

CZU: 351.712.2.025:37.016:504.3.054:004

DOI: 10.46727/c.v2.18-19-03-2023.p87-93

APLICAREA UNOR TEHNOLOGII MODERNE ÎN PREDARE ȘI CERCETARE

APPLYING SOME ADVANCED TECHNOLOGIES IN TEACHING AND RESEARCH

Mihaela Tinca Udriștioiu dr., lector universitar, Universitatea din Craiova, România

Iulian Petrișor dr., conferențiar universitar, Universitatea din Craiova, România

Mihaela Tinca Udriștioiu PhD, lecturer, University of Craiova, Romania

ORCID: 0000-0002-5811-5930

Iulian Petrișor PhD, Associate Professor, University of Craiova, Romania

ORCID: 0000-0003-0875-7879

mtudristioiu@central.ucv.ro

Abstract: Science is the heart of technology and EU projects represent the key to Faculty collaboration in research and teaching. The language of science and engineering is mathematics and for this reason, it is necessary to encourage and help young people and pupils to cross all barriers of abstract language and to develop critical thinking that is so necessary to society's development, in the rhythm of evolving technology. The aim of this paper is to present two results of the Erasmus+ project 2021-1-RO01-KA220-HED-000030286 about some advanced technologies that are used in teaching and research will be presented. Four partners from Romania (University of Craiova), Turkey (Adana Alparslan Türkeş Science and Technology University), Slovakia (Matej Bel University Banská Bystrica), and Bulgaria (University of Plovdiv Paisii Hilendarski) have worked together to write a book about their teaching experience during the pandemic and a scientific paper about how can be used Artificial Intelligence to forecast air pollution episodes or to calculate different correlation coefficients between meteorological parameters (temperature, pressure, relative humidity) and particulate matter concentrations (PM₁, PM_{2.5}, PM₁₀), based on some sets of data given by the network of PM sensors from Craiova. Air quality monitoring in urbanized areas is important because air pollution affects inhabitants' health without discrimination. The mentioned book has emphasized the role and place of SMART technologies to train students in physics and engineering, cloud technologies, integrative approach, and how to involve STEM students in research. Some ideas from this book and project activities are presented.

Key-words: Erasmus+ project, science, pandemic experience, teaching, air pollution monitoring, network of PM sensors, advanced technologies.

Introducere

În cele ce urmează, va fi prezentată experiența acumulată în cadrul proiectului Erasmus+ proiect "Aplicarea unor tehnologii avansate în predare și cercetare, în legătură cu poluarea aerului". Rețeaua Erasmus+ este o rețea bine dezvoltată care sprijină educația și scurtează distanța dintre cercetători, studenți și elevi și deschide calea colaborării pe diverse proiecte.

Ideea proiectului Erasmus+ [1] a pornit de la rezultatele promițătoare a trei proiecte de voluntariat, sponsorizate de o companie multinațională (OMV Petrom), dezvoltate la Universitatea din Craiova (Clear Air Craiova, Clear Air Oltenia și Prevent) [2-4]. În cadrul proiectelor de voluntariat a fost realizată o rețea de senzori de monitorizare a calității aerului care include, pe lângă senzorii de măsurare a poluării aerului, și un senzor de monitorizare a radiației ionizante din mediul ambient. Ultimul senzor a fost adăugat în contextul conflictului armat, aflat la granița României. Echipamentele achiziționate în proiectul Interregio România-Bulgaria (A chance for development) [5] destinate screening-ului oftalmologic au permis studenților de la fizică să facă practică pe echipamente alături de specialiști din domeniu și să dezvolte o campanie de monitorizare a vederii elevilor din medii defavorizate care a produs date legate de vedere. Dincolo de campaniile de conștientizare a populației pe tema conștientizării efectelor poluării aerului asupra sănătății și a importanței prevenției pentru sănătate, campanii care s-au bucurat de un bun impact la nivel local,

rețeaua de senzori a produs o cantitate mare de date, fiecare senzor producând date la fiecare minut. Acest lucru a condus la ideea analizării și interpretării acestor seturi de date în cercetare, în cadrul unui proiect de tip Erasmus+, de colaborare între universități.

Proiectul Erasmus+ a avut trei obiective specifice, unul de adaptare a metodelor de predare de către cadrele didactice prin prisma experienței din pandemie pentru a fi utile în perioada post-pandemică, al doilea a urmărit dezvoltarea competențelor STEM și digitale ale studenților pe baza utilizării datelor furnizate de rețeaua de senzori și al treilea de creștere a gradului de angajare al absolvenților de la Științe și Inginerie cu 10% în primul an după absolvire.

Publicul țintă al acestui proiect a fost reprezentat de studenți și cadre didactice din cele patru universități partenere. Cadrele didactice din grupul țintă (10 persoane) au beneficiat de trei activități de formare. Prima activitate a fost focalizată pe metode de predare-învățare pentru perioada postpandemică. Cadrele didactice au învățat cum pot folosi dispozitive mobile noi, coduri QR, realitate augmentată în procesul de predare-învățare dar și în formarea viitorilor profesori. Al doilea curs a fost despre Machine Learning și Big Data iar al treilea despre Inteligență artificială și statistică. Toate cursurile au inclus și o parte practică, de exersare a modului de utilizare a tehnicilor învățate folosind date furnizate de rețeaua de senzori din România sau de surse verzi de energie (panouri fotovoltaice, Turcia).

Patruzeci de studenți din cele patru universități partenere, au beneficiat, de-a lungul a doi ani consecutivi (câte douăzeci de studenți pe an), de o școală de vară de o săptămână, organizată la Universitatea din Craiova. Studenții au avut un program intensiv în care au realizat senzori de monitorizare a calității aerului folosind un microcontroler, i-au conectat la o rețea internațională. De asemenea, studenții au învățat să colecteze datele din măsurători, să analizeze și să prelucreze aceste date. În cadrul școlii de vară, studenții internaționali au vizitat centrul regional de meteorologie pentru a vedea modelele matematice utilizate la realizarea prognozei vremii, au interacționat cu un antreprenor care deține un start-up în domeniul inovației, au vizitat centrul de cercetare aplicată al Universității din Craiova (INCESA) și alte obiective turistice locale, au participat la concursul Viziunea despre senzori în anul 2050.

Activitatea proiectului a fost organizată în opt pachete de lucru: 1. Pregătirea implementării proiectului, 2. Informare, promovare și diseminare a proiectului la universitățile partenere, 3. Recrutare și selecție a publicului țintă, 4. Activități de formare pentru profesori, 5. Activități de formare pentru studenți, 6. Realizarea rezultatelor proiectului: un articol despre tehnologii avansate în relație cu bazele de date, o carte despre metode noi de predare pentru perioada post-pandemică, un curriculum și un handbook pentru un curs în tehnologii avansate care va fi introdus în planul de învățământ după finalizarea proiectului la cele patru universități partenere, la programul de master și o carte de lucrări de laborator care se pot efectua folosind Arduino, 7. Organizarea evenimentelor de multiplicare 8. Managementul de proiect.

În continuare vor fi prezentate ideile de bază din cartea publicată în cinci limbi (engleză, română, turcă, bulgară și slovacă) și concluziile articolului științific, scris pe baza datelor furnizate de rețea. Ca și concluzii, colaborarea internațională aduce beneficii prin schimbul de bune practici, prin conectarea cercetătorilor din universități diferite, din domenii diverse, ceea ce poate contribui la crearea unei baze de colaborare, pe proiecte de cercetare multidisciplinare. Un alt avantaj al proiectelor europene este că acestea pot sprijini universitățile partenere prin oferirea de training de înaltă specializare specialiștilor, training de care specialiștii au dus lipsă în perioada pandemiei.

Rezultate și discuții

Cartea "Noi metode de predare și învățare pentru perioada post-pandemică" [6] are patru capitole și concluzii. În scrierea cărții, s-a pornit de la premiza că profesorul trebuie să cunoască modalitățile de organizare a procesului de învățare, atât de la distanță într-un mediu online, cât și prin forme mixtă și respectiv hibridă. Pentru oferirea unei educații de calitate studenților de către universități este necesar ca profesorul să fie deschis situațiilor neprevăzute, să se adapteze, să fie pregătit și să învețe permanent ca să fie capabil să integreze eficient tehnologiile moderne cu cele tradiționale în pregătirea studenților.

Primul capitol este despre rolul și locul unor tehnologii inteligente în formarea studenților de la științe și inginerie. Se discută despre inteligența artificială ca tendință în educația STEM, despre modul de utilizare a „realității augmentate” în educație, despre ce înseamnă laboratoarele la distanță, despre învățarea hibridă și mixtă și despre sala de clasă inversată. Cunoașterea tehnologiilor SMART de către formatori și aplicarea lor în procesul de învățare este o condiție pentru modernizarea și îmbunătățirea sistemului educațional. Tehnologiile SMART presupun integrarea tehnologiilor informatice și de telecomunicații, au o serie de avantaje care permit automatizarea, adaptarea proceselor și accesul de la distanță la acestea, sunt asociate în cea mai mare parte cu inteligența artificială, realitatea augmentată și virtuală, IoT, experimentul la distanță, tehnologiile cloud. Sunt utilizate în procesul educațional aplicații ale celor mai recente progrese în realitate virtuală (VR), realitate augmentată (AR) și inteligență artificială (AI). Roboții aplicați sunt utilizați în practică, permițând cursanților să lucreze în echipă sau cu profesorul (chatboți, roboți) [7]. Chatbot-ul este un program care simulează conversația umană prin interacțiuni text sau vocale. Roboții sunt roboți colaborativi, capabili să învețe mai multe sarcini, astfel încât să poată ajuta oamenii.

Tehnologia „AR” [8-9] reprezintă suprapunerea obiectelor 3D generate de computer pe un mediu real și are ca și caracteristici de bază combinarea obiectelor virtuale și reale, interactivitate în timp real și alinierea spațială în timp real (poziționarea și orientarea) a obiectelor virtuale în raport cu mediul real. Tehnologia AR poate fi aplicată diferitelor simțuri, nu numai vederii [10] și poate asista sau înlocui simțurile lipsă, în cazul persoanelor cu deficiențe de vedere sau de auz.

Principalele direcții principale de utilizare a tehnologiei AR în educație [11] sunt cărțile de realitate augmentată, jocurile, aplicațiile bazate pe învățarea prin descoperire, modelarea obiectelor 3D, aplicații de învățare care vizează dobândirea anumitor competențe.

Nu în ultimul rând, s-a discutat despre AI care oferă posibilitatea utilizării unei resurse imense de cunoștințe, oferind o modalitate individualizată și personalizată a învățării și care sprijină proiectarea și implementarea curriculei. Tehnicile de AI intervin în domenii precum - deep learning, data mining, rezolvarea unor probleme complexe. Pe baza unor instrucțiuni inteligente și a feedback-ului, sistemele inteligente de învățare (ITS) reprezintă un instrument educațional integrat care permite personalizarea educației formale. Inteligența artificială este utilizată pe scară largă în domeniul educației și demonstrează avantaje semnificative în aplicare, cu un impact important în procesul de învățare și în managementul clasei [7]. Deși AI aduce schimbări importante în educație, nu va înlocui complet educația tradițională. Momentan AI adăugă educației tradiționale de învățare o serie de elemente precum teoria jocului, tehnologiile VR și AR.

Laboratorul la distanță [12] reprezintă un experiment condus și controlat de la distanță, prin intermediul Internetului, care utilizează componente sau instrumente reale, într-o locație diferită de cea în care acestea sunt controlate. Utilizarea experimentelor la distanță permite educarea studenților folosind strategii compatibile cu starea actuală a societății precum metoda e-LTR (e-learning, e-

teaching and e-research) [13]. Caracteristicile acestei metode sunt: observațiile, căutarea informațiilor adecvate, prelucrarea și stocarea acestora, organizarea și planificarea muncii, prezentarea datelor și a rezultatelor etc. Există multe laboratoare electronice reale la distanță pe Internet care oferă utilizatorului experimente cu obiecte reale, vizualizarea experimentului într-un mediu interactiv în care controlează experimentul și obține date [14].

Capitolul al doilea prezintă tehnologiile cloud care s-au impus în educație în perioada pandemică și lecțiile învățate utile pentru perioada post-pandemică. Au fost evidențiate avantajele și dezavantajele utilizării Moodle ca sistem de management al învățării în activitățile de predare, Google Classroom și Google Meet, Zoom, Microsoft Teams și DIPSEIL. Fiecare universitatea parteneră a prezentat experiența proprie de utilizarea a acestor platforme în cadrul activităților de predare și de cercetare, dar și din punct de vedere al organizării unor conferințe și concursuri, întâlniri cu angajatorii, a comunicării individuale între studenți și profesori.

Printre beneficiile tehnologiilor cloud se numără îmbunătățirea administrației în instituțiile de învățământ și a procesului de educație. Tehnologiile cloud asigură o ușoară colaborare între unități administrative diferite și economisesc bani și timp în procesul de rezolvare a problemelor. Prin intermediul acestora, un anumit serviciu este oferit rapid sau chiar imediat, în diferite momente ale zilei și respectiv din diferite locuri.

Cu ajutorul tehnologiilor cloud, cadrele didactice pot activa și gestiona învățarea studenților, ajung la mai mulți studenți, inclusiv la cei care datorită unor deficiențe locomotorii sau altor probleme de sănătate nu pot ajunge la școală. De asemenea, aceste tehnologii facilitează cadrelor didactice realizarea unui conținut de învățare interactivă, îi sprijină în demersul pregătirii unor teste online și facilitează comunicarea cu studenții. Notarea testelor, a rezultatelor proiectelor, temelor studenților și oferirea de feedback a devenit mai ușoară ca niciodată.

Capitolul al treilea abordează problematica abordării integrative în predarea și învățarea studenților de la specialitățile STEM din universități, insistându-se pe rolul acestei abordări în procesul de predare-învățare și pe tendințe integrative în educația studenților STEM.

O modalitate de implementare a integrării este formarea interdisciplinară care se dezvoltă ca o aplicare simultană a cunoștințelor, principiilor și/sau valorilor mai multor discipline academice. Utilizarea abordării integrative este legată de aplicarea metodei orientate pe probleme, bazată pe dovezi inductive sau deductive și care necesită prelucrarea informațiilor învățate pentru a obține informații noi și a rezolva problema. Predarea integrative permite studenților efectuarea unor lucrări experimentale, să lucreze în afara universității, să colecteze și să analizeze datele, să explice și să facă predicții. Mai mult, tendințele integratoare presupun implementarea învățării prin cooperare (în comun) și se bazează pe munca în echipă, atât de apreciată de angajatori.

În capitolul al patrulea al lucrării se discută despre implicarea studenților în cercetare, o abordare care este permanent actualizată și utilizată din ce în ce mai mult pentru formarea viitorilor ingineri și cercetători. În învățarea prin investigație, cunoașterea este adusă în prim-plan. Sarcinile de învățare, evaluările, resursele, mediile și strategii de învățare sprijină învățarea prin investigație și descoperire.

Cartea se încheie cu concluzii și note bibliografice apelate de-a lungul lucrării. Restabilirea procesului educațional la nivelurile sale de funcționare pre-pandemice nu mai reprezintă o soluție la provocările existente, ci redirecționarea către noi forme de organizare, aplicarea de abordări noi, legate de tehnologii noi care definesc imaginea educația modernă post-pandemie.

Relativ la cel de-al doilea rezultat al proiectului, articolul științific [15], acesta este focusat pe datele furnizate de rețeaua de senzori. Primul pas în analiza datelor este colecția de date din surse statice sau dinamice. Procesarea datelor din surse dinamice, de la rețele de senzori, este posibilă datorită Internet of Things. Sistemele care colectează Big Data în ambele situații menționate anterior (surse statice și dinamice) vizează trei caracteristici importante ale datelor: volumul, varietatea și viteza de colectare a datelor [16]. După colectarea datelor urmează alți doi pași importanți, procesarea și analiza datelor. În principal, trebuie observate proprietățile datelor care ar putea fi descrise cu ajutorul unor modele matematice.

Există mai multe tipuri de analiza datelor, dar în ceea ce privește datele de la senzorii de poluarea aerului de la Universitatea din Craiova au fost utilizate *analiza exploratorie* și *analiza predictivă a datelor*.

Analiza exploratorie urmărește vizualizarea datelor și constă în [17]:

- pregătirea statistică sintetică a setului de date, valorile medii, mediane, maxime, minime pentru fiecare proprietate măsurată
- analiza corelațiilor în care sunt determinați coeficienții de corelație din setul de date
- vizualizarea datelor care permite evidențierea tendințelor.

Analiza predictivă a datelor utilizează machine learning și modelul rețelei neurale pentru a crea un model matematic capabil să descrie datele. Acest model stă la baza valorilor previzionate sau a categoriilor de date. Printre cele mai utilizate metode de predicție a datelor sunt [18] regresia liniară și polinomială, mașina vectorului suport, arborii de decizie, modele de rețele neurale.

Prin aplicarea analizei exploratorii au fost obținute valorile coeficienților de corelație Pearson, care au avut valori de peste 0.99 pentru concentrațiile de PM1, PM2.5 and PM10, în acord cu literatura de specialitate. Acest rezultat este util pentru senzorii care nu pot determina toate cele trei concentrații, ci numai una sau două. Coeficienți de corelație Pearson, cu valori de peste 0.476, au fost obținuți între concentrațiile de PM1, PM 2.5 și PM10 și presiune, respectiv 0.479 între presiune și umiditate. Prin urmare corelațiile dintre parametrii meteorologici și concentrațiile de poluanți în atmosferă sunt slabe. Coeficienții de corelație Spearman au valori apropiate de cei de tip Pearson, ușor mai ridicate între concentrațiile de PM1, PM 2.5, PM10 și presiune (0.49, 0.48, 0.47), și de 0.45 între presiune și umiditatea relativă și puțin mai joase decât în cazul corelațiilor Pearson 0.98-0.99 pentru PM1, PM 2.5 și PM10. Ultima etapă a metodei, cea de vizualizare, a permis evidențierea temporală a episoadelor de poluare sau a intervalelor de timp cât senzorul ar fi putut să nu funcționeze corect.

Prin aplicarea metodei de analiză predictivă a datelor a fost evaluată calitatea modelelor propuse, utilizându-se formula erorii standard reziduale (RSE)

$$RSE = \sqrt{\frac{\sum (y-\hat{y})^2}{df}}, \quad (1)$$

unde y reprezintă valoarea reală, \hat{y} este valoarea previzionată și df este numărul de observații (numărul total de parametri).

Utilizând modelul regresiei polinomiale aplicat setului de date despre poluarea aerului, RSE a luat valori între 3.223 și 66.06, ceea ce reprezintă un interval destul de larg de valori. Deoarece a fost căutat un RSE minim (pentru cea mai precisă estimare a valorilor), se folosește cea mai mică dintre două valori RSE pentru fiecare dintre concentrațiile de PM. Pe scurt, aceasta înseamnă că, la utilizarea unui model de regresie polinomială pentru estimarea valorilor PM 1, trebuie utilizat atributul PM 2,5

(RSE = 3,223), iar estimarea PM 2,5 și PM 10 ar trebui să se bazeze pe PM 1 (RSE = 5,926 și respectiv 64,51). Modelul utilizat este unul bun, care poate fi îmbunătățit prin utilizarea unui set mai mare de date.

Ambele tipuri de analiză a datelor, EDA și PDA, au o proprietate importantă în comun - dacă nu există o corelație sau există o corelație slabă între valorile setului de date, atunci nu există modalități de a construi un model matematic, care să poată descrie datele cu acuratețe. În cazul nostru, au fost găsite corelații mari între concentrațiile de PM și slabe între concentrațiile de PM și presiune, respective între presiune și umiditate relativă. În perioada următoare, dorim să folosim mai multe date (datele măsurate de senzori măsurate într-un an) și să creăm un model de regresie bazat pe clasificarea datelor cu utilizarea arborilor de decizie ca tehnică de optimizare.

Concluzii: Educația STEM are puterea de a trece dincolo de orice limbaj pentru că înseamnă perpetuarea progresului. Tehnologia informației și a comunicațiilor reprezintă necesitate care îmbunătățește semnificativ calitatea vieții comunității, eficientizează serviciile publice, contribuie la creșterea competitivității, este o componentă obligatorie în dezvoltarea orașelor SMART, curate, verzi și sustenabile. Poluarea aerului este important pentru afectează toți cetățenii, dar anumite categorii sunt mai afectate decât altele (bătrânii, copiii, bolnavii cronici cu boli respiratorii și cardiovasculare, femeile însărcinate). Studiile legate de poluare sunt importante pentru factorii de decizie care pot activa sisteme de avertizare pentru categoriile vulnerabile și pentru a reduce poluarea. Nu în ultimul rând, nu trebuie uitat faptul că poluarea este un factor de accelerare a schimbărilor climatice. Variațiile mari de temperatură conduc la creșterea mortalității datorită bolilor cardiovasculare [19-20].

Mulțumiri

Proiectul Advtech_AirPollution project (Applying some advanced technologies in teaching and research, in relation to air pollution, 2021-1-RO01-KA220-HED-000030286) a fost finanțat de Uniunea Europeană, în cadrul programului Erasmus+, autorii exprimându-și recunoștința pentru sprijinul primit.

Bibliografie:

1. <http://advtech-airpollution.ucv.ro/index.php/ro/> (accesat 16.02.2023)
2. <https://www.clearaircraiova.ro> (accesat 16.02.2023)
3. <https://www.clearairoltenia.ro> (accesat 16.02.2023)
4. <https://www.prevent-ucv.ro/> (accesat 16.02.2023)
5. <http://robgcareers.ucv.ro/index.php/ro/> (accesat 16.02.2023)
6. Z. RAYKOVA et al, Noi metode de predare și învățare pentru perioada post-pandemică, *Adana Printing House*, ISBN 978-625-399-053-4 (EN version), "in print" (2023)
7. CHASSIGNOL, M., KHOROSHAVIN, A., KLIMOVA, A., & BILYATDINOVA, A., Artificial Intelligence trends in education: a narrative overview. *Procedia Computer Science*, 136, 16–24. doi: [10.1016/j.procs.2018.08.233](https://doi.org/10.1016/j.procs.2018.08.233) (2018)
8. AZUMA, R. T. A survey of augmented reality. *Presence-Teleoperators and Virtual Environments*, 6(4), 355–385, (1997).
9. AZUMA, R., BAILLOT, Y., BEHRINGER, R., FEINER, S., JULIER, S., MACINTYRE, B. (2001). Recent Advances in Augmented Reality. *IEEE*, November/December.
10. CARMIGNIANI J., FURHT B. Augmented Reality: An Overview. In Furht B. (Eds.), *Handbook of Augmented Reality*, Springer, (2011)
11. YUEN, S.; YAOYUNYONG, G.; & JOHNSON, E. Augmented reality: An overview and five directions for AR in education. *Journal of Educational Technology Development and Exchange*, 4(1), 119-140, (2011)
12. CHEN, L., CHEN, P., LIN, ZH., Artificial Intelligence in Education: A Review, *IEEE Access*, [Online] [Accesat 2022-09-10] (2020)

13. THOMSEN, C., JESCHKE, S., PFEIFFER, O. AND SEILER, R., E-volution: eLTR – technologies and their impact on traditional universities *Proc Conf.: EDUCA online*, ISWE GmbH, Berlin, (2005)
14. SCHAUER, F. et al., Easy to build remote laboratory with data transfer using ISES – *Internet School Experimental System*. Online at: stacks.iop.org/EJP/29/1, (2018)
15. M.T. UDRISTIOIU et al, Using advanced technologies to process data given by a network of sensors, presented to TIM22 Physics Conference, sent for peer-review to *AIP Conference Proceedings* (2023)
16. R. ČEREŠŇÁK, K. MATIAŠKO, A. DUDÁŠ, Influencing Migration Processes by Real-Time Data, Proc. of the 28th Conf. on Open Innovations Association (FRUCT) ISSN 2305-7254 (2021)
17. S. S. SKIENA, *The Data Science Design Manual*, Springer, (2017) ISBN: 978-3- 319-55443-3
18. M. KVET, R. ČEREŠŇÁK, V. ŠALGOVÁ, Use of Machine Learning for the Unknown Values in Database Transformation Processes, 11th International Scientific Conference on Communication and Information Technologies, KIT (2021) doi: 10.1109/KIT52904.2021.9583753
19. R. LAUMBACH, Q. MENG, H. KIPEN, What can individuals do to reduce personal health risks from air pollution? *J. Thorac Dis.* 7(1): 96–107 (2015) doi: 10.3978/j.issn.2072-1439.2014.12.21
20. L. VELEA, M.T. UDRISTIOIU, R. BOJARIU, S.C. SARARU, L. PRUNARIU. The Influence of Climate Conditions on the Mortality Related to Cardiovascular Diseases in Dolj County (Southern Romania), *AIP Conf. Proc.* 1796, 040003, (2017) doi: 10.1063/1.4972381