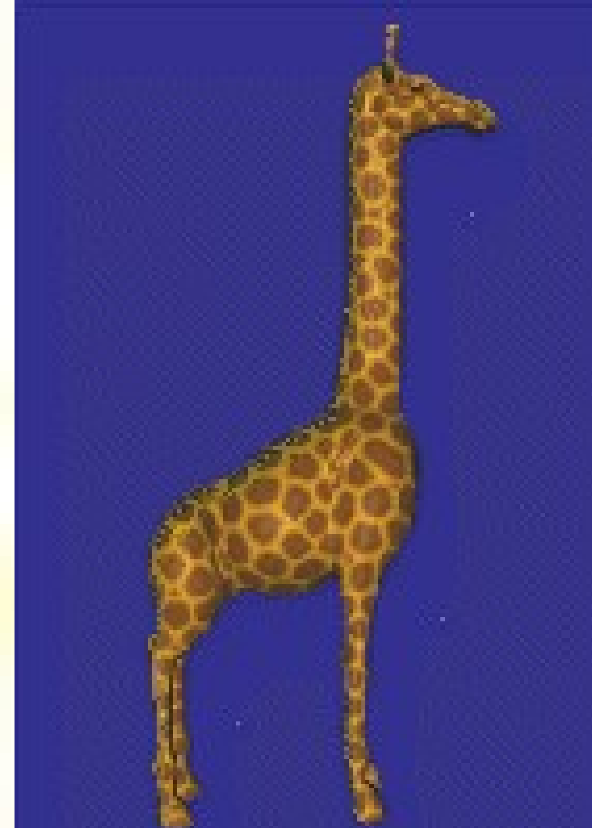
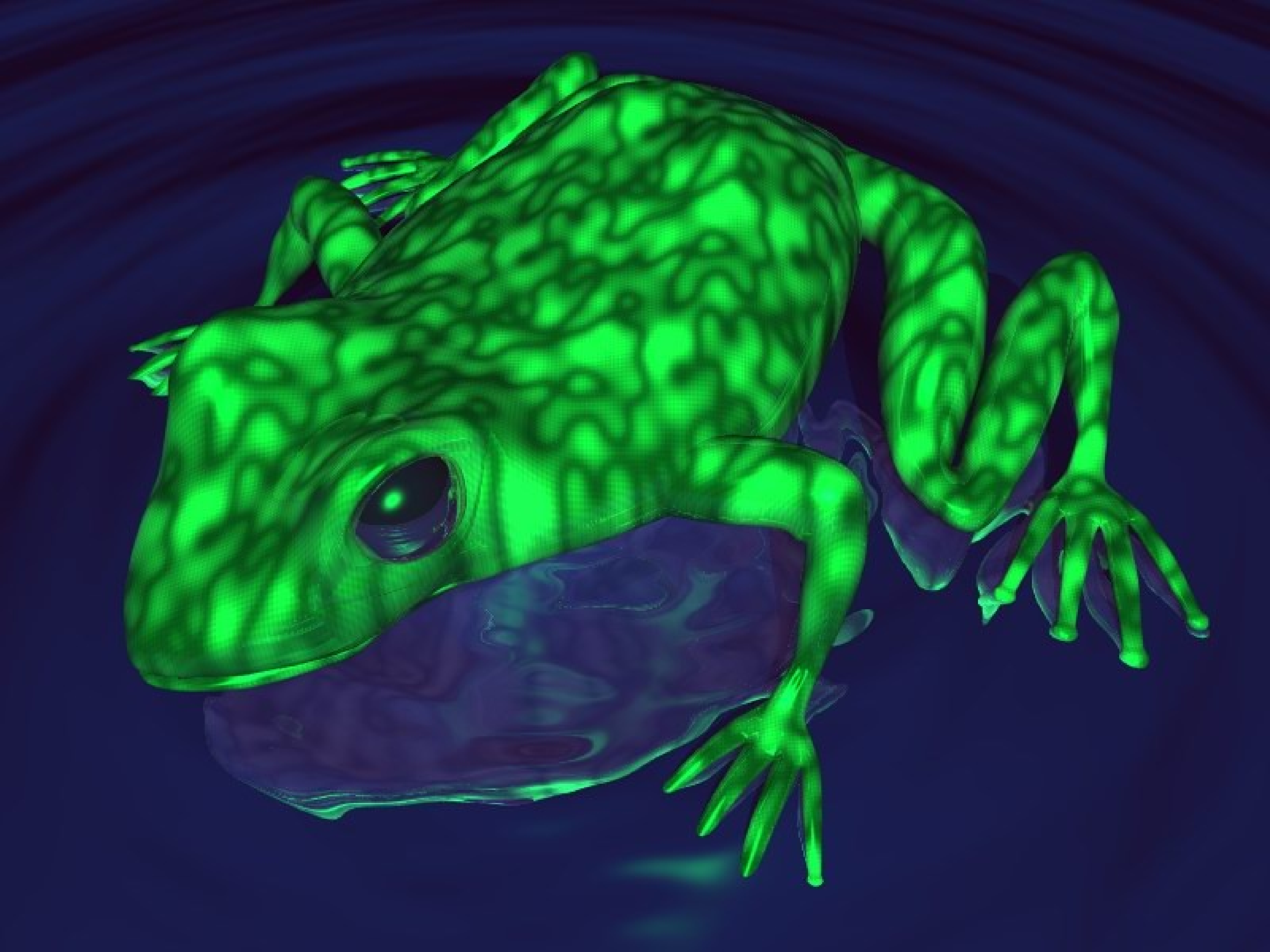
Reakčná difúzia, Difúzne ohraničené zhlukovanie

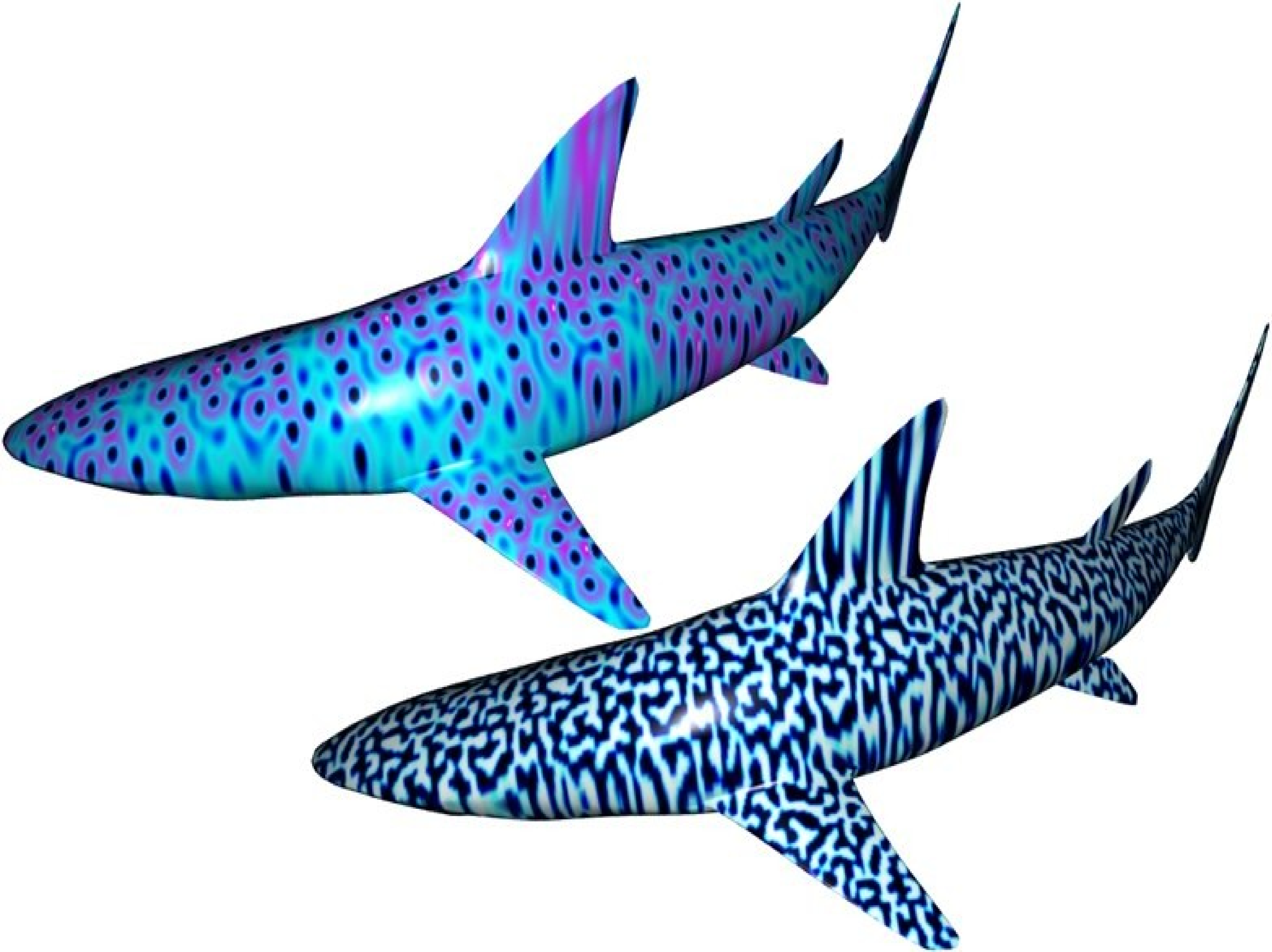
Aké vzory vytvára?

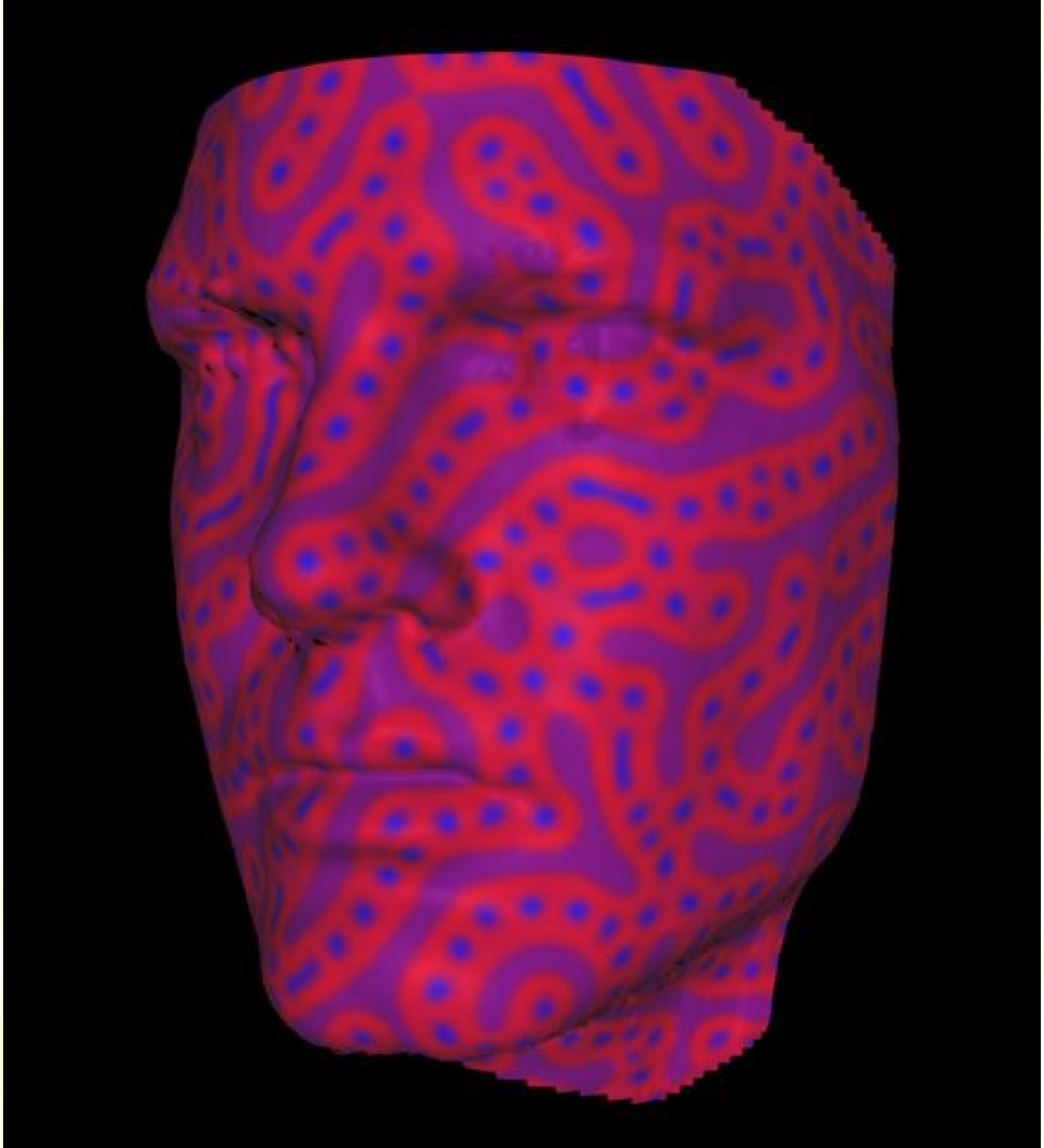
- Pozrite sa na pozadie tohto slajdu :)

Aplikácie RD na textúrach modelov cicavcov










(c) 1994 University of Manchester, Advanced Interfaces Group

História

- 1952: Alan Turing
  - model chemickej morfogenézy
- 1980's: využitie v chémii, biológii
  - embryogenéza
  - srsť/pokožka cicavcov
- 1990: uznanie Turingových modelov
- Sigraph 1991: Witkin, Kass, Turk
  Využitie RD v počítačovej grafike

Reakčná difúzia

- Predstavujú matematický model opisujúci zmenu koncentrácie jedného alebo viacerých chemických substancií v nejakom nehomogénnom prostredí.
- Lokálne chemické reakcie spôsobujú zmenu jednej substancie na druhú a difúzia spôsobuje šírenie týchto látok v danom prostredí
- Využívajú sa nielen v chémii ale aj v biológii, geológii, fyzike a dokonca aj v ekológii

Reakčná difúzia

- Z matematického pohľadu je model vytvorený pomocou semi-lineárnych parabolických parciálnych diferenciálnych rovníc
- Zvyčajne sa používa 2 – 5 morfogénov v jednom nehomogénnom prostredí
- Štandardne je prostredie/model 1D alebo 2D
- Je opísaná spojitým modelom – rovnicou
- Numericky sa rieši sa v diskrétnom priestore a čase

Reakčná difúzia

- Ak reakčná zložka chýba, ide o čisto difúzny proces, známy ako Fickov druhý zákon difúzie
- Voľba $R(u(x,t)) = u(x,t)(1-u(x,t))$ predstavuje Fischerovu rovnicu opisujúcu šírenie biologickej populácie
- Voľba $R(u(x,t)) = u(x,t)(1-u^2(x,t))$ opisuje vytváranie Bénardovych vzorov (buniek), ktoré je spôsobené prúdením zdola ohriatej kvapaliny (Zeldovich et al. pre β=1)

Jednozložková rovnica RD v 1D

- Hľadá sa funkcia $u(x)$ pre koncentráciu morfogénu v hodnote x
- Základná rovnica reakcie-difúzie v 1D:

$$\partial_t u(x,t) = a\,\partial_x^2 u(x,t) + R(u(x,t))$$

$\partial_t u(x,t)$ - derivácia v čase *t*

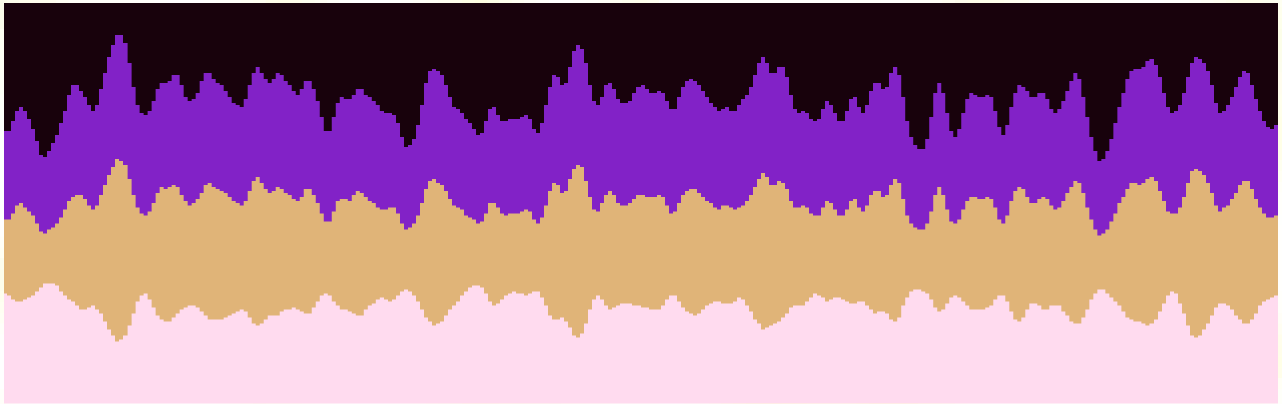
$a\,\partial_x^2 u(x,t)$ - difúzna zložka

$R(u(x,t))$ - reakčná zložka

- Fisher $R(u(x, t)) = u(x, t) - u^2(x, t)$
- Zeldovich $R(u(x, t)) = u(x, t)(1 - u(x, t))(u(x, t) - \beta)$

Vizualizácia príkladu v 1D

- Použité sú 4 morfogény
- Znázornená je relatívna koncentrácia
- Vyššia koncentrácia morfogénu je zobrazená väčšou hodnotou



Jednozložková rovnica v 2D

- Hľadá sa funkcia $u(x, y, t)$ pre koncentráciu morfogénu v bode (x, y) a v čase t
- Základná rovnica reakcie-difúzie:

$$\partial_t u(x,y,t) = a^2 \nabla^2 u(x,y,t) + R(u(x,y,t))$$

$\partial_t u(x,y,t)$ - derivácia v čase

$a^2 \nabla^2 u(x,y,t)$ - difúzna zložka

$R(u(x,y,t))$ - reakčná zložka

$$\nabla^2 u(x,y,t) = \frac{\partial^2 u(x,y,t)}{\partial_x^2} + \frac{\partial^2 u(x,y,t)}{\partial_y^2}$$

Dvojzložková rovnica v 1D

$$\begin{pmatrix}\partial_t u\\ \partial_t v\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}D_a & 0\\ 0 & D_b\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\partial_{xx} u\\ \partial_{xx} v\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}F(u,v)\\ G(u,v)\end{pmatrix}\quad \begin{matrix}u=u_a(x,t)\\ v=u_b(x,t)\end{matrix}$$

kde u a v predstavujú funkcie koncentrácií dvoch morfogénov a,b v prostredí

- Rovnica s produkciou a degradáciou (rozpadom):

$$\underbrace{\begin{pmatrix}\partial_t u\\ \partial_t v\end{pmatrix}}_{\text{Pomer zmeny koncentrácie}}=\underbrace{\begin{pmatrix}D_a & 0\\ 0 & D_b\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\partial_{xx} u\\ \partial_{xx} v\end{pmatrix}}_{\text{Difúzia}}+\underbrace{\underbrace{\begin{pmatrix}F(u,v)\\ G(u,v)\end{pmatrix}}_{\text{Produkcia}}-\underbrace{\begin{pmatrix}d_a u\\ d_b v\end{pmatrix}}_{\text{Rozpad}}}_{\text{Reakcia}}$$

Všeobecná rovnica

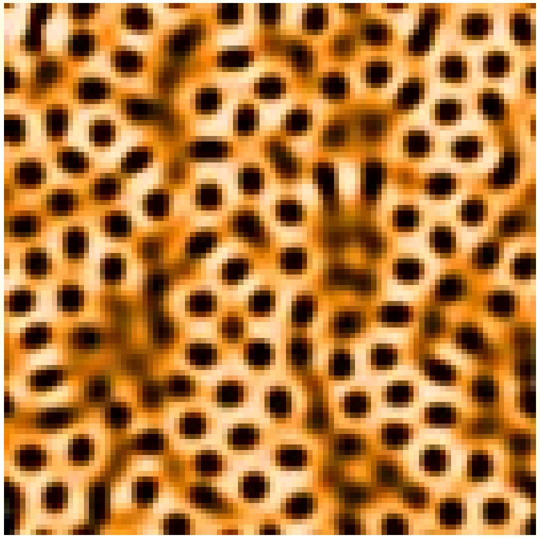
$$\partial_t \boldsymbol{u} = \underline{\boldsymbol{D}} \nabla^2 \boldsymbol{u} + \boldsymbol{R}(\boldsymbol{u}) + \boldsymbol{d}(\boldsymbol{u}) \quad \boldsymbol{u} = \boldsymbol{u}(x, t): \ \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$$

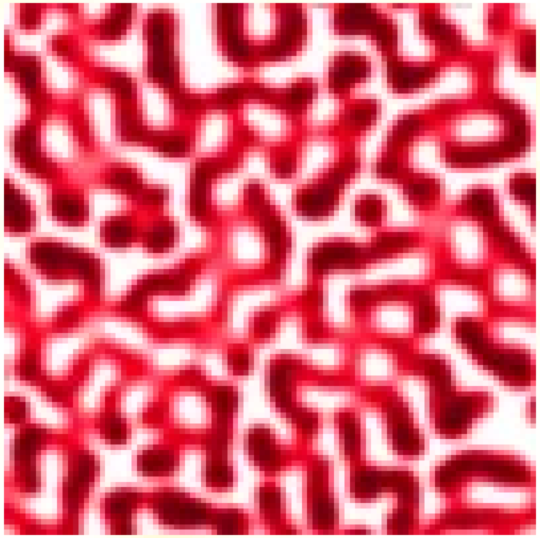
$$\underline{\boldsymbol{D}} = \begin{pmatrix} D_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & D_m \end{pmatrix}$$

- Reakčná zložka $\boldsymbol{R}(\boldsymbol{u})$:
  - Udáva ako morfogény reagujú s ostatnými
  - Určuje lokálnu koncentráciu morfogénov v bode $\boldsymbol{x}$
- Difúzna zložka:
  - $\underline{\boldsymbol{D}}$ =koeficienty akcelerácie difúzie (rýchlosť difúzie)
  - ∇^2=miera koncentrácie morfogénu vzhľadom k okoliu
- Zložka $\boldsymbol{d}(\boldsymbol{u})$ pre rozpad látky sa zvyčajne nepoužíva

Základná podmienka vytvorenia vzoru

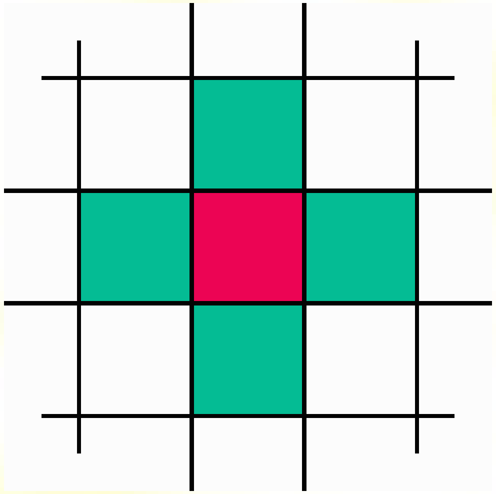
- Aspoň dva morfogény musia difundovať s rôznym pomerom, t.j. jeden sa šíri do susedných buniek rýchlejšie ako druhý ($D_a \neq D_b$)
- Začiatočná koncentráciu morfogénu β nie je rovnaká vo všetkých bunkách (náhodná, atď.)
- Rôzne vstupné koncentrácie morfogénu β vedú k rôznym vzorom:





Riešenie systému = diskretizácia

- Vstupné podmienky
  - Rozloženie/hustota morfogénov až na jeden je rovnomerná
  - Náhodne rozložená koncentrácia morfogénu β
- Diskretizácia v priestore
  - 2D mriežka (resp. torus)
  - 4 (8) - susednosť



- Diskretizácia v čase
  - Počiatočný stav
  - Celočíselný krok v čase
  - Kedy vývoj ukončiť?

Diskretizácia jednozložkovej RD v 1D

$$\frac{u_i^{j+1}-u_i^j}{\Delta t}=a\frac{u_{i+1}^j-2u_i^j+u_{i-1}^j}{\Delta x^2}+R\left(u_i^j\right)$$

$$\Delta t=1,\quad \Delta x=1$$

- Laplacian je $u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1} / 1$
- Okrajová podmienka $u(x, 0) = f(x)$

Diskrétny príklad 1D modelu

- Turingov model v 1D:

  2 morfogény a substrát $(u,v) + \beta$

  $$u_i = u_i + s(16 - u_i v_i) \qquad + D_a(u_{i+1} + u_{i-1} - 2u_i)$$

  $$v_i = v_i + s(u_i v_i - v_i - \beta_i) + D_b(v_{i+1} + v_{i-1} - 2v_i)$$

- D_a, D_b sú difúzne koeficienty
- Príklad vstupných parametrov:

  $u = 4$, $v = 4$, $s = 0.03$, $D_a = 0.25$, $D_b = 0.06$, $\beta = 12 \pm 0.1$

Diskrétny 2D model

- Laplacian $\dfrac{u_{i-1,j}+u_{i,j-1}+u_{i+1,j}+u_{i,j+1}-4u_{i,j}}{h^2}$

  a jeho maticové vyjadrenie $\mathbf{L}=\dfrac{1}{h^2}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & -4 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$

- $u_{i,j} = \mathbf{M}\, u_{i,j} + R(u_{i,j})$

  kde matica difúzie je: $\mathbf{M} = a^2\mathbf{L}$

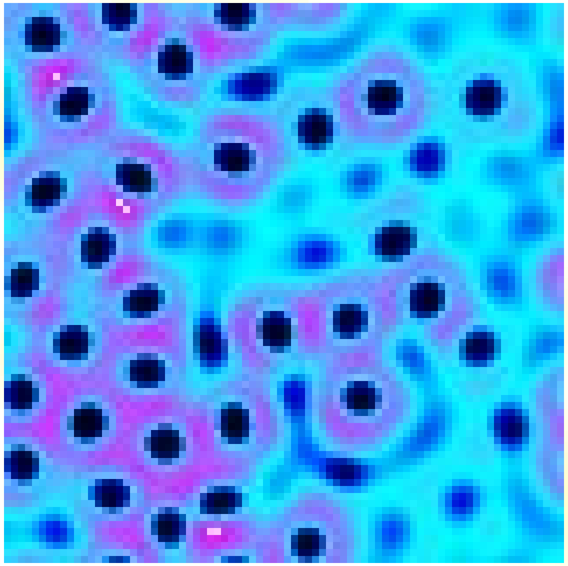
Turingov model v 2D

$$u_{i,j}=u_{i,j}+s(16-u_{i,j}v_{i,j}) \quad +D_{\mathrm{a}}(u_{i-1,j}+u_{i,j-1}+u_{i+1,j}+u_{i,j+1}-4u_{i,j})$$

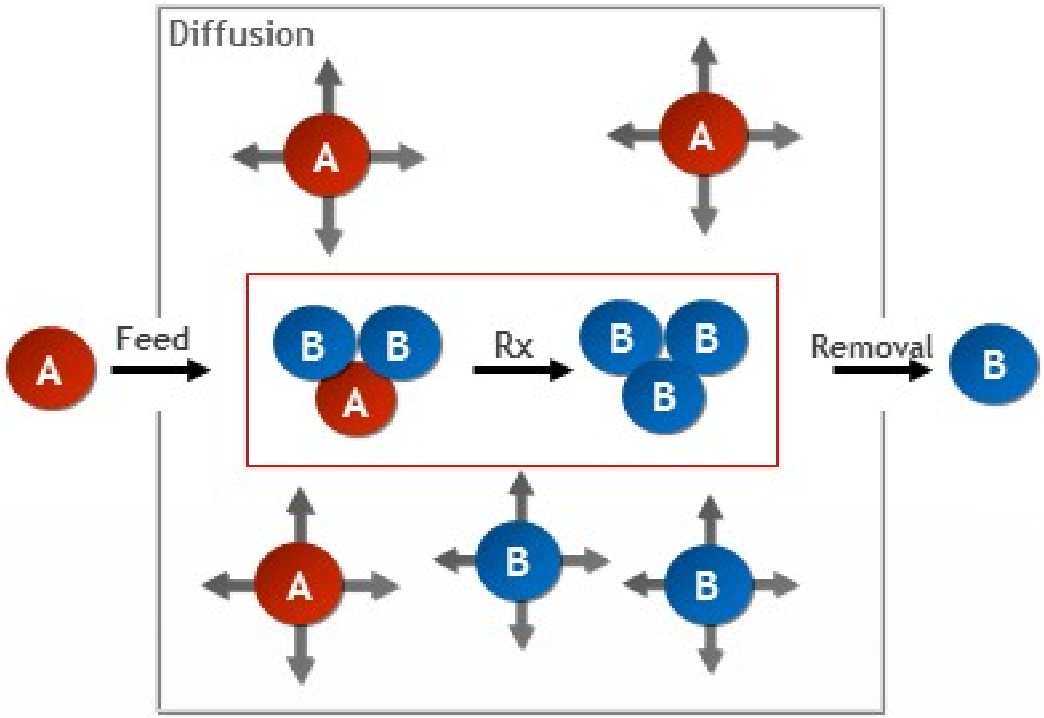
$$v_{i,j}=v_{i,j}+s(u_{i,j}v_{i,j}-v_{i,j}-\beta_{i,j})+D_b(v_{i-1,j}+v_{i,j-1}+v_{i+1,j}+v_{i,j+1}-4v_{i,j})$$

u = aktivátor ($D_a = 0.25$, rýchlejšia difúzia)

v = inhibítor ($D_b = 0.06$, pomalšia difúzia)



Grayov-Scottov model



Grayov-Scottov model

- Využíva nasledovný systém chemickej reakcie:

  $\mathrm{A+2B \rightarrow 3B}$

  $\mathrm{B \rightarrow P}$ (mení sa na inertný prvok)

- Vo forme rovníc sa dá zapísať v tvare:

  $u_t = D_a \nabla^2 u - uv^2 + F(1-u)$

  $v_t = D_b \nabla^2 v + uv^2 - (F+k)v$, kde konštanta

  D ovplyvňuje rýchlosť difúzie,

  k ovplyvňuje úbytok prvkov B zo systému

  F predstavuje dopĺňanie A do systému

- Hodnota koncentrácie u je maximálne rovná 1

Brusselator model

- Využíva systém chemickej reakcie
- Vo forme rovníc sa dá zapísať v tvare:

$$u_t = D_a \Delta u + uv^2 + a - (b+1)u$$

$$v_t = D_b \Delta v - uv^2 + bu$$

$$u = u_a(x, y, t), \quad v = u_b(x, y, t)$$

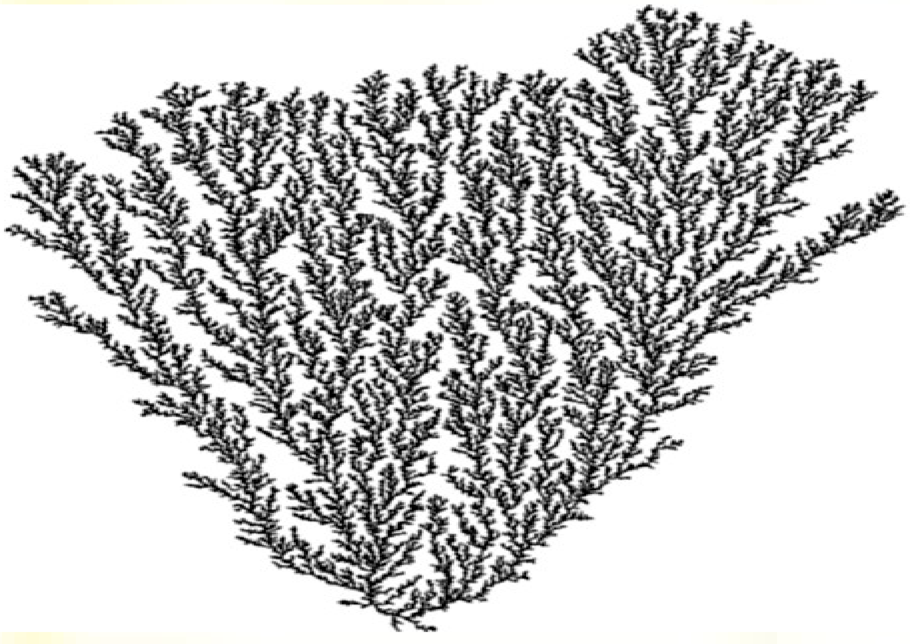
$$u_a(x, y, 0) = a, \; u_b(x, y, 0) = b / a$$

Modifikácie reakčnej difúzie

- Anizotropická difúzia – jej priebeh je rôzny v smere x a y. Najjednoduchšie sa dá dosiahnuť vynásobením matice $\mathbf{M}$ nejakou maticou rotácie a škálovania
- Reakčná difúzia sa dá použiť aj na nepravidelnej sieti – využitie Voronoiových buniek
- Kaskádový systém – použitie viacerých RD systémov, každý na ohraničenom časovom úseku (iniciátor, zjemnenie$_1$, …, zjemnenie$_n$)
- „Zámrazový systém“ je podobný kaskádovému, avšak bunky v ktorých koncentrácia po čase dosiahne dopredu stanovenú hodnotu sú zamrazené
- Výsledný vzor je následne spracovávaný nejakou ďalšou procedurálnou technikou

Difúzne ohraničené zhlukovanie

- Na centrálnu časticu sa nabaľujú ďalšie, náhodne sa pohybujúce častice
- Vytvára sa rozvetvená fraktálová štruktúra
- Uvedená v r. 1981Wittenom a Sanderom



Difúzne ohraničený rast

- Čiastočky sú transformované na telo organizmu
- Model opisuje rast kolónie organizmov pri dostatku živín
- Štruktúra sa rozvíja všade, kde má priestor na expanziu a narastá v smere príchodzích živín