

Doktoranto ataskaita už trečius doktorantūros metus

Skaitinis ir simbolinis reakcijos ir difuzijos procesų bioreaktoriuose
modeliavimas

doktorantas: Linas Petkevičius

vadovas: prof. dr. Romas Baronas

VU MIF II PS katedra

2018 m. spalio 24 d.



Formalioji pusė

- Doktorantūros egzaminai
- Ataskaitinių metų veikla
- Straipsniai ir konferencijos
- Kiti pasiekimai

Mikroreaktorių modeliavimas

- Matematinis modelis
- Atviros sistemos efektyvumo tyrimas

Ketvirtų metų planas

Egzaminai išlaikyti praėjusiais ataskaitiniais metais.

Dalykas	Kreditai	Laik. data	Komisija	Įvert.
Lygiagretieji ir paskirstyti skaičiavimai	9	2017m. rugsėjo 28d.	prof. dr. J. Žilinskas prof. habil. dr. G. Dzemyda dr. Viktor Medvedev	9
Matematinės fizikos lygtys	7	2016m. vasaris	prof. habil. dr. F. Ivanauskas doc. dr. A. Ambrazevičius prof. dr. R. Baronas	9
Skaitiniai metodai	9	2016m. birželis	prof. habil. dr. F. Ivanauskas doc. dr. P. Katauskis prof. dr. R. Baronas	8
Globaliojo optimizavimo metodai	7	2016m. rugsėjis	prof. habil. dr. A. Žilinskas prof. habil. dr. G. Dzemyda prof. dr. J. Žilinskas	8

Darbo planas

2.1 Mokslinio tyrimo vykdymas:

2.1.1 Metodikos aprašymas.

2.1.2 Metodikos taikymas.

2.2 Teorinis tyrimas:

2.2.1 Enantiomerinio ir/ar biserinio biojutiklio matematinių bei skaitinių modelių sudarymas.

2.2.2 Praktinių biojutiklių sprendinio konstravimas neuroniniais tinklais ir simboliais skaičiavimais.

2.2.3 Biojutiklio matematinio modelio sprendinių lyginamoji analizė.

2.3 2.3. Empirinis tyrimas:

2.3.1 Biojutiklio kompiuterinio modelio realizacija.

2.3.2 Sudarytų skaitinių ir simbolių algoritmų taikymas praktinių biojutiklių savybėms tirti.

- Parašyti du straipsniai doktorantūros tema žurnaluose indeksuotuose Web of Science duomenų bazėje
- Parašytas straipsnis recenzuojamame periodiniame žurnale
- Sudalyvauta trijose doktorantų mokylose/dirbtuvėse
- Paruoštas rankraštis iš simbolinių skaičiavimų lyginamosios analizės

Publikacijos žurnaluose indeksuotuose Web of Science duomenų bazėje

[1] Baronas R., Kulys J., Petkevičius L. (2018) Modelling the enzyme catalysed substrate conversion in a microbioreactor acting in continuous flow mode, *Nonlinear Analysis: Modelling and Control*, 23(3), 437-456. doi: 10.15388/NA.2018.3.9.

[2] Baronas R., Kulys J., Petkevičius L. (2018) Computational modeling of batch stirred tank reactor based on spherical catalyst particles, *Journal of Mathematical Chemistry*. doi: 10.1007/s10910-018-0954-x.

Publikacijos recenzuojamuose, periodiniuose leidiniuose

[3] Petkevičius L., Baronas R. (2018) Modeling and Simulation of Enzyme-Catalysed Substrate Conversion in a Microbioreactor, *International Journal On Advances in Systems and Measurements*.

Publikacijos recenzuojamų konferencijų darbuose

[4] Petkevičius L., Baronas, R. (2017) Numerical Simulation and Analysis of Enzyme-Catalysed Substrate Conversion in a Microbioreactor. *In SIMUL 2017: The Ninth International Conference on Advances in System Simulation* (pp. 1-6)

Publikacijos žurnaluose indeksuotuose Web of Science duomenų bazėje

[5] Petrulis, A., Petkevičius, L., Vitta, P., Vaicekaskas, R., & Žukauskas, A. (2018). Exploring Preferred Correlated Color Temperature in Outdoor Environments Using a Smart Solid-State Light Engine. *LEUKOS*, 14(2), 95-106. doi: 10.1080/15502724.2017.1377085.

[6] Neverauskiene, A., Maciusovic, M., Burkanas, M., Gričienė, B., Petkevicius, L., Zaleckas, L., Tamosiunas A. & Venius, J. (2018). Image based simulation of the low dose computed tomography images suggests 13 mAs 120 kV suitability for non-syndromic craniosynostosis diagnosis without iterative reconstruction algorithms. *European Journal of Radiology*. doi: 10.1016/j.ejrad.2018.06.005.

Mokslinės konferencijos už ataskaitinius metus:

- Tarptautinė konferencija: Conference on Advances in System Simulation, *Numerical Simulation and Analysis of Enzyme-Catalysed Substrate Conversion in a Microbioreactor*, 2017m. Spalis 8-12d., Atėnai, Graikija.
- Doktorantų žiemos mokykla: 3rd NESUS Winter School and PhD Symposium, *Numerical study of enzyme immobilized microbioreactor systems*, 2018m. Sausio 22-25d., Zagrebas, Kroatija.

Gautas COST programos finansavimas dalyvauti doktorantų mobilumo programose:

- Doktorantų žiemos mokykloje: "NESUS Winter School", Sausio 22-25d., Zagrebas, Kroatija. (COST Action IC1305)
- Doktorantų mokykloje: "Multi-scale and Multi-level Modelling Methodologies in Biomedicine", Vasario 21-23d., Erlangenas, Vokietija. (COST Action CA15120)
- Industrinėse dirbtuvėse: "Workshop on Mathematical Solutions in Business and Industry ", Birželio 11-15d., Palanga. (COST Action TD1409)

VU MIF vedami laboratoriniai darbai Informatika I/II, vadovauta kursiniams darbams, bakalauro ir magistrų baigiamiesiems darbams. Nuo pavasario semestru paruoštas pasirenkamasis dalykas "Giliojo mokymosi metodai".

Mikroreaktorių modeliavimas

Uždara sistema: maišomas nepildomas rezervuaras

Nagrinėjamas koncentracijos kitimas erdvėje ir laike $S(r, t), P(r, t)$. Substrato ir produkto koncentracijos pasiskirstymą mikrobioreaktoriuje modeliuojame netiesine antrosios eilės reakcijos-difuzijos lygtimi sferinėse koordinatėse:

$$\begin{aligned}\frac{\partial S_m}{\partial t} &= D_{S,m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial S_m}{\partial r} \right) - \frac{V_{\max} S_m}{K_M + S_m}, \\ \frac{\partial P_m}{\partial t} &= D_{P,m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial P_m}{\partial r} \right) + \frac{V_{\max} S_m}{K_M + S_m},\end{aligned}$$

čia $D_{S,m}$ ir $D_{P,m}$ - difuzijos koeficientai, V_{\max} maksimalus fermentinės reakcijos greitis, K_M - Michaelio konstanta. Sritis $0 < r < R_0$.

Modelio efektyvumo charakteristikos:

Reaktoriaus efektyvumas:

$$\eta_o(t) = \frac{3}{V(s_b(t)) R_0^3} \int_0^{R_0} V(s_m(r, t)) r^2 dr.$$

Laikas kol "sunaudojama" pusė substrato:

$$t_{0.5} = \{t : S_b(t) = 0.5S_0\}$$

Difuzijos modulis, nusako vidines reaktoriaus savybes:

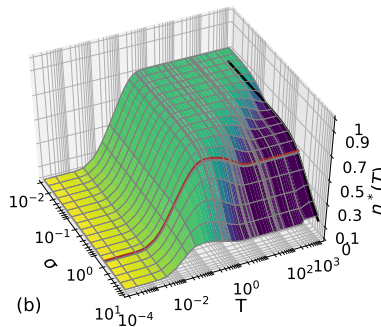
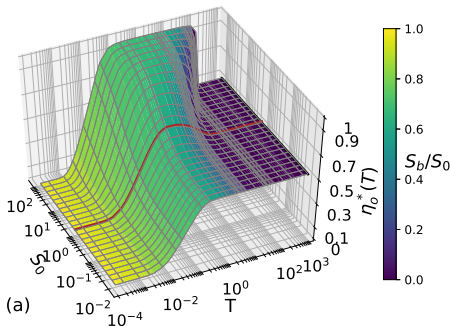
$$\sigma^2 = \frac{V_{\max} R_0^2}{K_M D_{S,m}}$$

Biot skaičius, nusako išorines reaktoriaus savybes:

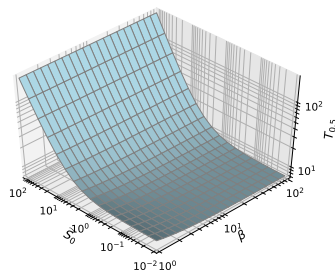
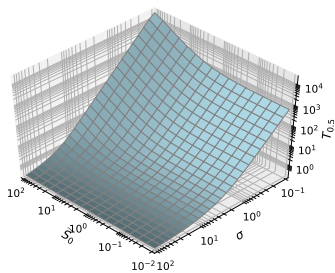
$$\beta = \frac{D_{S,d} R_0}{D_{S,m} (R_1 - R_0)}$$

Sistemos efektyvumo kitimas laike (2)

Nemonotoninis efektyvumo kitimas laike:



Procesų trukmės tyrimas:



- Sukurtas kompiuterinis modelis mikroreaktorių kitimo laike ir erdvėje modeliavimui
- Atlikta sistemos parametų įtakos analizė atviros ir uždaros sistemos atvejais
- Rastos sprendinių aproksimacijos, simboliniais metodais, ribiniais atvejais

- Sudėtingų procesų mikrobioreaktoriuje modelio sudarymas ir validavimas su eksperimentiniams duomenimis.
- Parengti algoritmus automatiniam simbolinių sprendinių skaičiavimui
- Parengti efektyvias schemas skaitiniams skaičiavimams
- Rezultatus pristatyti tarptautinėje konferencijoje
- Parengti disertacijos pradinį variantą

Klausimai?