

Kompiuterio mokymo metodai fizikinių ir biocheminių duomenų analizėje

Doktorantas: Tomas Raila

Darbo vadovas: prof. dr. Tadas Meškauskas

2021-03-26

- Studijų laikotarpis: 2017-2021 m.
- Ataskaita už 2020/2021 studijų metų 1-ą pusmetį.

Visų studijų planas ir jo vykdymo suvestinė

Studijų metai	Egzaminai		Dalyvavimas konferencijose		Publikacijos		
	Planas	Įvykdyta	Planas	Įvykdyta	Planas	Įvykdyta	Būklė
I (2017/2018)	2	2					
II (2018/2019)	2	2	1	1	1	1	Publikuota
III (2019/2020)			1	1	1	1	Publikuota
IV (2020/2021)					1		

Ataskaitinio pusmečio darbo planas ir jo vykdymas

Egzaminai		Dalyvavimas konferencijose		Publikacijos	
Planas	Įvykdyta	Planas	Įvykdyta	Planas	Įvykdyta
-	-	-	-	Straipsnis recenzuojamame periodiniame leidinyje, turinčiame citavimo rodiklį Clarivate Analytics Web of Science duomenų bazėje.	

- Raila T., Penkauskas T., Jankunec M., Dreičas 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.
 - 2020 m. publikuotas žurnale *Electrochimica Acta*

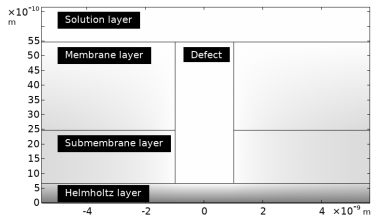
- Raila. T., Meškauskas T., Valinčius G., Jankunec M., Penkauskas T. (2019) Computer modeling of electrochemical impedance spectra for defected phospholipid membranes: finite element analysis
 - 2020 m. publikuotas Springer LNCS 11974
- Raila T., Jankunec M., Meškauskas T., Valinčius G., (2020). Computational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

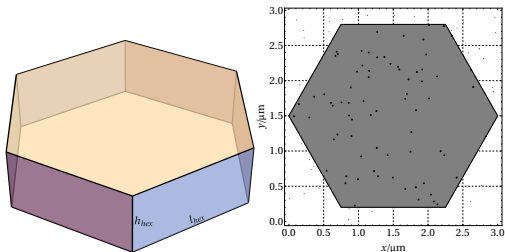
- Nagrinėjamos dvisluoksnių fosfolipidinių membranų (tBLM) su defektais elektrinio laidumo savybės.
- Baigtinių elementų metodu (FEM) modeliuojamos EIS (elektrocheminio impedanso spektroskopija) spektrų savybės ir tiriamas jų ryšys su defektų pasiskirstymu, tankiu bei dydžiu.
- Analizuojami membranų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

- Trys pagrindinės disertacijos dalys:
 - Membranų savybių įvertinimas pagal EIS spektrus
 - Defektų klasterizacijos įtaka EIS charakteristikoms
 - Automatizuotas defektų aptikimas AFM vaizduose
- Atskiros dalys šiuo metu pildomos publikacijų bei atliktų tyrimų rezultatų pagrindu

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:

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

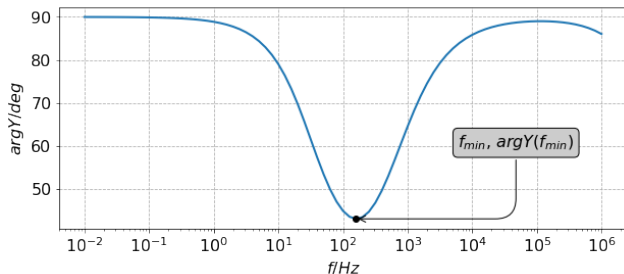
EIS parametrai

- EIS - elektrocheminio impedanso spektroskopija
- Išvestiniai parametrai:

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

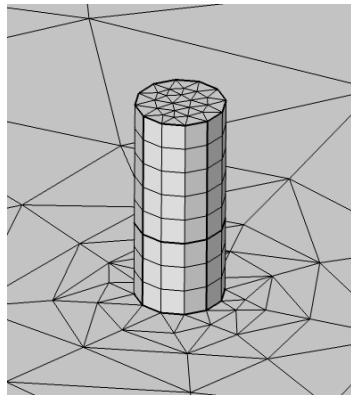
$\arg Y(f_{min})$ – admitanso fazės reikšmė taške f_{min} , (9)

(10)



2 pav.: Sumodeliuoto EIS spektro pavyzdys

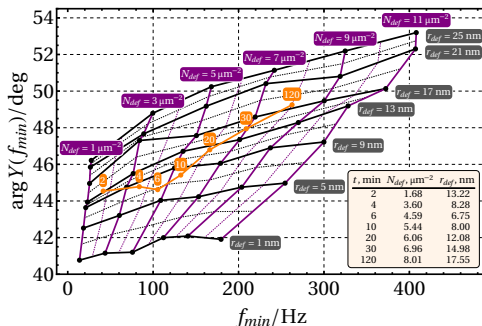
- FEM skaičiavimai atlikti naudojant COMSOL Multiphysics 5.4 paketą.
- Tinklelis, sudarytas iš prizmių arba tetraedrų, sutankinamas defektų viduje ir jų aplinkoje
- Lygčių sistemos sprendžiamos tiesioginiu MUMPS metodu.
- Skaičiavimai lygiagretinami pagal dažnio parametą.
- Ribotos apimties modeliai,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



3 pav.: Tinklelio defekto viduje pavyzdys

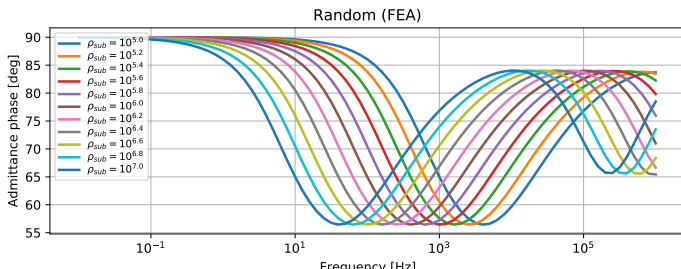
Membranos parametų kokybinis įvertinimas

- 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 spektrus įmanoma įvertinti membranos defektų savybes.



Membranos parametru kiekybinis įvertinimas

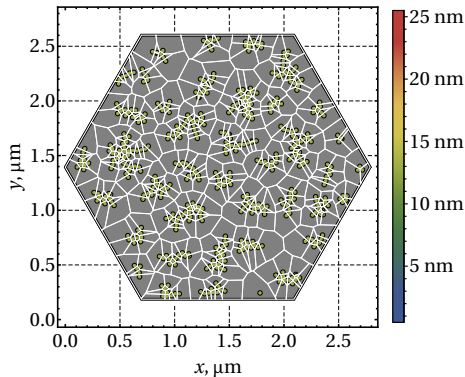
- Kai kurių membranos parametru neįmanoma išmatuoti laboratorijoje (pvz. pomembraninio sluoksnio specifinė varža ρ_{sub} , 4 pav.).
- Tačiau jie gali koreliuoti su kitais, išmatuojamais eksperimentiškai.
- Membranos parametru įvertinimas iš EIS spektrų taikant regresinius modelius (PLS regresija ir kt.).



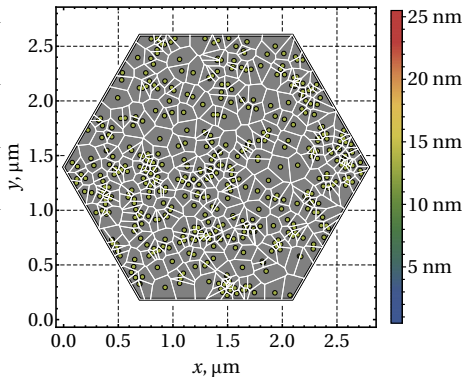
4 pav.: EIS spektrų priklausomybė nuo ρ_{sub}

Defektų klasterizacijos modeliai

- Atsitiktinis išsidėstymas (klasterizacijos nėra)
- Defektų tarpusavio trauka (5a pav.)
- Procedūrinis triukšmo generavimas (*lattice convolution noise - LCN*) (5b pav.)



(a) Defektų tarpusavio trauka



(b) Procedūrinis triukšmo generavimas

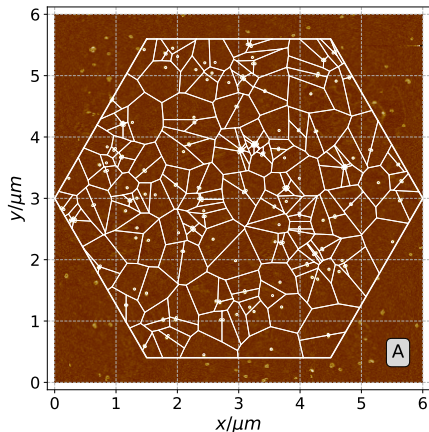
Klasterizacijos rodikliai

σ - Voronojaus diagramos sektorių plotų standartinis nuokrypis

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

Kitos metrikos:

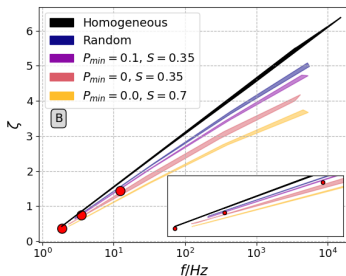
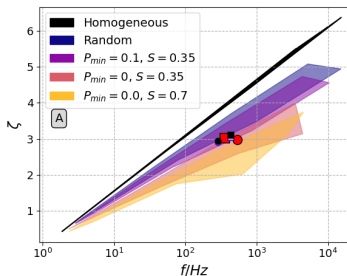
- Asimetrijos koeficientas (skewness)
- Ekscesas (kurtosis)
- Absoliutus medianos nuokrypis (MAD)



6 pav.: Membranos AFM vaizdas su defektų Voronojaus diagrama

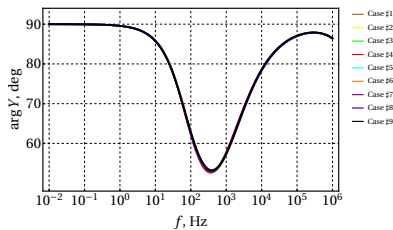
Klasterizācijas kokybinis jvertinimas

- Defektu išsidėstymo pobūdžio identifikavimas: homogeniškas (reguliarus), atsitiktinis ar klasterizuotas.
- Klasterizacijos jvertinimas pagal spektro ruožo aplink minimumą formą, pasiūlyta metrika ζ

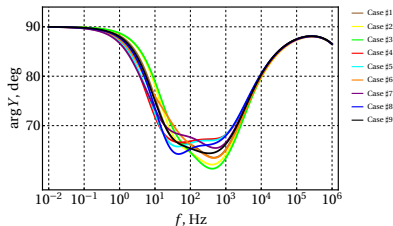


Klasterizacijos kiekybinis įvertinimas

- Pasireiškiant defektų klasterizacijai keičiasi EIS spektrų forma, atsiranda papildomi minimumai.
- Klasterizacijos efekto įvertinimas pagal EIS spektrą:
 - Voronojaus diagramos rodiklis σ
 - LCN ar kito modelio parametrai



(a) Atsitiktinis defektų išsidėstymas



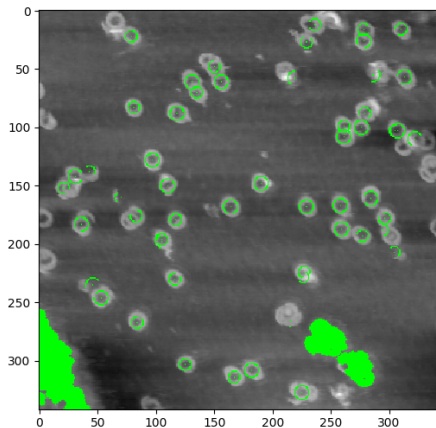
(b) Klasterizuotas defektų išsidėstymas (LCN modelis)

Defektų aptikimas ir parametrizavimas:

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

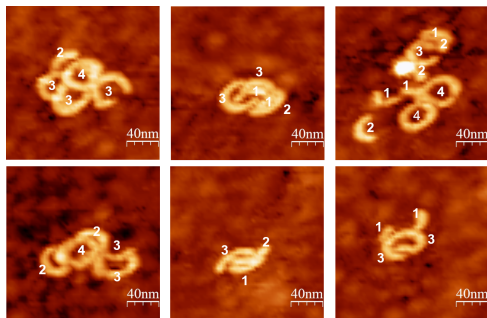
Metodai:

- Hough transformacija
- Šablono atitikimas
- Konvoliuciniai neuroniniai tinklai (CNN)



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

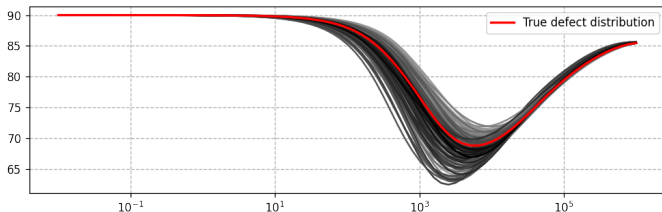
- AFM vaizduose stebimi sulipusių, persidengiančių defektų klasteriai (9 pav.)
- Reikalingas segmentavimo metodas atskirų defektų išskyrimui.
- Renkama didesnė duomenų aibė modelių apmokymui, defektai anotuojami naudojant **CVAT** įrankį.



9 pav.: Defektų klasteriai

EIS spektrai ir defektų aptikimo tikslumas

- Kaip varijuoja modeliuojami EIS spektrai, keičiantis defektų aptikimo tikslumui?
- Naudojami sintetiškai sugeneruoti defektų išsidėstymai, imituojantys skirtingą defektų aptikimo kokybę.
- Defektų aptikimo kokybė: tikslumas ir jautrumas (angl. precision, recall), F1 metrika



- Pagrindinės publikacijų išvados:
 - EIS spektrų požymiai leidžia kokybine prasme įvertinti membranos defektų pasiskirstymo pobūdį (homogeniškas, atsitiktinis ar klasterizuotas).
 - Voronojaus diagramos sektorių σ 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!