzajúce výsledky boli doteraz publikované:

Články publikované na domácej konferencii :

1. Lucia Vaľová, Controlling of drug targeting by magnetic field, 10th Scientific Conference of Young Researchers (SCYR), Faculty of Electrical Engineering and Informatics, Technical University of Košice, 2010

Články publikované na zahraničných konferenciách:

1. Galina Shabratoва, Lucia Jancurová a ALICE collaboration, RDIG in Simulation and Analysis of ALICE data from LHC, Joint Institute for Nuclear Research Laboratory of Information Technologies, The 4th International Conference "Distributed Computing and Grid-technologies in Science and Education", June 28 - July 3, 2010, Dubna, Russia
2. Galina Shabratoва, Lucia Jancurová a ALICE collaboration, Joint Institute for Nuclear Research Laboratory of Information Technologies, The 4th International Conference "Distributed Computing and Grid-technologies in Science and Education", June 28 - July 3, 2010, Dubna, Russia
3. Galina Shabratoва, Lucia Jancurová a ALICE collaboration, Joint Institute for Nuclear Research Laboratory of Information Technologies, Distributed Russian Tier2 – RDIG in Simulation and Analysis of ALICE. Data from LHC, International Conference on Computing in High Energy and Nuclear Physics (CHEP), Taipei, Taiwan from 18-22 October 2010.

*Projekt podpory vedeckých pobytov v organizácii
CERN,*

pre uchádzačov pôsobiacich na

***Katedre kybernetiky a umelej inteligencie, Fakulte
elektrotechniky a informatiky, Technickej
univerzity v Košiciach***

podporuje

***Ministerstvo školstva, vedy, výskumu a športu
Slovenskej republiky***