



**Vilniaus  
universitetas**

# Aktyvių ir pasyvių dalelių struktūrų formavimosi modeliavimas ir analizė

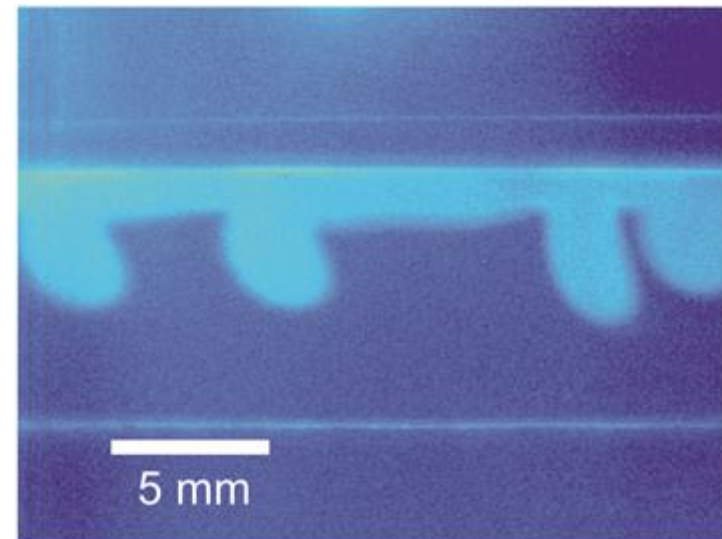


Boleslovas Dapkūnas  
2019–2024 m.

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

# Tyrimo objektas

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



# Tyrimo tikslas

Sudaryti dvimatį erdvėje bakterijų populiacijos struktūros formavimosi kompiuterinį modelį, tinkamai aprašantį *E. coli* struktūrų formavimąsi ir, pasinaudojant sukurtu modeliu, ištirti bakterijų populiacijos struktūros dinamikos dėsningumus.

# 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	
III (2022/2023)			1	1		1
IV (2023/2024)			1	1		
Iš viso:	4	4	2	3	1	1

Studijų metai	Publikacijos					
	Su citavimo rodikliu			Be citavimo rodiklio		
	Planas	Įvykdyta	Būklė	Planas	Įvykdyta	Būklė
I (2019/2020)						
II (2020/2022)					1	Publikuota
III (2022/2023)						
IV (2023/2024)	2		Įteikta: 2024-05-14 Įteikta: 2024-03-15, pataisyta versija įteikta 2024-07-04			
Iš viso:	2	0		0	1	

# Ataskaitinio pusmečio darbo planas

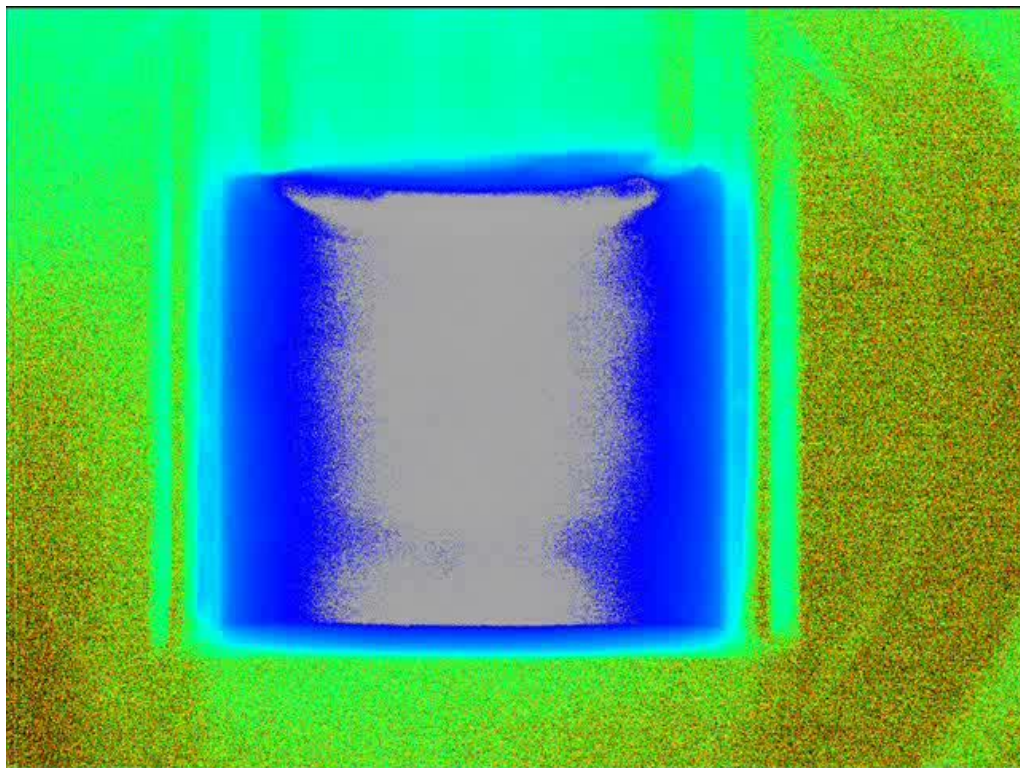
Dalyvavimas konferencijose		
Planas	Įvykdyta	Konferencijos tipas
	Boleslovas Dapkūnas. Modelling of Bacterial Plume Formation in a Circular Container. MMA2024. 2024-05-30. Pernu, Estija.	Tarptautinė

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> . Acta Biotheoretica.	Įteikta: 2024-05-14	Su cituojamumo rodikliu
	Romas Baronas, Boleslovas Dapkūnas, Remigijus Šimkus. Linking Self-Organization of Bacterial and Human Populations in Mathematical Models of Chemotaxis. Heliyon.	Įteikta: 2024-03-15, pataisyta versija įteikta 2024-07-04	Su cituojamumo rodikliu

# 2023/2024 II pusmečio rezultatai

- Pataisyta publikacija, kurioje aprašomas tyrimas kaip skirtingos reakcijos nario moduliacijos funkcijos įtakoja modeliavimo rezultatus, kuri įteikta *Acta Biotheoretica* žurnalui 2024-05-14.
- Po recenzentų pastabų pataisyta publikacija, kurioje aprašomas tyrimas kaip bakterijų populiacijų modeliai siejasi su žmonių populiacijų socialiniais modeliais (kapitalo–darbo modelis ir nusikaltimų modelis). Pataisyta versija įteikta *Heliyon* žurnalui 2024-07-04.
- Tęsimas tyrimas, kaip pasikeičia modeliavimo rezultatai įvedus priklausomybę nuo gravitacijos modelį, praplečiant Navier–Stokes skysčių dinamikos lygtimis. Ruošiama publikacija.
- Parengtas daktaro disertacijos rankraštis

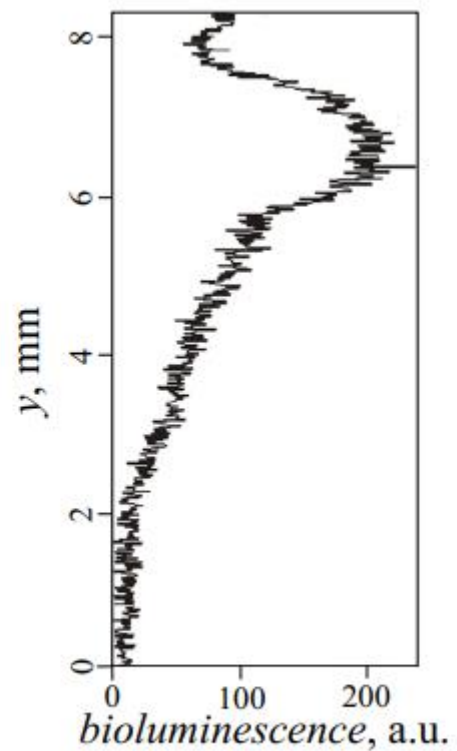
# Chemotaksis (1/2)



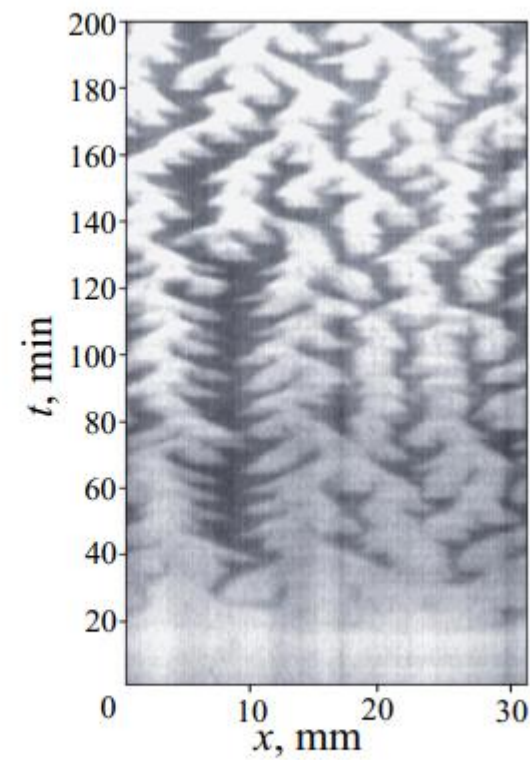
# Chemotaksis (2/2)



(a)



(b)



(c)



# Gravitacijos įtakos modelis

$$\frac{\partial n}{\partial t} + u \cdot \nabla n = D_n \Delta n - \chi \nabla(n \nabla c) + \alpha n \left(1 - \frac{n}{o}\right)$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \cdot \nabla c = \Delta c + \frac{n}{1 + \beta n} \theta(o_{max} - o) - c$$

$$\frac{\partial o}{\partial t} + u \cdot \nabla o = D_o \Delta o - \lambda n$$

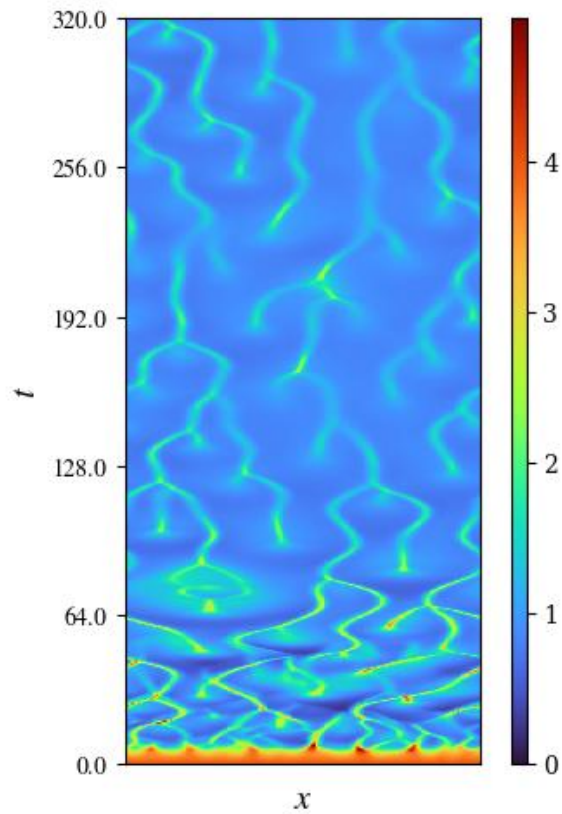
$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + u \cdot \nabla \omega = \nu \Delta \omega - \kappa \nu \frac{\partial n}{\partial x}$$

$$\Delta \Psi = -\omega$$

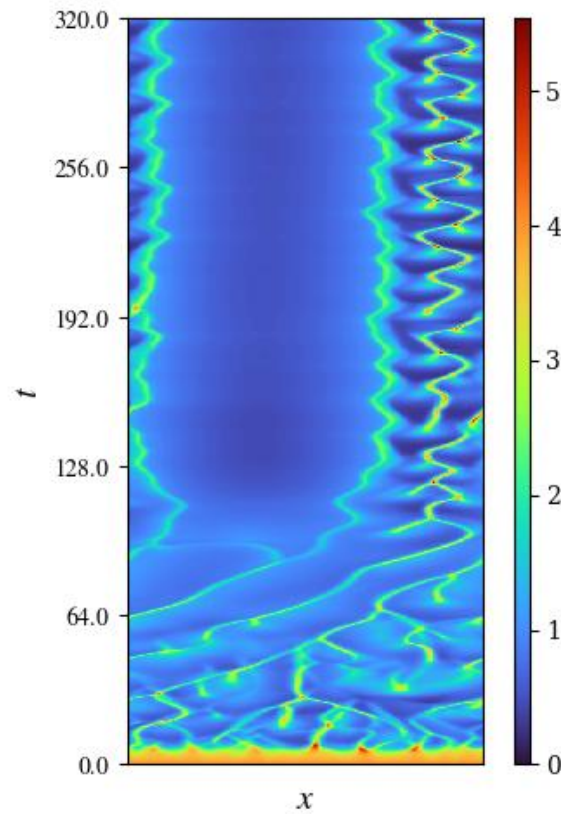
# Kompiuterinė simuliacija

- Netiesinis pradinių ir kraštinių sąlygų uždavinys sprendžiamas neišreikštiniu-išreikštiniu baigtinių skirtumų metodu
- Naudojama tolygi  $112 \times 250$  gardelė erdvės dimensijose
- Laiko dimensijoje naudojamas konstantinis bedimensis laiko žingsnis
- Difuzijos narys sprendžiamas naudojant ADI metodą
- Kiti nariai sprendžiami naudojant išreikštinį metodą
- Puasono lygtis sprendžiama naudojant SOR

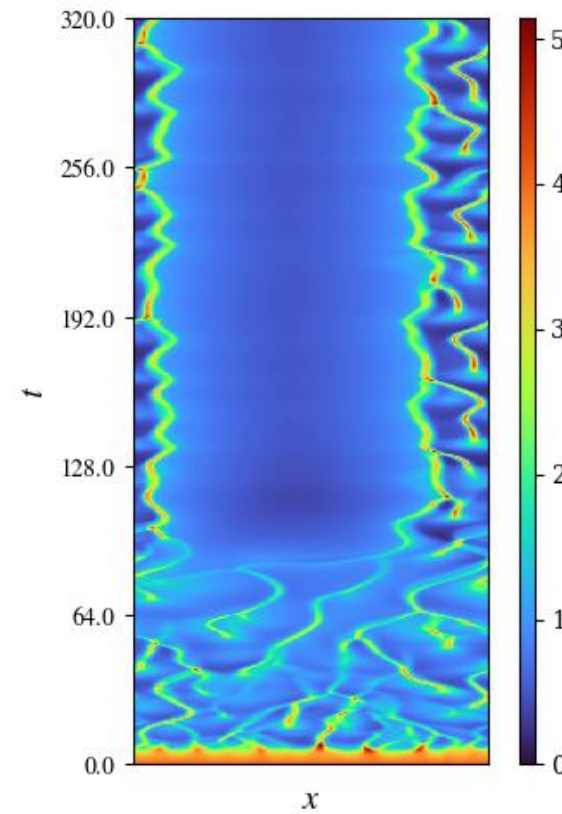
# Gravitacijos įtaka (1)



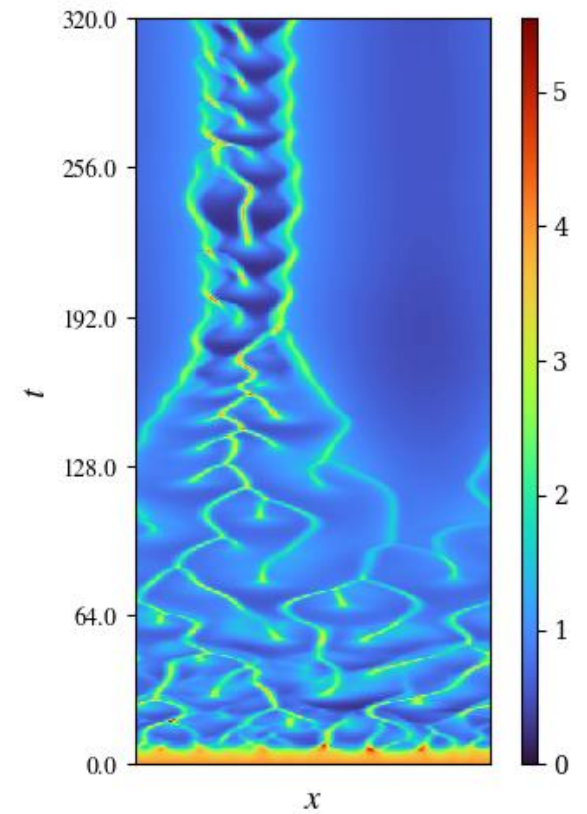
$$\nu = 48, \kappa = 1$$



$$\nu = 48, \kappa = 1,5$$



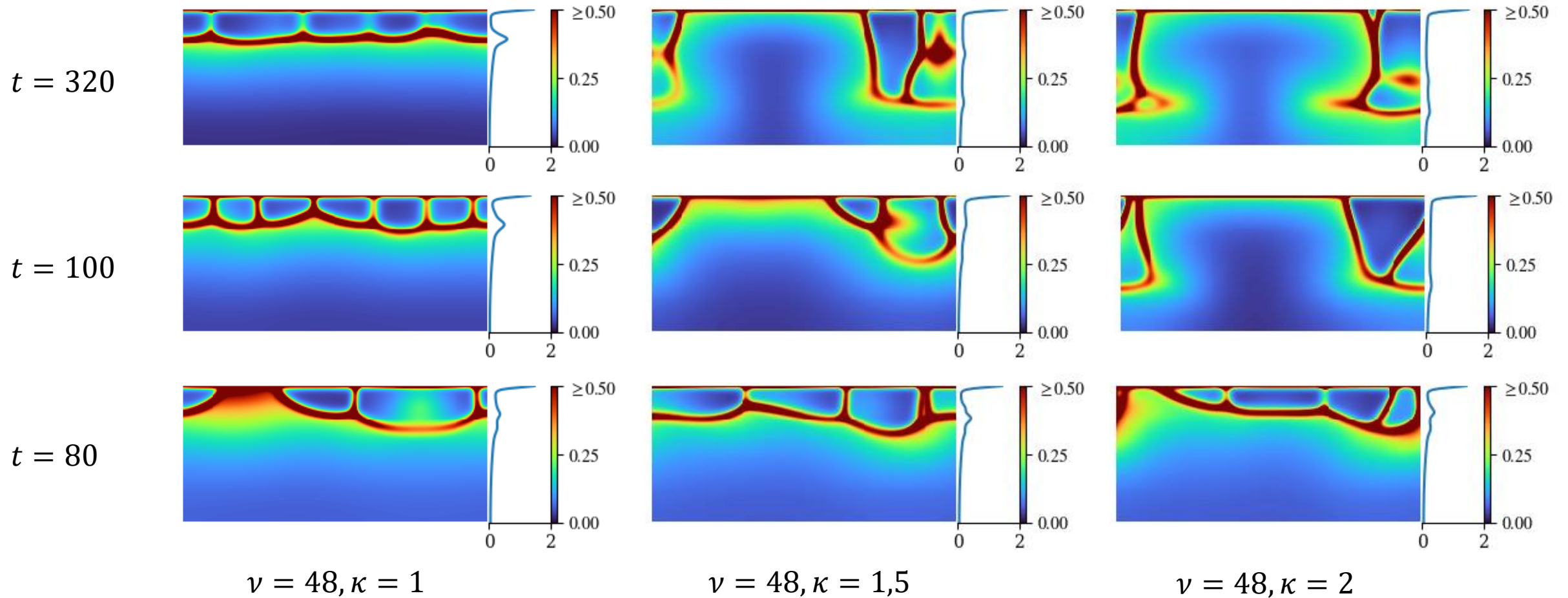
$$\nu = 48, \kappa = 2$$



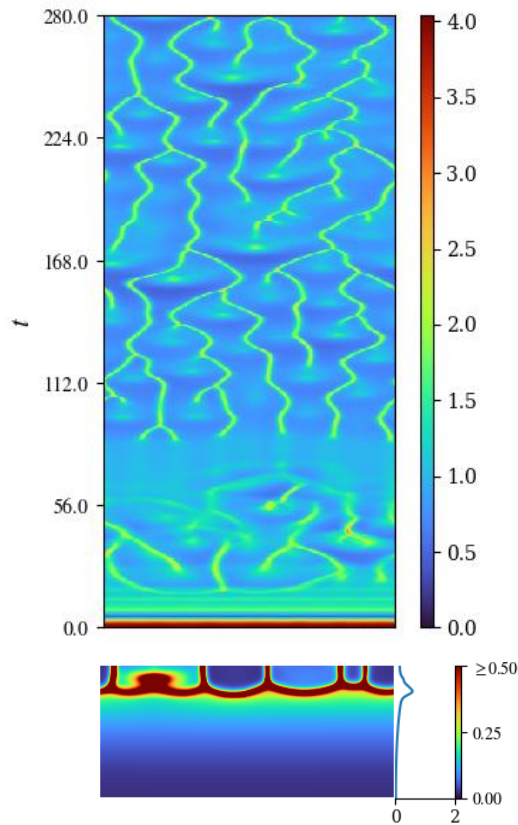
$$\nu = 0,1, \kappa = 2$$

# Gravitacijos įtaka (2)

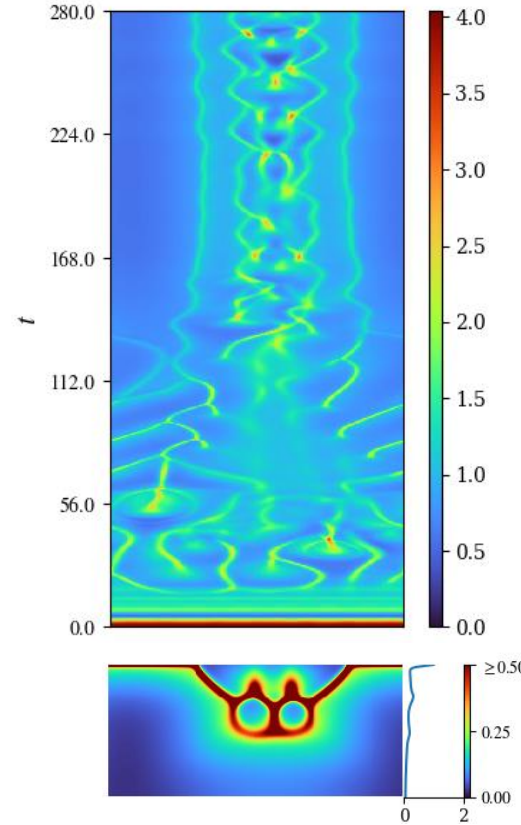
Vilniaus  
universitetas



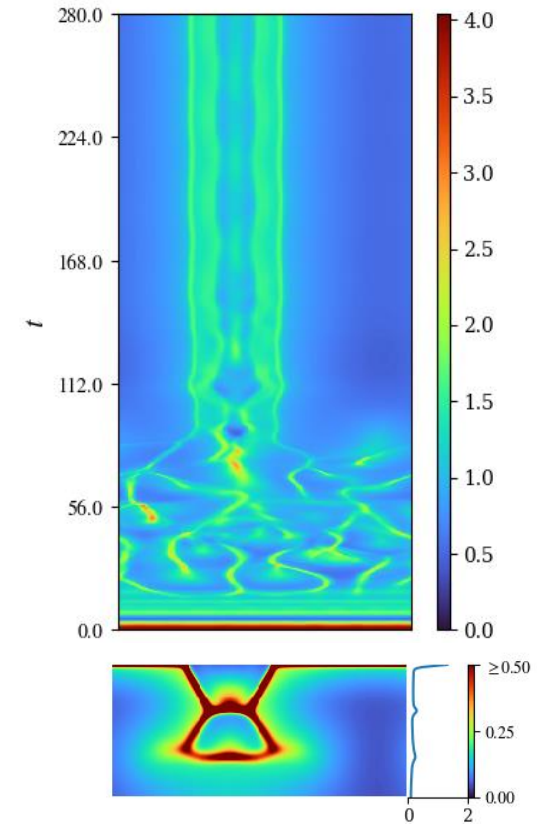
# Gravitacijos įtaka (3)



$$\nu = 0, \kappa = 1, o_{max} = 0,97$$



$$\nu = 48, \kappa = 1, o_{max} = 0,97$$



$$\nu = 48, \kappa = 1,5, o_{max} = 0,97$$

# Reakcijos nario moduliacija (1)

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

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

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

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:

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

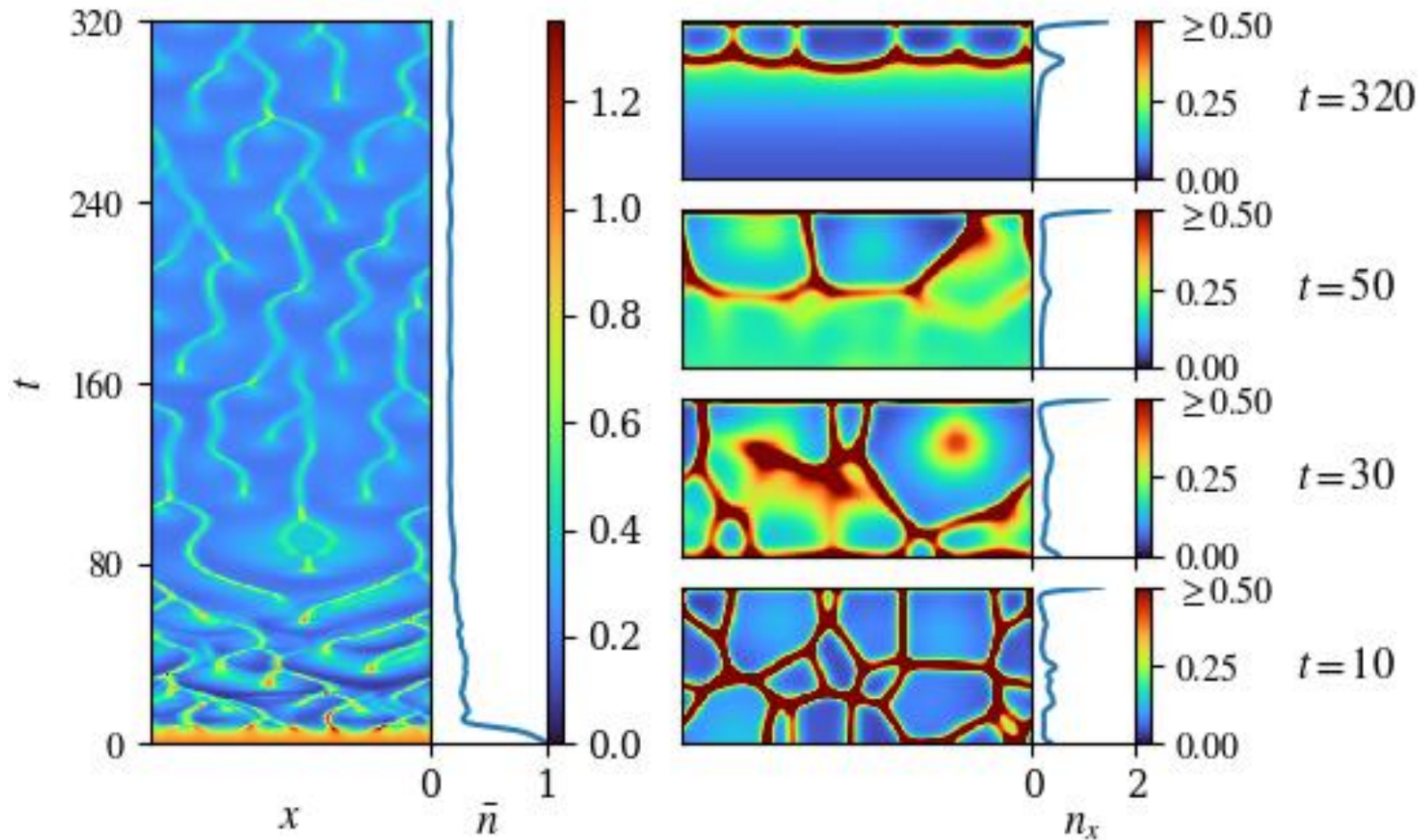
C. Ribinės vertės metodas:

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

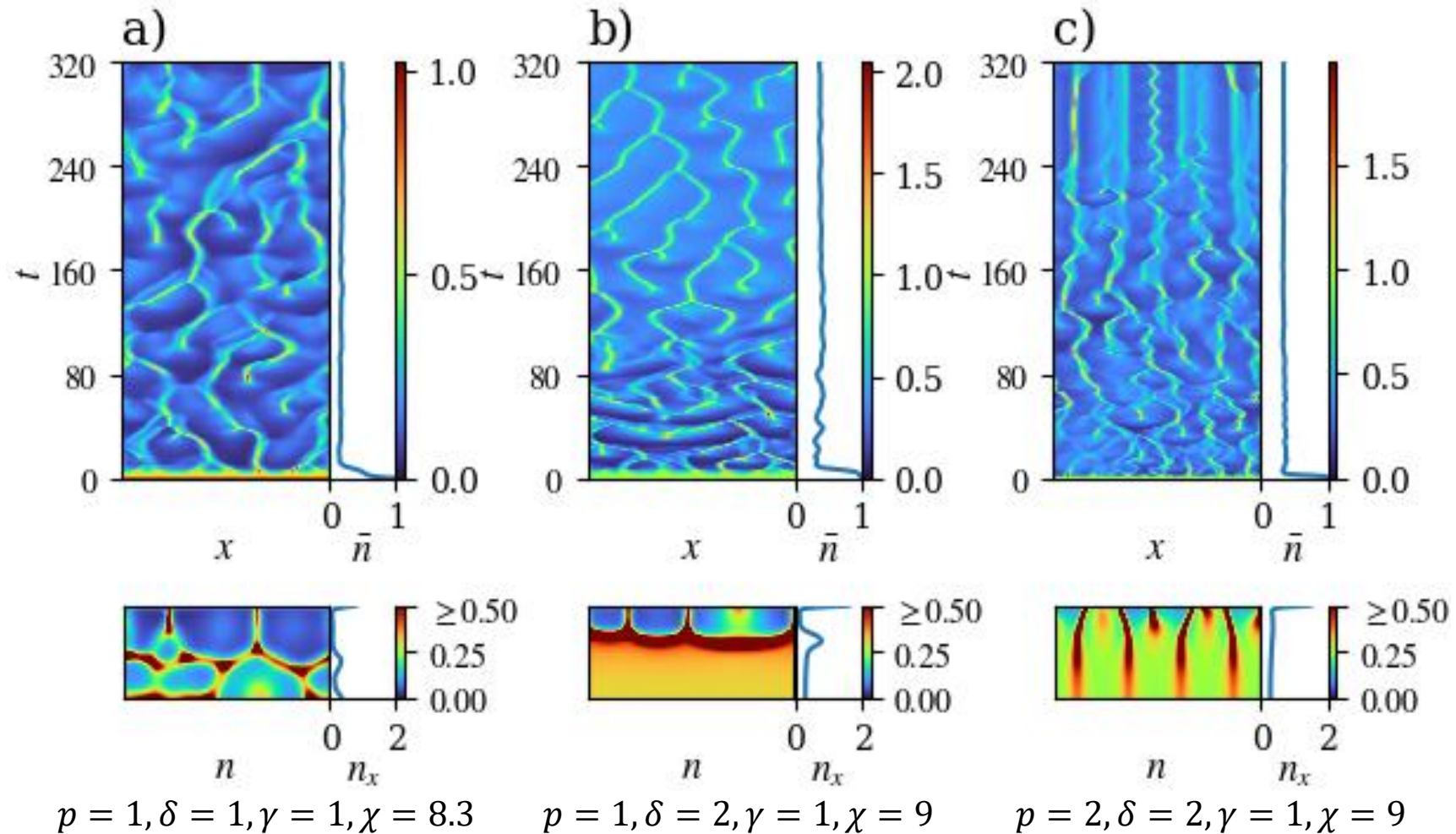
D. Nuo deguonies priklausantis Allee efektas

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

# Reakcijos nario moduliacija (2)



# Reakcijos nario moduliacija (B)





# Skirtingų populiacijų modeliai (1)

a) *E. coli* bakterijų populiacijos modelis

$$h(u, v) = \chi, \quad f(u, v) = \alpha u(1 - u),$$

$$g_p(u, v) = \frac{u}{1 + \beta u}, \quad g_d(u, v) = 1$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D\Delta u - \nabla(h(u, v)u\nabla v) + \gamma f(u, v),$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = \Delta v + \gamma(g_p(u, v) - g_d(u, v)v)$$

b) Kapitalo-darbo modelis

$$h(u, v) = \chi, \quad f(u, v) = \alpha u(1 - u),$$

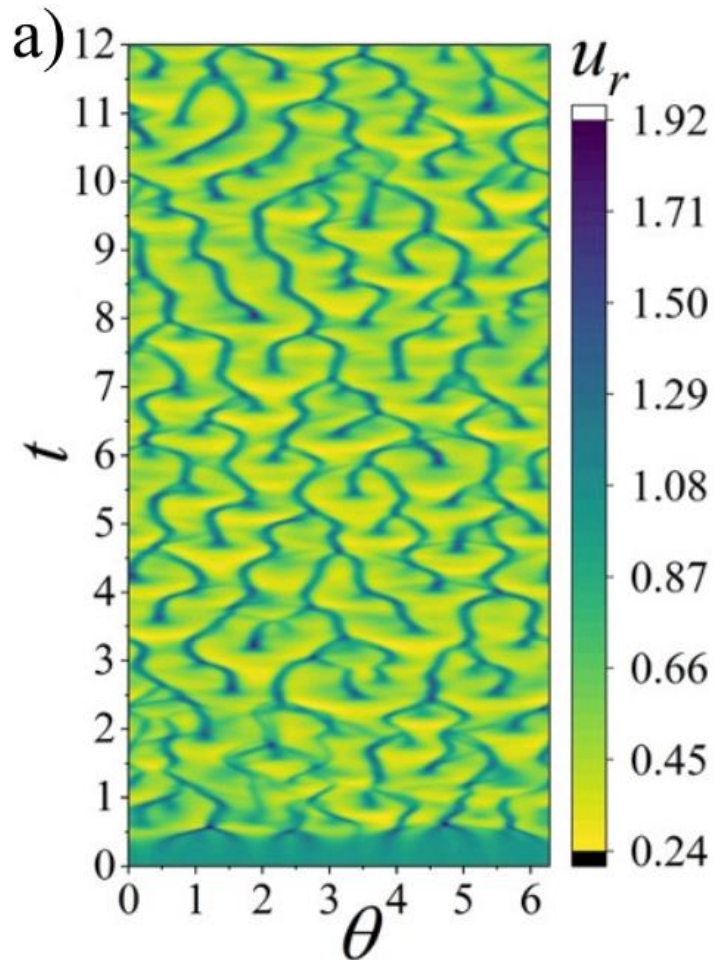
$$g_p(u, v) = v^\phi u^{1-\phi}, \quad g_d(u, v) = 1$$

c) Nusikaltimų modelis

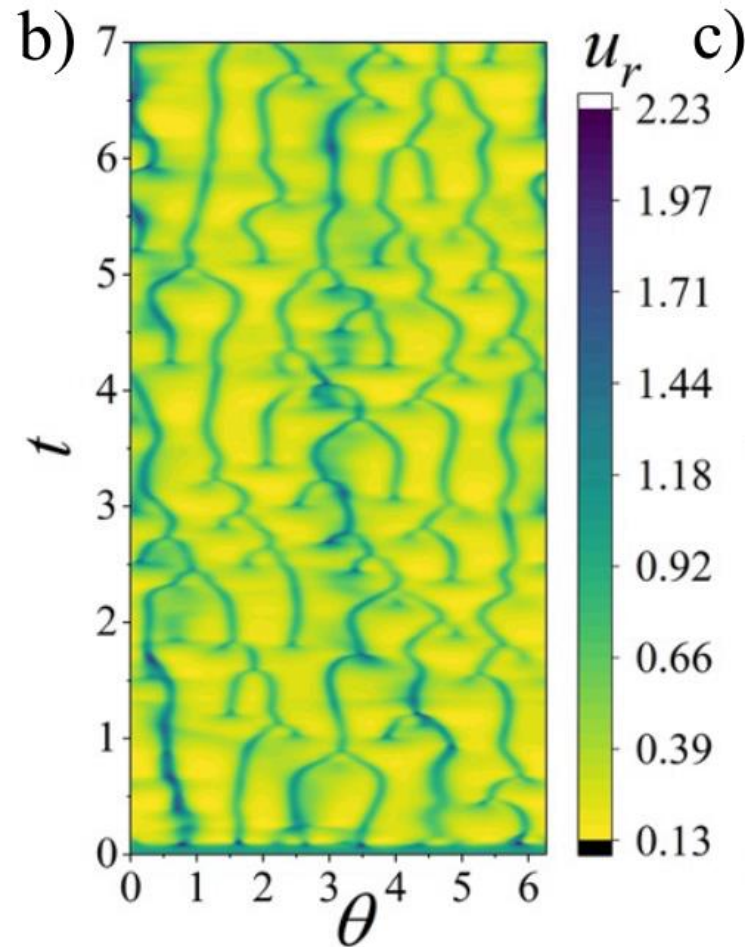
$$h(u, v) = \chi, \quad f(u, v) = k_1 - \kappa uv,$$

$$g_p(u, v) = k_2 + \frac{u}{1 + \varepsilon u}, \quad g_d(u, v) = 1$$

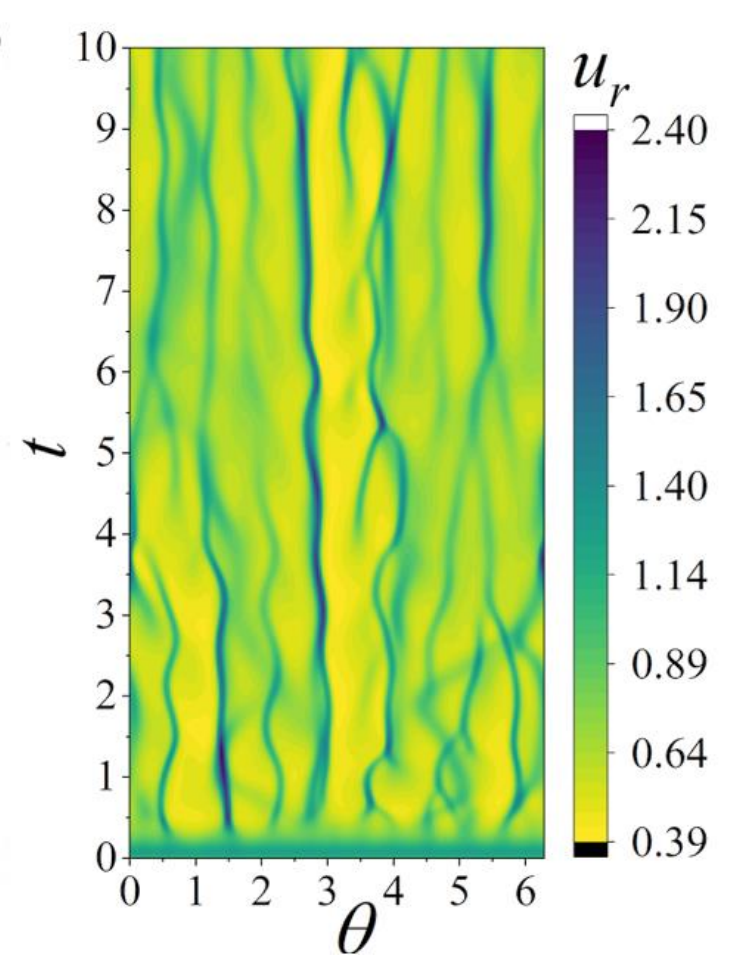
# Skirtingų populiacijų modeliai (2)



a) bakterijų populiacija,

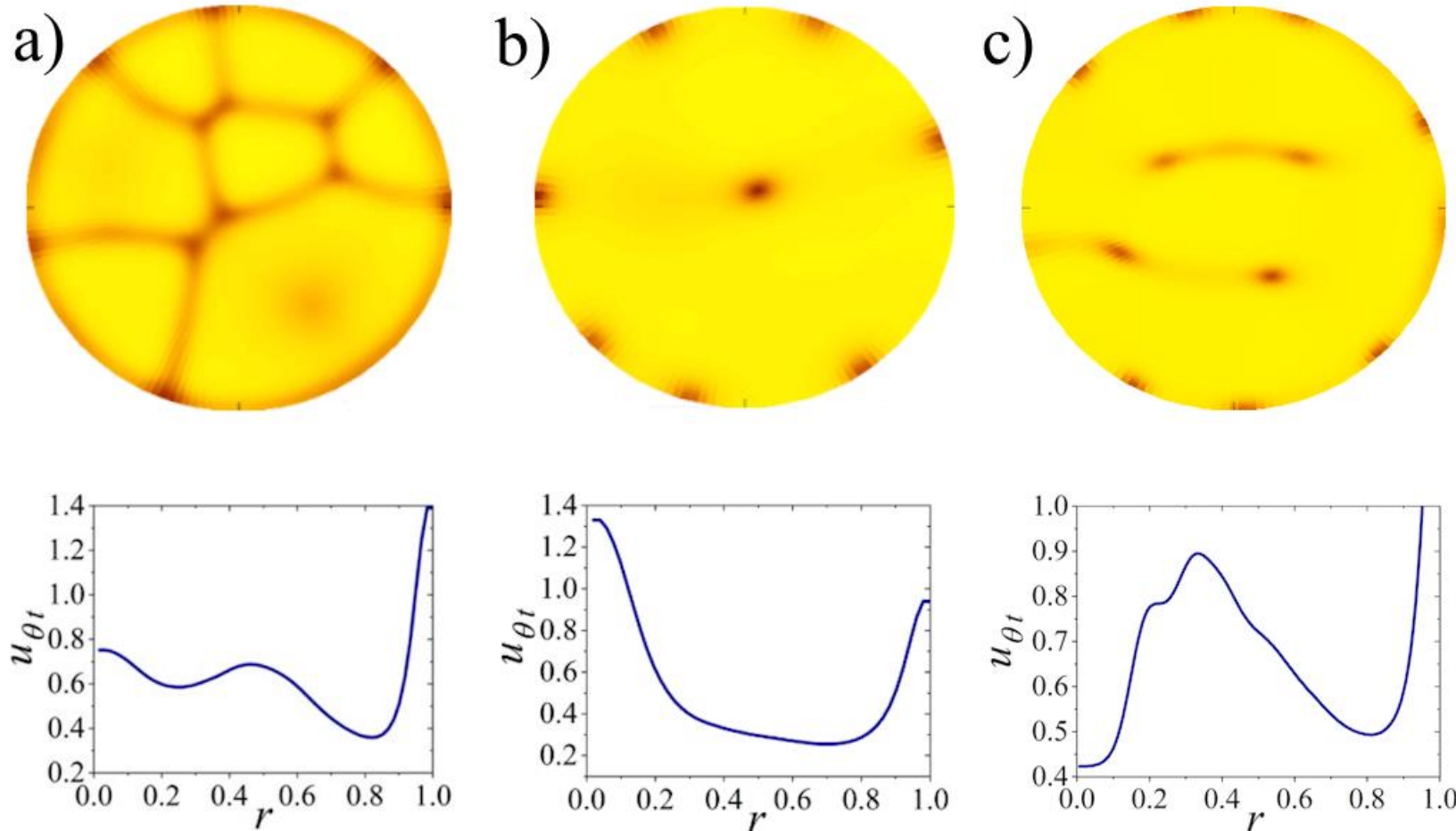


b) kapitalo-darbo modelis,



c) nusikaltimų modelis

# Skirtingų populiacijų modeliai (3)



a) bakterijų populiacija, b) kapitalo-darbo modelis, c) nusikaltimų modelis

# Išvados (1)

- Panaudojant įvairius Keller-Segel tipo modelius galima gauti simuliacijų rezultatus panašius į fizinių eksperimentų
- Difuzijos-reakcijos-chemotaksio lygčių modelių su Navier-Stokes lygtimis uždavinius galima efektyviai spręsti pasiūlytu kompiuteriniu simulatoriumi

# Išvados (2)

- Keller-Segel tipo modeliai su Navier-Stokes lygtimis gali simuliuoti bakterijų struktūrų su plunksnomis formavimąsi. Skysčio klampumą atspindintis parametras  $\nu$  daro nedidelę įtaką plunksnų formai.
- Skirtingos reakcijos nario moduliacijos funkcijos gali būti naudojamos gauti simuliacijų rezultatus panašius į fizinių eksperimentų. Įvairių parametrų įtaką dažnai galima kompensuoti keičiant chemotaktinio jautrumo  $\chi$  reikšmę.
- Keller-Segel tipo modeliais galima modeliuoti socialines sistemas. Simuliuojamos populiacijos (bakterijų ar žmonių) yra linkę į sankaupas simuliuojamo disko kraštuose.



**Vilnius  
universitetas**

---

# Klausimai?