

# Kompiuterio mokymo metodai fizikinių ir biocheminių duomenų analizėje

Doktorantas: Tomas Raila

Darbo vadovas: prof. dr. Tadas Meškauskas

2020-10-22

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

- Egzaminas „Duomenų analizės strategijos ir sprendimų priėmimas“.
  - Išlaikytas 2018 m., įvertinimas: 10
- Egzaminas „Sistemų bei adaptyviųjų filtrų metodai ir taikymai“.
  - Išlaikytas 2018 m., įvertinimas: 10
- Egzaminas „Skaitiniai metodai“.
  - Išlaikytas 2019 m., įvertinimas: 9.
- Egzaminas „Lygiagretieji ir paskirstytieji skaičiavimai“.
  - Išlaikytas 2019 m., įvertinimas: 10.

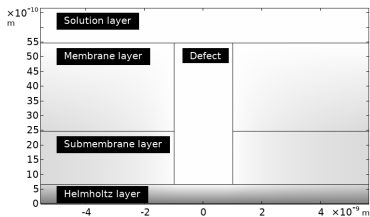
- Raila T., Penkauskas T., Jankunec M., Dreižas G., Meškauskas T., Valinčius G., (2019). Electrochemical impedance of randomly distributed defects in tethered phospholipid bilayers: Finite element analysis.
  - 2019 m. publikuotas žurnale *Electrochimica Acta*
- **Raila T., Ambrulevičius F., Penkauskas T., Jankunec M., Meškauskas T., Vanderah D. J., Valinčius G., (2020). Clusters of protein pores in phospholipid bilayer membranes can be identified and characterized by electrochemical impedance spectroscopy.**
  - Priimtas publikavimui žurnale *Electrochimica Acta*

- Raila. T., Meškauskas T., Valinčius G., Jankunec M., Penkauskas T. (2019) Computer modeling of electrochemical impedance spectra for defected phospholipid membranes: finite element analysis
  - 2020 m. publikuotas Springer LNCS 11974
- **Raila T., Jankunec M., Meškauskas T., Valinčius G., (2020). Computational models of defect clustering for tethered bilayer membranes.**
  - 2020 m. publikuotas Springer LNCS 12253

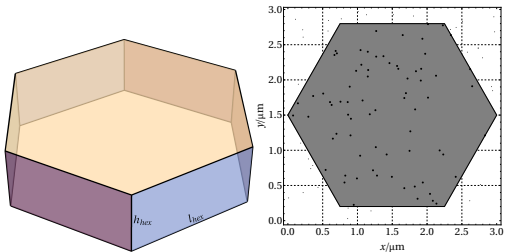
- 10-oji tarptautinė konferencija „Data Analysis Methods for Software Systems“ (DAMSS2018), 2018-11-28 – 2018-11-30, Druskininkai, Lietuva.
- 9-oji Jaunųjų mokslininkų konferencija „Fizinių ir technologijos mokslų tarpdalykiniai taikymai“. 2019-03-12, Vilnius, Lietuva.
- 3-oji tarptautinė konferencija „Numerical Computations: Theory and Algorithms“ (NUMTA2019), 2019-06-15 – 2019-06-20, Krotonė, Italija.
- **20-oji tarptautinė konferencija „International Conference on Computational Science and Its Applications“ (ICCSA2020), 2020-07-01 – 2020-07-04, Kaljaris, Italija.**
  - Dalyvauta nuotoliniu būdu

- 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) Trimačio membranos modelio skerspjūvis defekto aplinkoje



(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:

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

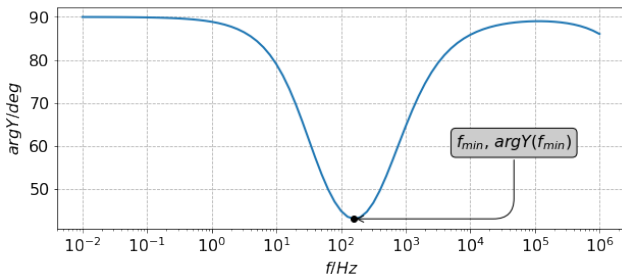
# EIS parametrai

- EIS - elektrocheminio impedanso spektroskopija
- Išvestiniai parametrai:

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

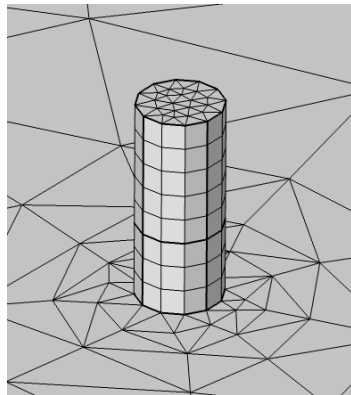
$\arg Y(f_{min})$  – admitanso fazės reikšmė taške  $f_{min}$ , (9)

(10)



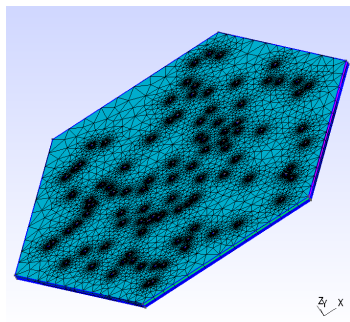
1 pav.: Sumodeliuoto EIS spektro pavyzdys

- FEM skaičiavimai atlikti naudojant COMSOL Multiphysics 5.4 paketą.
- Tinklelis, sudarytas iš prizmių arba tetraedrų, sutankinamas defektų viduje ir jų aplinkoje
- Lygčių sistemos sprendžiamos tiesioginiu MUMPS metodu.
- Skaičiavimai lygiagretinami pagal dažnio parametą.
- Ribotos apimties modeliai, iki  $\sim 1000$  defektų.



2 pav.: Tinklelio defekto viduje pavyzdys

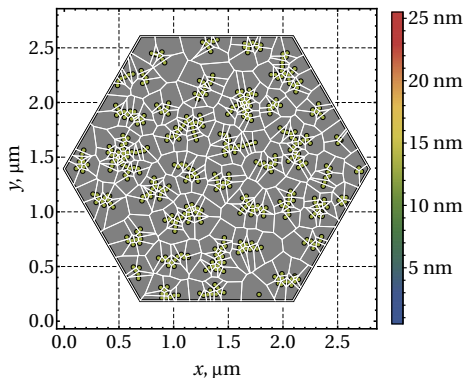
- Parinkti COMSOL parametrai, užtikrinantys reikiamą balansą tarp sprendinio tikslumo (EIS požymių atžvilgiu) bei skaičiavimų trukmės
- Alternatyvus tinklelio generavimo metodas naudojant **Gmsh** įrankį (3 pav.)
- Pradėtas modelio įgyvendinimas naudojant atviro kodo **deal.ii** įrankį



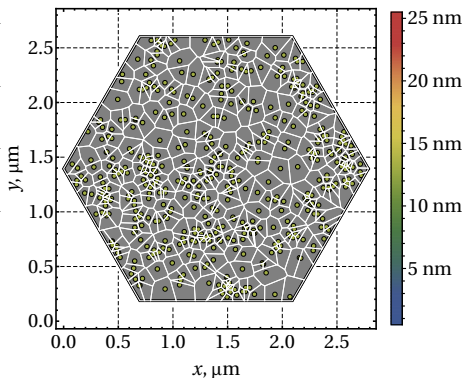
3 pav.: Gmsh įrankiu sugeneruoto tinklelio pavyzdys

# Defektų klasterizacijos modeliai

- Atsitiktinis išsidėstymas (klasterizacijos nėra)
- Defektų tarpusavio trauka (4a pav.)
- Procedūrinis triukšmo generavimas (*lattice convolution noise - LCN*) (4b pav.)



(a) Defektų tarpusavio trauka



(b) Procedūrinis triukšmo generavimas

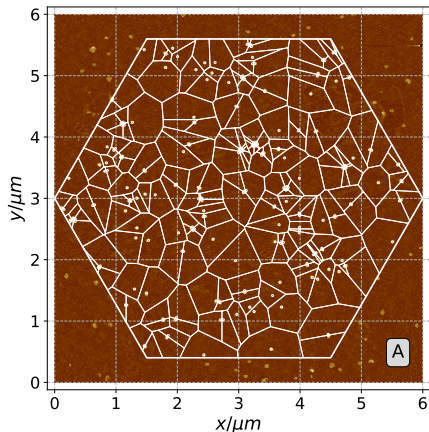
# Klasterizacijos rodikliai

$\sigma$  - Voronojaus diagramos sektorių plotų standartinis nuokrypis

- Atsitiktinis defektų išsidėstymas:  $\sigma \approx 0.54$
- Realūs defektų išsidėstymai, fiksuoti AFM:  $\sigma > 0.8$

Kitos metrikos:

- Asimetrijos koeficientas (skewness)
- Ekscesas (kurtosis)
- Absoliutusias medianos nuokrypis (MAD)



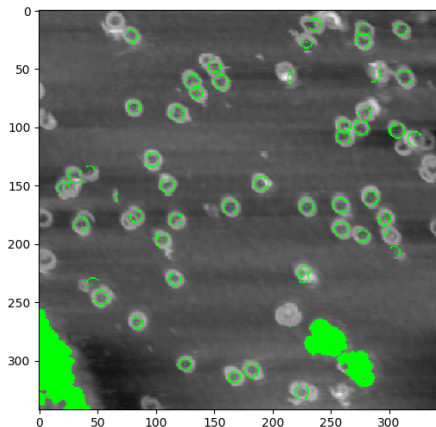
4 pav.: Membranos AFM vaizdas su defektų Voronojaus diagrama

Defektų aptikimas ir parametrizavimas:

- Centro koordinatės
- Žiedo pilnumas ( $1/4$ ,  $1/2$ ,  $3/4$ , pilnas)

Metodai:

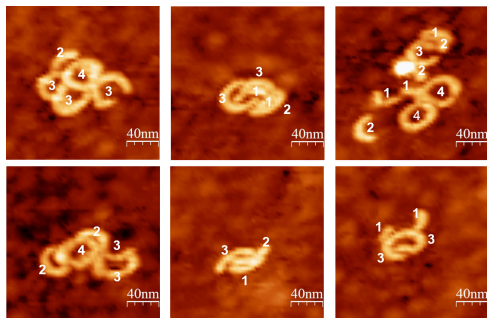
- Hough transformacija
- Slenkantis langas su apmokytu modeliu (logistinė regresija, SVM, neuroninis tinklas...)
- Konvoliuciniai neuroniniai tinklai (CNN)



5 pav.: Defektų aptikimas AFM vaizde (SVM+HoG)

## AFM vaizdų analizė (2)

- AFM vaizduose stebimi sulipusių, persidengiančių defektų klasteriai (6 pav.)
- Reikalingas segmentavimo metodas atskirų defektų išskyrimui.
- Renkama didesnė duomenų aibė modelių apmokymui, defektai anotuojami naudojant **CVAT** įrankį.



6 pav.: Defektų klasteriai



- Pagrindinės publikacijų išvados:
  - EIS spektrų požymiai leidžia kokybine prasme įvertinti membranos defektų pasiskirstymo pobūdį (homogeniškas, atsitiktinis ar klasterizuotas).
  - Voronojaus diagramos sektorių  $\sigma$  reikšmė leidžia atskirti atsitiktinius pasiskirstymus nuo klasterizuotų.
  - LCN modelis gali būti naudojamas kiekybiniam defektų klasterizacijos stiprumo įvertinimui.
- Pagrindiniai doktorantūros studijų reikalavimai yra įvykdyti.
- 4-iems studijų metams numatoma:
  - Publikacija apie defektų aptikimą ir parametrizavimą AFM vaizduose bei defektų morfologinių savybių įtaką EIS charakteristikoms.
  - Disertacijos rengimas.

Ačiū už dėmesį!