

OTKA Posztdoktori Pályázat

Zárójelentés

OTKA D048673

Összetett reakció-diffúzió rendszerek vizsgálata és modelljeik párhuzamosítása



Lagzi István László

Eötvös Loránd Tudományegyetem
Meteorológiai Tanszék

Budapest, 2007. október

KUTATÁSI BESZÁMOLÓ

I. Bevezetés

A posztdoktori kutatási pályázatom munkatervében az alábbi területeken terveztem és vállaltam kutatásokat végezni:

- Reguláris és mozgó csapadékmintázatok vizsgálata és modellezése;
- Részletes ózonfluxusok számítása operatív módon Magyarország területére;
- Reakció-diffúzió rendszerek hatékony modellezése multiprocesszoros számítógépen.

Továbbiakban röviden ismertem az utóbbi területeken végzett kutatások eredményeit.

II. Eredmények ismertetése

II. 1. Reguláris és mozgó csapadékmintázatok vizsgálata és modellezése

Régóta vizsgálják a mozgó reakció frontok mögött kialakuló csapadékmintázatot. Az érdeklődés középpontjában azért kerültek ismét, mert lehetőség nyílt mezo- és mikroskálájú mintázatot tervezni. Ellentétben a felülről-lefelé történő struktúra-építéssel a vezérelt csapadékképződés lehetőséget biztosít az alulról felfelé történő építkezésnek. Éppen ezért kulcsfontosságú, hogy megértsük, hogyan lehet vezérelni a csapadékképződést akár olyan esetekben is amikor a csapadékképződésen túl a keletkezett csapadék komplexképződés során feloldódik.

Az ennek eredményeképpen a virtuálisan mozgó csapadékszóna könnyen látható és viselkedése egyszerű eszközökkel vizsgálható. A klasszikus kísérleti elrendezése a mozgó zónák létrehozásának a következő: egy elektrolit (belső elektrolit) egyenletesen egy gélmátrixban van elosztatva. Addig a másik (külső elektrolit) kívülről diffundál a reakcióközegbe. A tipikus belső-külső elektrolitpárok a következők: Hg^{2+}/Γ , $\text{Co}^{2+}/\text{NH}_4\text{OH}$, $\text{Cr}^{3+}/\text{OH}^-$. Az adott csapadék (HgI_2 , $\text{Co}(\text{OH})_2$, $\text{Cr}(\text{OH})_3$) a reakciózónában keletkezik, amely diffúzívan mozog a diffúziós oszlopban. Ebben a reakciófrontban a külső elektrolit feleslegnek hatására a csapadék komplexképződés hatására feloldódik ($[\text{HgI}_4]^{2-}$, $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{2+}$, $[\text{Cr}(\text{OH})_4]^-$). Nagyon könnyen vizsgálható a csapadékszóna mozgása, ha a gél a külső-, és a belső elektrolit, továbbá a komplex is színtelen.

A reakció-diffúzió rendszereknek nagy jelentőségük van az élő és élettelen természettudományokban egyaránt. Az elmúlt évtizedekben számos önszerveződésről

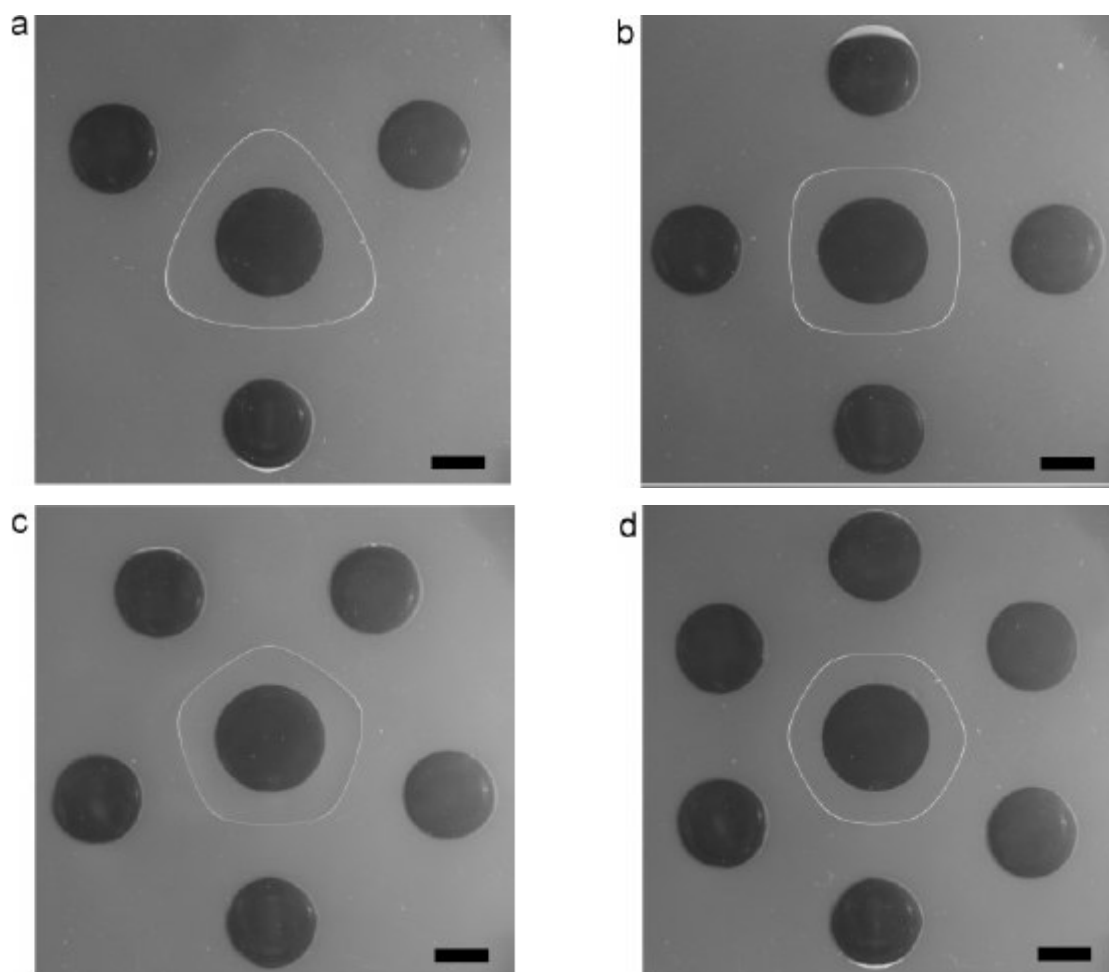
számoltak be: csapadékmintázatok, oszcilláló rendszerek, utazó hullámok, és Turing mintázatok. Csapadékmintázat reakció-diffúzió rendszerekben általában úgy keletkezhet, a két szervesen ion csapadékképződési reakcióval reagál egymással. Az ilyen típusú mintázatok kialakulását az átmenetileg keletkező szolok instabilitásával magyarázzák. A klasszikus mintázatok statikusak, és stacionáriusak abban az értelemben, hogy a keletkező csapadékszónák a keletkezésük helyén maradnak. Sok esetben úgynevezett mozgó zónák is létrejöhetnek, ha a csapadék komplexképződése biztosított.

- Matematikai modellt dolgoztunk ki és modelleztük az átmenetet a mozgó Liesegang mintázatokból heterogén csapadékhullámokba. Meghatároztunk egy „fázistérképet”, amelynek segítségével kísérletek tervezhetőek a különféle bonyolultabb mozgó csapadékmintázatok megfigyelésére és vizsgálatára.
- A reguláris csapadékmintázatok (Liesegang-jelenség) jellemzésére új törvényszerűséget ismertünk fel, amelyet elméleti, kísérleti módon és numerikus számításokkal is alátámasztottunk. Bevezettünk két új mennyiséget, a csapadékrendszer tömegközéppontját és a csapadék összmennyiségét. Vizsgálataink rámutattak arra, hogy a két mennyiség között egyenes arányosság van. Az arányossági tényezőt elméleti úton meghatároztuk. Az elméleti és numerikus szimulációval jóslat viselkedést kísérletekkel támasztottuk alá. A javasolt törvényszerűségnek fontos alkalmazási területe lehet a geokémia és a geokémiai morphogenezis.
- Vizsgáltuk a terjedő reakció front görbületének hatását a Liesegang mintázatra. Matematikai modell felállításával a jelenséget jellemeztük, és kísérletekkel támasztottuk alá a modell eredményeit.
- Liesegang-jelenség általános törvényszerűségeit vizsgáltuk elektromos erőterben. A csapadékmintázatok kialakulásában elektromos töltéssel rendelkező kémiai részecskék (ionok) vesznek részt, ezért az elektromos erőternek jelentős hatása van a mintázat kialakulásában. Bemutattuk, hogy az elektromos erőterrel, mint kontroll paraméterrel, hogyan lehet a mozgó mintázatok típusát befolyásolni. Ebben a témakörben végzett, régebbi kutatási anyagokat is felhasználásával több összefoglaló munkát készítettünk.

- Egy új típusú rendszert vizsgáltunk ($\text{Al}^{3+}/\text{OH}^-$), amelyben egymástól elkülönülő csapadékszónák jelenhetnek meg, ha a külső elektrolitot tartalmazó tartály kémhatása periodikusan változik. Ez amiatt lehetséges, mert a keletkezett alumínium-hidroxid csapadék amfoter tulajdonságú. A csapadékképződés és a komplexképződés jól megfigyelhető vékony alumínium-hidroxid csapadékfrontot eredményez az alábbi reakció alapján:



A reakció-diffúzió rendszerek mikro- és nanotechnológiai célokra történő felhasználása az úgynevezett WETS technikával a bélyegző geometriai formáját használja. Ezen felül fontos az olyan technikák kidolgozása is amely nem ezeket a geometriai megfontolásokat alkalmazza. Makroskálán a csapadékfrontok elektromos erőter alkalmazásával történő szimmetrikus és nem szimmetrikus torzítását már vizsgálták. Az alumínium-hidroxid csak egy szűk kémhatás tartományon belül létezik. A tartományon kívül vagy komplex, vagy szabad alumíniumion van jelen. Kihhasználva a csapadék ezen tulajdonságát számos mintázat tervezhető ha a központi tartályt körülvevő sósavat tartalmazó tartályokkal. Eleinte a központi lúgot tartalmazó tartály körül kialakul egy vékony szimmetrikus csapadékgyűrű, amely sugárirányba kifelé diffúzívan mozog. Ebben a szakaszban a mintázatot elsősorban az OH^- ion diffúziója vezérli. Továbbá nem történik mintázatképződés a savakat tartalmaz tartályok körül. Viszonylag távolabb a központi tartálytól, ahol a pH mezőt már nem csak a lúg, hanem a külső tartályokból diffundáló sav is meghatározza (1.ábra). Kis idő elteltével a pH mező stacionárius lesz. Ennek következtében a kialakult mintázat is stacionárius. Ez az ötlet lehetőséget biztosít az amfoter tulajdonságú csapadékrendszerekben a csapadék szisztematikus vezérlésére és torzítására. Ezt a technikát akár mikro- és nanoskálán is alkalmazhatjuk az ilyen típusú mintázatok tervezésénél.



1. ábra A csapadékfrontok szisztematikus torzítása 5 órával a kísérlet indítása után: három (a), négy (b), öt (c) és hat (d) külső tartályt alkalmazva. Kezdeti feltételek: (1) agaróz gél: $[Al^{3+}] = 0.040$ M, vastagsága: 3,2 mm; (2) központi tartály sugara: 10 mm, $[NaOH] = 2,50$ M (750 μ L); (3) a külső tartályok sugara 9,0 mm, $[HCl] = 3,020$ M (505 μ L). A skála 1 cm-t jelöl.

- Egy új típusú reakció-diffúzió rendszerben vizsgáltuk a mintázatképződést, ahol a csapadékfront mozgásához csatolódtott a mozgásra merőleges utazó hullám viselkedés is. Az alumínium-hidroxid rendszerben egy új típusú önszerveződést figyeltünk meg: utazó hullámok és spirálok megjelenését a csapadékfront belsejében. Együtt tudtuk vizsgálni és megfigyelni a mozgó csapadékfrontot, és ebben a rétegben mozgó kémiai hullámokat. Az ilyen típusú viselkedésre csapadékrendszerekben eddig nem találtak semmilyen bizonyítékot. A kísérleteket úgy végeztük el, hogy az agaróz gél meghatározott mennyiségű alumínium-kloridot (belső elektrolit) tartalmazzon. A gélkészítés során a monomert tartalmazó oldatot 70-80°C-ig melegítettük folytonos keverés közben. A forró oldathoz megfelelő mennyiségű $AlCl_3 \cdot 6H_2O$ anyagot adtunk. Ezután Petri-csészébe helyeztük, és vízszintesen állni hagytuk amíg a gélesedés teljesen le nem játszódott. Minden esetben 2,5 M-os nátrium-hidroxid oldatot használtunk külső elektroltként. A gél megszilárdulása után a külső elektrolitot ráöntöttük a gél felszínére és a

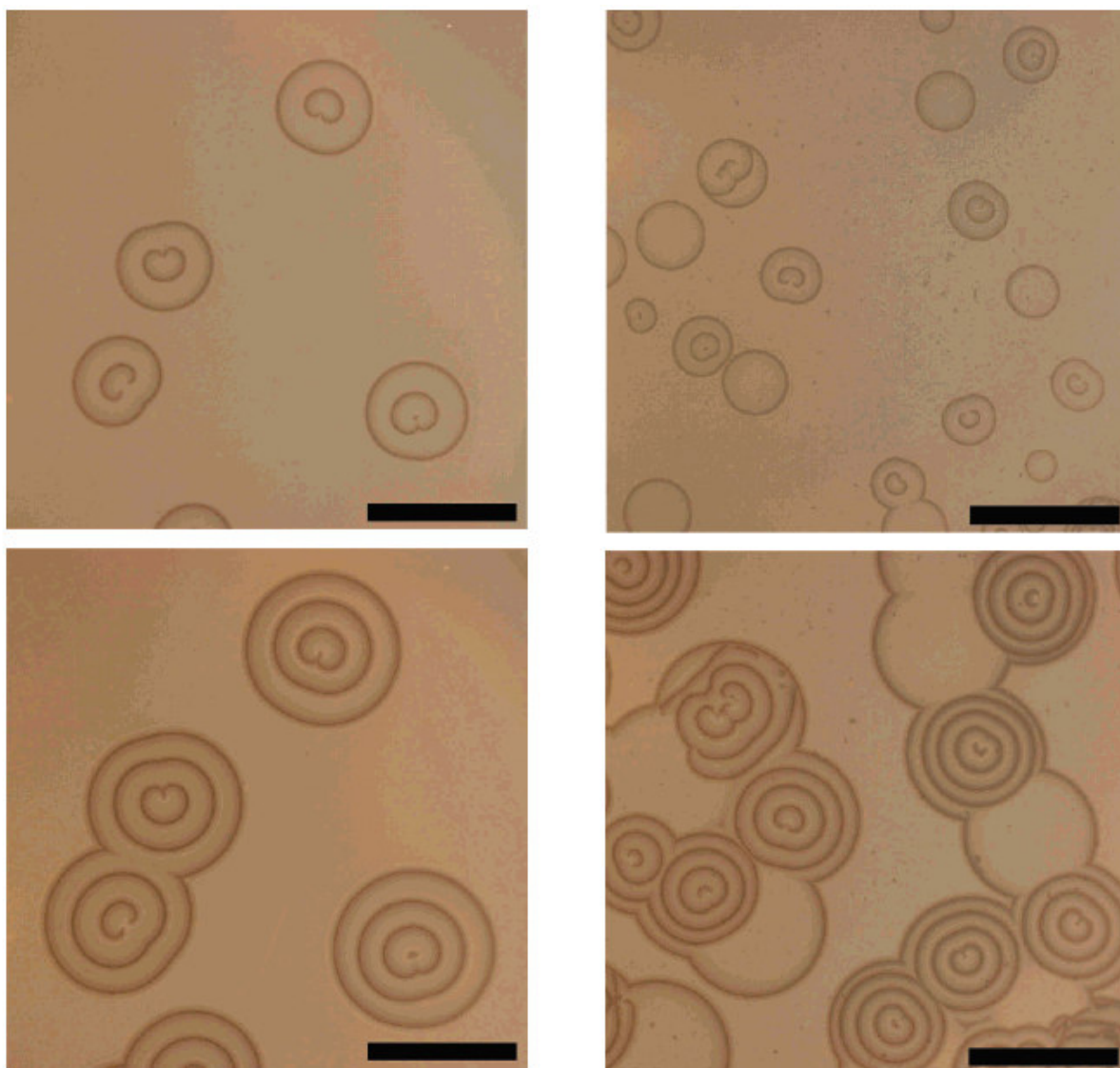
mintázatképződést átmenő fényben vizsgáltuk. Az általunk megfigyelt jelenség utazó hullámokból, és csapadékmintázatokból is áll. Eleinte a külső elektrolit hatására alumínium-hidroxid csapadék keletkezik a gélfelületen. A külső elektrolit feleslegében azonban ennek a csapadéknak egy része komplexképződés révén feloldódik. Ezáltal egy vékony, a gélfelszíntől távolodó csapadékréteget hozhatunk létre. A zóna sebessége folyamatosan csökken. A reakció elindítását követően néhány perccel egy különleges és jól megfigyelhető önszerveződést figyelhetünk meg, amely két fő részből áll:

1. Egy mozgó csapadékréteg, amely párhuzamos a gél felszínével, és merőleges a megfigyelés irányára. A réteg keresztülhalad a közegen, a csapadékképződés, és komplexképződés révén.
2. Önszerveződés játszódik le a vékony csapadékrétegben (50-200 μm).

Az ilyen típusú spirálképződés spontán módon történt, minden külső hatás és perturbáció nélkül (2. és 3. ábra). A dupla spirálok száma az időben növekszik, amely telítési kinetikát mutat. A hullámok terjedési sebessége csökken, és néhány óra elteltével a mintázat „befagy”. A rendszer gerjeszthetősége a kísérlet indítása után csökken. A rendszer kezdeti gerjeszthetősége az alumínium-klorid koncentrációjával vezérelhető. Az utazó hullámok sebessége (1 cm h^{-1}) körülbelül egy nagyságrenddel nagyobb, mint a csapadékréteg mozgásának sebessége. Megállapítottuk, hogy az ilyen típusú önszerveződés a belső elektrolit csak egy szűk koncentrációtartományában létezhet (0,28-0,34 M).

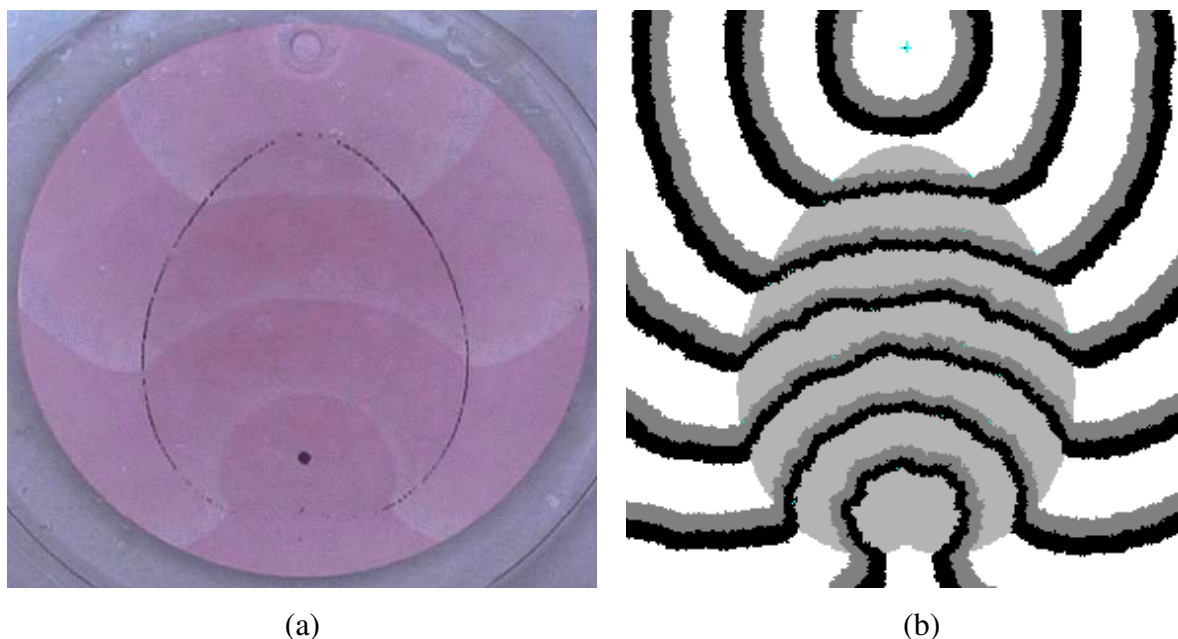


2. ábra Mozgó alumínium-hidroxid csapadék felületén kialakuló hullámok. (Az agaróz gélben $[\text{Al}^{3+}] = 0,29 \text{ M}$; a gélgolyó átmérője 2 cm; külső elektrolitot $[\text{NaOH}] = 2,50 \text{ M}$). A front a golyó középpontja felé mozog, közben a görbült felületen megfigyelhető a spirálok és duplaspirálok fejlődése.



3. ábra Bal oldali ábrák: Dupla spirálok terjedése az alumínium-hidroxid csapadék rétegében. (felülnézet, bal oldal). Kezdeti feltételek: az agaróz gélben $[Al^{3+}] = 0,29$ M; a gél vastagsága 6,4 mm; külső elektrolitot a géltre öntöttük (50 cm^3 , $[NaOH] = 2,50$ M). A képek t és $t + 390$ s időpontban készültek. A skála 1 cm-t jelöl. Jobb oldali ábrák: Dupla spirálok terjedése az alumínium-hidroxid csapadék rétegében. (felülnézet, jobb oldal). Kezdeti feltételek: az agaróz gélben $[Al^{3+}] = 0,30$ M; a gél vastagsága 6,4 mm; külső elektrolitot a géltre öntöttük (50 cm^3 , $[NaOH] = 2,50$ M). A képek t és $t + 390$ s időpontban készültek.

- Gerjeszthető közegekben terjedő kémiai hullámok vizsgálata nagy múltra tekint vissza. Ilyen közeget feltételezve az élő természettudományokban számos jelenséget modelleztek. Ilyenek a járványos betegségek terjedése, és fajok populációdinamikai modellezése. A jelenségeket reakció-diffúzió modellekkel írhatjuk le, amelyek matematikailag parciális differenciálegyenletekkel reprezentálhatóak. Ezek az egyenletek egyértelműen leírják a rendszer viselkedését, habár számos esetben a megfelelő numerikus módszer megválasztása és az egyenletek megoldása nagyon időigényes (különösen 3 dimenzióban). Sok esetben igen hatékonyan megoldhatjuk ezt a problémát sejtautomata modellekkel. Az ilyen típusú modellek egyszerűségük, általánosságuk, és kis számításigényük miatt jelentenek kiváló megoldást a jelenségek modellezésére. A sejtautomata modellekkel kvalitatívan számolható a diffúzió, a mintázatképződés, az ingerület átvitel, a közúti forgalom alakulása, az erdőtüzek vagy a fertőző betegségek terjedése. A sejtautomatákat különböző szempontok szerint fejlesztik. Néhány program lehetőséget ad a Belouszov-Zsabotyinszkij reakcióban a kémiai hullámok leírására. A vizsgálatunk célja, hogy egy saját fejlesztésű sejtautomata modellel jellemezzük, és leírjuk egy akadály körül mozgó hullámok viselkedését. Megvizsgáltuk a céltáblamintázatok kialakulását külső gerjesztés nélkül és a kémiai hullámok „lencse” effektusát. A sejtautomata modellünkkel modellezni tudtunk spirálokat, és céltábla mintázatok. Újabb kutatásokban leírták, hogy a csapadékfrontok és a gerjeszthető közegben terjedő kémiai hullámok törésszerű viselkedést mutatnak. Megvizsgálták, hogy a diffúzió által keltett csapadékfrontok hasonló viselkedést mutatnak mint az optikai megfelelője, és eleget tesznek a Snellius-Descartes-féle törési törvénynek. Gerjeszthető közegben megvalósították a kémiai lencsét, amelyet a kémiai hullámok a közeghatáron történő törésével hoztak létre. A hullámok terjedési sebessége kívül, és a kémiai lencsében különböző volt. Ilyen rendszerekben megvalósítható, hogy az egyetlen pontból indított hullám a lencse belsejében a törés következtében egy pontban megsemmisül. Ezt a típusú viselkedést egyszerű geometriai megfontolásokkal meg lehet magyarázni, és az általunk kidolgozott sejtautomata modellel modellezni lehet. A számolások során a paramétereket úgy választottunk meg, hogy a hullám terjedési sebessége a lencsében 0,45-szerese legyen a külső közeget képest. A szimuláció és a kísérleti eredményeket a 4. ábra tartalmazza.



4. ábra Kémiai lencse effektus a kísérletekben (a) [K. Kaly-Kullai, L. Roszol, A. Volford: “Chemical lens”, Chem. Phys. Lett., Vol. 414, (2005), pp. 326–330] és a sejtautomata szimuláció eredménye (b).

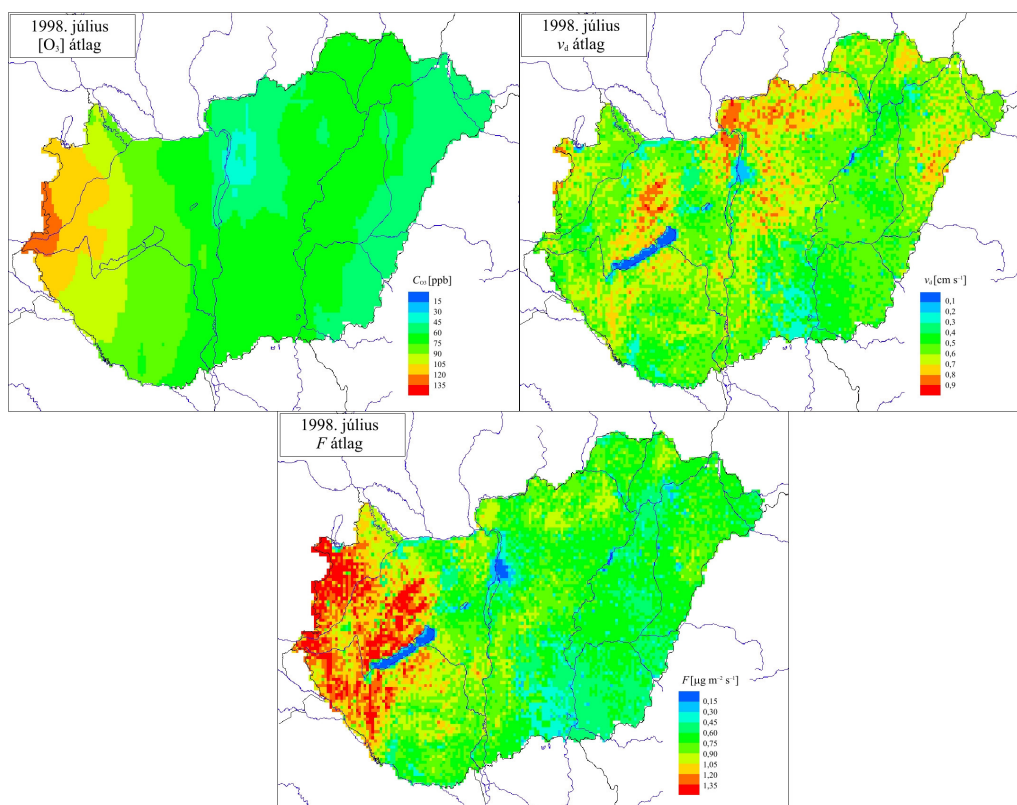
II. 2 Részletes ózonfluxusok számítása operatív módon Magyarország területére

Egy terjedési és egy száraz ülepedési modell összekapcsolásával olyan modellt fejlesztettünk ki, amellyel meghatározható a különböző felszíntípusokat érő, tényleges ózonerhelés mértéke. A csatolt modellel Magyarország területére megadtuk az ózon koncentrációjának, ülepedési sebességének, valamint az ülepedési fluxusának (teljes és a növényzet légcserenyílásain keresztüli) a térbeli eloszlását. A kutatás fontosságát mutatja, hogy az ózon a sztomákon (légzőnyílásokon) keresztül jut be a növényzet sejtjeibe és fejt ki ott roncsoló hatását. Ezért a tényleges ózonerhelést sokkal inkább az ülepedés, mint pusztán a koncentráció határozza meg. Összekapcsoltuk a terjedési modellt az Országos Meteorológiai Szolgálat ALADIN nevű időjárás-előrejelző modelljével, így gyakorlatban lehetőség van arra, hogy a légkörkémiail modellt operatív úton lehessen futtatni.

- Az ülepedési modellel Magyarország területére végeztünk számításokat. A modell bemenő adatait részben az Országos Meteorológiai Szolgálatnál alkalmazott ALADIN numerikus előrejelzési modell szolgáltatja. Ezek a felszíni meteorológiai állapotjelzők (hőmérséklet, csapadék, borultság, szélesség, szélirány, relatív nedvesség), a magaslégköri adatok (hőmérséklet, szélesség, szélirány, relatív nedvesség), valamint a felszínborítottságra vonatkozó információk (11 felszínborítottsági kategória). A felszínre,

a növényzetre, a talajra (7 fizikai talajféleség) és a nyomgázokra vonatkozó paramétereket, valamint a kémiai komponensekre vonatkozó kezdeti feltételeket szakirodalmi hivatkozásokból és hazai parametrizációkból nyertük. A koncentráció mezők meghatározásához hazai és nemzetközi emisszió katasztereket használtunk. A rendelkezésre álló adatbázis alapján részletes térbeli felbontásban szabályos rácsra számítottuk az ózonkoncentráció, az ülepedési sebesség és az ózonfluxus értékeit egy vegetációs periódusra. Elemeztük az egyes hónapok és évszakok közti különbségeket, valamint az időjárási helyzet, a növényfiziológiai paraméterek és a talajtípus hatását az ülepedésre. Meghatároztuk Magyarország területére a nemzetközi szakirodalomban használt küszöbszámok fölötti ózonterhelés mértékét. Összehasonlítottuk a koncentráció és fluxus alapú mérőszámok alapján kapott eredményeket. Ehhez az ún. AOT40 és a sztómafluxus mennyiségeket számítottuk a szabályos rácsra. Az AOT40 az órák 40 ppb koncentráció fölötti értékeit összegzi egy megadott időszakra. A sztómafluxus a ténylegesen a növénybe jutó és ott károsító hatást kifejtő ózonmennyiséget adja meg. A két mérőszám által kapott eredmények egyes területeken és időszakokban jelentősen eltérhetnek. Munkánkban rávilágítottunk, hogy a korábban elterjedten használt, pusztán koncentráció alapú mértéknél jóval pontosabb, kifinomultabb térbeli szerkezetet mutat a sztómafluxus alapján készített terhelési térkép. A fluxus ugyan jóval bonyolultabban meghatározható mennyiség, de az alkalmazott modellel lehetőség nyílt a részletes tér- és időbeli eloszlás becslésére (5. ábra). A havi ózonterhelési térképek alapján körülhatárolhatóvá váltak a leginkább szennyezett területek Magyarországon. Eredményeink alapján elemeztük a különböző terhelési térképeket, valamint az egyes mérőszámok közti eltéréseket. Az ülepedési fluxust az ülepedési sebesség és a referencia szintre (a modellben az aktív felszín felett 10 m-re) meghatározott ózonkoncentráció szorzataként számítjuk. Az ülepedési sebességet az ülepedést akadályozó ellenállások eredőjének reciprokaként állítjuk elő. Ezek az ellenállások az aerodinamikai ellenállás, a kvázi-lamináris határréteg ellenállása, valamint a felszíni ellenállás. Az aerodinamikai ellenállás a turbulencia által a felszín felé irányuló szennyezőanyag transzportot gátolja, a kvázi-lamináris határréteg ellenállás a felszín feletti vékony rétegben a molekuláris diffúzió által történő anyagcserére hat, a felszíni ellenállás pedig a növényzet és a talaj különböző részeinek a száraz ülepedésre kifejtett gátló hatását írja le. Míg előbbi kettő meteorológiai állapotjelzők alapján parametrizálható, utóbbi egy összetett ellenállás hálózatot alkotva egyaránt függ az időjárási helyzettől, a felszíntől, a növényzettől, annak fiziológiai állapotától és a talajtípustól. Munkánk során a felszíni ellenállás egyes

tagjainak pontosítását végzetük részben mérési adatokra támaszkodva, részben kiterjedt szakirodalmi adatbázis alapján. Megadtuk a modellben használt összes felszín típusra az egyes ellenállás tagok számításánál használt felszín- és időszakfüggő paramétereket. A kutatások keretében részletes modell érzékenységi vizsgálatot végeztünk. Megvizsgáltuk, hogy melyek azok a modellparaméterek és input adatok, amelyek erősen befolyásolják a kapott eredményt. Az ózon ülepedés becslésében számos bizonytalan tényező okoz nehézséget. Az egyes állapotváltozók illetve modellparaméterek hatása a számított ülepedésre sokszor jelentős időbeli változást is mutat (pl. a nyári hónapokban jelentősen befolyásolja a számításokat, az átmeneti évszakokban viszont elhanyagolható a hatása). Az érzékenységi vizsgálatok során első lépésben azt az egyszerű módszert követtük, hogy a bemenő adatok értékét egyenként, pozitív és negatív irányba változtatva megvizsgáltuk az eredményt. A részletes vizsgálatok során rámutattunk, hogy a hazai kontinentális viszonyok mellett a nyári félévben a talajnedvesség közvetett mechanizmusokon keresztül markánsan befolyásolja az ülepedés mértékét. Erdőállományokra hosszabb időszakra is végeztünk érzékenységi vizsgálatokat.



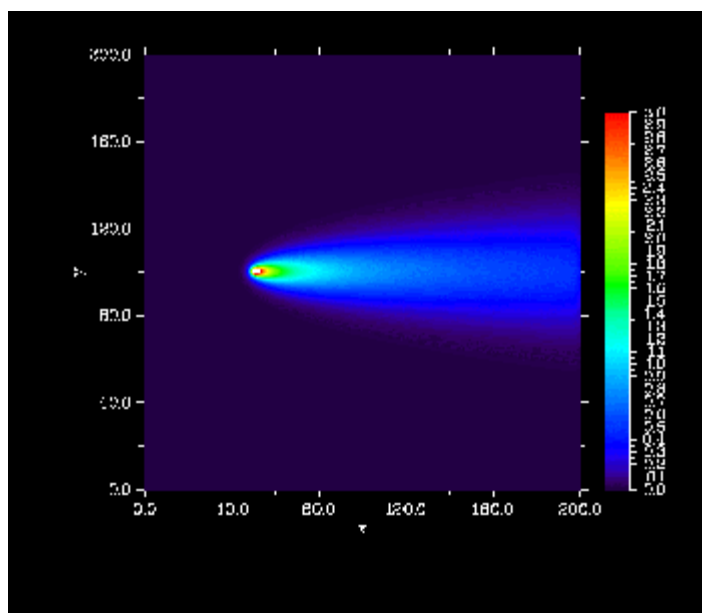
5. ábra A modellel számított átlagos ózon-koncentráció, átlagos ülepedési sebesség és teljes fluxus Magyarország területére 1998 júliusában.

II. 3. Reakció-diffúzió rendszerek hatékony modellezése multiprocesszoros számítógépen

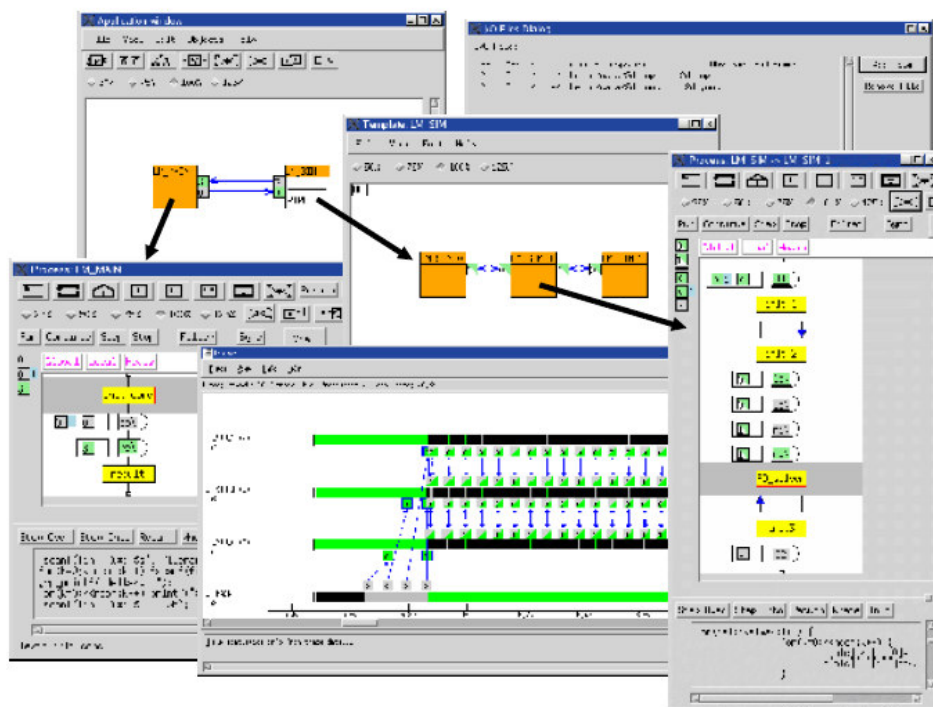
A MTA SZTAKI által létrehozott párhuzamos programfejlesztő rendszer (P-GRADE) segítségével elkészítettünk több párhuzamos alkalmazást (általános, merev kémiai kinetikai egyenleteket is megoldó reakció-diffúzió modell és légkörkémiai csóva terjedését leíró modell). Teljesítményanalizálási eszközökkel monitorizáltuk az alkalmazásokat. A modellek párhuzamosításával jelentősen lerövidült – az amúgy igen időigényes alkalmazások - futtatási ideje.

- Kidolgoztunk egy programot a reakció-diffúzió-advekción egyenletek megoldása, passzív nyomanyagok (radioaktív nuklidok) terjedésének szimulációjára. A reakció-diffúzió-advekción egyenletek matematikailag másodrendű parciális differenciálegyenletek. Ezekhez az egyenletekhez az adott feladattól függő kezdeti- és peremfeltételeket kell megadnunk. Legtöbb esetben a reakció-diffúzió-advekción egyenleteket, hasonlóan az egyszerűbb felépítésű reakció-diffúzió egyenletekhez, nem lehet analitikusan megoldani. Az egyenletek megoldása numerikusan történik és a numerikus megoldás egyik hatékony módszere az ún. "method of lines". Ilyenkor a reakció-diffúzió-advekción egyenletek megoldásához a szimulálandó tér diszkretizációja szükséges, amelynek során a fizikai teret (jelen esetben a síkot) cellákra (rácshálózatra) bontjuk, majd a tér mindkét térbeli változó irányában megvizsgáljuk a reakción, advekción és a diffúzió okozta koncentrációváltozásokat. A párhuzamosított algoritmus lényege, hogy a tartományt felbontjuk egyenlő részekre és az egyes processzek egymástól függetlenül számítják az adott tartományban végbemenő koncentrációváltozásokat a differenciálegyenletek segítségével. A diffúzió és advekción rövid kölcsönhatási távolsága miatt csak a szomszédos cellákban lejátszódó folyamatok hatnak egymásra, ami elősegíti a probléma futtatását többprocesszoros rendszereken. A diffúzió és az advekción miatt minden időlépésben a szomszédos tartományok határainak koncentrációvektorát át kell küldeni a szomszédos részeknek. Egy pontforrásból származó passzív anyag terjedését mutatja a 6. ábra. A pontforrás az (50,0, 100,0) koordinátájú pontban található. A szimuláción során felhasznált bemeneti paraméterek (*2d.inp1* fájl): $h = 100\text{m}$ forrás magassága), $\Delta t = 900\text{s}$ (időlépés), $K = 50\text{ m}^2/\text{s}$ (turbulens diffúziós együttható), $u = 5\text{ m/s}$ (szélmező vízszintes komponense), $v = 0\text{ m/s}$ (szélmező függőleges komponense). Ahogy azt a 7. ábra is mutatja a P-GRADE-en belül az *I/O Files Dialog* ablakban, a kimeneti értékeket a *2d1.out* fájlba írja az LM_MAIN processz, amit később a *dislin* programcsomaggal vizualizálhatunk (ld. 6.ábra). A folyamatok legfelső (alkalmazás) szintű kommunikációs

topológiáját a 7. ábra, *Application window* mutatja. Az LM_MAIN processz felelős a bemeneti paraméterek beolvasásáért, a kezdeti értékadásokért, az információ szétosztásáért a szimulációt végző processzek között a két 0-ával jelölt kommunikációs port és a közöttük kialakított kommunikációs csatorna segítségével. Később az eredmények összegyűjtését is ez a folyamat végzi a 3-sal jelölt kommunikációs portok és a közöttük definiált kommunikációs csatorna segítségével, majd a megfelelő kimeneti fájlba írja a szimuláció eredményét. A LM_SIM egy skálázható PIPE kommunikációs topológia, ami a már említett szimulációs lépések elvégzésért felelős. Az LM_MAIN processzen belül (7. ábra, *Process: LM_MAIN*) a kezdeti deklarációkat és értékadásokat követően definiáljuk a kezdeti feltételeket (*init cond*), majd egy multicast üzenettel elküldi a szimulációt végző processzeknek a szükséges információkat (*co*), majd egy másik kollektív kommunikáció segítségével (*re*) begyűjti a részeredményeket, végül az eredmények értékelése és kiírása következik (*result*). A szerkesztőablak alján kezdeti feltételek meghatározásához szükséges kód egy rövid részlete látható. A PIPE szervezésekor (7. ábra, *Template: LM_SIM*) minden egyes processz a fizikai tér egy szegmensét jelöli, amelyek minden időlépcsőben kommunikálnak egymással, átadva a határoló részekben a koncentrációvektorokat. Ezért szükséges a kétirányú kommunikációs csatorna és a ki/bemeneti kommunikációs portok alkalmazása ezen a szinten.



6. ábra A szimuláció eredménye *dislin* programcsomag segítségével vizualizálva.



7. ábra A levegőminőségi alkalmazás klaszter verziója P-GRADE alatt.

A reakció-diffúzió-advекció egyenletet megoldó egyik processz szerkezetét a 7. ábra, *Process: LM_SIM*→*LM_SIM_1* mutatja. A kezdeti inicializálás után (üzenetek fogadása az *II* –en keresztül, majd *init_1* szekvenciális ikon) az adott szegmensre vonatkozó kezdeti feltételekkel ciklusba szervezve oldjuk meg a problémát. Minden időlépcsőben meghatározzuk a határfeltételeket (*init_2*), a szegmensek közötti határon a koncentráció vektorokat átadjuk a szomszédoknak (*le* és *re* kommunikációs akciók), majd következik a transzport és a kémiai reakció tag numerikus megoldása a bevezetőben ismertetett módszerek alapján (*RD_solver*). A szerkesztőablak alján a numerikus megoldó kód egy rövid részlete látható. A ciklus végén a folyamat visszaküldi a részeredményeket az *LM_MAIN* processznek. A párhuzamos program teljesítményanalízise 200 iterációval és a numerikus szimuláció 200×200 felbontású négyzögrácson történt az MTA SZTAKI intézeti klaszterén. A 7. ábra, *PROVE* ablaka az 5,5 és 6,8 másodperc közötti időszakot mutatja, ahol jól megfigyelhető, ahogy a kezdeti értékek átadása és a szimulációs lépések egymás után történnek.

III. Összegzés

III. 1. A kutatás során megjelent, az adott területre jellemző legfontosabb közlemények:

- Reguláris és mozgó csapadékmintázatok vizsgálata és modellezése;

A. Volford, F. Izsák, M. Ripszám and I. Lagzi, **Pattern formation and self-organization in a simple precipitation system**, *Langmuir*, 23, 961-964, 2007

A. Volford, F. Izsák, M. Ripszám and I. Lagzi **Systematic front distortion and presence of consecutive fronts in a precipitation system**, *J. Phys. Chem. B*, 110, 4535-4537, 2006

- Részletes ózonfluxusok számítása operatív módon Magyarország területére;

I. Lagzi, R. Mészáros, L. Horváth, A.S. Tomlin, T. Weidinger, T. Turányi, F. Ács and L. Haszpra, **Modelling ozone fluxes over Hungary**, *Atmos. Environ.*, 38, 6211-6222, 2004

I. Lagzi, A. S. Tomlin, T. Turányi and L. Haszpra, **Photochemical air pollutant formation in Hungary using an adaptive gridding technique**, *Int. J. Environment and Pollution* (in press)

- Reakció-diffúzió rendszerek hatékony modellezése multiprocesszoros számítógépen;

R. Lovas, J. Patvarczki, P. Kacsuk, I. Lagzi, T. Turányi, L. Kullmann, L. Haszpra, R. Mészáros, A. Horányi, A. Bencsura, Gy.Lendvai, **Air pollution forecast on the HUNGRID infrastructure**, in: 'Parallel Computing: Current & Future Issues of High-End Computing', G. R. Joubert, W. E. Nagel, F. J. Peters, O. G. Plata, P. Tirado, E. L. Zapata (eds.), John von Neumann Institute for Computing Series, Vol. 33, Jülich, Germany, 121-128, 2005 ISBN 3-00-017352-8

R. Lovas, I. Lagzi, L. Kullmann and Á. Bencsura, **Chemistry GRID and its applications for air pollution forecast**, *ERCIM News*, 61, 16-17, 2005

III. 2. A kutatás számszerű jellemzése:

1. Az OTKA Posztdoktori pályázat elnyerése óta (2004. augusztus) megjelent (közlés alatt álló) tudományos közlemények és konferenciák száma:

Összes publikációk száma: 46

Összes konferenciák és előadások száma: 40

Könyvfejezetek: 2

Folyóiratban megjelent közlemények: 22 (kumulatív IF: 31,111)

Konferencia proceedings-ek: 7

Konferencia összefoglalók: 13

Tanulmányok, kutatási jelentések: 2

2. A **Langmuir** folyóiratban megjelent cikkünk (A. Volford, F. Izsák, M. Ripszám and I. Lagzi, *Pattern formation and self-organization in a simple precipitation system, Langmuir*, 23, 961-964, 2007) bekerült a „The Most-Accessed Articles: January-March, 2007” közé.
(http://pubs.acs.org/journals/langd5/promo/most/most_accessed/2007q1.html)

3. A posztdoktori kutatásom 3 éve alatt *három* alkalommal voltam meghívott előadó nemzetközi konferenciákon:

I. Lagzi:
Self-organization and dynamic pattern formation in precipitation systems
Workshop on Experimental and Theoretical Studies of Precipitation Patterns, 27-29 July, 2007, Tokyo, Japan (Invited Lecture)

F. Izsák, M. Ripszám, T. Szakály, A. Volford and I. Lagzi:
Pattern formation and self-organization in precipitation systems
Gordon Research Conferences, Oscillations and Dynamic Instabilities in Chemical Systems, 30 July - 04 August, 2006, Oxford, UK (Invited Lecture)

I. Lagzi and F. Izsák:
Experimental advances in Liesegang pattern generation and control
Workshop on stochastic effects in Liesegang pattern formation, 17-19 January, 2006, Sils-Maria, Switzerland (Invited Lecture)

Budapest, 2007. 10. 28.

Lagzi István László