



**Vilniaus  
universitetas**

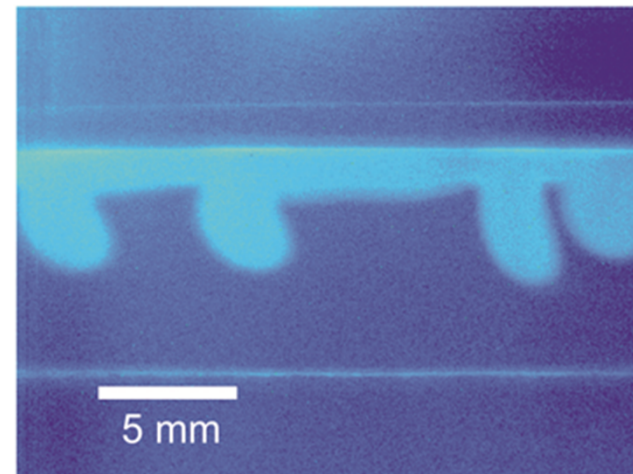
# Aktyvių ir pasyvių dalelių struktūrų formavimosi modeliavimas ir analizė

Boleslovas Dapkūnas  
2019–2024 m.  
2022–2023 m. ataskaita

Vadovas: prof. dr. Romas Baronas  
Konsultantas: dr. Remigijus Šimkus

# Tyrimo objektas

- Bakterijų populiacijos struktūrų formavimasis
- Galime „gerai“ modeliuoti paviršių
- Kai kurie empirinių eksperimentų metu matomi procesai nematomi modelių rezultatuose
- Tiriama, kokią įtaką modeliavimui turi skirtingos reakcijos nario moduliavimo funkcijos
- Tiriama, kaip galima modeliuoti reakcijos-difuzijos-chemotaksio lygtimis su skysčių dinamika



# Tyrimo tikslas

Sudaryti dvimatį aktyvių ir pasyvių dalelių (bakterijų populiacijos) struktūros formavimosi kompiuterinį modelį, tinkamai aprašantį *E. coli* struktūrų formavimąsi, sudaryti aktyvių ir pasyvių dalelių (bakterijų populiacijos) struktūrų vaizdų analizės modelį ir, pasinaudojant abiem modeliais, ištirti bakterijų populiacijos struktūros dinamikos dėsningumus.

# Planuojami rezultatai

- Sudarytas dvimatis aktyvių ir pasyvių dalelių struktūros formavimosi kompiuterinis modelis, tinkamai aprašantis bakterijų kolonijų fizinių eksperimentų rezultatus.
- Sudarytas aktyvių ir pasyvių dalelių (bakterijų kolonijų) vaizdų analizės modelis.
- Aprašyti bakterijų populiacijos struktūros dinamikos dėsningumai pasinaudojant sudarytais modeliais.

# Visų studijų planas

Studijų metai	Egzaminai		Dalyvavimas konferencijose			
			Tarptautinėse		Nacionalinėse	
	Planas	Įvykdyta	Planas	Įvykdyta	Planas	Įvykdyta
I (2019/2020)	2	2				
II (2020/2022)	2	2		1	1	
<b>III (2022/2023)</b>			<b>1</b>	<b>1</b>		<b>1</b>
IV (2023/2024)			1			
Iš viso:	<b>4</b>	<b>4</b>	<b>2</b>	<b>2</b>	<b>1</b>	<b>1</b>

Studijų metai	Publikacijos					
	Su citavimo rodikliu			Be citavimo rodiklio		
	Planas	Įvykdyta	Būklė	Planas	Įvykdyta	Būklė
I (2019/2020)						
II (2020/2022)					1	Priimta
<b>III (2022/2023)</b>			Įteikta: 2023-08-18			
IV (2023/2024)	2					
Iš viso:	<b>2</b>	<b>0</b>		<b>0</b>	<b>1</b>	

# Ataskaitinio pusmečio darbo planas

Dalyvavimas konferencijose		
Planas	Įvykdyta	Konferencijos tipas
	Boleslovas Dapkūnas. Influence of Bacterial Growth Rate on Pattern Formation in Aqueous Suspensions. NUMTA 2023. 2023-06-19. Kalabrija, Italija	Tarptautinė

Publikacijos			
Planas	Įvykdyta	Būklė	Publikacijos tipas
	Boleslovas Dapkūnas, Romas Baronas, Remigijus Šimkus. Modelling Bacterial Growth and Oxygen Consumption in Aqueous Suspensions of <i>Escherichia coli</i> . Journal of Mathematical Biology.	Įteikta: 2023-08-18	Su cituojamumo rodikliu

# 2022/2023 rezultatai

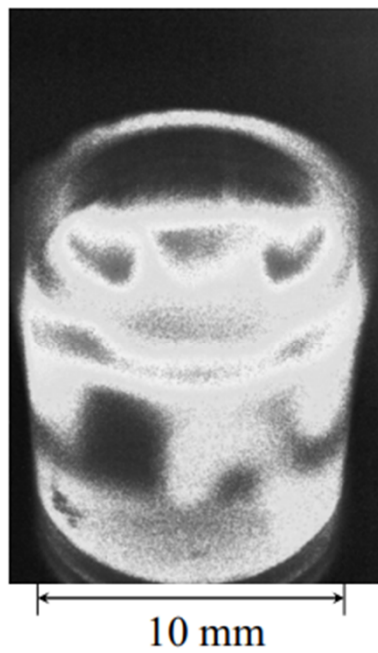
- Praplėsta mokslinių tyrimų disertacijos tema apžvalga ir analizė:
  - Praplėsta matematinių modelių apžvalga,
- Praplėstas tyrimas, kaip skirtingos reakcijos nario moduliacijos funkcijos įtakoja modeliavimo rezultatus. Rezultatai pristatyti NUMTA 2023 konferencijoje 2023-06-19.
- Pristatytas tyrimas praplėstas ir paruošta publikacija, kuri įteikta *Journal of Mathematical Biology* žurnalui 2023-08-18.

# Kitų metų darbo planas

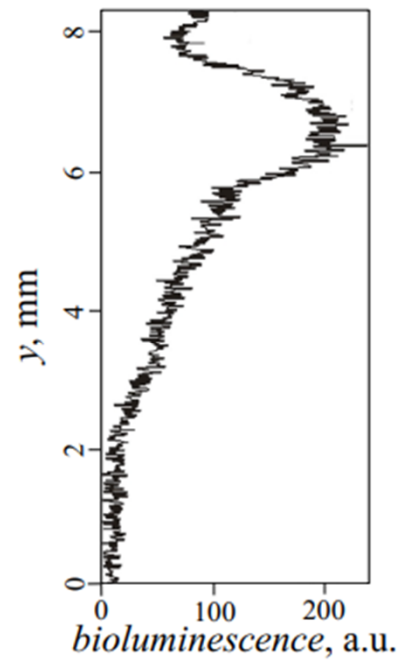
- Tęsiamas tyrimas, kaip pasikeičia modeliavimo rezultatai įvedus priklausomybę nuo gravitacijos modelį, praplečiant Navier–Stokes skysčių dinamikos lygtimis.
- Sudaromas vaizdų analizės modelis, leidžiantis verifikuoti matematinio modeliavimo rezultatus.



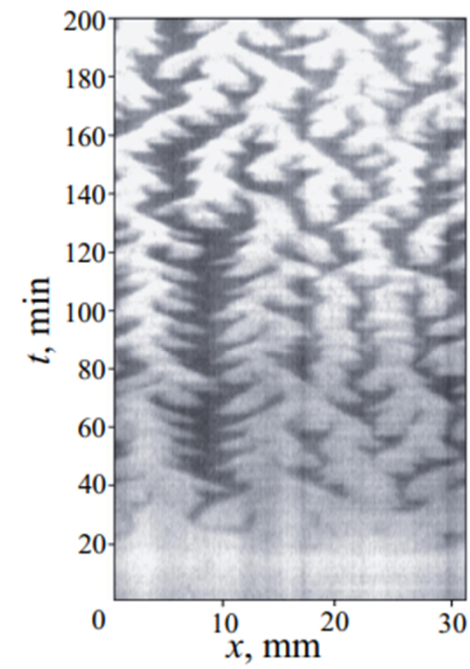
# Chemotaksis



(a)



(b)



(c)

# Reakcijos nario moduliacija

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D_n \Delta n - \chi \nabla \left( \frac{n}{(1 + \sigma c)^2} \nabla c \right) + \alpha n f_n(n, o),$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_c \Delta c + n f_c(n, o) - c,$$

$$\frac{\partial o}{\partial t} = D_o \Delta o - \lambda n f_o(n, o)$$

A. Nuo deguonies priklausanti pernešimo geba:

$$f_n(n, o) = 1 - \frac{n}{\mu o}, \quad f_b(n, o) = \frac{o^p}{1 + \beta n}, \quad f_o(n, o) = o^p.$$

B. Prisisotinantis ląstelių augimas:

$$f_n(n, o) = \delta \frac{o^p}{1 + \gamma o^p} - n, \quad f_c(n, o) = \frac{o n^{p-1}}{1 + \beta n^p}, \quad f_o(n, o) = \frac{o^p}{1 + \gamma o^p}.$$

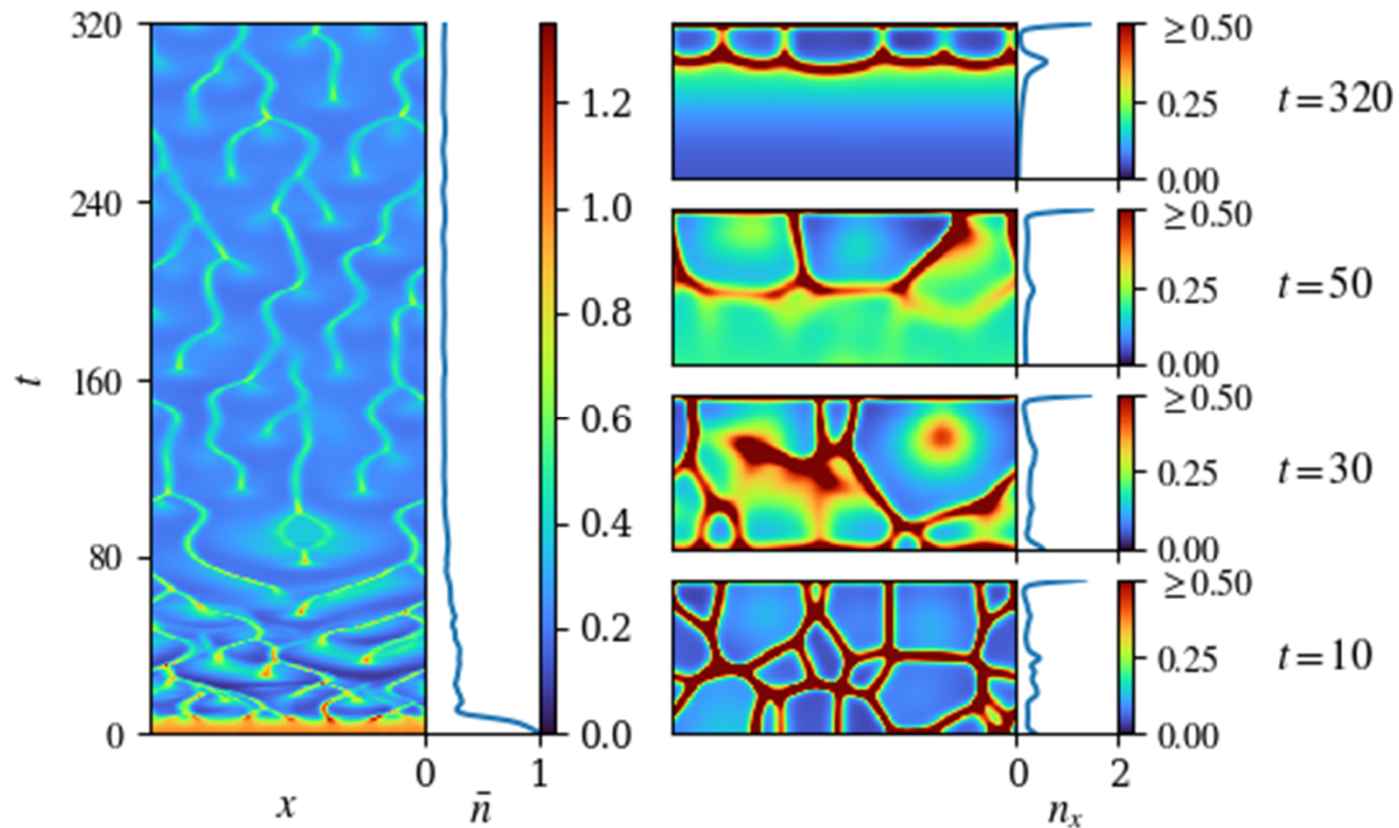
C. Ribinės vertės metodas:

$$f_n(n, o) = 1 - \frac{n}{o}, \quad f_c(n, o) = \frac{1}{1 + \beta n} \theta^-(o - o_{min}) \theta^+(o_{max} - o), \quad f_o(n, o) = \theta^-(o).$$

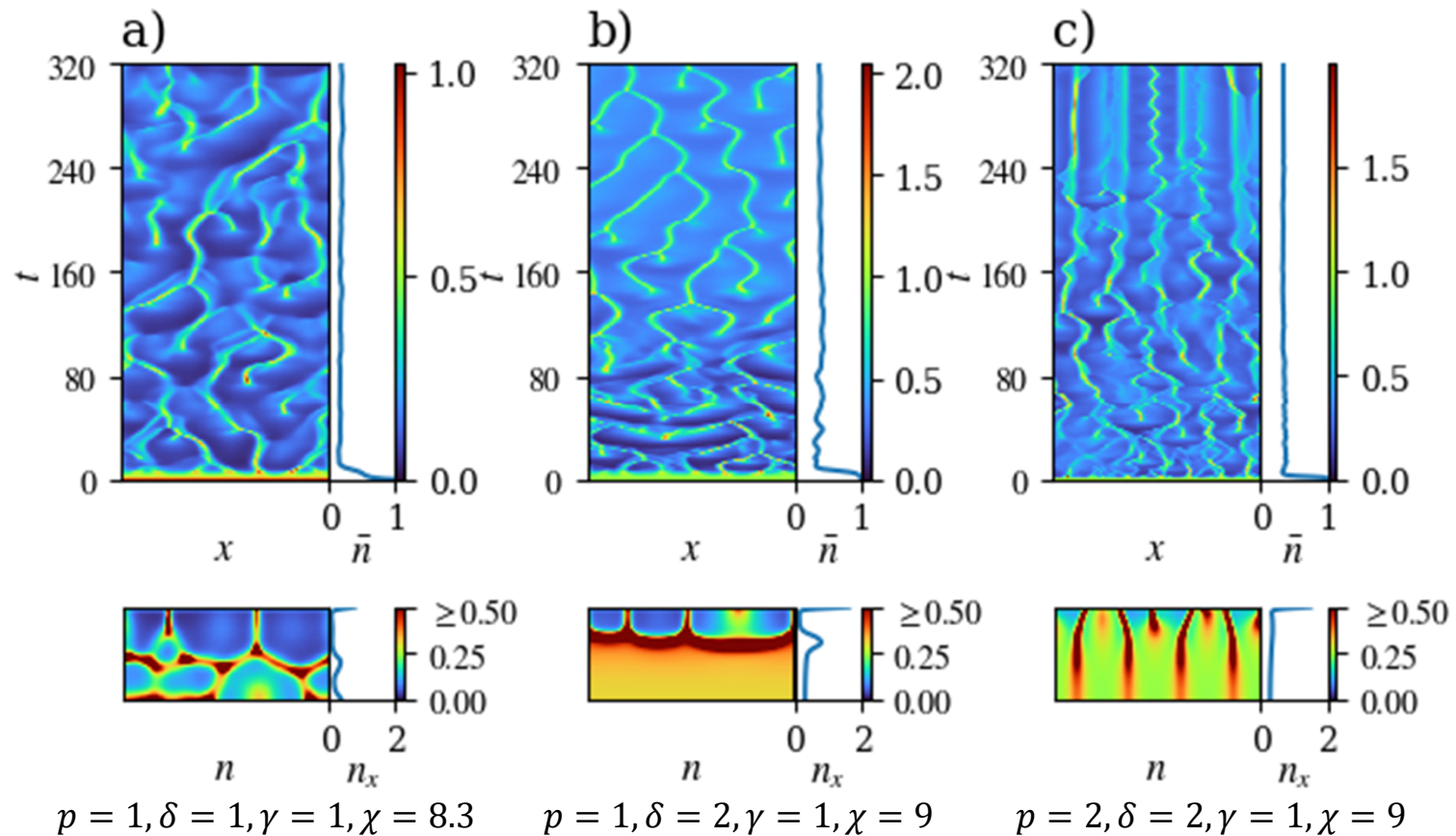
D. Nuo deguonies priklausantis Allee efektas

$$f_n(n, o) = \left(1 - \frac{n}{\mu o}\right) \left(\frac{n - \eta o}{\mu o}\right), \quad f_c(n, o) = \frac{o^p}{1 + \beta n}, \quad f_o(n, o) = o^p,$$

# Reakcijos nario moduliacija



# Reakcijos nario moduliacija (B)



# Įrankis rezultatų palyginimui

Modeliavimo rezultatai

klevas.mif.vu.lt/~mif28413/bakt/

Modeliavimo rezultatai

a) 2023-05-14 B p=1.0 B, p=1, δ=2.0, γ=1.0 X  
 b) 2023-05-29 C α\_max C, χ=8.3, σ\_min=0.0, σ\_max=0.975 X  
 c) 2023-05-23 D μ=1.0 E, χ=9.0, η=-0.3, μ=1.0 X

➤ Pustelio pakitimai

Modelis

Modelis apibrėžtas srityje  $\Omega = (0, l) \times (0, h)$ ,  $l = 4.6\pi$ ,  $h = 0.45l$

Modelį aprašo šios lygtys:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D_n \Delta n - \chi v \left( \frac{n}{1+\sigma n} \right) c + \sigma n f_n(n, o)$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_c \Delta c + n f_c(n, o) - c$$

$$\frac{\partial o}{\partial t} = D_o \Delta o - \lambda n f_o(n, o)$$

kur  $\Delta$  yra laplasianas,  $x$  ir  $y$  yra koordinatės bedimensinėje erdvėje,  $t$  yra bedimensinis laikas,  $n$  yra bakterijų koncentracija,  $c$  yra chemoatraktanto koncentracija,  $o$  yra deguonies koncentracija,  $D_n$  ir  $D_o$  yra konstantiniai difuzijos koeficientai,  $\alpha$  yra bakterijų populiacijos augimo greitis,  $\chi$  ir  $\sigma$  yra chemotaktinis jautrumas,  $\lambda$  yra deguonies vartojimo greitis,  $f_n(n, o)$  ir  $f_o(n, o)$  yra greičio moduliacijos funkcijos.

A. Oxygen-Dependent Carrying Capacity

$$f_n(n, o) = 1 - \frac{n}{\beta o}$$

$$f_c(n, o) = \frac{\sigma n}{1 + \beta n}$$

$$f_o(n, o) = o^p$$

B. Saturating Cell Growth

$$f_n(n, o) = \delta \frac{\sigma n}{1 + \beta n} - n$$

$$f_c(n, o) = \frac{\alpha n^{p-1}}{1 + \beta n^p}$$

$$f_o(n, o) = \frac{\sigma n}{1 + \beta n^p}$$

Modeliavimo rezultatai

klevas.mif.vu.lt/~mif28413/bakt/

Lako-erdvės granitė viršutinė dalis dvimatis erdvės, t.y.:

$$n_0(x, t) = \frac{1}{h_0} \int_{h-h_0}^h n(x, y, t) dy, \quad h_0 = 0.5h$$

a) b) c)

a)  $B, p = 1.0, \delta = 2.0, \gamma = 1.0$

b)  $C, \chi = 8.3, \sigma_{\min} = 0.0, \sigma_{\max} = 0.975$

c)  $E, \chi = 9.0, \eta = -0.3, \mu = 1.0$

a)  $B, p = 1.0, \delta = 2.0, \gamma = 1.0$

b)  $C, \chi = 8.3, \sigma_{\min} = 0.0, \sigma_{\max} = 0.975$

c)  $E, \chi = 9.0, \eta = -0.3, \mu = 1.0$



**Vilnius  
universitetas**

---

# Klausimai?