



**Vilniaus
universitetas**

Aktyvių ir pasyvių dalelių struktūrų formavimosi modeliavimas ir analizė

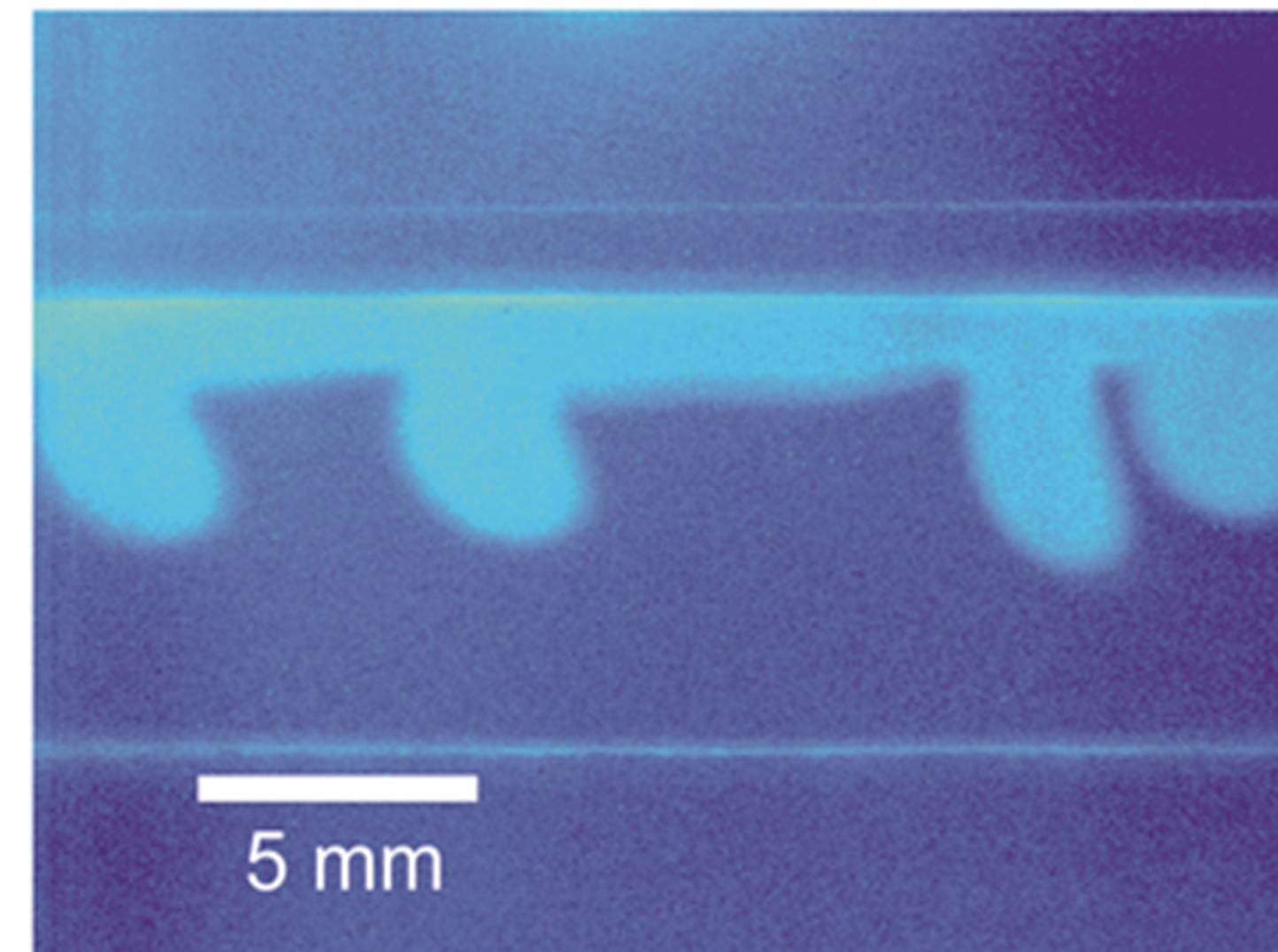


Boleslovas Dapkūnas
2019–2024 m.
2022–2023 m. I pusmečio ataskaita

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 deguonies sunaudojimo 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 empirinių eksperimentų rezultatus, 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		Publikacijos		
	Planas	Įvykdyta	Planas	Įvykdyta	Planas	Įvykdyta	Būklė
I (2019/2020)	2	2					
II (2020/2022)	2	2		1			
III (2022/2023)			1	1	1		
IV (2023/2024)			1		1		

Ataskaitinio pusmečio darbo planas

Dalyvavimas konferencijose		
Planas	Įvykdyta	Konferencijos tipas
	Boleslovas Dapkūnas, Romas Baronas, Žilvinas Ledas. Influence of Oxygen Consumption Rate Modulation on Bacterial Pattern Formation Models. DAMSS 2022. 2022-12-01. Druskininkai, Lietuva.	Lietuvos

Mokslinių tyrimų ir disertacijos rengimo etapai

Darbo pavadinimas	Atlikimo terminai	Pastabos
1. Mokslinių tyrimų disertacijos tema apžvalga ir analizė (Lietuvoje ir užsienyje)	2021 m. sausio mėn.	Parengta dalis mokslinės literatūros apžvalgos
2. Mokslinio tyrimo vykdymas: 2.1. Tyrimo metodikos sudarymas 2.2. Teorinis tyrimas: 2.3. Empirinis tyrimas: 2.4. Gautų duomenų analizė, apibendrinimas, išvadų parengimas	2022 m. rugsėjo mėn. 2023 m. sausio mėn. 2023 m. rugsėjo mėn. 2024 m. vasario mėn.	Atlikta dalis teorinių ir empirinių tyrimų

Mokslinių tyrimų ir disertacijos rengimo etapai

Darbo pavadinimas	Atlikimo terminai	Pastabos
3. Atskirų daktaro disertacijos dalių (tyrimo metodikos, rezultatų, ginamų teiginių, išvadų, ir kt.) parengimas	2024 m. kovo mėn.	
4. Daktaro disertacijos parengimas ir svarstymas padalinyje	2024 m. gegužės mėn.	
5. Daktaro disertacijos gynimas	2024 m. rugsėjo mėn.	

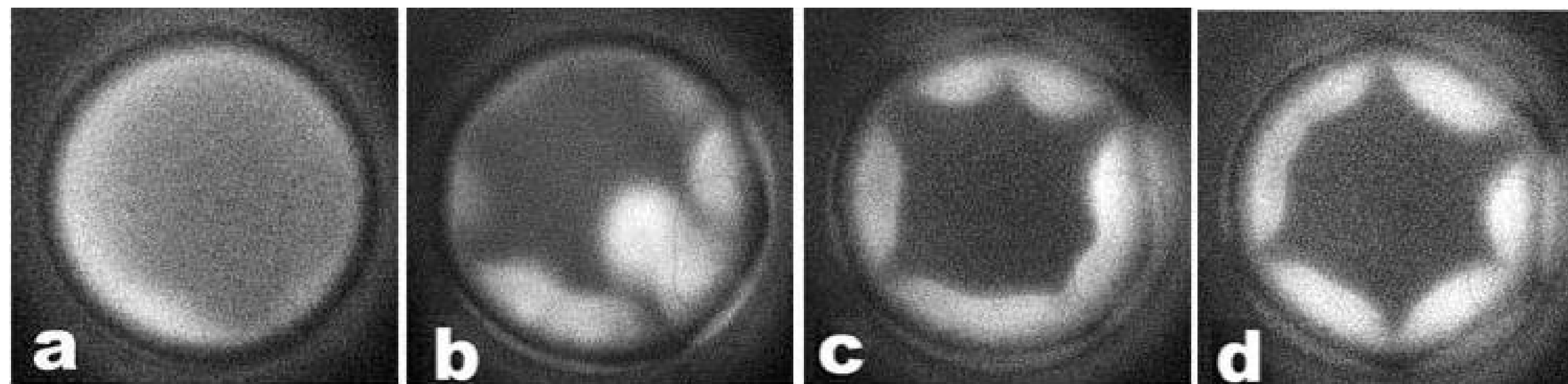
2022/2023 I pusmečio rezultatai

- Praplėsta mokslinių tyrimų disertacijos tema apžvalga ir analizė:
 - Praplėsta matematinių modelių apžvalga,
- Praplėstas tyrimas, kaip skirtingos deguonies sunaudojimo moduliacijos funkcijos įtakoja modeliavimo rezultatus. Rezultatai pristatyti DAMSS 2022 konferencijoje 2022-12-01.

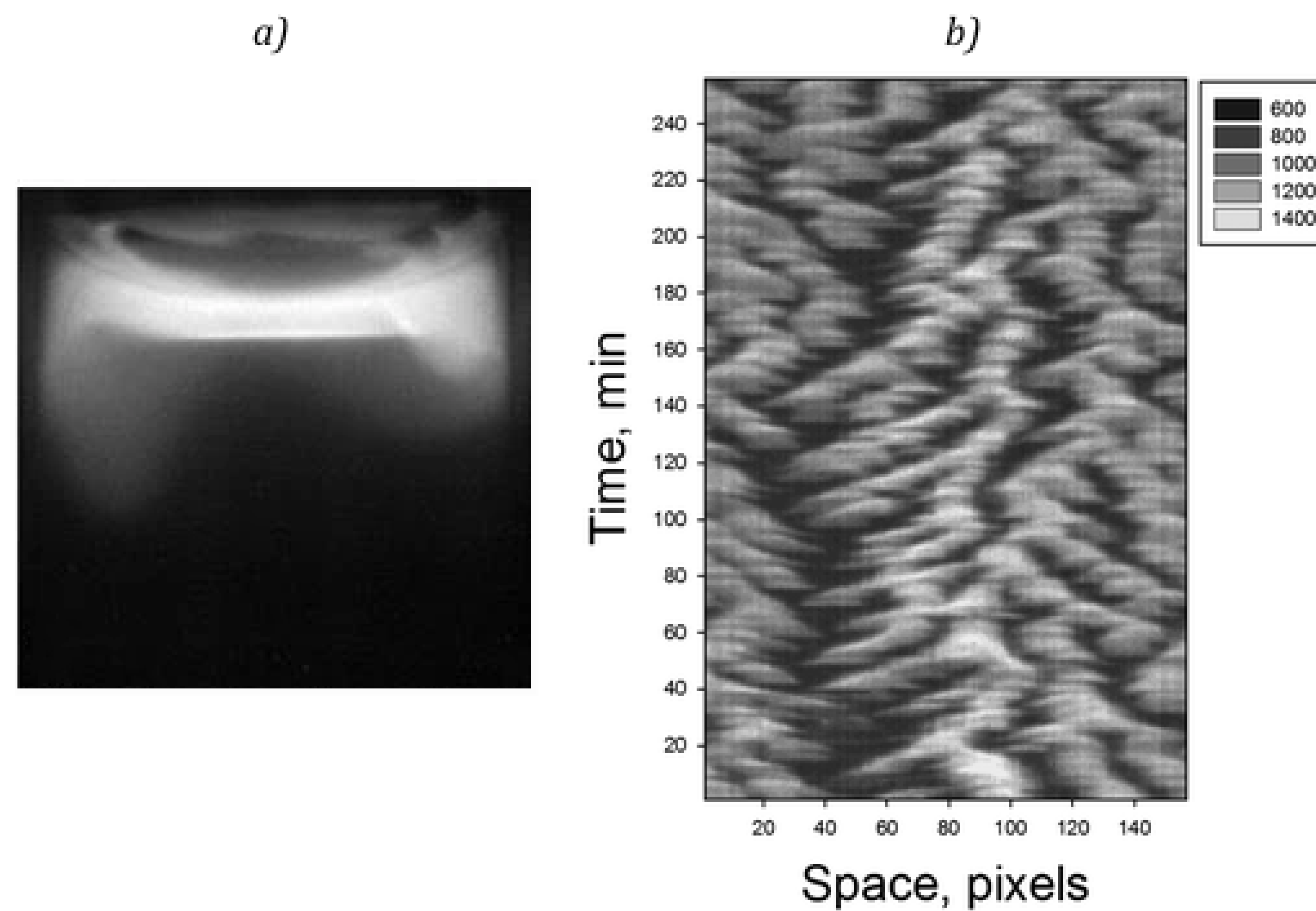
Kito pusmečio darbo planas

- Plečiama mokslinių tyrimų disertacijos tema apžvalga ir analizė,
- Plečiamas tyrimas, kaip skirtingos deguonies sunaudojimo moduliacijos funkcijos įtakoja modeliavimo rezultatus,
- Tęsiamas tyrimas, kaip pasikeičia modeliavimo rezultatai įvedus priklausomybę nuo gravitacijos modelį, praplečiant Navier–Stokes skysčių dinamikos lygtimis.

Chemotaksis



Chemotaksis



Deguonies sunaudojimo moduliacija

$$f(n, o) = g(n, o) = 1,$$

$$f(n, o) = g(n, o) = \theta(o),$$

$$f(n, o) = 1, \quad g(n, o) = o,$$

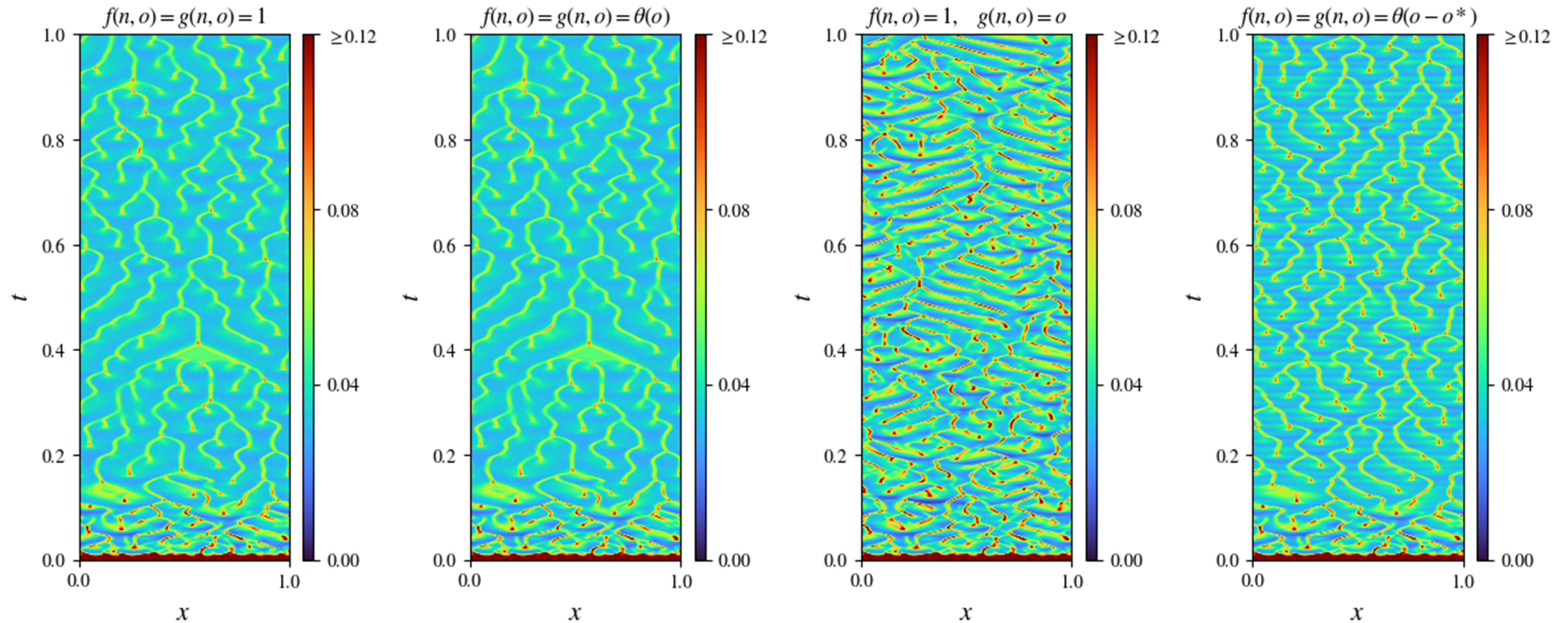
$$f(n, o) = g(n, o) = \theta(o - o^*).$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D_n \Delta n - \chi \nabla(n \nabla c) + \gamma \alpha n \left(1 - \frac{n}{o}\right) f(\mathbf{n}, \mathbf{o}),$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_c \Delta c + \gamma \left(\frac{n}{1 + \beta n} f(\mathbf{n}, \mathbf{o}) - c \right),$$

$$\frac{\partial o}{\partial t} = D_o \Delta o - \gamma \lambda n g(\mathbf{n}, \mathbf{o}).$$

Deguonies sunaudojimo moduliacija



Reakcijos nario moduliacija

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D_n \Delta n - \chi \nabla(n \nabla c) + \alpha n f_n(n, o),$$

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

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

A. Nuo deguonies priklausanti pernešimo geba:

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

B. Prisisotinantis ląstelių augimas:

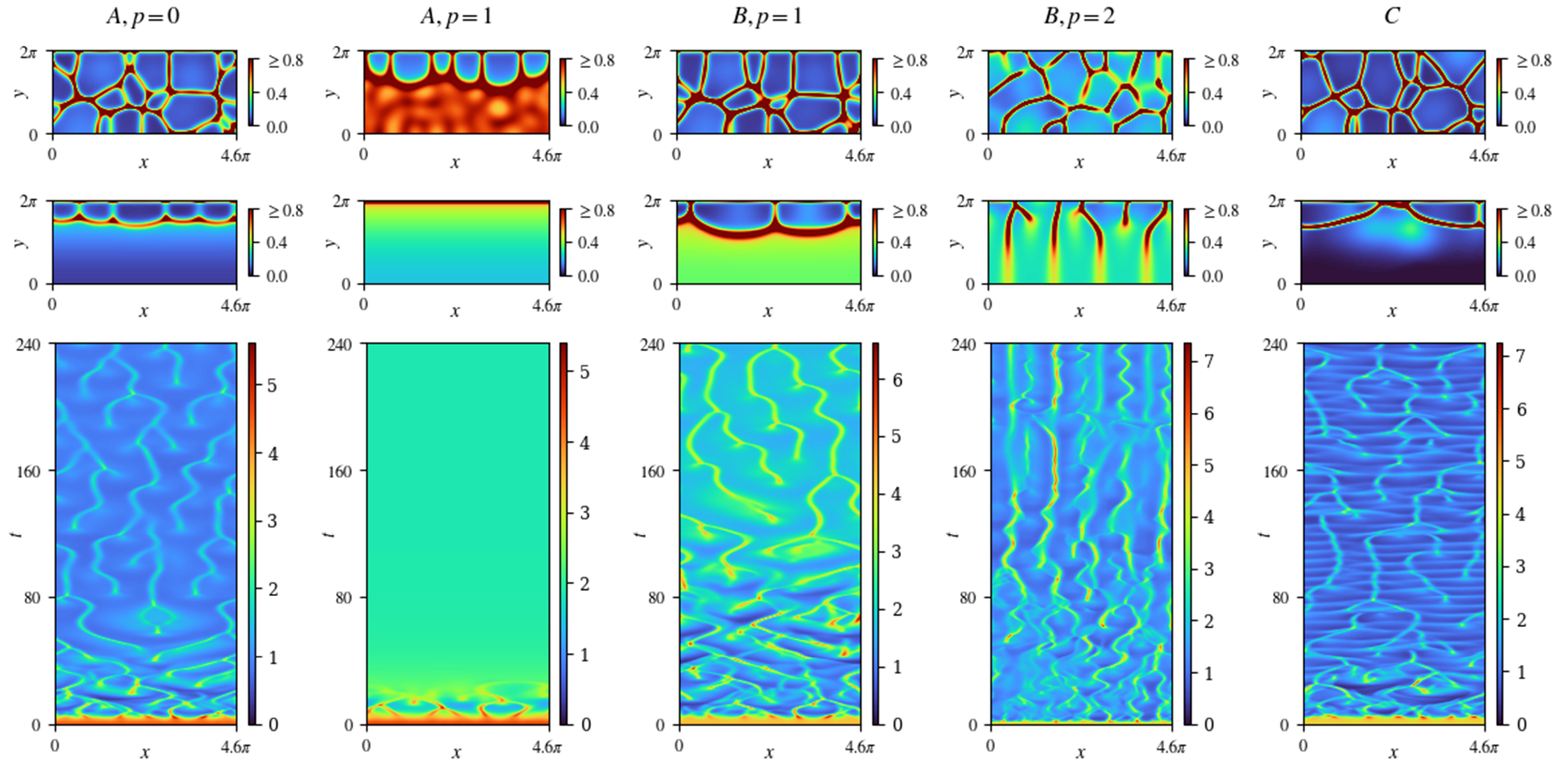
$$f_n(n, o) = \delta \frac{o^p}{1 + \gamma o^p} - n, \quad f_c(n, o) = \frac{\alpha n^{p-1}}{1 + \beta n^p}, \quad f_o(n, o) = \frac{o^p}{1 + \gamma o^p}.$$

C. Ribinės vertės metodas:

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

Reakcijos nario moduliacija

Vilniaus
universitetas



Tolimesni tyrimai – reakcijos nario moduliacija

- Nuo deguonies priklausantis ląstelių deaktyvavimas

$$f_n(n, o) = g(n)o - a(o), \quad f_c(n, o) = 1, \quad f_o(n, o) = g(n)o,$$

$$g(n) = \frac{1}{2} \left(1 + \tanh(\phi(n - n^*)) \right), \quad a(o) = \frac{a_0}{1 + o/o^*}.$$

- Nuo deguonies priklausantis Allee efektas

$$f_n(n, o) = \left(\frac{n}{a_1 o} - 1 \right) \left(1 - \frac{n}{a_2 o} \right), \quad f_c(n, o) = \frac{o^p}{1 + \beta n}, \quad f_o(n, o) = o^p.$$



**Vilniaus
universitetas**

Klausimai?