

Алгоритмы реализации индивидуальной клеточной динамики в плотно упакованных средах

Савинков Р.^{1, 2}

¹ Первый МГМУ имени И.М. Сеченова Минздрава России (Сеченовский Университет), Москва, Россия

² Институт вычислительной математики имени Г.И. Марчука Российской академии наук (ИВМ РАН), Москва, Россия
r.savinkov@inm.ras.ru

Ключевые слова: иммунология; клетка; моделирование; стохастические процессы

Мотивация и цель: Множество иммунных процессов, происходящих в организме, связано с взаимодействием малого количества агентов (вирусных частиц, клеток иммунной системы). В частности, на начальной стадии процесс заражения вирусом ВИЧ-1 в лимфатических узлах человека задействует считанные единицы или десятки клеток в условиях плотно упакованной различными объектами (клетками, коллагеновыми структурами) Т-клеточной зоны. В связи с потребностью исследования случайных процессов в таких расчётных областях, а также схожих ситуациях, были разработаны два подхода к моделированию клеток и их динамических свойств в виде структур вокселей, связанных между собой и алгоритмов, управляющих изменением этих структур.

Методы и алгоритмы: Для реализации поставленной задачи были применены два подхода:

- 1) метод паттернов: деформации одобрялись или отвергались на основании предвычисленного списка шаблонов, контролирующих выполнение двух условий: клетка вследствие деформации не может потерять структурную целостность, а также не может поглотить иные объекты внутри моделируемой области.
- 2) метод поиска на графе: после оценки наиболее предпочтительной точки деформации тела клетки, все дальнейшие решения по совершаемым с вокселями манипуляциям принимались на основании дальности рассматриваемых элементов от выбранной в качестве предпочтительной точки.

Результаты: В результате проделанной работы было показано, что предложенные алгоритмы позволяют частично воспроизвести статистические свойства индивидуальной клеточной динамики наблюдаемых *in vitro* клеток иммунной системы и позволяют выполнять моделирование поведения порядка 100000 клеток в плотно упакованной (более 80 %) среде.

Выводы: Разработанные алгоритмы могут быть применены для моделирования движения отдельных клеток в плотно упакованных средах в различных задачах математического моделирования, а именно, в ситуациях, когда количество значимых для процесса агентов существенно меньше общего числа объектов, присутствующих в расчётной области. Оба алгоритма обладают как преимуществами, так и недостатками, так что выбор в пользу одного из них (или выбор иного подхода к решению) существенно зависит от цели исследования.

Финансирование: Исследование поддержано грантом РНФ 23-11-00116.

Algorithms for implementing individual cell dynamics in dense packed environments

Savinkov R.^{1, 2}

¹ Sechenov First Moscow State Medical University, Ministry of Health of the Russian Federation (Sechenov University), Moscow, Russia

² Marchuk Institute of Numerical Mathematics, Russian Academy of Sciences (INM RAS), Moscow, Russia
r.savinkov@inm.ras.ru

Key words: immunology; cell; modeling; stochastic processes

Motivation and Aim: Many immune processes occurring in the body involve interactions of a small number of agents (viral particles, immune cells). For instance, in the initial stage of HIV-1 virus infection process in human lymph nodes, only a few or tens of cells are involved in densely packed conditions with various objects (cells, collagen structures) in the T-cell zone. To study random processes in such computational domains and similar situations, two approaches have been developed for modeling cells and their dynamic properties as voxel structures interconnected and algorithms governing the changes in these structures.

Methods and Algorithms: Two approaches were applied to achieve the set goal:

- 1) Pattern method: deformations were accepted or rejected based on a precomputed list of patterns controlling the fulfillment of two conditions: the cell cannot lose structural integrity due to deformation and cannot engulf other objects within the modeled area.
- 2) Graph search method: after evaluating the most preferred point of cell body deformation, further decisions on voxel manipulations were made based on the distance of considered elements from the selected preferred point.

Results: The study showed that the proposed algorithms partially reproduce the statistical properties of individual cell dynamics observed *in vitro* in immune system cells and enable modeling the behavior of around 100,000 cells in a densely packed (over 80 %) environment.

Conclusion: The developed algorithms can be applied to model the movement of individual cells in densely packed environments in various mathematical modeling tasks, specifically in situations where the number of agents significant to the process is substantially less than the total number of objects present in the computational domain. Both algorithms have their own advantages and disadvantages, so the choice between them (or choosing a different approach to solving the problem) significantly depends on the research goal.

Funding: The research was supported by the Russian Science Foundation grant 23-11-00116.