

Kompiuterio mokymo metodai fizikinių ir biocheminių duomenų analizėje

Doktorantas: Tomas Raila

Darbo vadovas: prof. dr. Tadas Meškauskas

2018-10-24

- Studijų laikotarpis: 2017-2021 m.
- Ataskaita už pirmus studijų metus

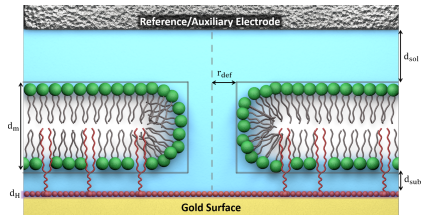
- Egzaminas „**Duomenų analizės strategijos ir sprendimų priėmimas**“.
 - Išlaikytas, įvertinimas: 10.
- Egzaminas „**Sistemų bei adaptyviųjų filtrų metodai ir taikymai**“.
 - Išlaikytas, įvertinimas: 10.

- Raila T., Penkauskas T., Jankunec M., Dreičas G., Meškauskas T., Valinčius G., (2018). Electrochemical impedance of randomly distributed defects in tethered phospholipid bilayers: Finite element analysis.
 - Straipsnis pateiktas į žurnalą *Electrochimica Acta*, laukiama recenzijos.
- Valinčius G., Penkauskas T., Jankunec M., Raila T., Dreičas G., Meškauskas T. Electrochemical impedance of heterogeneous phospholipid bilayers on solid electrodes.
 - Darbo rezultatai pristatyti tarptautinėje konferencijoje: *International Society of Electrochemistry Topical Meeting, Vilnius, Lithuania, 2018-05-09*.

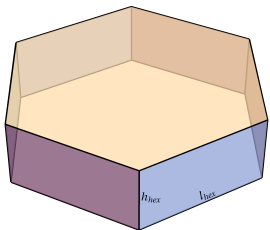
- Egzaminai:
 - Išlaikyti egzaminą „**Skaitiniai metodai**“.
 - Išlaikyti egzaminą „**Lygiagretieji ir paskirstytieji skaičiavimai**“.
- Rezultatų pristatymo planas:
 - Konferencija *Data Analysis Methods for Software Systems (DAMSS)*, lapkričio 29 d. - gruodžio 1 d. 2018 m., Druskininkai, Lietuva.
 - Dar viena tarptautinė konferencija, skirta kompiuterio mokymo metodų tyrimams ir taikymams.
- Mokslinių publikacijų planas:
 - Nauja metodika (modelis ir algoritmas) fizikinių arba biocheminių duomenų analizei. Straipsnis recenzuojamame periodiniame leidinyje, turinčiame citavimo rodiklį *Clarivate Analytics Web of Science* duomenų bazėje.

- Nagrinėjamos dvisluoksnių fosfolipidinių membranų (tBLM) su defektais elektrinio laidumo savybės.
- Baigtinių elementų metodu (FEM) modeliuojamos EIS (elektrocheminio impedanso spektroskopija) spektrų savybės ir tiriamas jų ryšys su defektų pasiskirstymu, tankiu bei dydžiu.
- Bendradarbiaujama su VU GMC Biochemijos instituto mokslininkais.

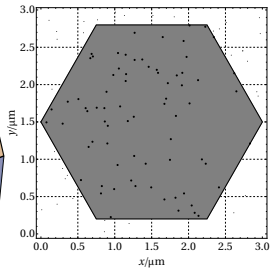
Trimatis membranos modelis



(a) Membranos defekto skerspjūvis



(b) Modelio geometrija



(c) Defektų išsidėstymas

- FEM sprendžiama Laplaso lygtis:

$$\nabla \cdot (\tilde{\sigma}(x, y, z) \nabla \Phi(x, y, z)) = 0 \quad (1)$$

$$\tilde{\sigma}(x, y, z) = \sigma(x, y, z) + j\omega\varepsilon(x, y, z), \quad (2)$$

- Kraštinės sąlygos:

$$\Phi(x, y, h_{hex}) = 1 \quad (3)$$

$$\Phi(x, y, 0) = 0 \quad (4)$$

$$n \cdot J = 0 \quad (5)$$

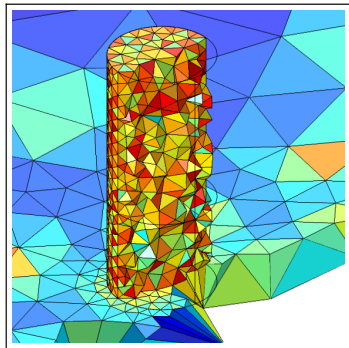
- Srovės tankis:

$$J(x, y, z) = -\tilde{\sigma}(x, y, z) \nabla \Phi(x, y, z) \quad (6)$$

- Admitansas:

$$Y = \frac{\iint_{(x,y) \in \Gamma_{hex}} -n \cdot J(x, y, h_{hex}) dx dy}{S_{hex}} \times \frac{1}{\Phi(x, y, h_{hex})} \quad (7)$$

- Modelis realizuotas naudojant COMSOL Multiphysics 5.3a paketą.
- Tinklelis sutankintas defektų viduje ir jų aplinkoje.
- Lygčių sistemos sprendžiamos tiesioginiu (angl. direct solver) MUMPS metodu.
- Skaičiavimai vykdomi MIF PST, lygiagretinama pagal dažnio parametą.



- EIS - elektrocheminio impedanso spektroskopija
- Išvestiniai parametrai:

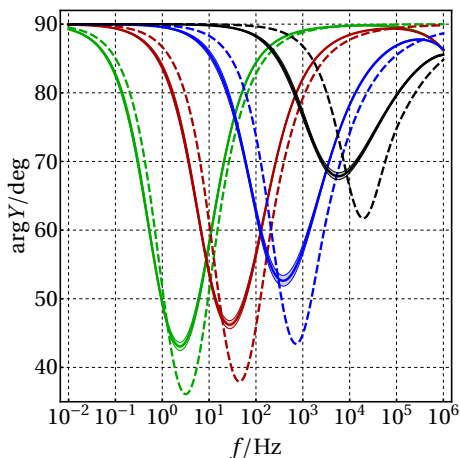
f_{min} – dažnis f kuriame $\arg Y(f)$ įgyja mažiausią reikšmę, (8)

$\arg Y(f_{min})$ – admitanso fazės reikšmė taške f_{min} , (9)

$|Y(f_{min})|$ – admitanso modulio reikšmė taške f_{min} , (10)

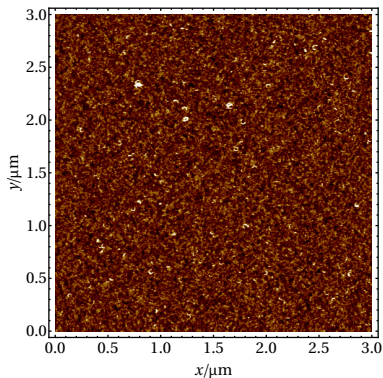
$D_{f_{min}}$ – išvestinė $\frac{d \lg |Y|}{d \lg f}$ taške f_{min} . (11)

Palyginimas su analitiniais sprendiniais

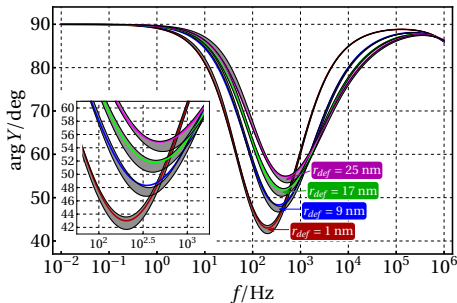


- EIS spektrai esant skirtingam defektų tankiui
- Punktyrinės kreivės - analitiniai sprendiniai esant homogeniškam defektų pasiskirstymui
- Išsitiesinės kreivės - skaitiniai sprendiniai esant kompiuteriu sugeneruotam atsitiktiniam defektų pasiskirstymui

Eksperimentinis defektų išsidėstymas be klasterių

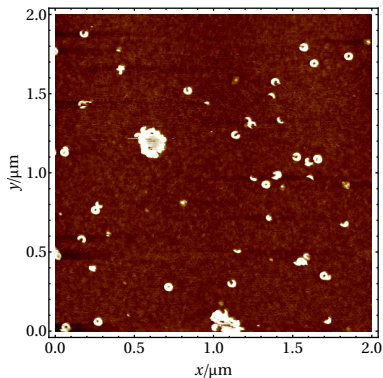


(d) Eksperimentiškai gautas defektų išsidėstymas membranoje

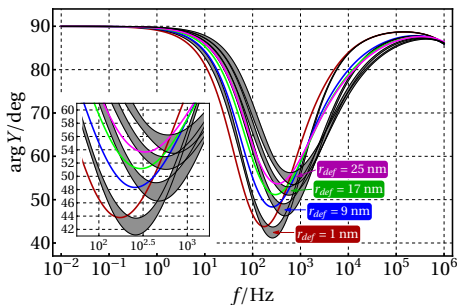


(e) EIS parametrai esant eksperimentiškai gautam ir kompiuteriu sugeneruotam defektų išsidėstymui

Eksperimentinis defektų išsidėstymas su klasteriais

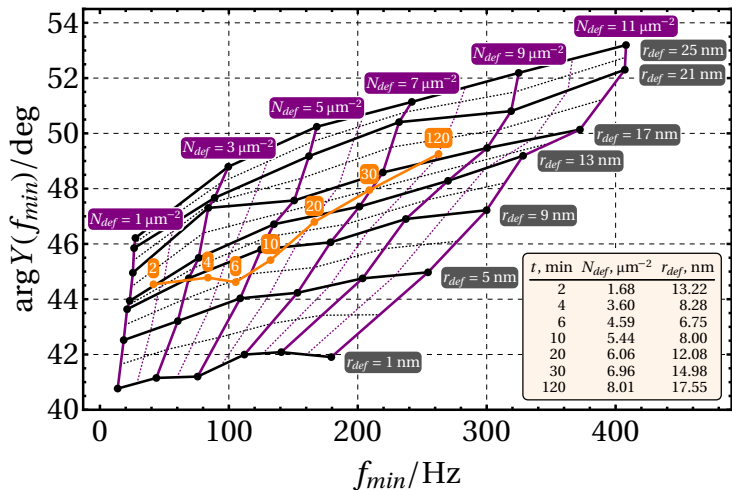


(f) Eksperimentiškai gautas defektų išsidėstymas membranoje



(g) EIS parametrai esant eksperimentiškai gautam ir kompiuteriu sugeneruotam defektų išsidėstymui

Palyginimas su EIS matavimų rezultatais



- Egzistuoja kokybinis panašumas tarp analitiškai gautų EIS spektrų homogeniškiems defektų pasiskirstymams bei skaitiškai sumodeliuotų spektrų esant atsitiktiniams pasiskirstymams.
- Atsitiktinai kompiuteriu sugeneruotų ir eksperimentiškai gautų defektų pasiskirstymų (esant fiksuotam tankiui) EIS spektrai sutampa tik pasiskirstymų be klasterių atvejais.
- Pagal eksperimentiškai gautus EIS parametrus įmanoma įvertinti membranos defektų savybes.

- Tirti defektų klasterizacijos įtaką EIS charakteristikoms.
- Parinkti kompiuterio mokymo tipo metodą automatiniam defektų aptikimui ir parametrizavimui AFM nuotraukose.
- Padidinti skaičiavimų našumą, panaudojant iteracinius sprendimo algoritmus, adaptyvų tinklelio generavimą bei efektyviau išlygiagretinant skaičiavimus skirtingose aplinkose (Cluster, GPU).
- FEM testavimui alternatyviai algoritmą įgyvendinti atviro kodo *deal.ii* biblioteka.