Kompiuterio mokymo metodai fizikinių ir biocheminių duomenų analizėje

Doktorantas: Tomas Raila
Darbo vadovas: prof. dr. Tadas Meškauskas

2019-10-30

Studijos

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

Studijų plano vykdymas

- Egzaminas **„Skaitiniai metodai“**.
  - Išlaikytas, įvertinimas: 9.
- Egzaminas **„Lygiagretieji ir paskirstytieji skaičiavimai“**.
  - Numatyta egzamino data 2019 m. spalio 28 d. (įsakymo nr. (4.1) 110000-DS1-818).
- Kiti du egzaminai išlaikyti praėjusiais studijų metais

Publikacijos

- 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.
  - Publikuota 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
  - Konferencijos straipsnis, priimtas publikavimui Springer LNCS

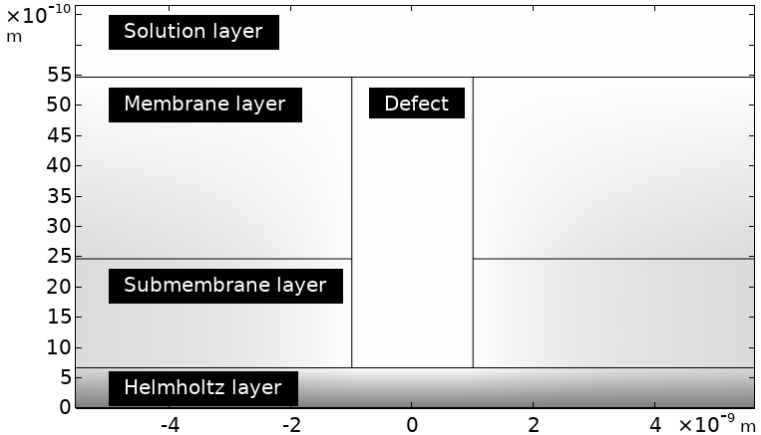
Dalyvavimas konferencijose

- 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.

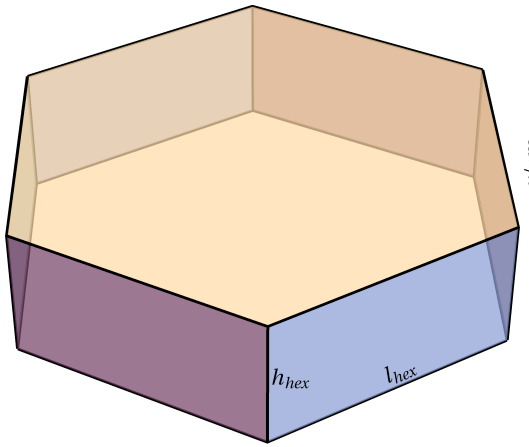
Tyrimo objektas

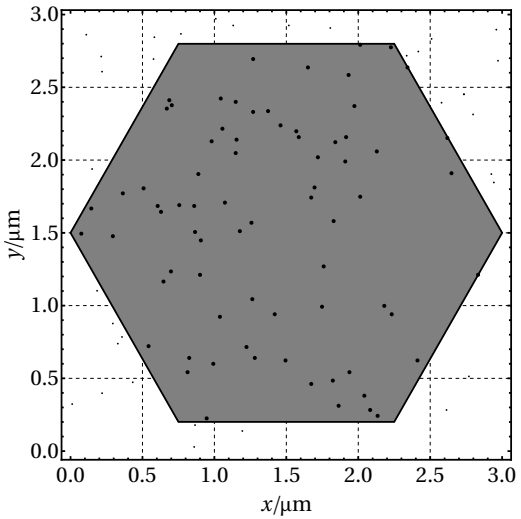
- Nagrinėjamos dvisluoksnių fosfolipidinių membranų (tBLM) su defektais elektrinio laidumo savybės.
- Baigtinių elementų metodu (FEM) modeliuojamos EIS (elektrocheminio impedanso spektroskopija) spektrų savybės ir tiriamas jų ryšys su defektų pasiskirstymu, tankiu bei dydžiu.
- Bendradarbiaujama su VU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

Trimatis membranos modelis



(a) Trimačio membranos modelio skerspjūvis defekto aplinkoje





(b) Modelio geometrija (c) Defektų išsidėstymas

Matematinis modelis

- FEM sprendžiama Laplaso lygtis:

$$\nabla \cdot (\tilde{\sigma}(x, y, z) \nabla \Phi(x, y, z)) = 0 \tag{1}$$
$$\tilde{\sigma}(x, y, z) = \sigma(x, y, z) + j\,\omega\varepsilon(x, y, z), \tag{2}$$

- Kraštinės sąlygos:

$$\Phi(x, y, h_{hex}) = 1 \tag{3}$$
$$\Phi(x, y, 0) = 0 \tag{4}$$
$$n \cdot J = 0 \tag{5}$$

- Srovės tankis:

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

- Admitansas:

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

Modelio realizacija ir skaičiavimai

- Modelis realizuotas 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 parametrą.

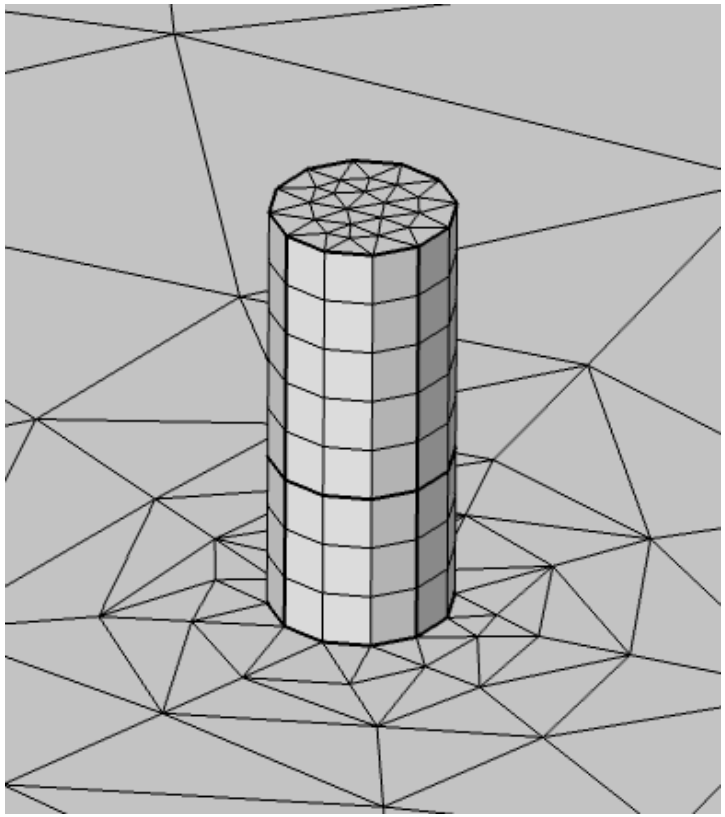


Figure 1: Tinklelio defekto viduje pavyzdys

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)

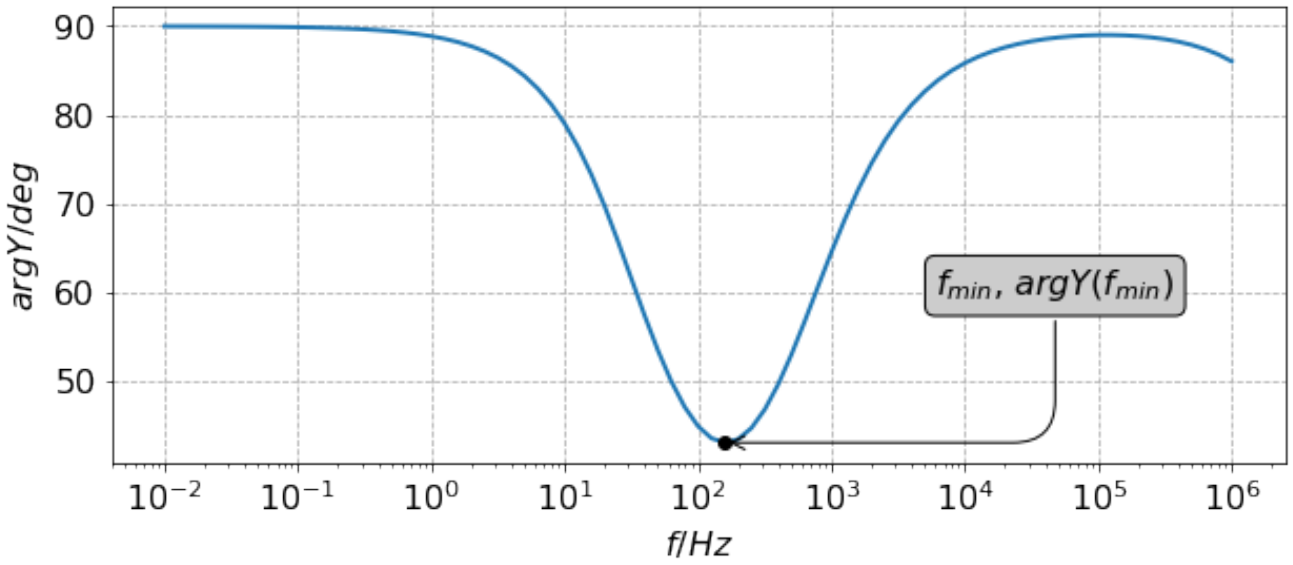
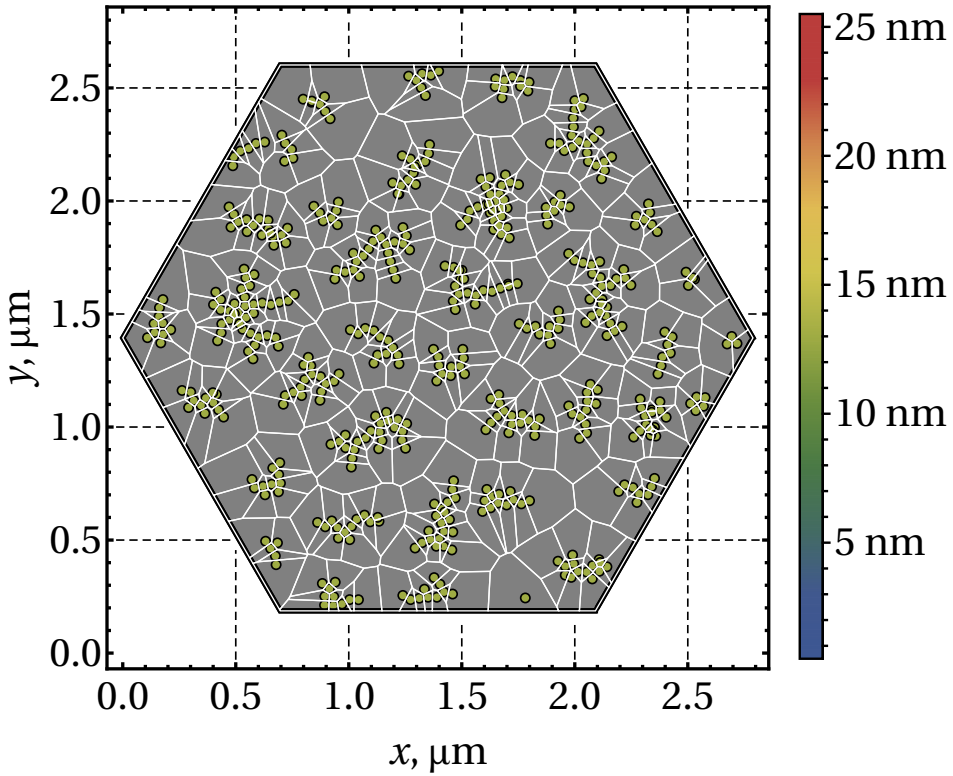


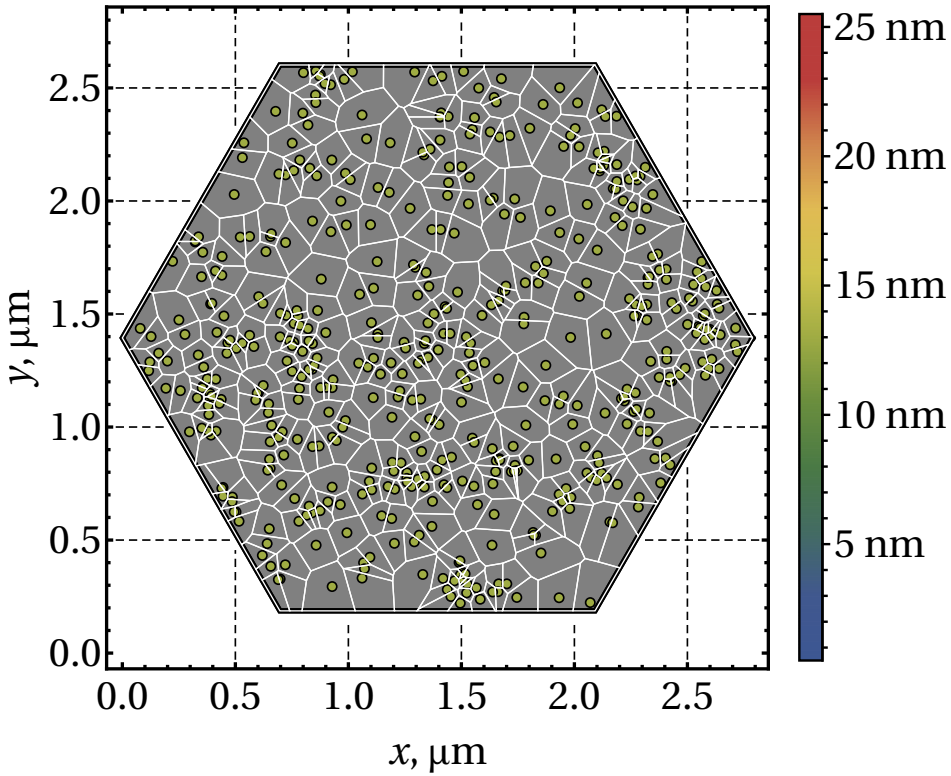
Figure 2: Sumodeliuoto EIS spektro pavyzdys

Defektų klasterizacijos modeliai

- Atsitiktinis išsidėstymas (klasterizacijos nėra)
- Defektų tarpusavio trauka (3a pav.)
- Procedūrinis triukšmo generavimas (*lattice convolution noise*) (3b pav.)



(a) Defektų tarpusavio trauka



(b) Procedūrinis triukšmo generavimas

Klasterizacijos rodiklis σ

σ - Voronojaus diagramos sektorių plotų standartinis nuokrypis

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

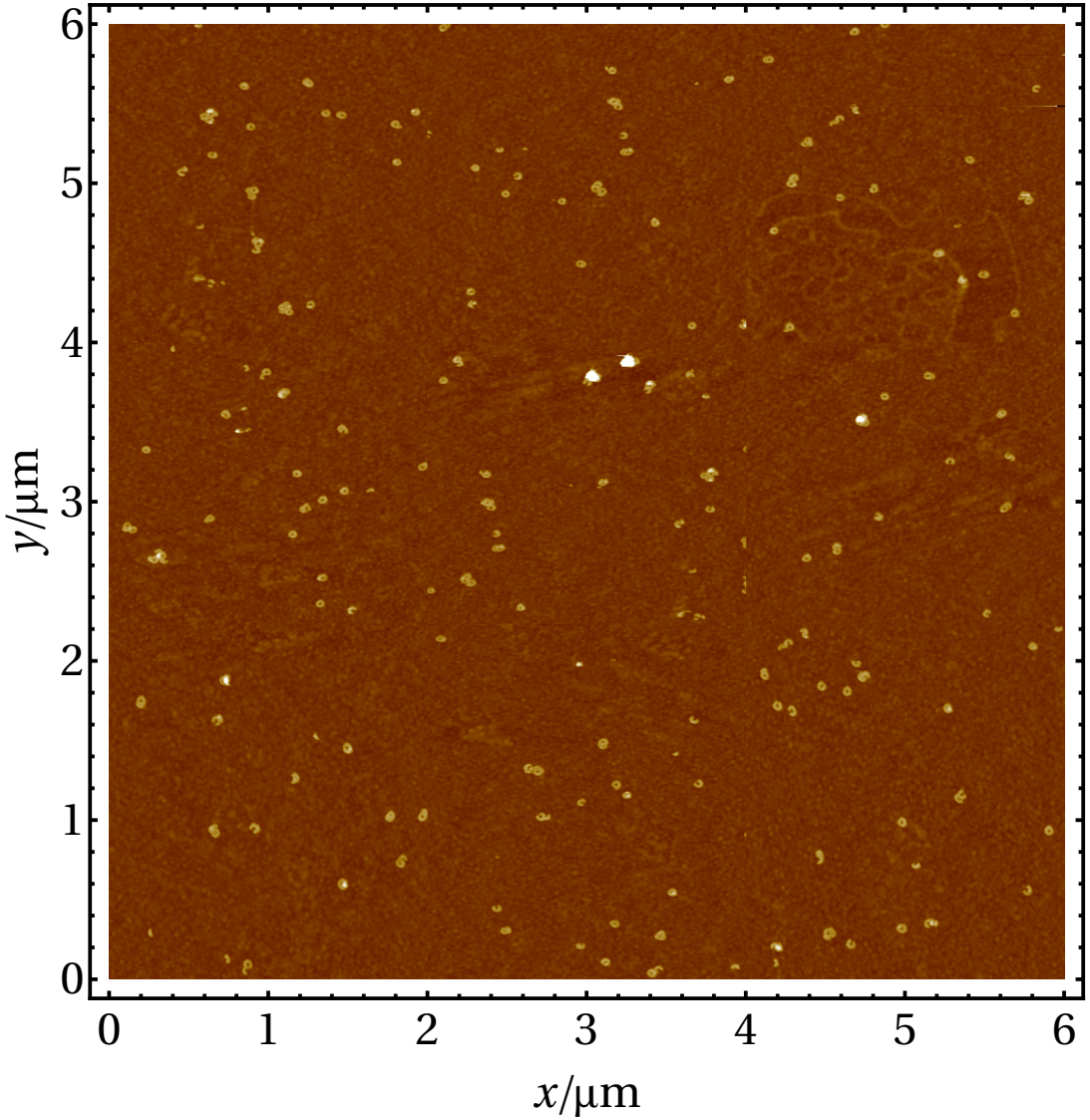


Figure 3: Membranos AFM vaizdas

FEM optimizavimas

Spręstos su FEM modeliavimo procesu susijusios našumo ir stabilumo problemos:

- Parinkti COMSOL parametrai, užtikrinantys reikiamą balansą tarp sprendinio tikslumo (EIS požymių atžvilgiu) bei skaičiavimų trukmės
  - Rezultatai pristatyti NUMTA2019 konferencijoje
- Alternatyvus tinklelio generavimo metodas naudojant **Gmsh** įrankį
- Pradėtas modelio įgyvendinimas naudojant atviro kodo **deal.ii** įrankį, siekiant skaičiavimams panaudoti grafinius procesorius (GPU).

Tolimesnis studijų ir tyrimų planas

- Parengti publikaciją apie defektų klasterizacijos įtaką membranų EIS charakteristikoms.
- Sukurti arba parinkti kompiuterio mokymo tipo metodą automatiniam defektų aptikimui ir parametrizavimui atominės jėgos mikroskopo (AFM) nuotraukose, naudojant eksperto sužymėtus apmokymo pavyzdžius.
- Tobulinti FEM modeliavimo procesą, naudojant skaičiavimų išlygiagretinimą, alternatyvius atviro kodo įrankius bei parenkant modeliavimo proceso parametrus.
- Rezultatus pristatyti tarptautinėje konferencijoje.

Ačiū už dėmesį!