



SIMBIOS

Modelovanie a simulácie biologických systémov

AUTORI:

Projekt 3: Bc. Andrej Paulen, Bc. Lukáš Löffler,
Bc. Jozef Staško, Bc. Kristína Jurenková
Projekt 1: Bc. Martin Mazúch, Bc. Karolína Petková

POPIS PROJEKTU

Projekt SIMBIOS sa zaoberá simuláciou a modelovaním tokov buniek v mikroskopických kanálikoch na základe biologických experimentov. Pomocou počítačového modelovania je možné navrhnuť a vytvoriť dizajn mikokanálikov a následne s ním vykonávať rozličné experimenty, ktoré môžeme porovnať a prispôsobiť na podmienky reálneho pokusu.

Na našej fakulte bol na to vyvinutý počítačový model, ktorý bol následne implementovaný do otvoreného softvéru ESPResSo, s ktorým sa študenti v rámci tohto projektu oboznámia. Následne analyzujú, nasimulujú a vyhodnotia biologické experimenty. Pri práci je využívaný programovací jazyk Python.

NAŠE CIELE

Cieľom našej práce bolo rozšírenie existujúceho ESPResSo modulu PYOIF, kde sme predstavili nové možnosti práce s viacerými bunkami, vrátane kalibrácie interakcií, ukladania stavov, znovuvyužitia zhukov v ďalších simuláciách a zavedenie nástroja na imitáciu vnútorného prostredia bunky pomocou vnútrobunkových silových častíc. Pri práci so zhukmi buniek sme riešili problém vzájomných interakcií, pri ktorom sme využili viaceré potenciály adhézných a odpudivých síl. Naopak pri práci s vnútornými časticami sme riešili problém ich umiestnenia, ukladania, načítania a ladenia interkacií s časticami iných telies simulácie.

- ANALÝZA EXPERIMENTOV
- ZHLUKOVANIE BUNIEK
- KALIBRÁCIA PARAMETROV INTERAKCIÍ A ADHÉZNYCH SÍL
- VNÚTORNÉ ČASTICE

ZHLUKOVANIE BUNIEK

Pomocou nami vytvorenej triedy sme dosiahli zjednodušenie a zautomatizovanie vytvárania zhukov buniek. Počas návrhu a vývoja tejto triedy bolo nutné analyzovať a správne nastaviť jednotlivé parametre pôsobiacich adhézných síl tak, aby výsledný zhuk bol stabilný a autentický. Ich cieľom bolo zaručiť súdržnosť buniek v zhuku. Pri implementácii sme pracovali s dvoma rôznymi potenciálmi - príťažlivý Morse potenciál, ktorý bolo nutné kombinovať s odpudivým - SoftSphere, vďaka ktorému sa bunky v zhuku neprekrývali, a Lennard-Jones (príťažlivo/odpudivý).

- DVA VYTVORENÉ SPÔSOBY TVORBY ZHLUKOV
- VYTVORENÝ KATALÓG RÔZNYCH TYPOV ZHLUKOV

Implementovali sme dva spôsoby vytvárania zhukov. Pre guľovité zhuky využívame pritláčanie pomocou externých síl smerom do ťažiska a pre retiazkové zhuky (priame, nepravidelné alebo s bunkami rôznych veľkostí) je zhuk vytváraný iteračne postupným pritláčaním po dvojiciach. Uložené tvary tvoria katalóg zhukov, ktoré majú odlišné vlastnosti, a ktoré môžu byť využité ako podklad v ďalších simuláciách.

VNÚTORNÉ ČASTICE

- KALIBRÁCIA VLASTNOSTÍ HEMOPARTICLOV
- NÁVRH A IMPLEMENTÁCIA VKLADANIA ČASTÍC
- METÓDY NA ULOŽENIE A ZNOVUNAČÍTANIE

Ďalším výsledkom našej práce je integrácia vkladania hemoparticlov, ktoré imitujú vlastnosti vnútra krvných buniek. Zamerali sme sa práve na kalibráciu ich vlastností a správanie sa v bunkách. Navrhli sme a implementovali tri typy inicializácie hemoparticlov - náhodne do užívateľom definovaného kvádra, náhodne do najväčšej novej vpísanej gule a deterministicky na určené pozície. Častice sú vhodnou metódou vkladane do stredu bunky a následne sú pôsobením opudivých síl rozptýlené po celom jej objeme.

