

Таблиця 1. Матеріали та умови моделювання

Опис	Значення	Коментар
Particle density $\rho_p$	750 kg/m <sup>3</sup>	Насіння сої
Gas density	1.225 kg/m <sup>3</sup>	Повітря
Mean Particle diameter	0.05 м	
Restitution coefficient	0.9	Довідкова
Initial solid packing	0.6	Довідкова
Bed width	0.4 м	Константа
Bed height	0.8 м	Константа
Static bed height	0.2 м	Константа
Grid interval spacing	0.005 м	Визначений
Inlet boundary condition	Velocity	Початкова умова
Outlet boundary condition	Pressure	Початкова умова
Time-step size	0.001 s	Початкова умова
Maximum number of iterations	2000	Початкова умова

Отримана модель служить відправною точкою в розробці більш досконалої моделі, що буде враховувати пульсацію повітряного потоку та вібрацію повітрепроникної деки.

### Список використаних джерел

1. ANSYS FLUENT 12.0 Theory Guide - 16.5.4 Interphase Exchange Coefficients. *ENEAGRID PROJECTS WEB PAGES*. URL: <https://www.afs.enea.it/project/neptunius/docs/fluent/html/th/node323.htm#sec-fl-sol-ex> (дата звернення: 06.05.2024).

**УДК: 519.6, 539.2, 577**

## ДИFUZІЙНИЙ МЕХАНІЗМ УТВОРЕННЯ ПАТЕРНІВ

**Стороженко І.П. д.ф.-м.н, професор**

*Державний біотехнологічний університет*

*Аналізується реакційна – дифузійна модель утворення візерунків на поверхні з первісного хаотичного розподілення концентрації речовин. Приведено приклади на основі розв'язання системи диференціальних рівнянь Грея-Скотта.*

Утворенням стійких станів нерівномірного розподілення концентрації речовини в живих і неживих об'єктах має загальний механізм. Задача по взаємодію електромагнітного випромінювання з рухливими носіями заряду, що виникають в напівпровіднику завдяки фотоефекту [1], приводить до аналізу дифузійних хвиль заряду. Тут існує певна аналогія з механізмом утворення

візерунків у живих об'єктах. Мета дослідження – аналіз дифузійного механізму утворення стаціонарних візерунків на поверхнях.

Інформація, на основі якої будується складний багатоклітинний організм, міститься в геномі. Проте сучасна генетика та молекулярна біологія свідчать, що безпосередньої інформації про форму та структуру організму геном не містить. Ця інформація генерується за певними законами в процесі розвитку організму. Чому і як це відбувається? Загальний механізм неоднорідного поширення речовини пояснює механізм Тюрінга.

Патерн Тюрінга – це концепція, введена англійським математиком Аланом Тюрінгом у статті 1952 року під назвою «Хімічні основи морфогенезу» [2]. Вона описує, як виникають у природі візерунки з однорідного стану (рис. 1).



Рис. 1. Візерунок діоксиду кремнію на основі полідиметилглутараміду (200x) [3] (а) і природного ландшафту (б).

Тюрінг запропонував модель, у якій дві однорідно розподілені речовини ( $P$  і  $S$ ) взаємодіють, створюючи стабільні розподілення під час морфогенезу. Речовина  $P$  сприяє утворенню більшої кількості речовини  $P$ , а також речовини  $S$ . Однак речовина  $S$  пригнічує утворення речовини  $P$ . Якщо  $S$  дифундує швидше, ніж  $P$ , то будуть створюватися різкі хвилі концентрації.

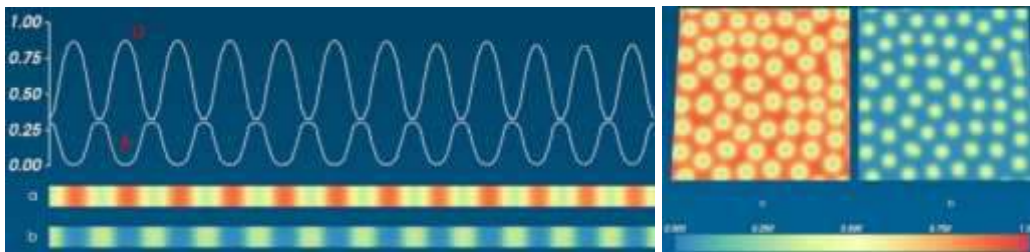
Розмальовка шкіри тварини визначається розподілами хімічних речовин, які закладаються на стадії ембріогенезу протягом перших тижнів розвитку зародка. Мюрреєм зроблено величезний аналіз моделей, що побудовані за подібним принципом [4]. Цікаво, що подібні механізми утворення неоднорідних станів виникають також в організмах, що розвиваються без класичної потреби дифузійних морфогенів. Моделі таких клітинних агрегатів спочатку були запропоновані в теоретичній моделі, сформульованій Джорджем Остером, який постулював, що зміни в клітинній рухливості та жорсткості можуть привести до різних самовиникаючих моделей з однорідного поля клітин [5]. Цей спосіб формування шаблонів може діяти в тандемі з класичними реакційно-дифузійними системами або незалежно. Моделі Тюрінга зустрічаються також в інших природних системах. Прикладом є візерунки на піску, що утворює вітер, хвилі речовини в кристалах (рис. 1).

Розглянемо на прикладі реакції Грея – Скота [6] механізм Тюрінга утворення патернів та нерівномірного розподілення речовини з початкового хаосу. У моделі Грея – Скотта моделюється хімічна реакція між двома речовинами  $A$  і  $B$ , обидві з яких дифундують з часом [7]. Під час реакції  $A$

витрачається, а  $B$  утворюється. Густини речовин  $a = dA/dV$  і  $b = dB/dV$  представлені системою рівнянь:

$$\begin{aligned}\frac{\partial a}{\partial t} &= -ab^2 + F(1 - a) + D_a \Delta a; \\ \frac{\partial b}{\partial t} &= ab^2 - (F + k)b + D_b \Delta b.\end{aligned}$$

Для побудови моделей використана реалізація різних моделей тюрінського типу [8]. В нашій симуляції  $D_a = 0,082, D_b = 0,041$ . В більшості з можливих комбінацій значень  $k$  і  $F$  призводять до досить нудних результатів – однорідного розподілення концентрації. На рис. 2 показано розподіл концентрації речовини  $a$  і  $b$  в 1d і 2d випадках. Можна бачити, що з первісного хаотичного розподілення концентрації речовин утворився з часом упорядкований стаціонарний стан. Концентрації речовин змінюються з координатою за гармонічним законом в противофазі.



а б

Рис. 2. Симуляція реакції Грея – Скотта 1d при  $F = 0,06, k = 0,035$  (а) і 2d при  $F = 0,064, k = 0,035$  (б)

Якщо задати поверхню, яка відповідає живим істотам, то можна отримати при симуляції розмальовки моделей біологічних об'єктів [8]. Прикладом більш реалістичної моделі утворення візерунків є модель візерунків зебри, запропонованої Meinhardt Hans у 1982 Models of Biological Pattern Formation та впровадженої Greg Turk у 1991 [9]. Модель складається вже з 5 рівнянь. Результати симуляції можна бачити на рис. 3, на якому ліворіч зображена – початкова розмальовка зебри, праворіч – після утворення стаціонарного стану розподілення речовин.



Рис. 3. Симуляція утворення візерунків на поверхні зебри [9].

Таким чином, механізм Тюрінга працює не тільки з окремими істотами. Він може бути застосований для симуляції утворення ландшафтів. Наприклад, при пожежах, видової конкуренції. Передбачається, що подібний механізм можна задіяти для нерівномірного розподілення носіїв заряду у напівпровіднику для утворення плазмон-поляритонних приладів [10].

### Список використаних джерел

1. Alexey Vertiy, Sergey Mizrakhy, Alexander Uzlenkov, Peter Ersland, Sam Mil'shtein, "Surface wave technique at millimeter waveband for semiconductor testing by photoexcitation," 2019 IEEE 2nd Ukraine Conference on Electrical and Computer Engineering (UKRCON), pp. 218–221, 2019.
2. A.M.Turing, "The chemical basic of morphogenesis," Philosophical Transactions of the Royal Society of London B, vol. 237, p. 37 – 72, 1952.
3. URL:<https://www.nikonsmallworld.com/galleries/2013-photomicrography-competition/silicon-dioxide-on-polydimethylglutarimide-based-resist>
4. J. D. Murray, "Mathematical Biology II: Spatial Models and Biomedical Applications," Springer, 1993
5. G. Oster, A. Perelson, A. Katchalsky, "Network thermodynamics," Nature, vol. 234, pp. 393–399, 1971
6. P. Gray, S.K. Scott, "Autocatalytic reactions in the isothermal, continuous stirred tank reactor," Chemical Engineering Science, vol. 38(1), pp. 29 – 43, 1982.
7. Вероніка Капустинська, Ігор Стороженко. Механізм утворення стаціонарних станів. Морфогенез. Труды навчальної колаборації «MetaAngstrom'24». Ліцей «Ангстрем» 15 квітня 2024, (5 с.) URL: [angstromua.com/symetrychna-pyroda](http://angstromua.com/symetrychna-pyroda)
8. URL: <https://github.com/GollyGang/ready>
9. URL:[https://faculty.cc.gatech.edu/~turk/reaction\\_diffusion/reaction\\_diffusion.htm](https://faculty.cc.gatech.edu/~turk/reaction_diffusion/reaction_diffusion.htm)
- 10 Dongdong Zhang, Yushan Zeng, Yafeng Bai, Zhongpeng Li, Ye Tian, Ruxin Li, "Coherent Surface Plasmon Polariton Amplification via Free Electron Pumping," Nature, vol. 611, pp. 55–60, 2022.