

## ŠVYTINČIŲ BAKTERIJŲ STRUKTŪROS CILINDRINIO MĖGINTUVĖLIO ŠONINIAME PAVIRŠIUJE KOMPIUTERINIS MODELIAVIMAS

Žilvinas Ledas<sup>1</sup>, Romas Baronas<sup>1</sup>, Remigijus Šimkus<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universiteto Matematikos ir Informatikos fakulteto Programų sistemų katedra,  
Didlaukio g. 47, LT-08303 Vilnius

<sup>2</sup>Vilniaus universiteto Biochemijos institutas, Mokslininkų g. 12, LT-08662 Vilnius  
zilvinas.ledas@dict.lt, romas.baronas@mif.vu.lt, remigijus.simkus@bchi.vu.lt

**Anotacija.** Darbe nagrinėjamas švytinčių bakterijų formuojamų struktūrų kompiuterinis modeliavimas. Nagrinėjami du modeliai – Keller-Segel tipo difuzijos-advekcijos-reakcijos lygčių sistema bei modelis, kai prie tos sistemos papildomai prijungiama lygtis, aprašanti deguonies koncentracijos kaitą. Šie modeliai buvo taikomi *Escherichia coli* bakterijų kultūroms, stebimoms mažoje cilindro formos talpoje analizuojant cilindro šoninį paviršių dvimatėje erdvėje bei jo projekciją į pseudo vienmatę erdvę, vaizduojančią bakterijų koncentraciją skritulio viršutiniame krašte. Skaitiniam modeliavimui buvo naudotas baigtinių skirtumų metodas. Taikant modelius buvo iširta cilindro gylio įtaka bakterijų formuojamoms struktūroms.

**Pagrindiniai žodžiai:** reakcija-difuzija, bakterijų struktūros, modeliavimas.

### Įvadas

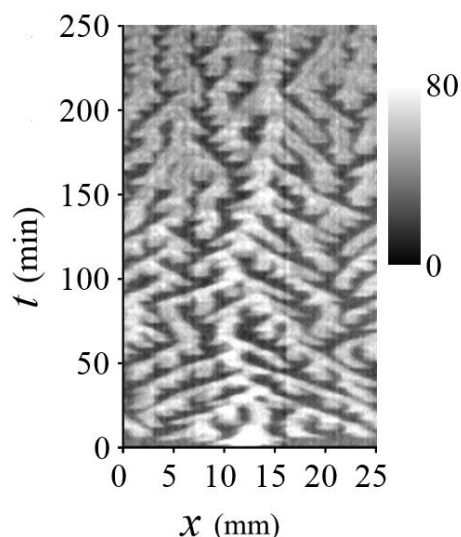
Įvairūs mikroorganizmai reaguoja į aplink esančią cheminę aplinką. Jie gali jausti įvairias chemines medžiagas ir judėti link arba nuo jų. Toks mikroorganizmų kryptingas judėjimas, priklausantis nuo cheminių gradientų, vadinamas chemotaksium (Eisenbach, 2004). Šis procesas yra svarbus ir mikroskopinėms bakterijoms, ir dideliems žinduoliams – daugelio organizmų išlikimas priklauso nuo jų gebėjimo judėti sudėtingose aplinkose, nes toks judėjimas daro įtaką daugeliui elgsenos aspektų, pavyzdžiui, maisto šaltinių paieškai, plėšrūnų išvengimui ar poros pritraukimui (Hillen, Painter, 2009). Nors chemotaksis pasireiškia daugelyje bakterijų, *Escherichia coli* yra viena iš daugiausiai tyrinėjamų. *E. coli* bakterijos geba atlikti nesimetriškus atsitiktinius judėjimus, kurių metu tiesaus judėjimo laikotarpiai yra pertraukiami momentų, kai bakterija atsitiktinai pasisuka. Matuodamos per tam tikrą laiką pajausią vidutinį chemoatraktanto kiekį šios bakterijos geba valdyti tiesaus judėjimo ir sukimosi momentų kaitą ir taip judėti pageidaujama kryptimi (Brenner, 2010).

*E. coli* ir daugelis kitų bakterijų pasižymi tuo, kad esant tam tikroms sąlygoms formuoja įvairius struktūrizuotus raštus (Brenner ir kt., 2010; Murray, 2003), t. y. bakterijų populiacija terpėje pasiskirsto netolygiai (Sasaki ir kt., 2010). Pastaraisiais metais buvo stebėtos nedidelėje su oru besiliečiančioje talpoje patalpintų švytinčių lux-genais žymėtų *E. coli* bakterijų bėgant laikui besikeičiančios erdvinės struktūros (Šimkus ir kt., 2009). Tačiau kokie tiksliai dėsniai nusako šių struktūrų susidarymą bei kitimą vis dar nėra aišku. 1 pav. matomas bakterijų koncentracijų pasiskirstymas ir kitimas cilindro formos mėgintuvėlio viršutiniame krašte (Šimkus, Baronas, 2011), taip pat iš (Šimkus ir kt., 2009) aišku, kad žiūrint į mėgintuvėlį iš šono, didesnės bakterijų koncentracijos yra mėgintuvėlio viršuje.

Per paskutinius keliolika metų ši bakterijų savybė buvo pradėta naudoti konstruojant efektyvius visos ląstelės (angl. *whole-cell*) liuminescencinius biojutiklius, kurie gali būti taikomi, pavyzdžiui, aplinkoje esantiems teršalams aptikti (Gu, Kim, 2004). Dėl to svarbu aiškintis ir tirti bakterijų judėjimą ir struktūrų susidarymą lemiančius bei valdančius veiksnius.

Įvairūs matematiniai modeliai, dažniausiai paremti Paltak-Keller-Segel tipo lygtimis, yra sėkmingai taikomi modeliuojant bakterijų judėjimą ir tiriant chemotaksio mechanizmus (Keller, Segel, 1971). Išsami matematinio modeliavimo taikymo šioje srityje apžvalga yra pateikiama (Hillen, Painter, 2009).

Šiame darbe yra tiriamos bakterijų saviorganizacijos ypatybės mažoje cilindro formos talpoje nagrinėjant cilindro šoninį paviršių dvimatėje erdvėje bei jo projekciją į pseudo vienmatę erdvę, vaizduojančią bakterijų koncentraciją skritulio viršutiniame krašte. Neseniai buvo pasiūlytas modelis, sėkmingai aprašantis *E. coli* struktūrų formavimąsi cilindro formos talpoje (Šimkus ir kt., 2013), o šiame darbe skaitiniais eksperimentais tiriama kaip kinta bakterijų formuojamos struktūros keičiant cilindro gylį.



1 pav. Bakterijų koncentracijų pasiskirstymas cilindro formos mėgintuvėlio viršutiniame krašte bėgant laikui (Šimkus, Baronas, 2011).

## 1. Matematinis modelis

Šiame skyriuje pateikiami naudoti matematiniai modeliai bei jų pasirinkimo motyvacija.

### 1.1. Modelis be deguonies

Nors bakterijų savaiminiam judėjimui modeliuoti yra naudojama nemažai modelių, Keller ir Segel pasiūlytos lygtys išlieka vienos iš labiausiai naudojamų (Keller, Segel, 1971). Remiantis jų požiūriu, struktūros formavimąsi bakterijų kolonijose galima aprašyti dviejų difuzijos-advekcijos-reakcijos lygčių sistema (Hillen, Painter, 2009). Atsižvelgiant į tai, šio darbo metu naudotas matematinis bedimensinis modelis, skirtas modeliuoti bakterijų struktūros formavimąsi, buvo apibrėžtas taip:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= D\Delta u - \chi \nabla \cdot (u \nabla v) + \gamma \alpha u (1 - u), \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= \Delta v + \gamma \left( \frac{u}{1 + \beta u} - v \right), \end{aligned} \quad (1)$$

kur  $\Delta$  yra Laplaso operatorius,  $x$  ir  $y$  nusako bedimensę erdvę (atitinkamai cilindro šoninio paviršiaus ilgį bei cilindro aukštį),  $t$  nusako bedimensį laiką,  $u(x, y, t)$  nusako bedimensę

bakterijų koncentraciją,  $v(x, y, t)$  nusako bedimensę chemoatraktanto koncentraciją,  $D$  yra bedimensis bakterijų difuzijos koeficientas,  $\chi$  – bedimensis chemotaktinis jautris,  $\alpha$  – bedimensis bakterijų populiacijos augimo greitis,  $\beta$  – signalo soties koeficientas ir  $\gamma$  nusako bedimensį erdvės ir laiko mastelį.

Prie (1) lygčių pridėję pradinės bei kraštinės sąlygas gauname matematinį modelį, skirtą modeliuoti bakterijų judėjimą palei cilindro šoninį paviršių:

$$\begin{aligned} u(x, y, 0) &= 1 + \epsilon(x, y), \quad v(x, y, 0) = 0, \quad (x, y) \in [0, 1] \times [0, h], \\ u(0, y, t) &= u(1, y, t), \quad \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=0} = \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=1}, \quad y \in [0, h], \quad 0 < t, \\ v(0, y, t) &= v(1, y, t), \quad \frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{x=0} = \frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{x=1}, \quad y \in [0, h], \quad 0 < t, \\ \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{y=0} &= \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{y=h} = \frac{\partial v}{\partial y} \Big|_{y=0} = \frac{\partial v}{\partial y} \Big|_{y=h} = 0, \quad x \in [0, 1], \quad 0 < t, \end{aligned} \quad (2)$$

kur  $\epsilon(x, y)$  yra atsitiktinis dydis pasiskirstęs pagal Gauso skirstinį su vidurkiu 0 ir standartiniu nuokrypiu 0,1,  $h$  yra cilindro aukštis. Cilindro šoninio paviršiaus ilgis šio darbo eksperimentuose yra prilyginamas vienetui.

## 1.2. Modelis su deguonimi

Atsižvelgiant į (Šimkus ir kt., 2013) pateikiamus rezultatus, (1) modelis nėra pats efektyviausias modeliuojant ir tiriant *E. coli* saviorganizaciją, kai į cilindrą iš viršaus patenka deguonis, kurį bakterijos nuolat naudoja. Dėl to verta analizuoti ir (1) sistemą, papildytą lygtimi, aprašančia deguonies koncentracijos kaitą (Šimkus ir kt., 2013):

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= D\Delta u - \chi \nabla \cdot (u \nabla v) + \gamma \alpha u \left(1 - \frac{u}{o}\right), \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= \Delta v + \gamma \left(\frac{u}{1 + \beta u} - v\right), \\ \frac{\partial o}{\partial t} &= D_o \Delta o - \gamma \lambda u, \end{aligned} \quad (3)$$

kur  $o(x, y, t)$  yra deguonies koncentracija,  $D_o$  yra bedimensis deguonies difuzijos koeficientas,  $\lambda$  nusako bedimensį deguonies suvartojimo greitį, o kitų parametrų reikšmės yra tokios pačios kaip (1) lygčių sistemos. Verta pastebėti, kad (1) lygčių sistema yra specialus (3) sistemos atvejis, kai  $o(x, y, t) = 1$ .

Prie (3) bei (2) pridėję trūkstantas pradinės bei kraštinės sąlygas:

$$\begin{aligned} o(x, y, 0) &= 1, \quad (x, y) \in [0, 1] \times [0, h], \\ o(0, y, t) &= o(1, y, t), \quad \frac{\partial o}{\partial x} \Big|_{x=0} = \frac{\partial o}{\partial x} \Big|_{x=1}, \quad y \in [0, h], \quad 0 < t, \\ \frac{\partial o}{\partial y} \Big|_{y=0} &= 0, \quad o(x, h, t) = 1, \quad x \in [0, 1], \quad 0 < t, \end{aligned} \quad (4)$$

gauname matematinį modelį, skirtą modeliuoti bakterijų judėjimą palei cilindro šoninį paviršių, kai deguonis patenka į sistemą „iš viršaus“, bakterijos naudoja deguonį ir taip deguonies kiekis apriboja bakterijų dauginimąsi.

## 2. Skaitinis eksperimentas

Netiesinių diferencialinių lygčių dalinėmis išvestinėmis sistemos, aprašančios bakterijų, chemoatraktanto bei deguonies koncentracijų dinamiką, buvo sprendžiamos skaitiniais metodais. Buvo naudotas išreikštinių baigtinių skirtumų metodas (Samarskii, 2001), įgyvendintas Free Pascal programavimo kalba.

Skaitiniai eksperimentai buvo atliekami su (1), (2) modeliu, bei su (3), (2), (1) modeliu.

Sistemų dinamika buvo modeliuojama 0,7 bedimensių laiko vienetų taikant  $10^{-6}$  laiko žingsnį. Taip pat buvo taikytas 1/240 erdvės žingsnis palei cilindro kraštą bei 1/400 erdvės žingsnis palei cilindro gylį. Atitinkamai buvo naudojama  $240 \times \{120; 63; 60; 45\}$  erdvės taškų ir tas apytiksliai atitinka  $1 \times \{0,3; 0,16; 0,15; 0,11\}$  matuojant bedimensiais erdvės vienetais.

Įvairių kitų parametrų reikšmės buvo imtos tokios, kokios buvo eksperimentiškai nustatytos ankstesniuose darbuose naudojant atitinkamus 1 dimensijos (Šimkus, Baronas, 2011; Baronas, Šimkus, 2011), bei 2 dimensijų (Šimkus ir kt., 2013) modelius, t. y.  $D = 0,04$ ,  $\chi = 8,3$ ,  $\alpha = 1$ ,  $\beta = 0,73$ ,  $\gamma = 600$ ,  $D_o = 0.12$ ,  $\lambda = 0.048$ .

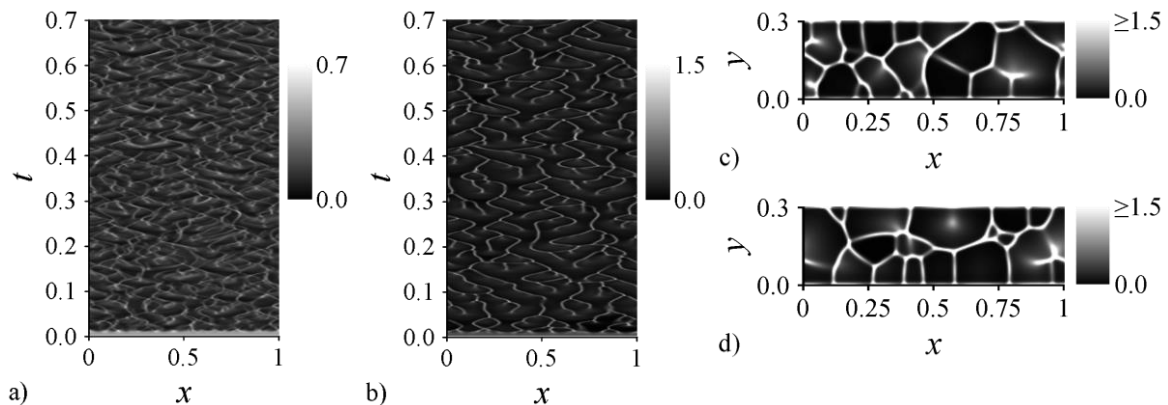
## 3. Modeliavimo rezultatai

Modeliuojant buvo gauti 2 dimensijų vaizdai kintantys laike. Norint gauti pseudo 1 dimensijos vaizdus, kurie simuliuoja palei cilindro viršutinį kraštą esančių bakterijų koncentracijas, gautieji 2 dimensijų vaizdai buvo integruojami palei gylį:

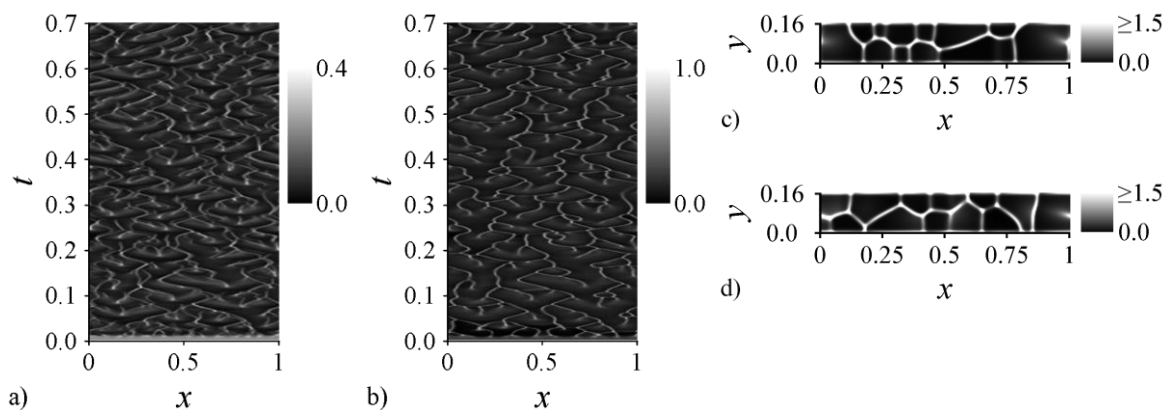
$$u_{1D}(x, t) = \frac{1}{h_0} \int_{h-h_0}^h u(x, y, t) dy, \quad x \in [0, 1], \quad t \in [0, 0.7], \quad (5)$$

kur  $h$  yra visas cilindro gylis, o  $h_0$  yra gylis, nuo kurio atliekamas integravimas. Toks integravimas ne per visą gylį leidžia simuliuoti skysčio su bakterijomis savybę, kad iš giliau esančių sluoksnių bakterijų švytėjimas nepasiekia paviršiaus.

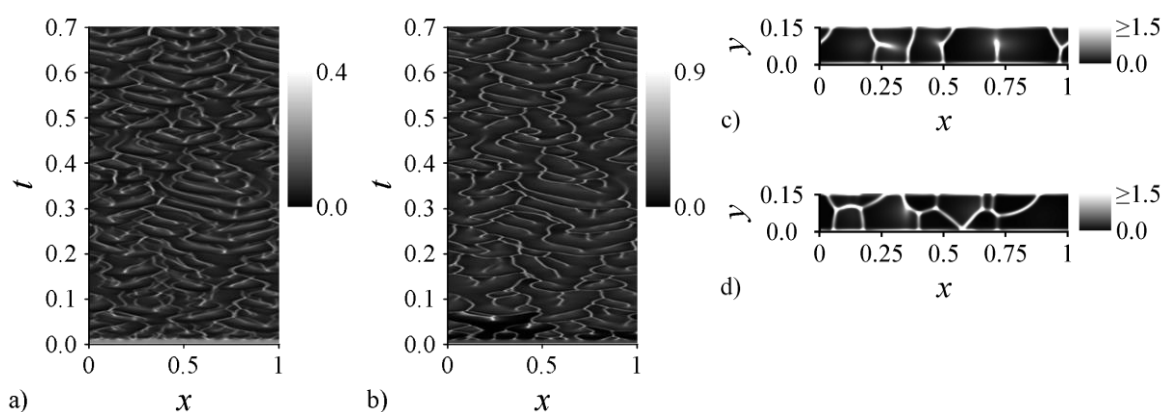
Skaitinių eksperimentų rezultatai pateikiami 2-5 pav. (kai modeliuojama be deguonies) ir 6-9 pav. (kai modeliuojama su deguonimi).



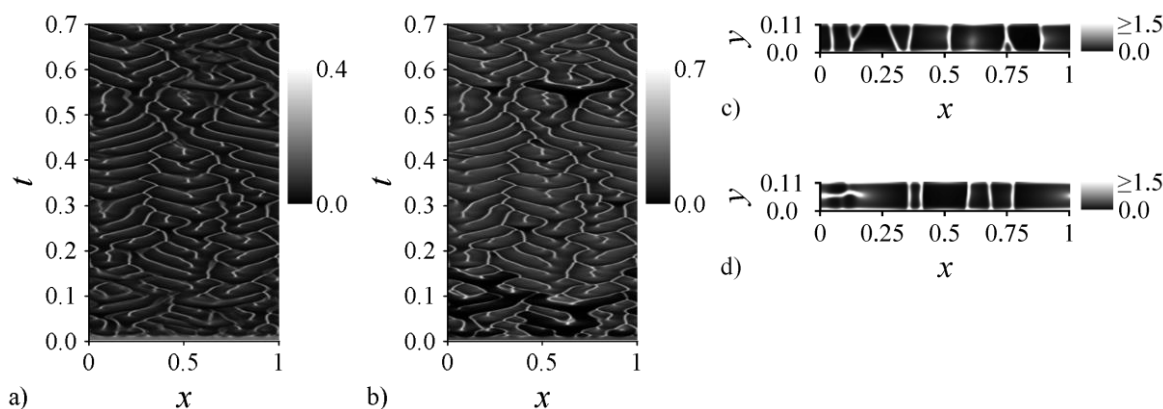
2 pav. Modeliuojant be deguonies kai  $h = 0,3$  bakterijų koncentracijos: a)  $u_{1D}$  kai  $h_0 = h$ ; b)  $u_{1D}$  kai  $h_0 = 0,1h$ ; c) laiko momentu  $t = 0,2$ ; d) laiko momentu  $t = 0,4$ .



3 pav. Modeliuojant be deguonies kai  $h = 0,16$  bakterijų koncentracijos: a)  $u_{ID}$  kai  $h_0 = h$ ; b)  $u_{ID}$  kai  $h_0 = 0,1h$ ; c) laiko momentu  $t = 0,2$ ; d) laiko momentu  $t = 0,4$ .



4 pav. Modeliuojant be deguonies kai  $h = 0,15$  bakterijų koncentracijos: a)  $u_{ID}$  kai  $h_0 = h$ ; b)  $u_{ID}$  kai  $h_0 = 0,1h$ ; c) laiko momentu  $t = 0,2$ ; d) laiko momentu  $t = 0,4$ .



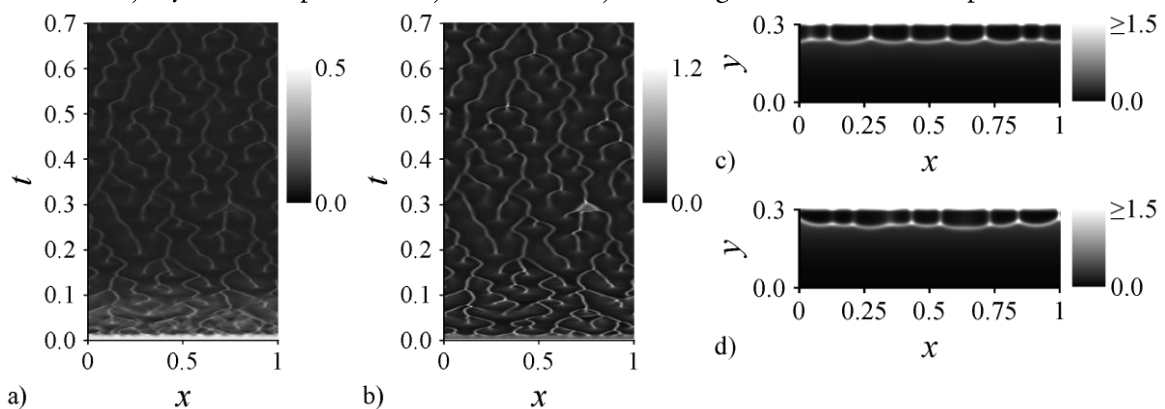
5 pav. Modeliuojant be deguonies kai  $h = 0,11$  bakterijų koncentracijos: a)  $u_{ID}$  kai  $h_0 = h$ ; b)  $u_{ID}$  kai  $h_0 = 0,1h$ ; c) laiko momentu  $t = 0,2$ ; d) laiko momentu  $t = 0,4$ .

Iš 2c ir 2d pav. matome, kad kai  $h = 0,3$ , tai 2 dimensijų erdvėje susidaro netaisyklingos jungtys, vienodai artėjančios tiek prie cilindro viršaus, tiek prie apačios. Taip pat matome, kad dažnai jungtys atskiria mažos koncentracijos zonas, kurios yra erdvės viduje, t. y. tos

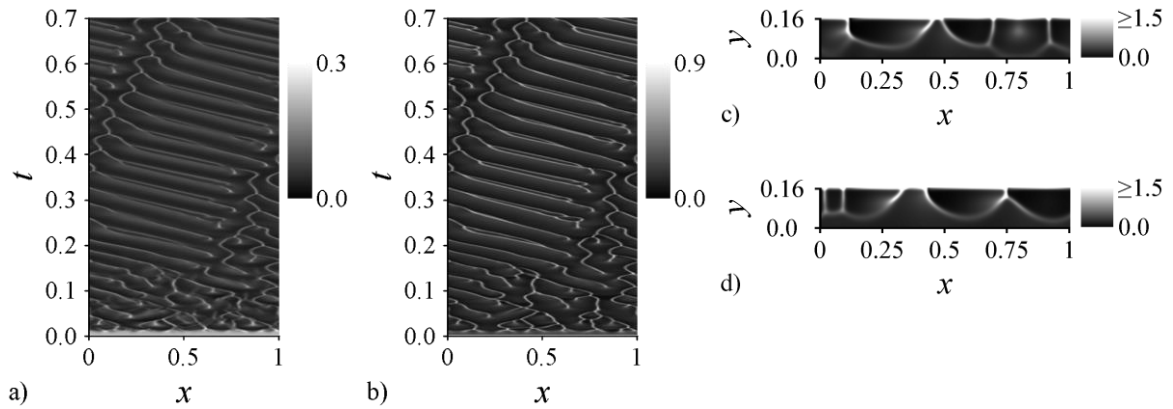
zonos nesiliečia prie viršaus ar apačios. Žiūrint į 3 bei 4 pav. matome, kad mažinant aukštį  $h$ , mažos koncentracijos zonos erdvės viduje nebesusidaro. Toliau mažinant gylį (5 pav.), matomas stebimų 2 dimensijų struktūrų elgsenos kitimas – atsiranda „perskyrimai“ einantys beveik tiesiai nuo viršaus iki apačios. Lyginant 2a, 2b, 3a, 3b, 4a ir 4b pav. pseudo 1 dimensijos vaizdus matoma, kad integruoti per visą gylį vaizdai 2a, 3a ir 4a yra chaotiškesni. Šis chaotiškumas išnyksta 5 pav., kai visas cilindro gylis tampa nedidelis ir 2 dimensijų struktūros tampa taisyklingesnės. Tačiau bendrai pseudo 1 dimensijos vaizdai (2a, 2b, 3a, 3b, 4a, 4b, 5a ir 5b pav.) visuose gyliuose struktūriškai yra iš esmės tokie patys – didesnės koncentracijos bakterijų dariniai vietomis atsiranda, tada juda į šonus, vietomis išsiskiria ir vietomis susijungia. Verta pažymėti, kad realių eksperimentų vaizduose darinių išsiskyrimų beveik nėra (žr. 1 pav.). Lyginant struktūras, gaunamas į modelį neįtraukiant deguonies, su struktūromis, gaunamomis naudojant modelį su deguonimi, matomas ryškus pasikeitimas – deguonies trūkumas cilindro apačioje priverčia bakterijas koncentruotis viršuje ir bakterijos sudaro bambuko tipo struktūrą (6c ir 6d pav.).

Buvo atlikti ir eksperimentai didinant gylį dar daugiau, bet bakterijų formuojama struktūra, kai modeliuojama įtraukiant deguonį, nepakito – ji iš esmės buvo tokia pati bei susiformavo tokiame pačiame gylyje kaip ir 6 pav. Tuo tarpu mažinant gylį stebimas ryškus 2 dimensijų struktūros kitimas. Pasiekus  $h = 0,16$ , bambuko tipo struktūra vietomis virsta į pusapskritimus. 8 pav., lyginant su 7 pav., gylis sumažinamas labai nežymiai, tačiau pusapskritimiai išnyksta ir formuojasi netaisyklingos jungtys, nuo viršaus nusidriekiančios iki apačios. Toliau mažinant gylį (9 pav.) formuojasi struktūros labai panašios į tas, kurias gauname modeliuodami be deguonies kai naudojame tokį patį gylį (5 pav.). Analizuojant pseudo 1 dimensijos vaizdus, matoma, kad 6 pav. didesnės koncentracijos bakterijų dariniai vietomis atsiranda, juda į šonus ir vietomis susijungia – galima matyti daugmaž dvejetainio medžio struktūrą. Mažinant gylį, matomas struktūros kitimas (7a ir 8a pav.) – medžio „šakos“ ištįsta bei atsiranda vietų, kur bakterijų dariniai išsiskiria. Vėlgi, toliau mažinant gylį ir lyginant 9a pav. su 5a pav., matoma, kad struktūros labai supanašėja.

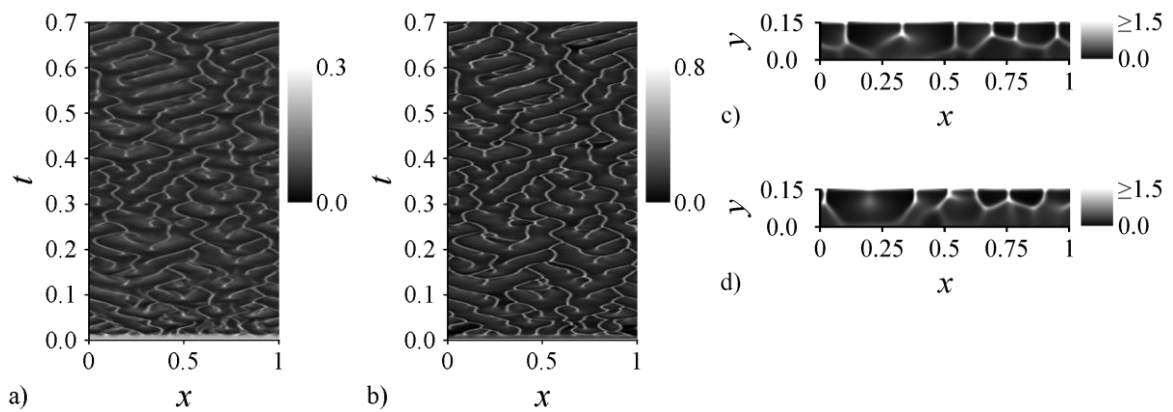
Lyginant su realių eksperimentų vaizdais (1 pav.), aiškiai matoma, kad pseudo 1 dimensijų vaizdai gauti modeliuojant su deguonimi (6a pav.) yra panašesni nei modeliuojant be deguonies (pvz., 2a pav.). Panašiai yra ir su 2 dimensijų vaizdais iš šono – juos palyginti sunkiau, bet aiškiai matoma, kad realių eksperimentų vaizduose (Šimkus ir kt., 2009) didesnės bakterijų koncentracijos yra susikaupusios viršuje, ir modeliuojant su deguonimi būtent tai ir pasiekama.



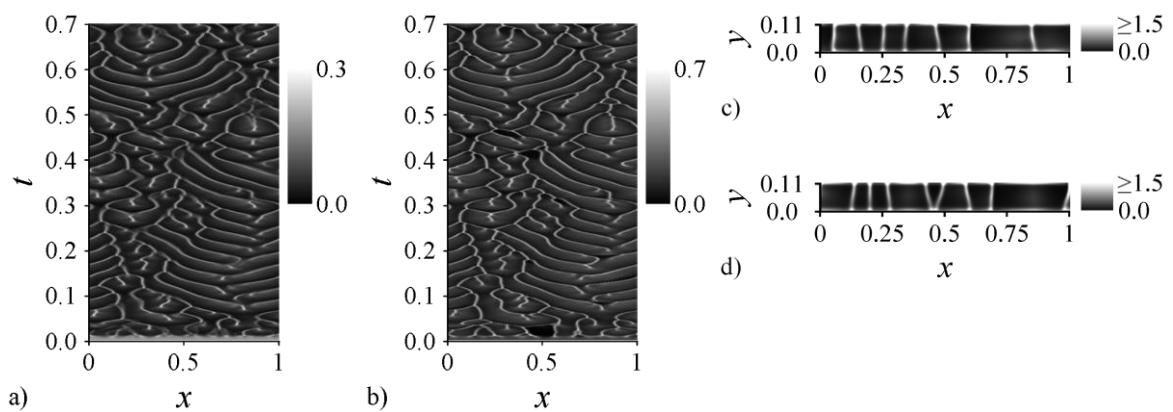
6 pav. Modeliuojant su deguonimi kai  $h = 0,3$  bakterijų koncentracijos: a)  $u_{1D}$  kai  $h_0 = h$ ; b)  $u_{1D}$  kai  $h_0 = 0,1h$ ; c) laiko momentu  $t = 0,2$ ; d) laiko momentu  $t = 0,4$ .



7 pav. Modeliuojant su deguonimi kai  $h = 0,16$  bakterijų koncentracijos: a)  $u_{ID}$  kai  $h_0 = h$ ; b)  $u_{ID}$  kai  $h_0 = 0,1h$ ; c) laiko momentu  $t = 0,2$ ; d) laiko momentu  $t = 0,4$ .



8 pav. Modeliuojant su deguonimi kai  $h = 0,15$  bakterijų koncentracijos: a)  $u_{ID}$  kai  $h_0 = h$ ; b)  $u_{ID}$  kai  $h_0 = 0,1h$ ; c) laiko momentu  $t = 0,2$ ; d) laiko momentu  $t = 0,4$ .



9 pav. Modeliuojant su deguonimi kai  $h = 0,11$  bakterijų koncentracijos: a)  $u_{ID}$  kai  $h_0 = h$ ; b)  $u_{ID}$  kai  $h_0 = 0,1h$ ; c) laiko momentu  $t = 0,2$ ; d) laiko momentu  $t = 0,4$ .

### Išvados

Modeliuojant lux-genais žymėtų švytinčių *E. coli* bakterijų kolonijos formuojamas struktūras cilindro formos mėgintuvėlio viršutiniame krašte bei ant cilindro šoninio paviršiaus, galima taikyti Keller-Segel difuzijos-advekcijos-reakcijos lygčių sistemą, tačiau

verta įtraukti į modeliavimą ir lygtį, aprašančią deguonies koncentracijos kaitą. Į modeliavimą įtraukus deguonį, galime gauti struktūras, panašesnes į realiuose eksperimentuose stebimas (palyginimui 1 pav. su 6 pav.).

Ištyrus kaip kinta bakterijų formuojamos struktūros keičiant cilindro gylį, paaiškėjo, kad kai į modeliavimą neįtraukiamas deguonis, tai gylis neturi labai didelės įtakos bakterijų formuojamiems raštams. Tuo tarpu, kai deguonis įtraukiamas į modeliavimą, tai nuo tam tikro gylio jį didinant struktūra iš esmės nekinta – gaunama bambuko tipo struktūra, 6c ir 6d pav. Tačiau gylį mažinant, bakterijų formuojamos struktūros pradeda kisti (7-9 pav.).

Verta pastebėti, kad gylį, kuriame formuojasi apatinė bambuko tipo struktūros dalis, nulemia deguonies difuzijos koeficientas  $D_0$  ir deguonies suvartojimo greitis  $\lambda$ , tad kituose darbuose vertėtų paanalizuoti šių parametrų įtaką.

### Literatūra

- Baronas, R.; Šimkus, R. (2011). Modeling the bacterial self-organization in a circular container along the contact line as detected by bioluminescence imaging. *Nonlinear Analysis: Modeling and Control*, vol 16, no 3, p. 270-282.
- Brenner, M. P. ; Levitov, L. S.; Bufrene, E. O. (1998). Physical mechanisms for chemotactic pattern formation by bacteria. *Biophysical Journal*, vol. 74, no. 4, p. 1677-1693.
- Brenner, M. P. (2010). Chemotactic patterns without chemotaxis. *PNAS*, vol. 107, no. 26, p. 11653-11654.
- Eisenbach, M. (2004). *Chemotaxis*. London: Imperial College Press. 499 p. ISBN 978-1860944130.
- Gu, R. J. M. M. B.; Kim, B. C. (2004). Whole-cell-based biosensors for environmental biomonitoring and application. *Advances in Biochemical Engineering/Biotechnology*, vol. 87, p. 269-305.
- Hillen T.; Painter K. J. (2009). A user's guide to PDE models for chemotaxis. *Journal of Mathematical Biology*, vol. 58, no. 1-2, p. 183-217.
- Keller, E. F.; Segel L. A. (1971). Model for Chemotaxis. *Journal of Theoretical Biology*, 1971, vol. 30, no. 2, p. 225-234.
- Murray, J. D. (2003). *Mathematical Biology: II. Spatial Models and Biomedical Applications*, 3rd ed. Berlin: Springer. 811 p., ISBN 978-0387952284.
- Samarskii, A. A. (2001). *The Theory of Difference Schemes*, New York-Basel: Marcel Dekker. 789 p. ISBN 978-0824704681.
- Sasaki, S.; Mori, Y.; Ogawa, M.; Funatsuka, S. (2010). Spatio-Temporal Control of Bacterial-Suspension Luminescence Using a PDMS Cell. *Journal of Chemical Engineering of Japan*, vol. 43, no. 11, p. 960-965.
- Šimkus, R.; Baronas, R. (2011). Metabolic self-organization of bioluminescent *Escherichia coli*. *Luminescence*, vol. 26, no. 6, p. 716-721.
- Šimkus, R.; Baronas, R., Ledas, Ž. (2013). A multi-cellular network of metabolically active *E. coli* as a weak gel of living Janus particles. *Soft Matter*, vol. 9, no. 17, p. 4489-4500, DOI: 10.1039/c3sm27786k. ISSN 1744-683X.
- Šimkus, R.; Kirejev, V., Meškienė R.; Meškys, R. (2009). Torus generated by *Escherichia coli*. *Experiments in Fluids*, vol. 46, no. 2, p. 365-369.



**Ž. Ledas** is a PhD student at Vilnius University Faculty of Mathematics and Informatics. He graduated Vilnius University in 2010. His research interests are focused on computational modeling of bacterial behavior.

**R. Baronas** was born in 1959 in Kybartai, Lithuania. He enrolled at the Vilnius University, where he studied applied mathematics and received his Ph.D. degree. Now he is a professor and serves as the head of the department of Software Engineering at Vilnius University. His research interests are in database systems, software engineering, and computational modeling of nonlinear phenomena in life sciences.

**R. Šimkus** received his MS degree in Physics (optics and spectroscopy) in 1976 from Vilnius University and his PhD in Physics in 1986 from St Petersburg (former Leningrad) university. He is a senior research scientist at Vilnius University, Institute of biochemistry, since 1990. Currently, his research is focused on understanding bacterial behavior, and incorporates principles of physics, mathematics, chemistry, engineering and microbiology.

## COMPUTATIONAL MODELING OF LUMINOUS BACTERIA SELF-ORGANIZATION ON THE CYLINDRICAL CONTAINER SIDE SURFACE

**Žilvinas Ledas, Romas Baronas, Remigijus Šimkus**

### Summary

This paper deals with the computational modeling of the pattern formation of luminous bacteria. Two bacterial self-organization models are investigated – Keller-Segel diffusion-advection-reaction type equations and the model with additional oxygen equation. These models were applied for the modeling of fluid cultures of lux-gene engineered *Escherichia coli* in the cylindrical container as seen from the side in 2 dimensions and in quasi-1 dimension along the top three phase contact line. The spatiotemporal patterns were simulated by using the finite difference technique. By applying these models the influence of the cylindrical container depth on the pattern formation was investigated.

**Key words:** reaction-diffusion, bacterial self-organization, modeling.