HULLÁMFRONTOK EVOLÚCIÓJÁNAK LEÍRÁSA NUMERIKUS ÉS ANALITIKUS ESZKÖZÖKKEL

PhD tézisfüzet

KÁLY-KULLAI KRISTÓF

TÉMAVEZETŐK:

DR. FARKAS HENRIK †

DR. NOSZTICZIUS ZOLTÁN

BUDAPESTI MŰSZAKI ÉS GAZDASÁGTUDOMÁNYI EGYETEM
KÉMIAI FIZIKA TANSZÉK

2006

A kutatások előzményei

A fizika különböző területein sokféle hullám fordul elő, például a vízhullám vagy a hanghullám a mechanikában, az elektromágneses hullámok az elektrodinamikában, a hullámfüggvény a kvantummechanikában. Kevésbé ismert, hogy a biológiában is előfordulnak hullámok, és ezen hullámok megfelelői kémiai rendszerekben is megtalálhatóak. Biológiai hullámok felelősek a szívizom összehúzódásáért, de megtalálhatóak az idegrendszerben is, ahol az ingerületek továbbítását segítik elő. A kémiai és biológiai hullámok utáni kutatás főleg az utóbbi időben indult meg.

Kémiai hullámoknak a reagáló elegyekben tovaterjedő reakciófrontokat nevezzük. Kémiai hullám esetén a reakciófront koncentrációprofilja lényegében változatlanul, azaz csillapítás nélkül mozog. (Tehát nem tekintjük kémiai hullámnak amikor például egy savbázis reakcióban a neutrális zóna valamelyik irányban elmozdul, mert ekkor általában a savas és lúgos tartományokat elválasztó koncentrációprofil is megváltozik.) A gázfázisban fellépő kémiai hullámok elsősorban az égési és robbanási jelenségek terjedésével kapcsolatosak, és rendkívül fontosak az ipar bizonyos ágazatai számára. Az utóbbi évtizedekben azonban a folyadék fázisban (oldatokban) terjedő kémiai hullámokkal is egyre többet foglalkoznak [Gray and Scott, 1994], [Kapral and Showalter, 1995], [Epstein and Pojman, 1998]. Ezek terjedésében a reakcióban résztvevő anyagok transzportja játszik fontos szerepet, ami diffúzió vagy konvekció útján valósulhat meg. Megfelelő reakció és a reakciókomponensek különböző diffúziós együtthatói esetén bonyolult hullámjelenségek és stacionárius térbeli mintázatok (ún. Turing szerkezetek) is létrejöhetnek. E jelenségek tanulmányozásának igazi fontosságát bizonyos biológiai jelenségekhez való hasonlóságuk adja. A kémiai hullámok mechanizmusa hasonlít az idegrendszerben és a szívben megfigyelhető hullámokhoz, míg a stacionárius mintázatok vizsgálata segíthet a sejtdifferenciálódás és a biológiai morfogenezis megértésében.

A kémiai hullámok leírására általában a reakció-diffúzió egyenletek használatosak. Ezek a parciális differenciálegyenletek vizsgálatára kidolgozott matematikai apparátus segítségével tanulmányozhatóak, azonban a hullámjelenségek fellépéséhez szükséges nemlineáris reakciótagok miatt többnyire csak kvalitatív és numerikus vizsgálatok végezhetőek. Emellett egy adott elrendezésben terjedő hullámfront alakjának vizsgálatára létezik egy ennél sokkal egyszerűbb módszer: a geometriai hullámelmélet. Ez egy adott kezdeti front fejlődését írja le a Fermat-elv alapján.

A kémiai hullámok kutatása a Kémiai Fizika Tanszéken a kilencvenes évek elején indult meg. A témakörben az első publikációk az évtized közepén jelentek meg, egyrészt a legegyszerűbb eset, a kör alakú membránba vágott lyuk körül forgó front megfigyeléséhez szükséges kísérleti technika kifejlesztéséről [Lázár et al., 1995], másrészt a geometriai hullámelmélet alkalmazásáról a hullámfrontok terjedésének leírására [Simon and Farkas, 1996]. A homogén közeg vizsgálata után a következő lépés a heterogén (szakaszosan homogén) közegek vizsgálata volt, kör alakú közeghatárt alkalmazva. Kezdetben a kör alakú akadály és a közeghatár középpontja egybeesett [Lázár et al., 1997], később az akadályt elmozdítva az úgynevezett aszimmetrikus esetek is terítékre kerültek [Volford et al., 1999].

Célkitűzések

PhD munkám kezdetekor három fő célt tűztem ki magam elé:

1. Az első célkitűzés az addigi kutatások folytatása volt, vagyis a geometriai hullámelmélet alkalmazásával leírni a hullámok evolúciójának kvalitatív és kvantitatív sajátságait új, eddig még nem vizsgált elrendezésekben. A kutatások folytatásának másik iránya a szabad vég viselkedésének vizsgálata, amikor is a front mögötti tartomány kölcsönhatásba kerül a front egy másik szakaszával, és ez érdekes új jelenségeket eredményez.
2. A különböző tudományterületeken többféle matematikai modell, megközelítés fordul elő a hullámjelenségek leírására. A második célom ezen különböző tudományterületeken előforduló hullámok közös sajátságainak, általános jellemzőinek keresése, illetve a hullámok leírására használatos különböző matematikai módszerek összevetése, az ezek között fellelhető kapcsolatok keresése volt.
3. Még a diplomamunkám során kidolgoztam egy számítógépes programot, amely a geometriai hullámelmélet alapján modellezte a frontok evolúcióját. A harmadik célkitűzésem ennek a programnak a továbbfejlesztése volt, különös tekintettel a közeg modellezésének az alkalmazott rácstól minél függetlenebbé tételére és a gerjeszthetőség modellezésére. Emellett a kezdetben DOS operációs rendszer alatt futó program más (GNU/Linux, Windows) operációs rendszerek alatt is felhasználhatóvá kívántam tenni.

Új tudományos eredmények

1.) A Huygens-Fresnel-elvből kiindulva megmutattam, hogy a harmonikus hullámok végtelen hullámhosszhoz tartozó határeseteként a geometriai hullámelméletet kapjuk.

A Huygens-Fresnel-elvet egy, a kezdeti hullámfrontra ható operátorral megadott általános elemi gömbhullám integráljaként írtam fel. Erre az integrálra három fizikai feltétel teljesülését követeltem meg: az önkonzisztenciát és a hullámmozgást végző mennyiség skálájának nyújtásával és eltolásával szembeni invarianciát. Ezen feltételek teljesülése esetén megmutattam, hogy homogén közegben, állandó amplitúdójú kezdeti frontot és a hely függvényében lassan változó amplitúdót feltételezve a végtelen hullámhossz határesetében a front a közeg minden pontjába eljut, és az amplitúdója eközben mindenhol azonos. Ez a viselkedés megegyezik a geometriai hullámelmélet feltételezéseivel. Ugyanezen feltételek mellett megmutattam, hogy a nulla hullámhossz határesetében pedig csak a közeg azon pontjaiba jut el a hullám amelyekbe a kezdeti frontból kiinduló extremális sugár húzható, és ez a viselkedés pedig megfelel a geometriai optikában megszokott éles árnyéknak.

2.) Körlencse esetén megadtam a geometriai hullámelméletben előforduló lehetséges extremálisok helyeinek és a hozzájuk tartozó terjedési időknek az alakulását a törésmutató, mint kontrollparaméter függvényében.

Míg a körlencse esetén a geometriai optikában csak az egyenes terjedéshez és a törési törvényhez tartozó két extremális sugár fordulhat elő, addig a geometriai hullámelméletben két újabb extremális is fellép. Ezen extremálisok léte a közeghatáron végighaladó ún. vezetőpontból a kisebb terjedési sebességű közeg irányába leváló sugarak alkotta sugárcsaládnak [1] köszönhető. Megadtam azokat a törésmutató-intervallumokat, amelyekben az egyes extremális sugarak léteznek. Emellett megmutattam, hogy elég nagy törésmutató mellett a geometriai optikában nem létezik globálisan minimális sugár, ugyanakkor a geometriai hullámelméletben mindig létezik egy globális minimum, ami egyben lokális szélsőérték is [2].

3.) Az optikában is ismert törő aplanatikus felület geometriai hullámelméletbeli kiterjesztésével megalkottam a kémiai lencsét.

Az adott tárgyponthoz és képponthoz tartozó aplanatikus felületek tökéletes képalkotást valósítanak meg, azaz a felületen keresztül a tárgypontot a képponttal összekötő valamennyi sugár terjedési ideje állandó. Az optikában ennek a görbének csak egy része használható képalkotásra, azonban a geometriai hullámelméletben ez kiterjeszthető egy, a képpontot teljesen körülvevő görbévé, ezzel egy olyan kémiai lencsét alkotva, ami a tárgypontból induló kör alakú frontot a lencsén belül egy, a képpontba tartó, szintén kör alakú fronttá alakítja [2]. A kémiai lencsét kísérletileg is sikeresen megvalósítottuk [3].

4.) Kisméretű (az akadály megkerüléséhez szükséges idő kisebb a feltámadási időnél) kör alakú akadály körül forgó frontra megmutattam, hogy a vaslemez modellt alkalmazva az vagy monoton tart az egyensúlyi állapothoz, vagy leválik az akadályról.

Az úgynevezett vaslemez modell úgy veszi figyelembe a közeg regenerálódását, hogy a közeg egy pontján a front áthaladása után egy adott ideig (ez a feltámadási idő) nem haladhat át újabb front. Ezt a modellt alkalmazva a kisméretű akadály körül forgó frontra egyenes kezdeti front esetén, a front eleje az akadályt megkerülve a kezdeti front egyenesén halad tovább az úgynevezett átgyújtási pontig, és ennek a pontnak a helye határozza meg a front mozgását. Emiatt az egész rendszer dinamikája az átgyújtási pont mozgásával írható le. Erről a pontról mind geometriai megfontolásokkal, mind egy leképezés hozzárendelésével beláttam, hogy az monoton tart az egyensúlyi átgyújtási ponthoz. A modell hátránya, hogy a rendszer „emlékszik” a kiindulási állapotára.

5.) A vaslemez modellt kétféle irányba fejlesztettem tovább a ferde oldal, illetve a feltámadási függvény alkalmazásával, és ezeknél a rendszer már nem emlékszik a kezdeti állapotára.

A ferde oldalú vaslemez modellnél a hullámterjedést nem engedő pontok határa a front terjedési irányával α szöget zár be. Megmutattam, hogy ekkor a szabad vég is egy egyenes mentén mozog, amelynek a front terjedési irányával bezárt szöge 2α, és az átgyújtásokkal ez egy csillagszerű görbét eredményez a szabad vég pályájára, amely nem ismétli önmagát, ha α és π aránya irracionális. A feltámadási függvény azt jelenti, hogy az előző front áthaladása óta eltelt idő függvényében a következő front haladási sebessége folytonosan növekszik a nulláról az eredeti értékére. Ezt a modellt csak numerikusan tudtam tanulmányozni, és a szimulációkban a szabad vég pályája ezúttal is egy önmagát nem ismétlő, szabálytalan görbe volt.

6.) A geometriai hullámelméleten alapuló programot fejlesztettem, amelyben közeg és a front az alkalmazott rácstól függetlenül modellezhető, és amely alkalmas a feltámadás szimulálására is [4].

A korábbi, hasonló elven működő programomat gyakorlatilag teljesen újraírtam, és elértem a program GNU/Linux és Windows rendszerek közötti hordozhatóságát is. A programmal gyorsan és kényelmesen szimulálható a kémiai hullámok terjedése. A legnagyobb gyengesége a feltámadás modellezése, ugyanis ehhez szükség van a rácsra is. Javaslatot tettem egy másik algoritmus használatára, amellyel ez a probléma kiküszöbölhető.

7.) Egy skálafüggetlen optimalizációs módszert javasoltam, amellyel a Nap spektrumából megkapható az emberi szem érzékenységi tartománya [5].

A Nap hullámhosszban megadott spektrumának maximuma nagyjából egybeesik az emberi szem érzékenységi görbéjének maximumával, ez azonban feltehetően csak véletlen egybeesés. Ennek igazolására összehasonlítottam a spektrum különböző változókban megadott alakjainak maximumhelyeit és egy skálafüggetlen optimalizáció maximumhelyét az emberi szem maximális érzékenységének helyével. A Napnak megfelelő fekete test esetén a hullámhossz maximuma esik a legközelebb a valódi értékhez, azonban egy mért spektrumot használva már a skálafüggetlen optimalizáció is lényegében ugyanolyan jó eredményt ad.

Irodalmi hivatkozások listája

[Gray and Scott, 1994]: P. Gray and S. Scott, *Chemical Oscillations and Instabilities. Nonlinear Chemical Kinetics.*, Clarendon, London, 1994.

[Kapral and Showalter, 1995]: *Chemical Waves and Patterns*, szerk.: R. Kapral and K. Showalter, Kluwer, Dordrecht, 1995.

[Epstein and Pojman, 1998]: I. R. Epstein and J. A. Pojman, *An Introduction to Nonlinear Chemical Dynamics*, Oxford University Press, New York, 1998.

[Lázár et al., 1995]: A. Lázár, Z. Noszticzius, H-D. Försterling and Zs. Nagy-Ungvárai, *Chemical waves in modified membranes - I. Developing the technique*, Physica D 84, 112-119, 1995.

[Simon and Farkas, 1996]: P. L. Simon and H. Farkas, *Geometric theory of trigger waves. A dynamical system approach*, J. Math. Chem. 19, 301-315, 1996.

[Lázár et al., 1997]: A. Lázár, H. D. Försterling, H. Farkas, P. Simon, A. Volford and Z. Noszticzius, *Waves of excitation on nonuniform membrane rings, caustics, and reverse involutes*, Chaos 7(4), 731-737, 1997.

[Volford et al., 1999]: A. Volford, P. L. Simon and H. Farkas, *Waves of excitations in heterogeneous annular region, asymmetric arrangement*, in: *Geometry and Topology of Caustics - Caustics '98*, szerk.: S. Janeczko and V. M. Zakalyukin, Banach Center Publications, Vol. 50, Warszawa, 1999.

A tézispontokhoz kapcsolódó tudományos közlemények

[1]: K. Kály-Kullai, A. Volford and H. Farkas, *Waves of excitations in heterogeneous annular region II. - Strong asymmetry*, in: *Geometry and Topology of Caustics - Caustics '02*, szerk.: S. Janeczko and D. Siersma, Banach Center Publications, Vol. 62, Warszawa, 2004.

[2]: H. Farkas, K. Kály-Kullai, S. Sieniutycz, *The Fermat principle and chemical waves*, in: *Variational and Extremum Principles in Macroscopic Systems*, szerk.: S. Sieniutycz, H. Farkas, Elsevier, Oxford, 2005.

[3]: K. Kály-Kullai, L. Roszol, A. Volford, *Chemical lens*, Chemical Physics Letters 414, 326-330, 2005.

[4]: K. Kály-Kullai, *A fast method to simulate travelling waves in nonhomogeneous chemical or biological media*, Journal of Mathematical Chemistry 34, 163-176, 2003.

[5]: Antal Ákos, Kály-Kullai Kristóf, Farkas Henrik, *A napsugárzás spektruma és a szem érzékenysége*, Fizikai Szemle 2005/6, 199-203, 2005.

További tudományos közlemények

[6]: Noszticzius Zoltán, Kály-Kullai Kristóf, Iván Kristóf, *Nemlineáris dinamika a kémiában*, Természet Világa 2005/I. (kémiai) különszám, 67-73, 2005.