

Teza de Abilitare - Rezumat

**Cercetări avansate în informatica medicală
standardizată și în dinamica moleculară
computațională**

Teza de Abilitare - Rezumat

Dr. Nicolae Goga

Teza de Abilitare - Rezumat

The image is a screenshot of the news website of the University of Groningen (RUG). The header features the university's logo and name, 'rijksuniversiteit groningen', along with the text '2014 | 400 jaar' and 'founded in 1614 - top 100 university'. There are navigation links for 'Contact', 'My University', and a search bar. A red navigation bar contains 'Nieuws en agenda', 'Onderwijs', 'Onderzoek', and 'Wetenschap en samenleving'. Below this, there are sub-navigation options for 'Over ons' and 'Actueel' with a 'Nieuws' dropdown. The main content area is titled 'Nieuws' and includes a sidebar with links for 'Nieuws doorzoeken', 'Nieuwsarchief', and 'Evenementen en open dagen'. The main article is titled 'IEEE-SA Emerging Technology Award received on standardization', dated '10 januari 2011'. The text describes Dr. Nicolae Goga's team receiving the award for their work on IEEE Standard 11073-20601™-2008. An image of a hospital room with medical equipment is shown, with a caption: 'Transmission protocols between medical devices that send patient-related physiological data'. To the right of the image, there is a text block explaining Goga's work on standardizing transmission protocols between medical devices and computer systems, and mentioning his collaboration with professor Herman Berendsen. A link for more information is provided: n.goga@rug.nl.

(see <http://www.rug.nl/news/2011/01/emergingtechnologyaward>)

Teza de Abilitare - Rezumat

Rezumat

Contextul tezei de abilitare Această teză de abilitare descrie contribuțiile științifice ale autorului realizate în decursul a zece ani de cercetare, după cele două teze de doctorat ale sale obținute din partea Universității din Eindhoven (2004), Olanda și Universitatea Politehnică din București (2005), România. Această teză de abilitare poate fi rezumată parțial prin următorul citat din știrea publicată pe site-ul Universității din Groningen, Olanda, atunci când autorul a primit IEEE Technology Merits Awards US (Premiul Științific IEEE pentru Merite Tehnologice, SUA), la sfârșitul anului 2010:

Dr. Nicolae Goga, împreună cu colegii săi din Grupul IEEE 11073 de Standardizare a Dispozitivelor Medicale au fost selectați pentru a obține unul din cele două premii științifice IEEE ((Institutul de inginerie electrică și electronică) pentru Merite Tehnologice.

Lucrul său în cadrul grupului de standardizare a constat în verificarea formală a protocoalelor de transmisie între dispozitive medicale care transmit date fiziologice legate de pacient și alte dispozitive sau sisteme de calculatoare care primesc aceste date. În prezent, el lucrează cu profesorul emerit Herman Berendsen și alți specialiști din grupul său de dinamică moleculară pentru realizarea de algoritmi, tehnici și aplicații de dinamică moleculară. (IEEE-SA Emerging Technology Award, Site-ul de Știri ale Facultății de Științe ale Naturii, Universitatea din Groningen, 10 ianuarie 2011, disponibil online la: <http://www.ruq.nl/news/2011/01/emergingtechnologyaward>)

Această teză descrie contribuții științifice din domeniul bio-informatică, și anume informatica medicală și dinamică moleculară. Este adevărat că cele două domenii se intersectează doar la nivel de domeniu (bio-informatică). Cu toate acestea, deoarece autorul are contribuții internaționale recunoscute în cele două domenii din timpul anilor săi de cercetare, ne-am decis să prezentăm ambele direcții de cercetare în această teză.

Impactul activității de cercetare Autorul tezei de abilitare este membru al grupului ISO/IEEE 11073 de standardizare a echipamentelor medicale. Pe baza rezultatelor activității sale de cercetare formală, el este co-autor al standardului ISO/IEEE 11073 - 20601. El este co-autor, de asemenea, la alte opt standarde din această familie¹. Impactul acestei cercetări poate fi considerat ca fiind la nivel mondial, având în vedere faptul că această familie de

¹ IEEE 11073 Device Specialization; standards: 1) 10420:2010; 2) 10421:2010; 3) 10472:2010 4) 20601a-2010; 5) 00103-2012; 6) 10406-2011; 7) 10417-2011; 8) 10441:2013;

Teza de Abilitare - Rezumat

standarde este o familie ISO implementata de către companii puternice de pe toate continentele, cum ar fi Philips, Siemens, Intel, IBM, etc, pentru a menționa doar câteva.

Noul algoritm stohastic de dinamica moleculara prezentat în această teză (Capitolul 5) este deja parte din noua versiune 5.0 a Gromacs (www.gromacs.org). Alți algoritmi noi prezentați în această teză (algoritmii DPD – Dissipative Particle Dynamics (En)/Dinamica Disipativa a Particulelor (Ro), Capitolul 5) sunt în lucru pentru a fi incluși în următoarele versiuni ale Gromacs. În acest fel, contribuțiile de dinamica moleculara prezentate în această teză vor fi folosite la nivel mondial de grupuri științifice de top, având, de asemenea, un impact la nivel mondial.

Structura tezei Înainte de a merge mai departe, trebuie să spunem două lucruri. În primul rând, așa cum deja am menționat, MD este un domeniu interdisciplinar. Cu două excepții (Capitolele 3 și 5), am încercat să ne concentrăm asupra aspectelor IT ale contribuțiilor MD ale autorului. Cu toate acestea, autorul a avut mai multe contribuții în cadrul teoriei MD pentru dezvoltarea de noi algoritmi (implementați în Gromacs), contribuții care sunt la intersecția dintre fizica și chimie. Cu excepțiile menționate, nu am alocat spațiu pentru contribuțiile teoretice de dinamica moleculara, ci am încercat să ne concentram pe aspectele IT ale cercetării de dinamica moleculara, făcând trimiteri pentru aprofundare către articolele publicate. Cu toate acestea, pentru a da o impresie cu privire la teoria dezvoltată, Capitolul 3 și Capitolul 5 prezintă contribuții teoretice și rezultatele din domeniul MD.

Cu acestea fiind spuse, mai jos redăm o privire de ansamblu asupra diferitelor capitole ale tezei și conținutul lor.

- Capitolul 1 prezintă contribuțiile autorului pentru analiza formală a standardului ISO / IEEE 11073 20601 - contribuții incluse în acest standard. Aceasta munca de cercetare a fost prezentată în *Systems Conference, 2009 3rd Annual IEEE*.
- Capitolul 2 descrie o nouă metodă de determinare a pulsului folosind camere video. Munca de cercetare a fost prezentată în *Bioinformatics and Bioengineering Conference (BIBE), 2013, 13th Annual IEEE*.
- Capitolul 3 descrie cercetarea referitoare la modelarea multiscalara MD. Munca de cercetare a fost publicată în cartea “*ADVANCES IN PLANAR LIPID BILAYERS AND LIPOSOMES*”, vol. 15, Academic Press, Elsevier Inc, 2012.
- Capitolul 4 prezintă paralelizarea MPI a unuia dintre algoritmii descriși în Capitolul 3. Munca de cercetare a fost publicată în *Systems Conference, 2009 3rd Annual IEEE*.

Teza de Abilitare - Rezumat

- Capitolul 5 descrie algoritmi noi pentru termostate stocastice și tip DPD. - lucrare publicata în *Journal of Chemical Theory and Computation*, vol. 8, no. 10, 3637–3649, 2012.
- Capitolul 6 discută paralelizarea NVIDIA a termostatelor prezentate în Capitolul 5 - lucrare publicată în *Journal of Chemical Theory and Computation*, vol. 8, no. 10, 3637–3649, 2012.
- Capitolul 7 prezintă paralelizarea MPI a unui variant de algoritm DPD dintre cei prezentati în Capitolul 5 - publicat in *Journal of Atomic and Molecular Physics, Volume 2013 (2013), Article ID 579696, 6 pages, 2013.*
- Capitolul 8 prezinta concluziile și planurile de dezvoltare viitoare.