

УДК 544:612.357:004.942

ПРИНЦИПИ ФРАКТАЛЬНОСТІ МЕХАНІЗМІВ ГЕНЕЗИ БІОЛІТІВ

В. Мельник, О. Піскунова, Л. Вакулук

Східноєвропейський національний університет імені Лесі Українки

Ключові слова: РЕМ-мікроскопія, фрактали, біоліти, фрактальна розмірність

Постановка наукової проблеми та її значення

Відомо, що будь-яка реальна система біокристалогенезу пов'язана з великою кількістю змінних параметрів середовища і не завжди може бути описана лінійно [1–4]. Ось чому спроби пізнання процесів, що відбуваються у такій системі, неможливі без створення моделі, як правило, завжди спрощеної порівняно з реальним аналогом [5].

Інтенсивний розвиток фрактальної геометрії останніми роками дозволяє до певної міри подолати вказані ускладнення із застосуванням комп'ютерного моделювання [6; 7].

В основу комп'ютерних гіпотез про механізм росту біолітів (холестеринових агрегатів) покладене припущення про статистично рівномірну дифузійну міграцію компонентів середовища у кристалізаційному просторі навколо деякого центра (агрегату, що росте) [8]. Дифузія ускладнюється процесами фільтрації, які супроводжують сорбцію й адгезію компонентів під час взаємодії з агрегатом [7]. Внаслідок цього виникає дисипативна структура, пов'язана з невірноваженістю термодинамічної системи та пороговим характером змін [9]. З математичного погляду невірноваженість та пороговий характер процесів самоорганізації пов'язані з нелінійністю рівнянь. Для лінійних рівнянь існує один стаціонарний стан, а для нелінійних – декілька. Отже, пороговий характер самоорганізації пов'язаний з переходом з одного стаціонарного стану в інший, втратою системи стійкості внаслідок стрибкоподібної зміни, що виникає у разі плавної зміни зовнішніх умов [5; 9].

Феномен такої поведінки будь-якої фізико-хімічної системи достатньо повно описується принципами фрактальності. Фрактальна поведінка для багатьох природних феноменів та під час розроблення теорії для структурованості таких розгалужених об'єктів виступає фрактальною розмірністю (D – кількісна характеристика фрактальних множин). Проте питання числового визначення фрактальної розмірності є неоднозначними і потребують систематичних досліджень. Відповідно тема статті є актуальною [6].

Аналіз останніх наукових досліджень, які стосуються вирішення цієї проблеми

В останні роки суттєво зріс інтерес до можливостей застосування принципів фрактальної геометрії в біомінералогії. В цьому контексті особливо виділяється кілька фундаментальних праць [3; 4]. В роботах [10; 11] вперше запропоновано визначати фрактальну розмірність кристалів жовчі як критерій оцінки її літогенності. Можливості застосування перколяційних

кластерів на основі визначення їхніх фрактальних розмірностей розглянуто в статті [5]. Застосування теорії фрактального росту для оцінювання фізико-хімічних властивостей жовчі розглянуто в роботі [11]. Оргінальною є пропозиція визначати фрактальну розмірність Хаусдорфа–Безиковича із застосуванням метрики Реньї [12].

Виклад основного матеріалу

Біогенні мінеральні утворення залоз внутрішньої секреції людини, подібно до гірських порід, мають три стадії розвитку: зародження, ріст і руйнування (зміни) [3; 4]. У відомій роботі [10], з дослідженням біолітів, традиційно основну увагу звернуто на різні аспекти оцінювання їх речового складу.

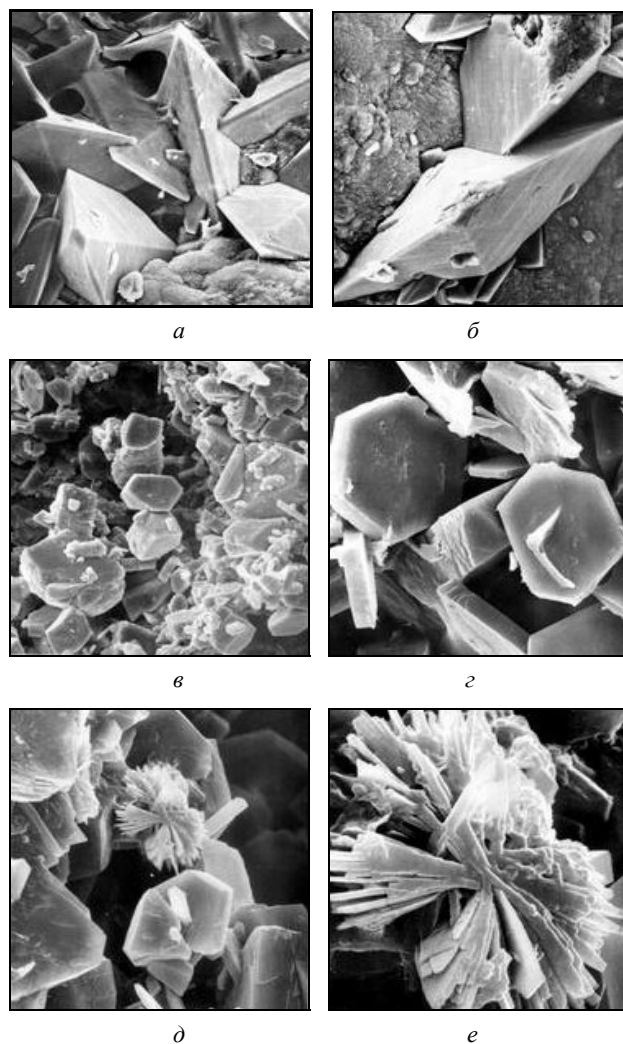


Рис. 1. Приклади РЕМ-зображень особливостей структури біогенних мінеральних утворень різної генези (РЕМ "HITACHI S-800")

Разом з тим, добре відомо, що детальне вивчення їх мікроструктури має також важливе значення для пізнання умов їх утворення. Особливо це стосується реконструкції просторових (тривимірних, об'ємних) зображень растрової електронної мікроскопії (РЕМ).

Для вивчення онтогенічних особливостей зміни мінеральних індивідів і агрегатів у процесі стадіального розвитку конкрементів рекомендується РЕМ-стереометричний метод дослідження (рис. 1) [8].

Для біогенного мінералоутворення, зумовленого природною життєдіяльністю організмів, характерне різноманіття умов рельєфоутворення, що, своєю чергою, проявляється у різноманітті цифрових моделей мікрорельєфу (ЦММР) (рис. 1). Очевидно, результати досліджень ЦММР біолітів можуть давати корисну інформацію про характер і статистичні параметри їх генези і розкриття механізму їх утворення [8]. Зрозуміло, що для коректної перевірки теорії таких складних явищ необхідно мати, окрім традиційних, також дані з незалежних джерел, якими є РЕМ-мікроскопія.

1. 1D теоретико-феноменологічна модель генези біолітів.

Розглянемо можливі теоретичні моделі й фізичні механізми формування ЦММР у біомінералогії. Поверхневий рельєф біоліту формується безпосередньо в процесі його зростання. Тому становлять безпосередній інтерес теоретичні розрахунки автокореляційної функції, спектральної щільності фрактальної розмірності, що є результатом конкретних модельних уявлень про механізми росту.

Опишемо метод розрахунку автокореляційної функції на основі простої статистичної моделі росту для одновимірного випадку [8].

Нехай у випадкових точках осі x виникають точкові зародки з деякою інтенсивністю $I = I(t)$.

Кожен зародок росте з постійними тангенціальною v_r і вертикальною v_h швидкостями. Тому зародок, що вільно росте, набуває форми рівнобедреного трикутника з кутом φ при основі, що визначається за умови:

$$\operatorname{tg}\varphi = v_h / v_r \equiv \eta. \quad (1)$$

Через неминучі зіткнення сусідніх зародків, що ростуть, їх зростання в місцях контактів припиняється, але в усіх доступних напрямках триває з попередньою швидкістю. В результаті формується одновимірний пилкоподібний рельєф, який після досягнення неперервності, не змінюючись, піднімається вгору як єдине ціле. Так асимптотично формується стаціонарний (у часі) й випадковий (у просторі) пилкоподібний рельєф. Можливі два варіанти зародження. Випадок миттєвого (якщо $t = 0$) зародження усіх центрів з щільністю N (β -модель) і безперервного зародження центрів впродовж усього процесу з постійною інтенсивністю $I(t) = I$ (α -модель).

Розподіл безрозмірної висоти профіля h відносно середнього рівня задається щільністю:

$$\Phi(h) = 2 \exp[-(1-2h)], \text{ якщо } h \leq 1/2, \quad (2)$$

у β -варіанті та:

$$\Phi(h) = 2 \left(\frac{\sqrt{\pi}}{2} - h \right) \exp \left[- \left(\frac{\sqrt{\pi}}{2} - h \right)^2 \right], \text{ якщо } h \leq \frac{\sqrt{\pi}}{2}, \quad (3)$$

в α -варіанті.

Відповідно до отриманих функцій розподілу висот, знайдених у явному вигляді, теоретична автокореляційна функція (АКФ) буде такою:

$$G = \sigma^2 (1 + 2s) \exp(-2s), \quad s = \bar{x} / a, \quad a = 1 / N, \quad (4)$$

$$\sigma = (G(0))^{1/2} = \eta a / 2. \quad (5)$$

Знаючи АКФ, легко розрахувати за відомими функціоналами спектральну щільність та залежну від АКФ і спектральної щільності фрактальну розмірність.

Відносно реальної форми мікронерівностей ситуація дещо складніша. Трикутна форма зародків-мікронерівностей прийнята в моделі з метою проведення теоретичних розрахунків АКФ. У реальних випадках мікронерівності частіше плавні, округлені, хоча іноді справді спостерігаються огранені фігури росту. Проте є підстави допускати, що статистичні властивості поверхневого мікрорельєфу визначаються, здебільшого, статистикою просторового розподілу мікронерівностей, а форма вершин мікронерівностей проявляється на окремих деталях АКФ.

2. 2D ймовірнісно-комп'ютерна модель росту біолітів.

Розглянемо комп'ютерну модель дендритних утворень на основі довільних ітерацій (блукань), не обмежених дифузиею, а лише дифундуванням у межах матриці у вигляді круглого диска, а зону генерації блукаючих частинок на квадратній ґратці – у вигляді периферійного околу [7]. Такий алгоритм цифрового генерування дендритних кластерів можна називати моделлю на основі випадкових блукань, не обмежених дифузиею. Траєкторія частинки у просторі буде такою: за певних умов існує область, яка максимально притягує до себе блукаючу частинку і в якій ймовірність агрегування максимальна; під час чергової агрегації двох і більше частинок у цій області виникає її розгалуження внаслідок біфуркації (тобто два незалежні напрямки росту). Упродовж тривалого часу існування невірноваженого стану виникає послідовність біфуркацій, яка супроводжується виникненням неупорядкованих розгалужених структур. Така модель формування фрактальних форм, за умови попереднього детермінування кількості (концентрації) частинок, є комп'ютерною реалізацією випадкових блукань (ВБ).

Розглянута модель ВБ є спрощеною. Реалістичнішою є модель дифузії обмеженої агрегації (ДОВА).

Моделі ДОВА характеризуються накопиченням елементів (пікселів, мономерів тощо), що випадково рухаються відносно одного чи декількох центрів (ядер, зерен тощо). На рис. 2 показано кластер, отриманий за методом ДОВА.

У цьому процесі мономері рухаються довільно із віддаленого джерела (дифундують). Досягнувши кластера, мономері прилипають до нього. Процес агрегації такого типу породжує кластери з фрактальною розмірністю $D \approx 1,70$ у випадку дифузії в площині, тобто для розмірності простору $E = 2$. Численні експерименти, проведені у просторі з $E = 3$, дали змогу отримати кластери з фрактальною розмірністю $D \approx 2,50$.

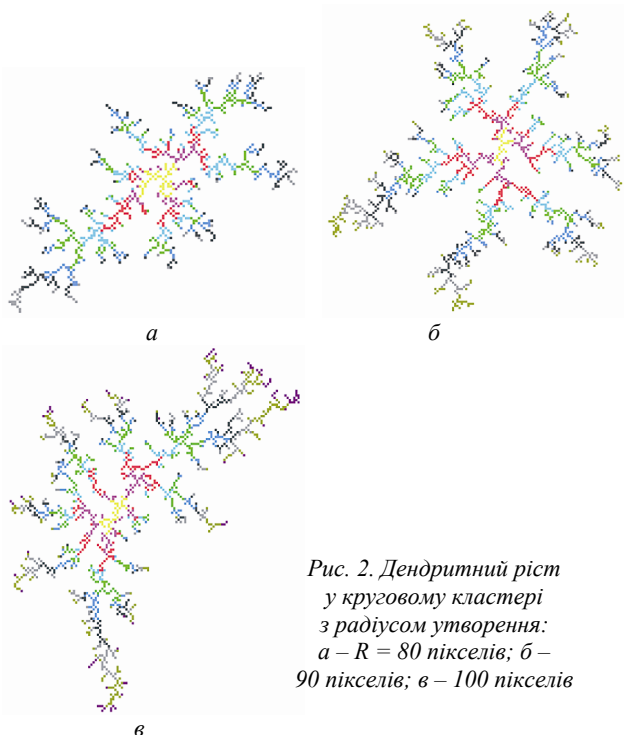


Рис. 2. Дендритний ріст у круговому кластері з радіусом утворення: а – $R = 80$ пікселів; б – 90 пікселів; в – 100 пікселів

Варто підкреслити, що якщо кластер пористий або випадковий, то це ще не означає, що він фрактальний. Фрактальний кластер відрізняється властивістю, що з ростом розмірів його щільність зменшується за законом, що описується показником у співвідношенні чисел (частка–радіус). Якщо ввести щільність числа часток, то щільність на радіусі r для кластерів, аналогічних зображеному на рис. 2, визначається виразом:

$$\rho(r) \approx R_0^{-D} r^{D-E} \quad (6)$$

Ця щільність постійна за умови, коли фрактальна розмірність D дорівнює фрактальній розмірності E простору, в якому міститься кластер. В іншому разі фрактальні кластери мають щільність, яка зменшується із збільшенням відстані від центра, тобто фрактальна розмірність кластера є кількісною характеристикою кластера, а саме характеристикою заповнення простору. Отже, фрактальна розмірність є важливою характеристикою росту біолітів [7]. Пропонується її значення отримувати з виразу:

$$D = \frac{\ln(AN(r)\pi)}{\ln r} \quad (7)$$

де A – площа одиничної комірки (частинки, що блукає); r – радіус кластера; $N(r)$ – загальна кількість частинок, що входять до кластера радіусом r ; $\pi = 3,14$.

3. 3D емпірична структурна функція ЦММР.

Нехай в деякій області Ω у N точках з координатами $(x_k; y_k) \in \Omega$ виміряні методом РЕМ-стереометрії значення невідомої функції цифрової моделі мікрорельєфу (ЦММР) $f(x; y)$, які визначені на всій

ділянці $\Omega = \bigcup_{i=1}^n \Omega_i$, де $\Omega_i \cap \Omega_j = 0$ для $\forall_i, j \in 1..n$.

Подамо рельєф дискретно, тобто висота z точки

визначається як функція її положення (координат x та y).

На основі отриманого у результаті масиву значень $z_{i,j}$ можна розрахувати структурну функцію ЦММР.

Двовимірну структурну функцію визначається виразом [13–15]:

$$S(\tau) = S(k, m) = \frac{1}{N-k} \frac{1}{N-m} \sum_{i=1}^{N-k} \sum_{j=1}^{N-m} (z(i, j) - z(i+k, j+m))^2, \quad (8)$$

$$k, m = 0, 1, 2, \dots, N-1,$$

де N – кількість точок у кожному напрямку регулярної сітки; τ – евклідова відстань між точками (i, j) та $(j+k; j+m)$ на площині.

Структурна функція допускає апроксимацію мовою фрактальної геометрії у вигляді масштабного співвідношення:

$$S(\tau) \propto \tau^{2(3-D_f)} \quad (9)$$

Для розрахунку фрактальної розмірності довільних ЦММР пропонується такий алгоритм. Для кожної точки ЦММР визначається значення структурної функції за формулою (8) та обчислюється значення τ . За набором значень $(\tau, S(\tau))$ одержимо графік залежності $\ln S(\tau) - \ln \tau$. Визначивши лінію регресії, отримаємо D_f як коефіцієнт нахилу лінії регресії. Приклад практичного застосування цього алгоритму показано на рис. 3.

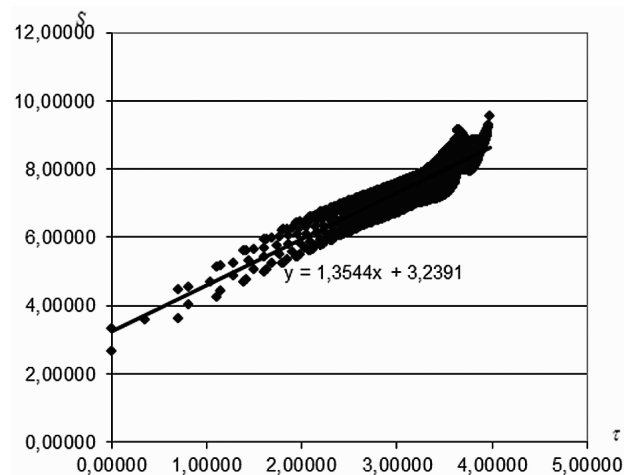


Рис. 3. Графік регресійної залежності $\ln S(\tau) - \ln \tau$ для визначення фрактальної розмірності $D_f = 2,32$

Крім методу структурної функції, фрактальна розмірність визначалася методом покриття поверхні кубами.

Висновки

1. Розглянуті різні моделі механізмів генези біолітів. Для одновимірного випадку пропонується теоретико-феноменологічна модель, для якої отримані в явному вигляді функції висот і АКФ.

2. Дендритний ріст біолітів ілюструється імовірно-комп'ютерною моделлю, в основу якої покладена видозмінена броунівська кінематика.

3. Для тривимірного випадку пропонується визначити емпіричну модель за даними РЕМ-стереометрії.

4. Обґрунтовані для розглянутих моделей коректні оцінки фрактальних розмірностей.

5. Статтю проілюстровано мікрофотографіями біолітів, отриманих за допомогою сучасних РЕМ.

Література

- Sipahi M. A novel approach for differentiating etiology of gallstone formation: sistocholedochal angle / M. Sipahi, M. F. Erkos, H. I. Serin [et al.] // *Eur Rev Med Pharmacol Sci*. – 2015. – Vol. 19, № 6. – P. 1063–1067.
- Abeysuriya V. Biliary microlithiasis, sludge, crystals, microcrystallization, and usefulness of assessment of nucleation time / V. Abeysuriya, K. I. Deen, N. M. Navarathne // *Hepatobiliary Pancreat Dis Int*. – 2010. – № 9 (3). – P. 248–253.
- Зузок Ф. В. Мінералогія уролітів: у 3 т. / Ф. В. Зузок. – Луцьк: Вежа, 2003. – Т. 2: Мінеральний та хімічний склад уролітів. Кн. 2. – 508 с.
- Зузок Ф. В. Мінералогія уролітів: у 3 т. / Ф. В. Зузок. – Луцьк: Вежа, 2004. – Т. 3: Онтогенія уролітів – 582 с.
- Буданов П. Ф. Дослідження фрактальних властивостей перколяційної моделі провідності процесу електролітичного заземлення / П. Ф. Буданов, А. М. Чернюк // *Системи озброєння і військова техніка*. – 2012. – № 4 (32). – С. 76–81.
- Федер Е. Фракталы / Е. Федер. – М.: Мир. – 1991. – 258 с.
- Дяків В. О. Мікроструктурна будова жовчевих камінців та роль фрактальної кристалізації у їх формуванні: автореф. дис. ... канд. геолог. наук: спец. 04.00.20 “Мінералогія, кристалографія” / В. О. Дяків. – Львів, 1999. – 20 с.
- Мельник В. М. Растрово-електронна стереомікрофрактографія: монографія [Текст] / В. М. Мельник, А. В. Шостак. – Луцьк: РВВ “Вежа” ВНУ ім. Лесі Українки, 2009. – 469 с.
- Золотухин И. В. Фракталы в физике твердого тела / И. В. Золотухин // *Соросовский образовательный журнал*. – 1998. – № 7. – С. 108–113.
- Лагунова Н. В. Применение теории фрактального роста для оценки физико-химических свойств желчи у детей с воспалительной патологией гепатобилиарной системы в периоде ремиссии / Н. В. Лагунова, О. Д. Лебедева // *Таврический медико-биологический вестник*. – 2012. – Т. 15, № 4 (60). – С. 219–223.
- Лагунова Н. В. Визначення фрактальної розмірності кристалів жовчі як критерій оцінки її літогенності / Н. В. Лагунова, О. Д. Лебедева // *Педіатрія, акушерство та гінекологія*. – 2010. – № 4. – С. 75–76.
- Журавель І. М. Аналіз текстури фрактографічних зображень на основі спектра фрактальних розмірностей Реньї / І. М. Журавель // *Искусственный интеллект*. – 2013. – № 1. – С. 204–208.
- Корн Г. Справочник по математике / Г. Корн, Т. Корн. – М.: Наука, 1970. – 720 с.
- Remondino F. Image-based 3D modelling: a review / F. Remondino, S. El-Hakim // *The Photogrammetric Record*. – 2006. – Vol. 21 (116). – P. 269–291.
- Отнес Р. Прикладной анализ временных рядов: монография [Текст] / Р. Отнес, Л. Эноксон. – М.: Мир, 1982. – 428 с.

Принципи фрактальності механізмів генези біолітів

В. Мельник, О. Пискунова, Л. Вакулюк

Розглянуто застосування принципів фрактальної геометрії для оцінювання механізмів генези біолітів. Пропонується одновимірною теоретико-феноменологічною моделлю, яка дозволяє отримати функції висот і АКФ. Для двовимірного простору розглянуто ймовірнісну комп'ютерну модель на основі принципів броунівського руху. Емпіричну 3D-модель пропонується отримувати із застосуванням сучасних РЕМ. Для всіх розглянутих моделей подано вирази їх фрактальних розмірностей.

Принципы фрактальности механизмов генезиса биолитов

В. Мельник, О. Пискунова, Л. Вакулюк

Рассмотрено применение принципов фрактальной геометрии для оценки механизмов генезиса биолитов. Предлагается одномерная теоретико-феноменологическая модель, которая позволяет получить функции высот и АКФ. Для двумерного пространства рассмотрена вероятностная компьютерная модель на основе принципов броуновского движения. Эмпирическую 3D модель предлагается получать с применением современных РЭМ. Для всех рассмотренных моделей получены выражения их фрактальных размерностей.

Principles of fractality of bioliths origin mechanisms

V. Melnyk, O. Piskunova, L. Vakulyuk

The article explores the application of the principles of fractal geometry for evaluation bioliths genesis mechanisms. The one-dimensional theoretical and phenomenological model that provides a function of elevation and ACF is offered. For two-dimensional space probabilistic computer model based on the principles of Brownian motion is considered. Empirical 3D model is proposed to obtain with modern REM. For all these models the expressions of their fractal dimensions are conducted.