

Skaitinis ir simbolinis reakcijos ir difuzijos procesų bioreaktoriuose modeliavimas

Linas Petkevičius (VU MIF)

Doktorantūros metai - 2015 m. - 2019 m.

Vadovas - prof. dr. R. Baronas (VU MIF)

Mokslo kryptis: Informatika (09 P)



2017 m. spalio 17 d.

- Išlaikyti egzaminą Lygiagretieji ir paskirstyti skaičiavimai
 - 1 Mokslinių tyrimų disertacijos tema apžvalga ir analizė
 - 1.4 Parengti disertacijos apžvalginės dalies pradinę versiją
 - 2 Mokslinio tyrimo vykdymas
 - 2.1 Sudaryti ir aprašyti tyrimo metodiką
- Sudalyvauti tarptautinėje konferencijoje "International Conference on Advances in System Simulation (SIMUL 2017)";
- Iš gautų rezultatų paruošti straipsnį.

Doktorantūros egzaminai

Dalykas	Kreditai	Laik. data	Komisija	Įvert.
Lygiagretieji ir paskirstyti skaičiavimai	9	2017m. rugsėjo 28d.	Prof. Dr. J. Žilinskas Prof. habil. dr. G. Dzemyda dr. Viktor Medvedev	9
Matematinės fizikos lygtys	7	2016m. kovo 1d.	Prof. habil. dr. F. Ivanauskas Doc. dr. A. Ambrazevičius Prof. dr. R. Baronas	9
Skaitiniai metodai	9	2016m. birželio 28d.	Prof. habil. dr. F. Ivanauskas Doc. dr. P. Katauskis prof. dr. R. Baronas	8
Globaliojo optimizavimo metodai	7	2016m. rugsėjo 26d.	Prof. habil. dr. A. Žilinskas Prof. habil. dr. G. Dzemyda Prof. Dr. J. Žilinskas	8

Straipsniai recenzuojamuose leidiniuose:

[1] L. Petkevičius, R. Baronas. Numerical Simulation and Analysis of Enzyme-Catalysed Substrate Conversion in a Microbioreactor. In: SIMUL 2017: The Ninth International Conference on Advances in System Simulation. IARIA, 2017. ISBN 978-1-61208-594-4, p. 1-6.

Mokslinės konferencijos už ataskaitinius metus:

- Tarptautinė konferencija: Conference on Advances in System Simulation, Numerical Simulation and Analysis of Enzyme-Catalysed Substrate Conversion in a Microbioreactor, 2017m. Spalio 8-12d., Atėnai, Graikija.
- 58-oji Lietuvos matematikų draugijos konferencija, Matematinis biokatalizės procesų sferiniame mikroreaktoriuje modeliavimas, 2017m. Birželio 21-22d., Vilnius.
- Open Readings 2017, Modelling micro-reactor with an Nernst layer, 2017m. Kovo 14-17d., Vilnius.
- Tarptautinė konferencija: Data analysis methods for software systems, Micro-reactor with an outer layer: experimental investigation and modelling, 2016m. Gruodžio 1-3d. Druskininkai.

Mokslinės konferencijos:

- Tarptautinė konferencija: AMSDA Outlier detection and identification when the number of outliers is unknown 2017m. Birželio 6-9d., Londonas, Jungtinė Karalystė.

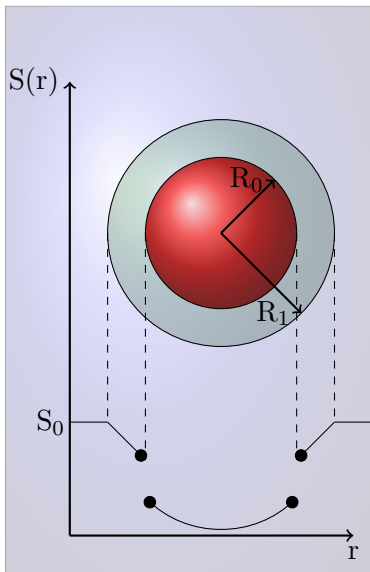
Doktorantūros mobilumo programos:

- Gautas finansavimas doktorantų mobilumo programai (COST Action IC307), dalyvauti vasaros mokykloje "iV&L Net Training School 2017", Rugsėjo 4-6d., Atėnai, Graikija.

- Pratybų užsiėmimų vedimas
 - Informatika II(FDM), trys pogrupiai, 96 akad. val.
- Vadovavimas bakalauro ir kursiniams darbams
 - Vadovauta bakalauro baigiamajam darbui.
 - Vadovauta penkiems kursiniams darbams.
- Bakalauro darbų recenzavimas
 - Recenzuoti trys programų sistemų bakalauro darbai.

Mikroreaktorių modeliavimas

Pastoviai pildomas ir maišomas reaktorius



- Nagrinėjamas dviejų sluoksnių mikroreaktorius.
- Mikrobioreaktoriuje vyksta biocheminės reakcijos (Michaelio-Menten kinetika), vidiniai masės mainai.
- Nernsto sluoksnyje vyksta difuzija - išoriniai masės mainai.
- Koncentracijos yra trūki tarp dviejų sluoksnių.
- Suformuluotas bedimensinis modelis.
- Tirtas mikroreaktoriaus efektyvumas (išeigos faktorius)

- Nernsto sluoksnio storis stipriai įtakoja produkto išėigą;
- Produkto išėiga reikšmingai mažėja, Nernsto sluoksniui esant bent du kart didesniam už mikrobioreaktoriaus dydį;
- Išėigos faktorius didėja didėjant substrato koncentracijai tirpale, bei mažėjant Biot skaičiui;
- Kinetika supanašėja į pirmos eilės, jei tirpalo koncentracija didesnė nei 10;
- Didelis išėigos faktorius gali būti gaunamas, tik prie mažesnių nei 1 difuzijos modulio reikšmių;

- Parašytas ir pateiktas straipsnis nagrinėjantis biokatalizines sistemas, sudarytas iš daug mikroreaktorių, patalpintų tirpale;
- Stacionariai sistemai suformuluotas bedimensinis modelis;
- Parašytas rankraštis iš simbolių skaičiavimų modelių palyginimo;
- Rezultatai pristatyti tarptautinėse konferencijose;

2.2 Teorinis tyrimas:

- 2.2.1 Biserinio mikroreaktoriaus matematinių bei skaitinių modelių sudarymas.
- 2.2.2 Praktinių bioreaktorių sprendinio konstravimas neuroniniais tinklais ir simboliais skaičiavimais.
- 2.2.3 Bioreaktorių matematinio modelio sprendinių lyginamoji analizė.

2.3 Empirinis tyrimas:

2.3.1 Bioreaktorių kompiuterinio modelio realizacija.

- Darbo rezultatus pristatyti tarptautinėje konferencijoje
- Darbo rezultatus publikuoti periodiniame Lietuvos ar užsienio mokslo žurnale.

Programų sistemų katedros išvada: doktorantas Linas Petkevičius
2016/2017 m. m. darbo planą įvykdė.

Ačiū už dėmesį