Biokonvekciós mintázatok numerikus modellezése

SZALAI FERENC ATTILA

2003.

Tartalomjegyzék

1. Bevezető **5**
1.1. Úszó organizmusok megfigyelése - biokonvekció 6

2. Taxisok - biokonvekció modellek **13**
2.1. Modellezési technikák 13
2.2. Geotaxis 14
2.3. Gyrotaxis 17
2.3.1. Új kontínum modell 21
2.4. Oxotaxis 23
2.5. Eddigi eredmények 25

3. Numerikus módszer **27**
3.1. Szimulációs tér 27
3.2. Diszkretizálás térben 28
3.2.1. Véges térfogat módszer 29
3.3. Diszkretizálás időben 33
3.3.1. Nyomáskorrekciós módszer 34
3.4. Nyomás Poisson egyenlet megoldása 35
3.4.1. Simító iterációk 36
3.4.2. Interpoláció és restrikció 37
3.4.3. Többrácsos iteráció algoritmusa 39

4. Tesztfeladatok **41**
4.1. Tesztfeladat a többrácsos módszerhez 41
4.2. Tesztfeladat a Navier-Stokes megoldóhoz 44
4.2.1. Lamináris eset 44
4.2.2. Turbulens eset 44
4.3. Tesztfeladat a konvekciós diffúziós egyenlet megoldóhoz 46

5. Eredmények **49**

6. Összefoglalás **51**

7. Köszönetnyilvánítás **53**

A. Geotaxis - diszkretizáció **57**

1. fejezet

Bevezető

Az utóbbi évtizedekben a fizikában különös figyelmet szentelnek a kollektív effektusok vizsgálatának. A statisztikus fizika módszerei egyre több határterületen hatékony eszköznek bizonyulnak, kezdve az emberi viselkedéstől egészen a biológiai folyamatok modellezéséig. Különösen azok a kollektív folyamatok keltik fel az érdeklődést, melyek valamilyen mintázat képződéssel járnak. Ennek az érdeklődésnek köszönhető a szilárdtest fizikában a felületek fraktál jelenségek megismerése valamint a biológiai folyamatok során keletkező mintázatok utóbbi időben egyre erőteljesebb vizsgálata is.

Miért is érdekel minket az úszó mikroorganizmusok mintázatképződése?

Ezek a mikroorganizmusok - jellemzően baktériumok - olyan kicsik, hogy szabad szemmel nem láthatóak és a mindennapi életünket nem befojásolják jelentősen. Ugyanakkor ezek a mikroorganizmusok mindenhol jelen vannak kezdve a gyomrunktól egészen az óceánok mélyéig és sok millió évvel korábban léteztek, mint mi emberek. Az életciklusok viszonylag jól meghatározott egyszerű szabályokat követ. Ennek az életciklusnak egy alapvető része az organizmusok kollektív viselkedése által létrehozott mintázatok is.

A mikroorganizmusok fontossága szempontjából nem elhanyagolható az a tény, hogy számtalan ipari folyamat használja manapság ezeket különféle biotechnológiai eljárás keretében. Vannak olyan baktériumok, melyek szennyvizeket tisztítanak mások alkoholt termelnek. Továbbá ők alkotják a földi biomassza jelentős részét.

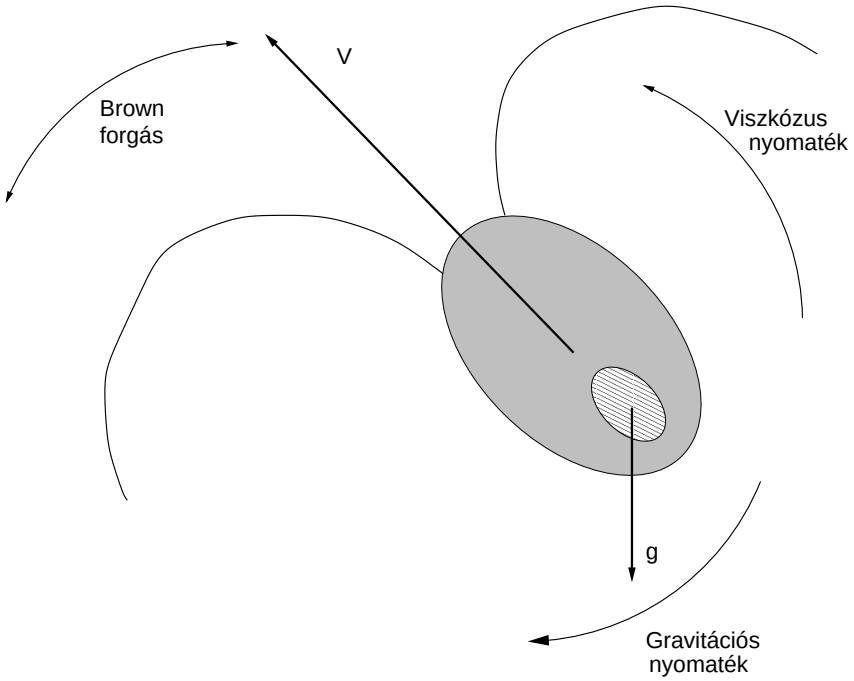
Természetesen az az általános remény fűződik az ilyen mikroorganizmusok vizsgálatához, hogy ha ezeknek az egyszerű lényeknek a kollektív viselkedése során keletkező mintázatok tulajdonságait megismerük, akkor közelebb juthatunk a komplexebb élőlények (hagyák, méhek, emberek) kollektív viselkedésének megértéséhez is.

Mi az alábbi dolgozatban az úszó mikroorganizmusok életciklusa során keletkező mintázatok egy jellegzetes fajtájára az úgynevezett biokonvekcióra fókuszáljuk figyelmünket. Összefoglaljuk az eddig elért kísérleti és elméleti valamint szimulációs eredményeket, majd kiegészítjük azokat az általunk kapottakkal.

1.1. Úszó organizmusok megfigyelése - biokonvekció

A "biokonvekció" kifejeztést először Platt használta 1961-ben hogy elnevezze a vékony szuszpenzióban mozgó organizmusok által létrehozott mintázatokat. Mindemellett magát a jelenséget nem akkor említik először. Az 1800-as évek közepén már hivatkoztak a mintázat képződés ezen formájára. Később mások (Nultsch és Hoff (1973), Plesset és Winet (1974), Kessler (1984)) is megerősítették Platt megfigyelését és ki is terjesztették azokat. Az utóbbi 15-20 évben különösen J. O. Kessler munkásságának köszönhetően ismertünk meg több fontos jelenséget az úszó mikroorganizmusok mintázatképződésével kapcsolatban. Ő vezette be a gyrotaxis kifejezést annak a mechanizmusnak a jellemzésére melyet U-alakú csőben figyelt meg, mikor is a cső egyik szárán lefele úszó organizmusok "fókuszálódnak" egy vékony tartományra (erre még később visszatérünk).

A kísérletek számtalan különféle fajjal zajlanak: *Chlamydomonas nivalis*, *Euglena viridis*, *Euglena gracilis*, *C. cohnii*, *Tetrahymena pyriformis*, *Bactilius subtilis*, *Heterosigma akashiwo*. Ezek mindegyikére az jellemző, hogy átlagosan 5-10% nagyobb a sűrűségük, mint a víz. méretük a $1\mu m$-től néhány 100 μm-ig terjed ezért is az őket körülvevő fizikai közeggel történő kölcsönhatás határozza meg döntően a mozgásukat. Alakjuk jellemzően közel gömb vagy elnyújtott forgásellipszoid. Fontos tulajdonságuk még, hogy a tömegközéppontjuk és a geometriai középpontjuk nem esik egybe, ami a biológiai felépítésük közvetlen következménye.



1.1. ábra. Erőhatások a *Chlamydomonas nivalis*-on.

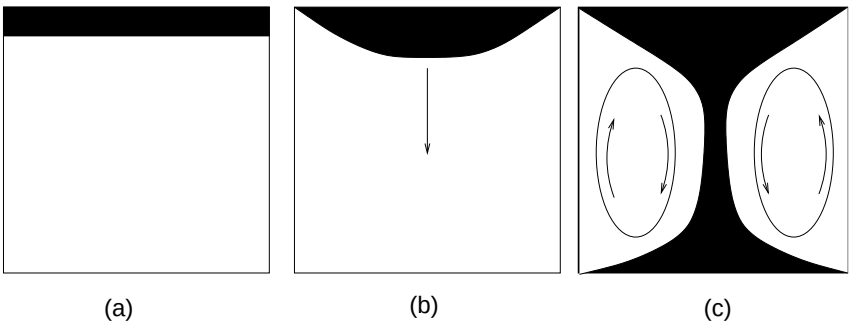
A megfigyelt mintázatképződés az organizmusok mozgásformáinak közvetlen következménye. Ezeket a mozgásformákat az organizmusokra ható erők határozzák meg.

Számtalan különböző erő hathat egy úszó organizmusra ezek közül a legtöbb külső eredetű és alapvetően fizikai természetű, de vannak belső kényszerekből adódóak is melyek döntően az organizmus biológiai viselkedésével kapcsolatosak. A 1.1 ábrán a legfontosabb erőket mutatjuk meg egy algán.

A legtöbb olyan organizmus - legyen az akár alga akár baktérium - rendelkezik valamilyen speciális szervvel mellyel az belső biológiai működésből adódó akaratlagos mozgás végrehajtható. Ezek általában valamilyen csáp szerű szervek. Mozgatásukkal keletkezett erő elsődlegesen határozza meg az organizmus sebességvektorát. E mellett mivel az organizmusok tömegközéppontja és a geometria középpontja nem esik egybe így a gravitáció is forgató nyomatékot fejt ki rá. Ehhez járul még egy viszkózus nyomaték ami annak eredménye, hogy az organizmus a súrlódó folyadékban forog.

Ezekhez a determinisztikus erőhatásokhoz még véletlen effektusok is járulnak. Ez annak következménye, hogy az organizmusok mérete kicsi és ekkor a Brown-típusú termikus fluktuációk jelentősek lehetnek. A megfigyelések szerint azonban ez csak az organizmusok mozgási irányában jelentkezik jelentősen.

E mellet egyéb véletlen effektusok is felléphetnek mivel az organizmusok mérete, alakja, mozgékonysága is változat egy mintában, ami végül is organizmus koncentráció szűrtségének fluktuációjában jelentkezik egy kontinuum modellben.



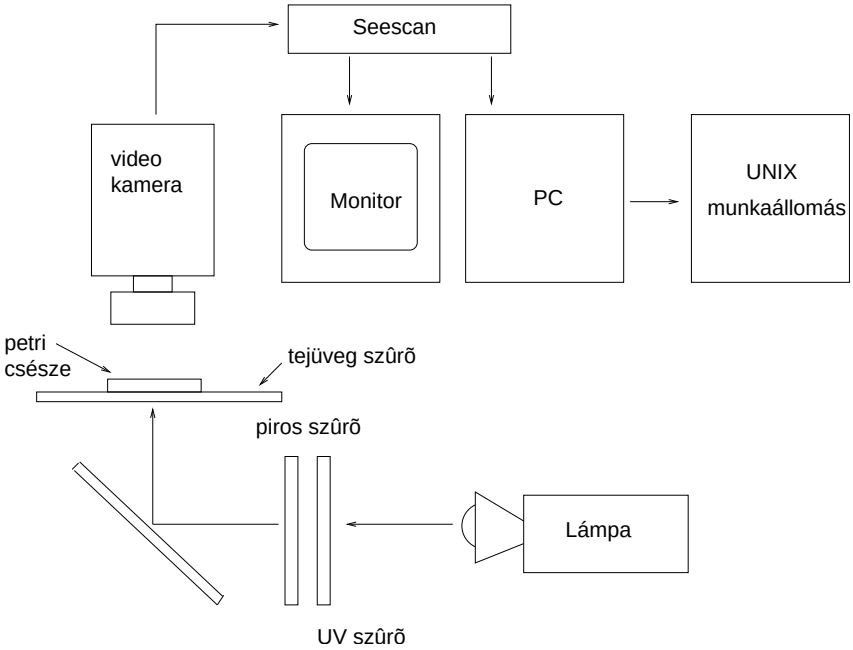
1.2. ábra. Rayleigh-Taylor típusú instabilitás.

Az erőhatások eredőjeként végül is egy olyan mozgás jön létre, mely a gravitációs erővel ellentétes irányú. Az úszás sebességének abszolút értéke $10\frac{\mu m}{s}$-tól néhány 100 $\frac{\mu m}{s}$-ig terjedhet.

A mintázatképződés folyamata sok esetben emlékezetet az ismert Rayleigh-Taylor instabilitáshoz: Az organizmusok koncentrációja a folyadékban kezdetben egyenletes. Mivel az átlagos mozgási irány jellemzően a gravitációval ellentétes irányú a folyadék felszínének közelében kialakul egy magas organizmus koncentrációjú réteg. Ha ebben a rétegben a koncentráció meghalad egy kritikus értéket a réteg instabillá válik és úgynevezett ujjak jelennek meg melyek a felszínről lefelé nőnek. Amikor a ujj eléri a közeg alját szétterülnek így a lokális koncentráció

csökken és megindul a leszálló ujjtól távolabb egy felfelé áramlás. Amennyiben a közeg elég széles több ilyen ujj is kialakulhat, melyek kölcsönhatnak egymással és igen komplex mintázatokat hozhatnak létre. A folyamatot a 1.2 ábra szemlélteti.

Azonban a gyrotaxis (lsd.:2.3 fejezet) egy másik instabilitást is létrehozhat. Ez az instabilitás nem csak a folyadék felszínén, hanem annak belsejében is létrejöhet. Tegyük fel ugyanis hogy a folyadék belsejében egy kis fluktuáció miatt egy magasabb koncentrációjú régió jön létre. Az ebben a tartományban mozgó organizmusok a gyrotatikus viselkedésünk miatt olyan sebesség teret hoznak létre, ami gyorsabb úszást tesz lehetővé és a környező régiókból is vonzza az organizmusokat a régióba és ez tovább növeli a sűrűségét. Ehhez járul még, hogy egy ilyen régió a közeg aljáról felfele úszó organizmusokat magukba tudják szippantani és ezáltal egyre elnyújtottabbá válnak. Végül egy ilyen régió is eléri a közeg alját ahol hasonlóan viselkedik, mint a Rayleigh-Taylor instabilitás ujjai. Ezt a jelenséget nevezzük "gyrotatikus fókuszálásnak".



1.3. ábra. Kísérleti elrendezés biokonvekciós mintázatok rögzítéséhez.

A fentiekben leírt jelenegek együttesen végül is folyadék közegben igen bonyolult mintázatokat képesek létrehozni. Ezeknek a mintázatoknak a tanulmányozása a fő feladatunk. A 1.3 ábra egy tipikus kísérleti elrendezést mutat, mellyel ezeket a mintázatokat meg szokták figyelni. A kísérleti elrendezéssel általában szürke fényképek készíthetőek a mintázatokról felürül. A 1.4 ábra ilyen mintázatokat mutat.

Ezeknek a fényképeknek a megfelelő feldolgozásával kaphatjuk meg a kialakuló mintázatokat jellemző paramétereket.

1.4. ábra. Biokonvekció mintázatok.

Az egyik legfontosabb ilyen paraméter az mintázatok karakterisztikus vagy domináns hullámhossza.

A karakterisztikus hullámhossz több módszerre is meghatározható ezekből a fényképekből. Az egyik ilyen módszer a Fourier analízis. Ebben az esetben minden fényképpel a Fourier spektrumból ki kell szűrni a nemkívánatos zajokat, amik a petri csésze fala, a fényvisszaverődések és szóródások valamint a kép szélei effektusok okozhatnak. Ez utóbbi a legjelentősebb a Fourier analízis során, de egy megfelelően választott ablakfüggvénnyel ez a hibaforrás könnyen csökkenthető. A fényképek diszkrét Fourier transzformáltjaiból előállítható a diszkrét Fourier intenzitás spektrum ($I(k)$), mely a megfigyelések szerint jól illeszthető az alábbi formulával:

$$\ln(I(k)) = \alpha|\ln(k) - \ln(k_0)| - \beta\ln(k) + C \tag{1.1}$$

ahol α, β, C illesztési paraméterek, a k_0 a keresett karakterisztikus hullámszám.

Egy másik módszer a karakterisztikus hullámhossz meghatározására a a normalizált szürkeségi értékek közötti kép-pont korrelációs függvény számítása.

Az ilyen módon számított karakterisztikus hullámhosszak számtalan érdekes tulajdonságát sikerült megfigyelni. Ez egyik ilyen tulajdonág a karakterisztikus hullámhossz függése a biokonvekció közegmélységétől. Bees [4]-ben *Chlamydomonas nivalis*-on végzett kísérleteiben lineáris kapcsolatot mutatkozik ugyanezt jelzik [14]-ban is *Heterosigma akashiwo*-ra.

Ezzel szemben Czirók András [7]-ben *Bactilius subtilis*-en végzett vizsgálatai ilyen összefüggést nem mutattak ki, ott lényegében a karakterisztikus hullámhossz független volt a közeg

mélységétől.

Ennek az eltérésnek az oka feltehetőleg az, hogy míg a *Chlamydomonas nivalis* mozgását alapvetően a gyrotaxis (lsd.: 2.3 fejezet), míg *Bactilius subtilis* mozgását az oxotaxis (lsd.: 2.4 fejezet) határozza meg.

Természetesen ez a karakterisztikus hullámhossz nem csak a közegmélységtől, hanem más paraméterektől is erősen függ. Például a kezdeti koncentráció döntően befolyásolja. Megfigyelések szerint a koncentráción növelésével lassan csökken és ez a kialakuló mintázatok típusaira is nagy hatással van.

A kialakuló mintázatok típusai önmagukban is érdekesek nem csak az őket jellemző paraméterek. Bees vizsgálatai során négy nagy csoportot figyelt meg: vonalak, hálózatok, körök és pontok. Mintázatok kialakulásának időbeli sorrendje is fontos. Általánosan azt mondható, hogy az idő előre haladtával az összefüggő mintázatok egyre jobban feldarabolódnak. Így kezdetben kialakuló vonal szerű alakzatok köröket tartalmazó hálózatokba rendeződnek. A hálózatokban a köröket X és Y alakú csatlakozások kötik össze. Egy kicsivel később a hálózat eltűnik és valamivel nagyobb önálló körök maradnak. Később a körök apró pontokká töredeznek a körök körvonalai mentén. Végül egy rendezetlen ponthalmazt kapunk. Természetesen ettől egy kicsit eltérő folyamat is lejátszódhat. Például a pontokat összekötő hálózat is kialakulhat.

Jelenleg ennek a mintázat hierarchia kialakulásának a pontos mechanizmusa nem ismert. Több elképzelhető magyarázatot is adott Bees [4] munkájában, melyek nagy része összefügg a karakterisztikus hullámhossz hosszú idő alatt bekövetkező változásával.

Ennek a változásnak a lényege, hogy míg a biokonvekciós mintázatok néhányszor 10 másodperces időskálán az instabilitást követően stabilizálódni látszanak és a karakterisztikus hullámhossz időben alig vagy egyáltalán nem változik, addig néhányszor 10 perces időskálán azt tapasztaljuk, hogy határozott növekedés következik be. E mellett szemben a rövid időskálájú mintázatokkal a kifejlett mintázatokat jellemző karakterisztikus hullámhossz nem függ számottevően a közegmélységtől és a kezdeti koncentrációval határozottan csökken.

A mintázatképződés mellett különösen annak modellezése szempontjából fontosak az olyan mérési eredmények, melyek az egyedi organizmusok mozgását vizsgálják. mint azt a következő fejezetben látni fogjuk a biokonvekció modellek számtalan feltételezéssel élnek az organizmusok mozgásának alapvető tulajdonságaira. Az egyik ilyen paraméter az átlagos sebesség illetve annak iránya. Különösen J.O. Kessler méréseinek (pl.: [20], [24]) köszönhetően néhány adat rendelkezésünkre áll ezzel kapcsolatban is.

A *C. nivalis*-al végzett kísérletekben az organizmusok átlagos sebességének nagyságára $|\mathbf{U}| = 63\frac{\mu m}{s}$ adódott. A sebesség függőleges komponense dominált ugyan a mérésekben, de megfigyelhető volt, hogy nem csak függőleges irányú sebességkomponense volt az organizmusoknak. ($\frac{U_v}{|\mathbf{U}|} \approx 0.51$).

Az organizmusok mozgásának véletlenszerűségét jól jellemezhetjük egy diffúziós tenzorral. Ez a paraméter fontos szerepet fog betölteni későbbi modelljeinkben. Kezdetben teljesen iztrópnak ($D_{11} = D_{22} = D_{33} = D_0$) tekintették de a mérések később rámutattak, hogy a függőleges irányú komponens eltérhet a másik kettőtől. Ennek az eltérésnek a nagysága méré-

sek szerint: $\frac{D_{11}=D_{22}}{D_33} \approx 1.94$. Abszolút értékben pedig azt mondhatjuk, hogy: $D_{11} = D_{22} \approx 1.3 \times 10^{-5} cm^2 s^{-1}$ valamint $D_{33} = 0.67 \times 10^{-5} cm^2 s^{-1}$.

A 1.1 táblázatban összefoglaljuk a kísérletileg meghatározott paramétereket. A paraméterek pontos definíciójának helyére hivatkozunk a táblázatban.

Paraméter neve	Jelölés	Dimenzió	*Chlamydomonas n.*	*Bactilius subtilis*
Részecskeszám sűrűség	N_0	$\frac{1}{cm^3}$	$\approx 10^6$	$\approx 10^9$
Átmérő	r	μm	1-10	0.7
Excentricitás	α_0	-	0.2-0.4	0.78-0.97
(2.37)	$\alpha_\perp$	-	6.8	4
Tömegközéppont offszet (2.31)	h	μm	0-0.5	N. A.
Térfogat	V_m	$\frac{1}{cm^3}$	1×10^{-11}-5×10^{-10}	10^{-12} - 10^{-13}
Sűrűség	ρ_m	$\frac{g}{cm^3}$	1.05-1.1	1.1-1.15
Sebesség	U_{s0}	$\frac{\mu m}{s}$	50-100	40-80
Diffúzivitás (2.20)	D_h, D_v	$10^{-5}\frac{cm^2}{s}$	1.3,0.67	0.3-0.13, 0.3-0.13
Korrelációs idő (2.54)	τ	s	1.3	N. A.
Gyrotaxis paraméter (2.48)	B	s	3.4-6.3	N. A.
Forgási diffúzivitás (2.54)	D_r	$\frac{1}{s}$	0.067-0.13	N. A.
Oxigén fogyasztás (2.66)	K	$\frac{\text{molekula}}{s}$	-	10^6
Oxotaxis konstans (2.75)	a	cm	-	min(0.01H,0.05)
Oxotaxis határkoncentráció (2.69)	$C_{\mathtt{min}}$	$\frac{\text{molekula}}{cm^3}$	-	$< 10^{17}$

1.1. táblázat. Paraméterek. A paraméterek többsége közelítő vagy átlagos érték. A paraméterek neve melletti számok azokra az egyenletekre hivatkoznak melyekben az adott paramétert definiáljuk. (N. A. = Nem találtunk az irodalomban adatot)

2. fejezet

Taxisok - biokonvekció modellek

Ebben a fejezetben természetesen nem a taxisofőrökről lesz szó! A biológiában taxisoknak nevezzük azokat a hatásokat, melyek az egyszerű organizmusokat - különösen az egysejtűeket - bizonyos mozgás formákra kényszerítenek. Ezek a hatások azok melyek az organizmusokra ható belső kényszerből származó erőit meghatározzák.

A legtipikusabb példa a taxisokra a *kemotaxis*, mikor az organizmusok a kémiai anyagok koncentrációjára érzékenyek és megváltoztatják mozgásukat a magas koncentrációjú helyek közelében. A másik a *fototaxis*, mikor a fényintenzitás befolyásolja jelentősen az organizációk mozgását. Továbbá a *geotaxis* vagy más néven gravitaxis amikor a gravitációs erő módosítja a mozgás jellegét. A gravitációs és viszkózus nyomatékok különbségéből származó hatát pedig *gyrotaxisnak* nevezzük.

Taxisok nélkül az organizációk mozgása véletlenszerű. A természetes kiválasztódás során azok az organizmusok maradtak fenn, melyek a véletlenszerű mozgást és a taxisokat együttesen hatékonyan tudják kihasználni annak érdekében, hogy túlélési helyzetüket javítsák, például több táplálékhoz jussanak. Ebben a dolgozatban a taxisok közül különös figyelmet szentelünk a gyro- és a geotaxisnak.

2.1. Modellezési technikák

A modellalkotás során nem korlátozzuk magunkat a speciális fajokra és nem foglalkozunk a vizsgálat tárgyát képző organizmusok konkrét anatómiájával. Minden mozgásforma esetén egy általánosított úszó organizmus modellt készítünk, mely tükrözi a legfontosabb tulajdonságait a konkrét mikroorganizmusoknak is.

Többféle képen is modellezhetjük az úszó organizmusokat. Egyfelől megtehetjük az egyes organizmusok külön részecskéknek tekintjük és mozgásukat egyedileg modellezzük. Ez egyfajta sokrészecske modellt jelent. Azonban itt is meg kell birkózniuk a részecskéket körülvevő folyékony közeg mozgásának és a közeg valamint az organizmusok közötti kölcsönhatás modellezésével. Erre a típusú technikára jó példa a [17] cikkben található.

Mivel a kísérleti körülmények között az organizmusok részecske szám sűrűsége igen nagy így lehetőség kínálkozik a kontinuum modell bevezetésére is. Ebben az esetben az esetben bevezettük a részecskeszám sűrűséget n és erre a mennyiségre vezetünk le vagy tételezünk fel matematikai összefüggéseket. Ez a technika abból a szempontból kényelmesebb, hogy a szimuláció során egységes technikával modellezhetjük az organizmusokat tartalmazó közeget és magukat az organizmusokat is. Továbbá ez a módszer könnyen kiterjeszthető az össze taxis típusra is.

A dolgozatban mi ez utóbbi technikát fogjuk alkalmazni a különféle taxisok modellezésére.

2.2. Geotaxis

A biokonvekció első kontinuum modelljét Plesset és Winet alkotta meg. Ők a Rayleigh-Taylor instabilitást vették alapul. Ezt a modellt fejlesztette tovább Childers és munkatársai ahol, már figyelembe vették azt, hogy az organizmusok tudnak úszni adott sebességvektorral ($\mathbf{U}$). Bevezettek továbbá egy diffúziós mátrixot ($\mathbf{D}$) is, mellyel a véletlen mozgást kívánták leírni.

Mindemellett a legfontosabb feltételezés amivel e modell során élünk, hogy a gravitáció nem külön külön hat az organizmusokat tartalmazó folyadékra és az organizmusokra, ha nem azok elegyére együttesen. Ennek figyelembevételével amennyiben az organizmusok sűrűsége ρ_m ami nagyobb a folyadék ρ sűrűségénél és átlagos térfogata V_m akkor írhatjuk a teljes elegy sűrűségére (ρ_a), hogy:

$$\rho_a = \rho_m V_m n + \rho\,(1 - V_m n) = \rho(1 + \alpha n) \tag{2.1}$$

ahol bevezettük az $\alpha = \frac{V_m(\rho_m - \rho)}{\rho}$ változót ami az egyes organizmusok sűrűségjárulékát jellemzi.

A folyadékra vonatkozó egyenletekben feltették továbbá, hogy a Bossinesq közelítés alkalmazható és a folyadék összenyomhatatlan állandó viszkozitással. Ez utóbbi feltételezés abból adódik, hogy α kicsi. Ezek alapján a modellt az alábbi egyenletek definiálják:

$$\rho\left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathfrak{D}(\mathbf{v})\mathbf{v}\right) + \nabla p - \nabla \mathbf{\Sigma} = -\rho \mathbf{g}(1 + \alpha n) \tag{2.2}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \tag{2.3}$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0 \tag{2.4}$$

$$\mathbf{J} = n(\mathbf{v} + \mathbf{U}) - \mathbf{D}\nabla n \tag{2.5}$$

ahol $\mathbf{v} = (u, v, w)$ az organizmust tartalmazó folyadék sebessége, ρ annak sűrűsége, $\mathbf{J}$ a részecskeszám sűrűség fluxus. A $\mathbf{\Sigma}$ a viszkozitási tenzor:

$$\mathbf{\Sigma} = 2\eta \mathbf{E} \tag{2.6}$$

$$E_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i}\right) \tag{2.7}$$

ahol η a folyadék viszkozitása. Azért vezettük be ezt a jelölést, hogy később a gyrotaxisnál a viszkozitási tenzor fenti alaktól való eltérését könnyen be tudjuk vezetni. Természetesen jelen esetben a 2.2 egyenletben szereplő $\nabla\mathbf{\Sigma}$ tag a jól ismert Laplace alakra egyszerűsödik:

$$\nabla\mathbf{\Sigma} = \eta\nabla^2\mathbf{v} \tag{2.8}$$

Bevezettük továbbá a konvekciós tagok konzervatív jelölésére a $\mathfrak{D}$ operátort, melynek definíciója az alábbi:

$$\mathfrak{D}(\mathbf{v})v_i = \frac{\partial v_i}{\partial x_j}v_j = \frac{\partial(v_i v_j)}{\partial x_j} \tag{2.9}$$

A második egyenlőség összenyomhatatlan esetben és a 2.3 egyenlet segítségével adódik.

Az egyenletek teljes meghatározottsághoz hozzátartoznak a modell határfeltételei is. Itt feltételezzük, hogy az alsó ($z = 0$) át nem eresztő falon a sebesség és a részecskeszám sűrűség fluxus falra merőleges komponense eltűnik:

$$\mathbf{v} = \mathbf{0} \tag{2.10}$$

$$\frac{\partial w}{\partial z} = 0 \tag{2.11}$$

$$\mathbf{J}\cdot\mathbf{n} = nU_z + D_{zx}\frac{\partial n}{\partial x} + D_{zy}\frac{\partial n}{\partial y} + D_{zz}\frac{\partial n}{\partial z} = 0 \tag{2.12}$$

ahol $\mathbf{n}$ a határfelület normálvektora.

A felső határon ($z = H$) szabad felszínt tételezünk fel ugyanakkor mivel a felületen kialakuló fluktuációk elhanyagolhatóak így felületi feszültségtől és a felület emelkedésétől eltekintünk (nincsenek felületi hullámok).

$$\mathbf{v}\cdot\mathbf{n} = 0 \tag{2.13}$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \tag{2.14}$$

$$\frac{\partial^2 w}{\partial z^2} = 0 \tag{2.15}$$

$$\mathbf{J}\cdot\mathbf{n} = nU_z + D_{zx}\frac{\partial n}{\partial x} + D_{zy}\frac{\partial n}{\partial y} + D_{zz}\frac{\partial n}{\partial z} = 0 \tag{2.16}$$

Amennyiben a további két irányban fallal számolunk, úgy a határfeltételek az alsó falnak megfelelően alakulnak. Ha pedig periodikus határokat választunk akkor sebesség és a részecskeszám sűrűség egyenlő lesz a választott irány két végpontján.

A fenti határfeltételekből leszármaztatható a nyomásra vonatkozó határfeltételek is ha a 2.2 egyenletet a határon szeretnénk kielégíteni a megfelelő határfeltételek figyelembevételével.

Ez mindkét határ (felső és alsó) esetén az alábbi formulára egyszerűsödik:

$$(\nabla p)\cdot\mathbf{n} = -\rho g(1+\alpha n)\mathbf{n} \tag{2.17}$$

valamint a többi esetben pedig az alábbi összefüggés adódik:

$$(\nabla p) \cdot \mathbf{n} = 0 \tag{2.18}$$

A fenti modellel kapcsolatban alapvetően két kérdés merül fel. Egyfelől a $\mathbf{D}$ diffúziós együttható másfelől a $\mathbf{U}$ sebesség megválasztása és azoknak a többi változótól való függése.

Általában azt szokás feltételezni, hogy mindet változó a függőleges pozíció és a lokális részecskeszám szűrtség függvénye.

A geotaxis modellben az egyik legfontosabb egyszerűsítés, hogy a $\mathbf{U}$ vektorról feltesszük hogy konstans és a $\mathbf{k}$ irányba mutat. Az organizmusos tehát felfele úsznak azaz írhatjuk, hogy:

$$\mathbf{U} = U_0 \mathbf{k} \tag{2.19}$$

Ehhez még hozzájárul hogy egy anizotróp diffúziós tenzort használunk a véletlen mozgás jellemzésére az alábbiak szerint:

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} D_h & 0 & 0 \\ 0 & D_h & 0 \\ 0 & 0 & D_v \end{pmatrix} \tag{2.20}$$

Az anizotópiát a kísérleti eredmények igazolni látszanak (lsd. [24]).

A biokonvekció modellek további finomításának egy lehetséges útját jelöli ki ennek a két paraméternek a pontosabb meghatározása.

A dolgozatban szereplő összes modellt ugyanúgy fogjuk dimenziótlanítani, ez bizonyos esetekben a szokásos alakoktól való kisebb eltéréseket eredményezhet, de lehetővé teszi, hogy a későbbi szimulációk során kapott eredményeket könnyen össze tudjuk hasonlítani.

A dimenziótlanításhoz az alábbi helyettesítéseket fogjuk alkalmazni:

$$n \to N_0 \hat{n}; \mathbf{x} \to H\hat{\mathbf{x}}; \mathbf{v} \to \frac{D_0}{H}\hat{\mathbf{v}}; \mathbf{U} \to \frac{D_0}{H}\hat{\mathbf{U}}; t \to \frac{H^2}{D_0}\hat{t}; p \to \frac{\eta D_0}{H^2}\hat{p} - g\hat{z}\rho H; \tag{2.21}$$

ahol H a közeg mélysége.

A $Sc = \frac{\nu}{D_0}$ az úgynevezett Schmidt szám ahol $\nu = \frac{\eta}{\rho}$ a kinetikai viszkozitás és a $\Gamma = \frac{g\alpha N_0 H^3}{\nu D_0}$ a Rayleigh szám a két legfontosabb dimenziótlan paramétere a problémáinknak. Ugyanazt a szerepet töltik be, mint a Navier-Stokes egyenlet dimenziótlanításánál a Reynolds szám.

A fenti helyettesítések elvégzésével a modell egyenleteink az alábbi alakra hozhatóak:

$$\frac{\partial \hat{\mathbf{v}}}{\partial \hat{t}} = -Sc\nabla\hat{p} - \mathfrak{D}(\hat{\mathbf{v}})\hat{\mathbf{v}} - \Gamma \cdot Sc \cdot \hat{n}\mathbf{k} + Sc\nabla^2\hat{\mathbf{v}} \tag{2.22}$$

$$\nabla \cdot \hat{\mathbf{v}} = 0 \tag{2.23}$$

$$\frac{\partial \hat{n}}{\partial \hat{t}} = -\nabla \cdot (\hat{n}(\hat{\mathbf{v}} + \hat{\mathbf{U}}) + \hat{\mathbf{D}}\nabla\hat{n}) \tag{2.24}$$

A határfeltételek pedig a következőnek adódnak az alsó falon:

$$\hat{\mathbf{v}} = \mathbf{0} \tag{2.25}$$

$$\frac{\partial \hat{w}}{\partial \hat{z}} = 0 \tag{2.26}$$

$$\hat{n}\hat{U}_z + D_{zx}\frac{\partial \hat{n}}{\partial \hat{x}} + D_{zy}\frac{\partial \hat{n}}{\partial \hat{y}} + D_{zz}\frac{\partial \hat{n}}{\partial \hat{z}} = 0 \tag{2.27}$$

a felső határon az ettől eltérő összefüggések pedig:

$$\frac{\partial \hat{u}}{\partial \hat{x}} = \frac{\partial \hat{v}}{\partial \hat{y}} = 0 \tag{2.28}$$

$$\frac{\partial^2 \hat{w}}{\partial z^2} = 0 \tag{2.29}$$

A nyomásra pedig ezek alapján adódik, hogy:

$$(\nabla p)\mathbf{k} = -\Gamma \hat{n} \tag{2.30}$$

A 2.1 táblázatban a 1.1 táblázat adatainak felhasználásával megadjuk a dimenziótlanításhoz használt paramétereket és a dimenziótlan paraméterek tipikus értékeit.

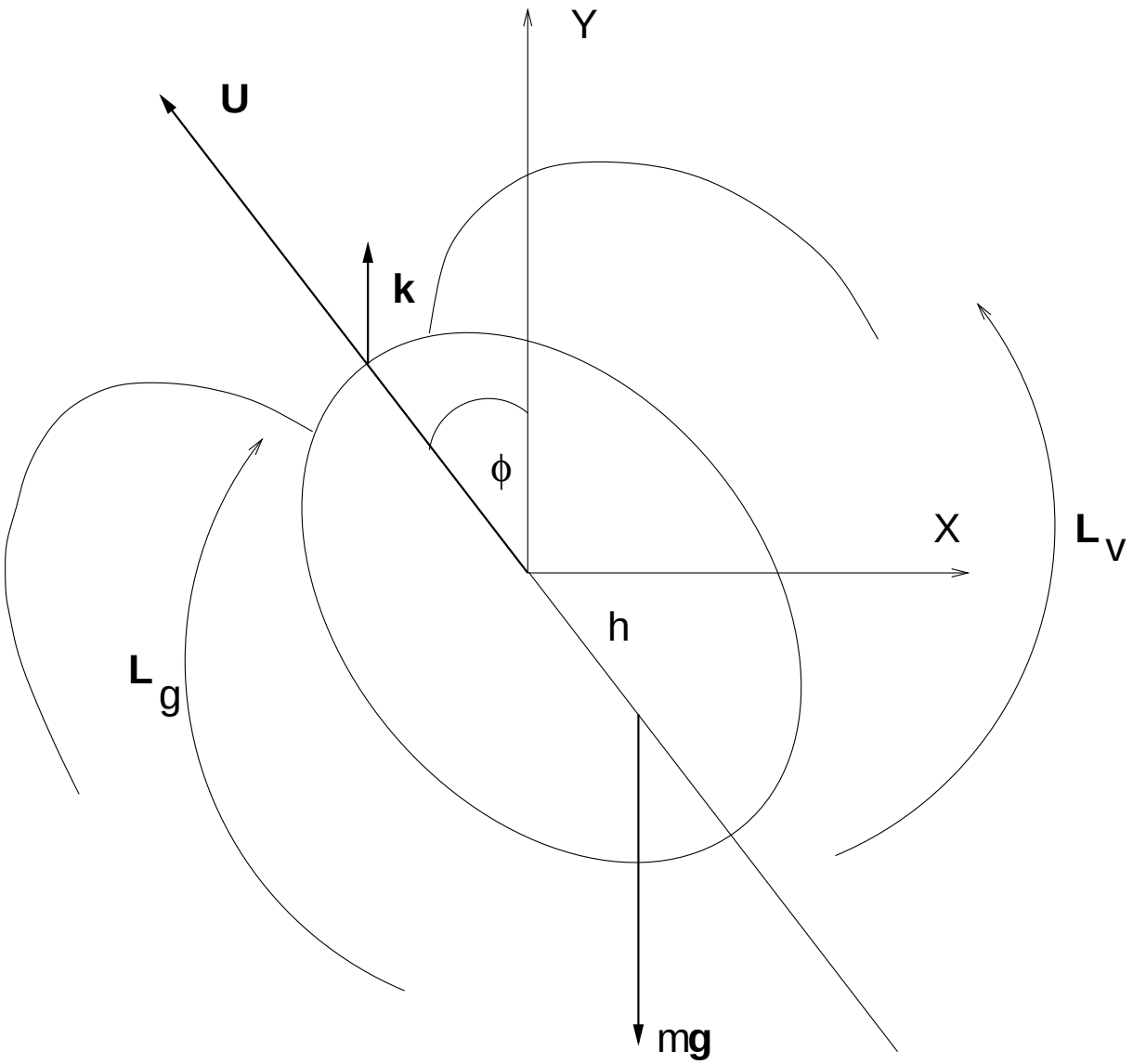
Paraméter	Dimenziója	*Chlamydomonas n.*	*Bactilius subtilis*
N_0	$\frac{1}{cm^3}$	10^6	10^9
ν	$\frac{cm^2}{s}$	10^{-2}	10^{-2}
D_0	$\frac{cm^2}{s}$	10^{-5}	10^{-5}
α	cm^3	5×10^{-13}-7.5×10^{-11}	5×10^{-15}-1.5×10^{-13}
Γ	-	$\approx10^4$H^3	$\approx10^2$H^3
Sc	-	$\approx10^3$	$\approx10^3$

2.1. táblázat. Geotaxis paramétereinek tipikus értékei és nagyságrendi becslésük.

2.3. Gyrotaxis

Amint azt a bevezetőben említettük a gyrotaxis a gravitációs és a viszkózus nyomaték különbségéből származó erőhatás hatására bekövetkező mozgásforma.

Ebben a modellben gyengítjük azt a geotaxis esetén bevezetett feltételezést, hogy az organizmusok, mindig ugyanabba az irányba mozognak. Továbbiakban feltesszük, hogy a mozgásirány ($\mathbf{p}$) változhat, de a sebesség nagysága állandó U_{s0}, azaz $\mathbf{U} = U_{s0}\mathbf{p}$.



2.1. ábra. A gyrotaxist kialakító nyomatékok forgásellipszoid alakú modell organizmuson.

Amennyiben az organizmus mozgása nem párhuzamos a Z tengellyel, úgy a gravitáció az alábbi nyomatékot fejti ki.

$$\mathbf{L}_g = mgh\mathbf{p} \times \mathbf{k} \tag{2.31}$$

ahol 2.1 ábra alapján h a tömegközéppont és a a geometria középpont közötti távolság, m az organizmus tömege.

Zérus Reynolds számnál egy magára hagyott testre az alábbi viszkózus nyomaték hat lineáris közelítésben (azaz ha feltesszük, hogy a folyadékban lejátszódó változások mérteének nagyságrendje jóval nagyobb, mint az objetum lineáris mérete) [?]:

$$\mathbf{L}_V = -\eta V_m \left[\mathbf{P}\left(\mathbf{U} - \mathbf{v}\right) - \mathbf{Y}\left(\frac{1}{2}\boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\Omega}\right) + \mathfrak{R}\mathbf{E} \right] \tag{2.32}$$

ahol $\boldsymbol{\omega}$ a örvényesség, $\boldsymbol{\Omega}$ az organizmus szögsebessége, α_0 a forgásellipszoid excentricitása:

$$\alpha_0 = \frac{a^2 - b^2}{a^2 + b^2} \tag{2.33}$$

ahol a,b a fél nagytengely hosszak.

A $\mathbf{P}$ és $\mathbf{Y}$ mátrixok és a $\mathfrak{R}$ háromindexes tenzor csak a felület geometriájától és az objektum helyzetétől függ. Forgásellipszoid esetre [4] nyomán:

$$\mathbf{P} = \mathbf{0} \tag{2.34}$$

$$\mathbf{Y} = \alpha_{||}\mathbf{p} \otimes \mathbf{p} + \alpha_{\perp}\left(\mathbf{I} - \mathbf{p} \otimes \mathbf{p}\right) \tag{2.35}$$

$$\mathfrak{R}\mathbf{E} = \alpha_0 \mathbf{Y}\left(\mathbf{p} \times \mathbf{E}\mathbf{p}\right) \tag{2.36}$$

ahol $\alpha_{||}$ és $\alpha_{\perp}$ dimenziótlan konstansok, melyek a $\mathbf{p}$ iránnyal párhuzamos illetve arra merőleges irányú forgással szembeni ellenállást jellemzik. Később a $\alpha_{\perp}$ értékére lesz szükségünk, így arra

az alábbi összefüggést adhatjuk:

$$\alpha_\perp = \frac{2\left(r^2+1\right)}{3\left(r^2-1\right)}\beta \tag{2.37}$$

$$\beta = \frac{6\left(r^4-1\right)}{2r^2 I_2 + \left(r^2+1\right)^2 L_2} \tag{2.38}$$

$$I_1 = \frac{r^2\left(2r^2-5+3\gamma\right)}{2\left(r^2-1\right)^2} \tag{2.39}$$

$$I_2 = \frac{\left(r^2+1\right)\left(r^2+2-3r^2\gamma\right)}{\left(r^2-1\right)^2} \tag{2.40}$$

$$L_1 = \frac{r^2\left(2r^2+1-\gamma\left(4r^2-1\right)\right)}{4\left(r^2-1\right)^2} \tag{2.41}$$

$$L_2 = I_1 - 2L_1 \tag{2.42}$$

$$\gamma = \frac{\cosh^{-1} r}{r\left(r^2-1\right)^{\frac{1}{2}}} \tag{2.43}$$

$$r = \frac{a}{b} \tag{2.44}$$

Szeretnénk ezek alapján meghatározni a $\mathbf{p}$ irányvektor mozgásegyenletét abban az esetben amikor az organizmusra ható nyomatékok kiegyenlítik egymást, azaz:

$$\mathbf{L}_g + \mathbf{L}_V = \frac{1}{2B}\left[\mathbf{k} - (\mathbf{kp})\,\mathbf{p}\right] - \frac{1}{2}\boldsymbol{\omega}\times\mathbf{p} + \boldsymbol{\Omega}\times\mathbf{p} + \alpha_0\left(\mathbf{p}\times(\mathbf{Ep})\right)\times\mathbf{p} = 0 \tag{2.45}$$

ahol felhasználtuk, hogy:

$$\mathbf{p}\times(\mathbf{k}\times\mathbf{p}) = \mathbf{k} - (\mathbf{kp})\,\mathbf{p} \tag{2.46}$$

figyelembe véve, hogy definíció szerint $\dot{\mathbf{p}} = \boldsymbol{\Omega}\times\mathbf{p}$ kapjuk, hogy:

$$\dot{\mathbf{p}} = \frac{1}{2B}\left[\mathbf{k} - (\mathbf{kp})\,\mathbf{p}\right] + \frac{1}{2}\boldsymbol{\omega}\times\mathbf{p} + \alpha_0\mathbf{pE}\left(\mathbf{I} - \mathbf{p}\otimes\mathbf{p}\right) \tag{2.47}$$

A fenti egyenletekben bevezettük a B gyrotaxis számot:

$$B = \frac{\eta\alpha_\perp}{2h\rho_m g} \tag{2.48}$$

Ez a szám az organizmus $\mathbf{p}$ vektorának megváltozásának időskáláját jellemzi.

Az alábbiakban egy egyszerű két dimenziós modellt ismertetünk gömb alakú organizációkra [8] nyomán. Ebben az esetben $\alpha_0 = 0$ így a $\mathbf{E}$-nek nincs hatása a $\mathbf{p}$ időbeni változására. Jelölje ϕ a $\mathbf{p}$ és a $\mathbf{k}$ által bezárt szöget. Ekkor

$$\mathbf{p} = (\sin\phi, \cos\phi) \tag{2.49}$$

Két dimenziós esetben az örvényesség egy skalár $\zeta = \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y}$, továbbá vezessük be a $\kappa = B\zeta$ változót. A 2.47 egyenlet ebben az esetben az alábbi egyszerű alakot veszi fel:

$$\frac{d\phi}{dt} = -\frac{\sin\phi + \kappa}{2B} \tag{2.50}$$

Ha a $|\kappa| \leq 1$ akkor B nagyságrendű idő alatt p egy egyensúlyi állapotot vesz fel aminek az alakja:

$$\mathbf{p} = \left(-\kappa, \left(1-\kappa^2\right)^{\frac{1}{2}}\right) \tag{2.51}$$

Amennyiben $-\kappa > 1$ úgy a 2.50 egyenlet megoldása :

$$-\kappa \tan\left(\frac{\phi}{2}\right) - 1 = \left(\kappa^2 - 1\right)^{\frac{1}{2}} \tan\left(\frac{1}{2}\left(\kappa^2-1\right)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{tB}{2} + C\right)\right) \tag{2.52}$$

ahol a határfeltételek alapján $C = \frac{2}{(\kappa^2-1)^{\frac{1}{2}}} \arctan\left(\frac{-\kappa-1}{(\kappa^2-1)^{\frac{1}{2}}}\right)$. Ez a megoldás $T = \frac{-4\pi\kappa}{(\kappa^2-1)^{\frac{1}{2}}}$ szerint periodikus. A tényleges mozgás irányt idő szerinti átlagolással kapjuk:

$$\mathbf{p} = \left(-|\kappa| + \left(\kappa^2-1\right)^{\frac{1}{2}} \frac{\kappa}{|\kappa|}, 0\right) \tag{2.53}$$

Az 2.51 és 2.53 egyenletek segítségével kapott $\mathbf{p}$ minden időpontban meghatározza a $\mathbf{U}$ organizmus sebességet, így a 2.2-2.5 egyenletek ezekkel való kiegészítése után az előző fejezetben megismert határfeltételek figyelembe vételével megoldható.

2.3.1. Új kontínum modell

A fenti modell legnagyobb hátránya, hogy nem veszi figyelembe a véletelten effektusokat az organizmus forgásának valamint diffúziós együtthatóniak meghatározása során. Pedley és Kessler 1990-ben korábbi eredményeik kiegészítése során készítették el azt a gyrotaxis modellt mely ezt a hiányosságot igyekszik kiküszöbölni. Ebben a részben ezt ismertetjük vázlatosan.

Korábbi feltételezéseinkkel ellentétben most nem állítjuk, hogy a $\mathbf{p}$ irányvektor determinisztikus jellegű, ha feltételezzük, hogy véletlen folyamatok erősen befolyásolják értéket. Ennek véletlenszerű viselkedésnek a jellemzésére bevezetjük a $f(\mathbf{p})$ valószínűségi sűrűség függvényt, melyet az alábbi Fokker-Planck egyenlet határoz meg:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla \cdot (\dot{\mathbf{p}} f) = D_r \nabla^2 f \tag{2.54}$$

ahol a $\dot{\mathbf{p}}$-t a 2.47 egyenlet határozza meg. A D_r a rotációs diffúzivitás (dimenziója s^{-1}), melyről nem sokat tudunk így első közelítésben ismeretlennek tekintjük. (Egy lehetséges definíciója $D_r = \frac{kT}{\eta V_m \alpha_\perp}$).

Általában ezzel a modellel kapcsolatban fel szokták tételezni, hogy D_r^{-1} sokkal kisebb mint a folyadékban lezajló változások időskálája, amiből az következne $\frac{\partial f}{\partial t}$ tag elhanyagolható.

Az $f(\mathbf{p})$ sűrűségfüggvények a segítségével fogjuk előállítani az organizmusok sebességvektorát és diffúziós együtthatóját. Ehhez mindenek előtt bevezetjük a $\mathbf{p}$ térben történő átlagolást:

$$\langle A \rangle_{\mathbf{p}} = \int\int d\mathbf{p}^2 A f(\mathbf{p}) \tag{2.55}$$

ahol az integrálok $\mathbf{p}$ által meghatározott egységgömb felületén értendőek.

Ezek alapján írhatjuk, hogy:

$$\mathbf{U} = U_{s0} \langle \mathbf{p} \rangle_{\mathbf{p}} \tag{2.56}$$

$$\mathbf{D} = U_{s0}^2 \tau \left(\langle \mathbf{p} \otimes \mathbf{p} \rangle_{\mathbf{p}} - \langle \mathbf{p} \rangle_{\mathbf{p}} \otimes \langle \mathbf{p} \rangle_{\mathbf{p}} \right) \tag{2.57}$$

ahol τ a korrelációs idő.

A stacionárius Fokker-Plank egyenlet megoldása áramlásmentes esetben tanulságos. Ehhez írjuk fel a 2.54 egyenletet ahol $\dot{\mathbf{p}}$ helyére a 2.47 egyenletet behelyettsítettük és az egészet dimenziótlanítottuk:

$$\mathbf{k} \cdot \nabla f - 2(\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}) f + b \hat{\boldsymbol{\omega}} \cdot (\mathbf{p} \times \nabla f) + b \alpha_0 (\mathbf{p} \cdot (\hat{\mathbf{E}} \nabla f) - 3 \mathbf{p} \cdot (\hat{\mathbf{E}} \mathbf{p} f)) = \lambda^{-1} \nabla^2 f \tag{2.58}$$

ahol az alábbi dimenziótlan változókat és konstansokat vezettük be:

$$\boldsymbol{\omega} = \frac{U_{s0}^2 \tau}{L^2} \hat{\boldsymbol{\omega}} \tag{2.59}$$

$$\mathbf{E} = \frac{U_{s0}^2 \tau}{L^2} \hat{\mathbf{E}} \tag{2.60}$$

$$\lambda = \frac{1}{2 D_r B} \tag{2.61}$$

$$b = \frac{B U_{s0}^2 \tau}{L^2} \tag{2.62}$$

Az így kapott egyenlet megoldása, amennyiben a $\mathbf{p} = (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta)$ gömbi koordinátákat használjuk:

$$f^0 = \frac{\lambda}{4\pi \sinh \lambda} \tag{2.63}$$

Melynek segítségével a sebesség és a diffúziós együttható a 2.56 és 2.57 integrálok elvégzése után az alábbi alakot ölti:

$$\langle \mathbf{p} \rangle^0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \coth\lambda - \lambda^{-1} \end{pmatrix} \tag{2.64}$$

$$\mathbf{D}^0 = U_{s0}^2 \tau \begin{pmatrix} \frac{\coth\lambda}{\lambda} - \lambda^{-2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\coth\lambda}{\lambda} - \lambda^{-2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 - \coth^2\lambda + \lambda^{-2} \end{pmatrix} \tag{2.65}$$

Ez pedig jól mutatja, hogy a korábbi feltételezéseink erre a speciális esetre vonatkoznak azaz a geotaxis a gyrotaxis egy határesetének fogható fel.

2.4. Oxotaxis

A kemotaxis egy speciális változata az oxotaxis mikor a baktériumok mozgását döntően a folyadékban oldott oxigén koncentrációja határozza meg. Ez a modell először [16]-ben lett bevezetve és a biokonvekció egy új aspektusára hívja fel a figyelmet.

Az 2.2-2.5 egyenletek formailag fenntarthatóak továbbra is csak kiegészítjük azokat az alábbi oxigén koncentrációra (C) vonatkozó egyenlettel:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\nabla \cdot (C\mathbf{v} - \mathbf{D}_{O_2}\nabla C) - Kn \tag{2.66}$$

ahol $\mathbf{D}_O$ az oxigén diffúziós tenzora, melyre feltehetjük szokás szerint, hogy izotóp:

$$\mathbf{D}_{O_2} = \begin{pmatrix} D_{O_2} & 0 & 0 \\ 0 & D_{O_2} & 0 \\ 0 & 0 & D_{O_2} \end{pmatrix} = D_{O_2}\mathbf{I} \tag{2.67}$$

Általános esetben az organizmusok által keltett véletlen mozgás befojással van az oxigén koncentrációra amennyiben $D_{O_2} \approx D$. Amennyiben azonban az organizmusok diffúziója jóval gyorsabb, mint az oxigéné, úgy ettől a hatástól eltekinthetünk. Az egyenletben szerepel még K, ami az organizmusok oxigén fogyasztási rátája.

Az oxigén koncentráció egyenletéhez még annak határfeltételeit is hozzátartoznak. Az alsó falon illetve általában a falakon igaz az alábbi összefüggés:

$$(\nabla C) \cdot \mathbf{n} = 0 \tag{2.68}$$

A felső falon mivel itt a folyadék az atmoszférával van kapcsolatban egy állandó (C_0) oxigén koncentrációt írunk elő.

A megfigyelések szerint az organizmusok mozgás megáll egy adott helyen, amint az a lokális oxigén koncentráció egy kritikus érték ($C_{\mathtt{min}}$) alá csökken. Ezt a jelenséget az alábbi módon vezethetjük be a modellünkbe.

Vezessük be a koncentrációt jellemző dimenziótlan paramétert θ-t az alábbiak szerint:

$$\theta = \frac{C - C_{\mathtt{min}}}{C_0 - C_{\mathtt{min}}} \tag{2.69}$$

Ezek után a korábban bevezetett az organizmusok mozgását meghatározó paraméterek az alábbiak szerint módosulnak, hogy:

$$U_s = U_{s0}W(\theta) \tag{2.70}$$

$$\mathbf{D} = D_0W^2(\theta)\mathbf{I} \tag{2.71}$$

$$K = K_0W(\theta) \tag{2.72}$$

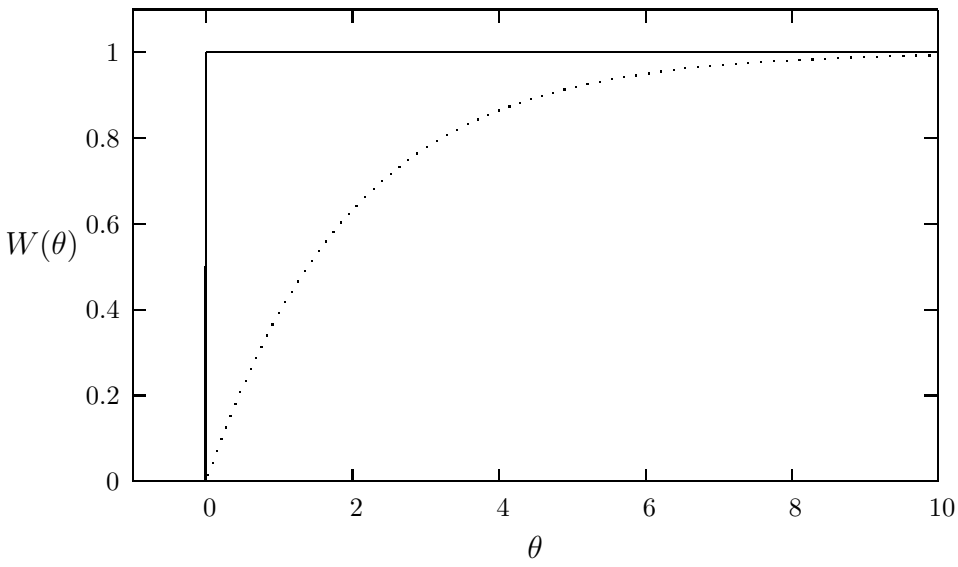
ahol 0-ás indexel jelöltük a korábban bevezetett oxigén koncentrációtól független alakokat. Továbbá bevezettünk egy $W(\theta)$ szaturációs függvényt, melyre az megköveteljük hogy $C \to \infty$

esetén $W(\theta) \to 1$ valamint $C \leq C_{\mathtt{min}}$ esetén $W(\theta) = 0$ teljesüljön. Ennek figyelembevételével az alábbi két formula egyikét szokás használni a $W(\theta)$ függvény alakjára:

$$W(\theta) = \mathcal{H}(\theta) \tag{2.73}$$

$$W(\theta) = \left[1 - e^{-\frac{\theta}{\theta_1}}\right] \mathcal{H}(\theta) \tag{2.74}$$

ahol $\mathcal{H}(\theta)$ a Heaviside-féle lépcsőfüggvény.



2.2. ábra. Szaturációs függvény típusok. Az expnenciális formulában $\theta_1 = 2$.

Meg kell jegyezünk azonban, hogy az oxigén és organizmus kölcsönhatás alapvetően feltételezéseken és nem megfigyeléseken alapszik, így az abból levonható eredmények megbízhatósága sok vita tárgyát képezheti.

A legegyszerűbb módja, hogy az oxotatikus hatást figyelembe vegyük a modellben, ha feltesszük, hogy az organizmusok sebességvektora arányos az oxigén koncentráció gradiensével, azaz írhatjuk, hogy:

$$\mathbf{U} = aU_s \nabla\theta \tag{2.75}$$

ahol a egy skálázási faktor, melyre az alábbi összefüggést találhatjuk:

$$a = a(C) = \frac{\frac{1}{a_0}}{\left(\frac{1}{a_0} + C\right)^2} \tag{2.76}$$

a más összefüggések is használatban vannak.

Feltételezhetjük továbbá, hogy létezik egy ε_0 korlátja az oxigénkoncentráció gradiensének, ami alatt az oxotaxis nem jelentkezik. Ezek alapján 2.75 az alábbiak szerint finomítható tovább:

$$\mathbf{U} = aU_s\hat{\mathbf{e}}\left(|\nabla\theta| - \varepsilon_0\right)\mathcal{H}\left(|\nabla\theta| - \varepsilon_0\right) \tag{2.77}$$

ahol $\hat{\mathbf{e}}$ az oxigén koncentráció gradiensének irányába mutató egységvektor. A legtöbb esetben ε_0-ra nyugodtan feltehetjük (és mi ezt fel is fogjuk tenni), hogy az 0.

A kapott egyenleteinket az alábbi új dimenziótlan paraméterek bevezetésével dimenzótlaníthatjuk:

$$\delta = \frac{D_{O_2}}{D_0}; \gamma = \frac{aV_{s0}}{D_0}; \beta = \frac{K_0N_0L^2}{D_{O_2}\left(C_0 - C_{\mathtt{min}}\right)} \tag{2.78}$$

E nagyszámú feltételezés után a 2.66 és 2.4 egyenleteket az alábbi dimenziótlan alakba írhatjuk:

$$\frac{\partial\hat{n}}{\partial\hat{t}} = \nabla\cdot\left(W(\theta)\nabla\hat{n} - \hat{\mathbf{v}}\hat{n} - W(\theta)\gamma\hat{n}\nabla\theta\right) \tag{2.79}$$

$$\frac{\partial\theta}{\partial\hat{t}} = \nabla\cdot\left(\delta\nabla\theta - \hat{\mathbf{v}}\theta\right) - W(\theta)\delta\beta\hat{n} \tag{2.80}$$

A korábbiakban elmondottakhoz képest a θ és a $\hat{n}$ változók dimenziótlan határfeltételi változtak jelentősen. Az alsó falnál és általában falnál θ-ra a

$$(\nabla\theta)\cdot\mathbf{n} = 0 \tag{2.81}$$

a felső szabad felületnél pedig

$$\theta = 1 \tag{2.82}$$

írható.

A részecskeszám sűrűség határfeltétele a periódikus határoktól eltekintve minden esetben:

$$W(\theta)\left(\gamma\hat{n}\nabla\theta - \nabla\hat{n}\right)\cdot\mathbf{n} = 0 \tag{2.83}$$

A sebességmező és határfeltételei valamint a nyomás határfeltételei ugyanazok, mint a geotaxis esetén. A 2.2 táblázatban a 1.1 táblázat adatai alapján összefoglaljuk az oxotaxis járulékos paramétereinek tipikus értékeit.

2.5. Eddigi eredmények

Bár a biokonvekciós modellek régóta ismeretesek mindeddig a lineáris és nem-lineáris stabilitás elméletek jelentették az elméleti vizsgálatok alapját. Mindhárom eddig említett modelltől ismert a lineáris stabilitás elmélet eredménye, mind sekély, mind pedig mély közegekre egyaránt [4]. Bees a gyrotaxis új kontínuum modelljét véges mély közeg esetén kimerítően vizsgálta elsőrendű perturbációk esetén és meghatározta a kritikus Rayleigh számokat valamint a különféle módusok instabilitási feltételeit. Gohorai a korábban bemutatott egyszerű két dimenziós

Paraméter	dimenzió	B. S
C_0	$\frac{\text{molekula}}{cm^3}$	1.5×10^{17}
D_{O_2}	$\frac{cm^2}{s}$	2.12×10^{-5}
δ	-	8-16
γ	-	≈ 30
β	-	$\approx$10H^2

2.2. táblázat. Oxotaxis paraméterei.

modellt vizsgálta, mind szimulációs mind pedig stabilitás elméleti eszközökkel. Többek között azt találta, hogy a mintázatok hullámhossza gyengén nő a közegmélységtől. Továbbá rámutatott a biokonvekciós mintázatok asszimetriájára henger alakú közegben [11].

Az oxotaxis modell stabilitás vizsgálata leginkább Metcalfe és Pedley nevéhez fűződik [22], [23]. Ezekben a munkákban azt találták, hogy a jelenség hasonlít a termikus konvekcióhoz az újak belsejében a fluxus állandó és a újak szélessége $W = \left(\frac{2}{\beta\gamma}\right)^{\frac{1}{2}} z^{\frac{1}{2}}$ szerint változik a mélységgel. Továbbá megmutatták, hogy δ és $\beta\gamma$ paraméterek értékétől függően az leginstabilabb hullámszám lehet zérus vagy nem-zérus is. A nem zérus esetben a kialakuló mintázatot egy hatszög rácsnak jósolják.

Sajnálatos módon a legfontosabb a kísérletek által nyitva hagyott kérdésekre csak a modellek teljes körű három dimenziós szimulációs vizsgálata után lehet válaszolni, ez az vizsgálat egyik modell esetén sem lett eddig elvégezve. Erre teszünk kísérletet ebben a dolgozatban.

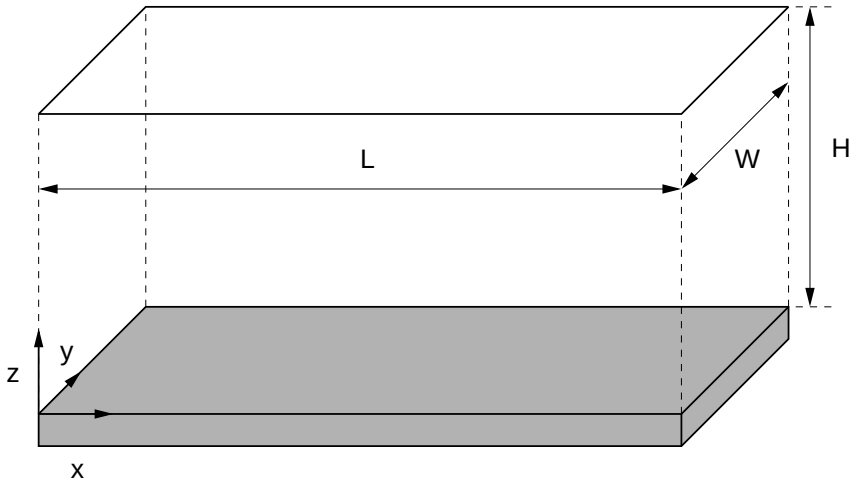
3. fejezet

Numerikus módszer

Ebben a fejezetben az előzőben kapott dimenziótlanított egyenleteket kívánjuk numerikusan megoldani három dimenzióban. A jelölés egyszerűsítése érdekében a "kalapozást" elhagyjuk.

3.1. Szimulációs tér

A modell számításokat a 3.1. ábrán jelzett fizikai elrendezés mellett fogjuk végezni három dimenzióban Descartes koordináta rendszerben. Bár ez az elrendezés lényegesen eltér az általánosan alkalmazott henger alakú geometriától, úgy gondoljuk, hogy a jelenség legfontosabb jellemzői alapvetően nem geometria függőek és a henger-koordináta rendszerben való számolás további elsősorban technikai nehézségeket jelentene.



3.1. ábra. Szimulációs tér geometriája

A nagy rendszer viselkedést az x illetve y irányokban periodikus határfeltételekkel kényszerítjük rá a rendszerre.

Ebben a fizikai térben vezetünk be egy ekvidisztáns rácsot az alábbiak szerint, követve a [12] jelöléseit:

$$\begin{aligned}\omega_h := \{&(x_{1i}, x_{2j}, x_{3k}) \in \Omega,\\ &x_{1i} = (i+\frac{1}{2})h_1, x_{2j} = (j+\frac{1}{2})h_2, x_{3k} = (k+\frac{1}{2})h_3,\\ &i = 1 \dots N_1 - 1, j = 1 \dots N_2 - 1, k = 1 \dots N_3 - 1\}\end{aligned} \tag{3.1}$$

Ahol Ω jelöli a tartományunkat. Feltéve, hogy a tartományunkban N_1, N_2, N_3 számú rácspontot veszünk:

$$h_1 = \frac{L}{N_1}, h_2 = \frac{W}{N_2}, h_3 = \frac{H}{N_3} \tag{3.2}$$

A ω_h-t a rács belső pontjainak nevezzünk, mert minden elme a Ω tartomány belsejében található. Az előző fejezetben bevezetett egyenletek mindegyikét térben ezen a rácson fogjuk diszkretizálni. Az egyenletekhez tartozó határfeltételek diszkretizálását egy másik rácson fogjuk megtenni amit az alábbi egyenlet definiál:

$$\begin{aligned}\gamma_h := \{&(x_{1i}, x_{2j}, x_{3k}) \in \Omega,\\ &x_{1i} = (i+\frac{1}{2})h_1, x_{2j} = (j+\frac{1}{2})h_2, x_{3k} = (k+\frac{1}{2})h_3,\\ &i = 0, N_1, j = 0, N_2, k = 0, N_3\}\end{aligned} \tag{3.3}$$

Végül a fenti két rács uniója adja a szimuláció során kezelendő teljes rácshalmazt $\overline{\omega}_h = \omega_h \cup \gamma_h$

3.2. Diszkretizálás térben

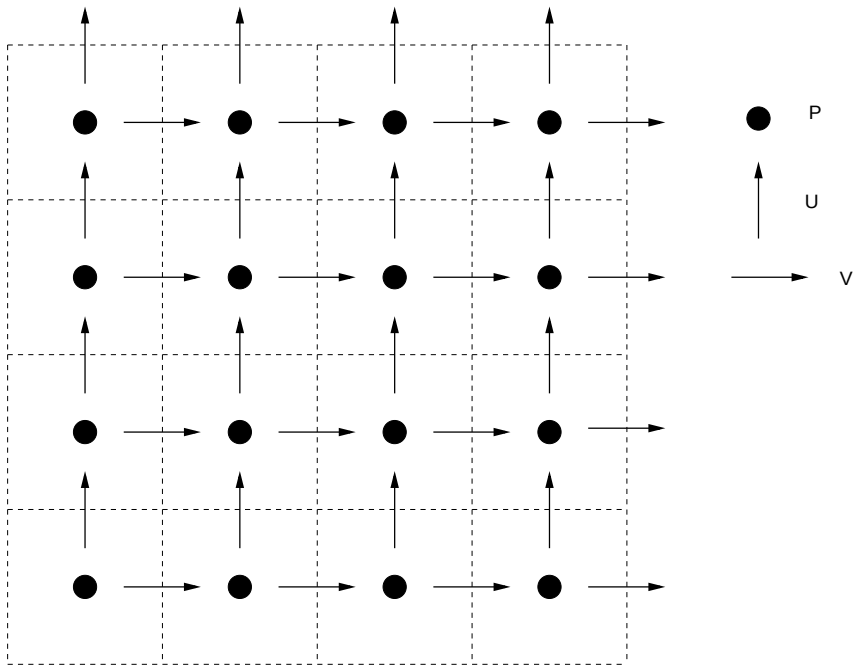
A sebességmező komponenseit és a nyomás valamint a részecskeszám szűrűség függvényeket és ha kell a további skalárfüggvényeket az előző részben bevezetett $\overline{\omega}_h$ rácson diszkretizáljuk először térben.

Minden folytonos függvény diszkretizált megfelelőjét ugyanazzal a betűvel fogjuk jelölni, csak indexben jelöljük, hogy mely rácspontban felvett értékére gondolunk éppen. Ennek megfelelően például a nyomásmező esetén bevezetjük a:

$$p_h = p_{i,j,k} = p(x_{1i}, x_{2j}, x_{3k}), (x_{1i}, x_{2j}, x_{3k}) \in \overline{\omega}_h \tag{3.4}$$

A sebességmező esetén egy kicsit máshogy járunk el. Azokat ugyanis nem a rácscellák közepén, hanem a szélén értelmezzük. Két dimenzióban ezt az elrendezést mutatja a 3.2. ábra. Ennek megfelelően a sebességmező diszkretizált megfelelője az alábbiak szerint alakul:

$$\begin{aligned}u_h &= u_{i+\frac{1}{2},j,k} = u(x_{1(i+\frac{1}{2})}, x_{2j}, x_{3k}), (x_{1(i+\frac{1}{2})}, x_{2j}, x_{3k}) \in \overline{\omega}_h\\ v_h &= v_{i,j+\frac{1}{2},k} = v(x_{1i}, x_{2(j+\frac{1}{2})}, x_{3k}), (x_{1i}, x_{2(j+\frac{1}{2})}, x_{3k}) \in \overline{\omega}_h\\ w_h &= w_{i,j,k+\frac{1}{2}} = w(x_{1i}, x_{2j}, x_{3(k+\frac{1}{2})}), (x_{1i}, x_{2j}, x_{3(k+\frac{1}{2})}) \in \overline{\omega}_h\end{aligned} \tag{3.5}$$



3.2. ábra. Eltolt rács két dimenzióban. A nyilak a sebességmező egy-egy komponensének számítási helyet jelölik a fekete kör a skalárfüggvények például a nyomás számítási helye.

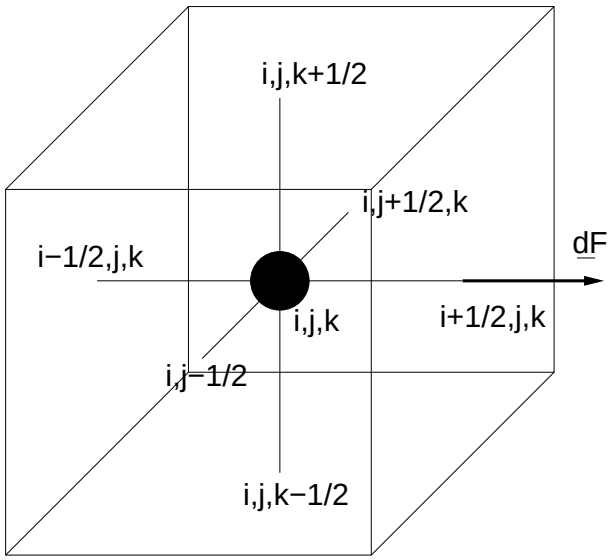
Ezt az elrendezést *eltolt rácsrendszernek* nevezzük és számos előnye van ahhoz képest, hogy ha minden változót ugyanott számolnánk:

- minden rácsfüggvény differencia hányadosa ott képződik ahol szükség lesz rá (ismeretes, hogy két pont differenciahányadosának 1-ed rendű közelítő képletéből nyert értéket a két pontot összekötő szakasz felében vett ponthoz szokták hozzárandelni)
- nem alakul ki numerikus szaktábla instabilitás
- fizikailag könnyen interpretálható egy cella, mint egy elemi folyadéktérfogat, melyben a áramok könnyen számolhatók a peremen.

3.2.1. Véges térfogat módszer

Térbeli diszkretizálást az úgynevezett véges térfogat módszerrel fogjuk elvégezni. Ennek az egyik legfontosabb tulajdonsága, - különessen egy fizikusjelölt számára - hogy egy elemi térfogatelemben felírt fizikai fluxusmérlegek adják az alapját.

Vegyük az Ω tartomány egy másodlagos felosztását. Ez a rácspontok körül kijelölt elemi téglalapokat fogja tartalmazni általános esetben. Szerencsére nekünk az eltolt rács miatt a nyomás, részecskeszám stb. esetekben ez a elemi térfogat magától érthetődően adódik, de a sebességek esetén sem jelent különösebb nehézséget annak kijelölése, mint az a 3.3. ábrán látható.



3.3. ábra. Véges térfogat módszer elemi cellája

Ezt követően erre az elemi térfogatra formálisan integráljuk a differenciál egyenleteinket. Itt jegyezzük meg, hogy az elemi tartományokra felírt egyenletekből az egész tartományra érvényes egyenleteket kapunk mivel az egyik térfogatból kiáramló fluxus a másik tartományban ellenkező előjellel jelentkezik. Így a globális egyenletek a megfelelő megmaradási tulajdonságokkal is rendelkeznek. Ez különösen fontos a részecskeszám változását leíró egyenlet diszkretizálásakor ezért a módszert ezen az egyenleten keresztül mutatjuk meg. A többi egyenletre kapott végeredmények és néhány megjegyzés a függelékben található.

Integráljuk tehát a fenti elemi térfogatra a 2.4 egyenletet:

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_{\Omega} \mathrm{dV} n = -\int_{\Omega} \mathrm{dV} \nabla \cdot (n(\mathbf{v}+\mathbf{U}) + \mathbf{D}\nabla n) \tag{3.6}$$

Ezek után az egyenlet jobb oldalán található térfogati integrált felületi integrállá átalakítjuk a Gauss-Osztrogratzkij tétel segítségével, majd a felületi integrált a elemi térfogat egy egy lapjára

vett integrálokkal fejtük ki az alábbiak szerint:

$$
\begin{aligned}
&\int_{\Omega} \mathrm{dV} \nabla \cdot (n(\mathbf{v}+\mathbf{U}) + \mathbf{D}\nabla n) = \int_{\partial\Omega} \mathrm{dF}(n(\mathbf{v}+\mathbf{U}) + \mathbf{D}\nabla n) = \\
&\int\int_{i+\frac{1}{2},j,k} \mathrm{d}y\mathrm{d}z \left(n(u+U_x) + D_{xx}\frac{\partial n}{\partial x} + D_{xy}\frac{\partial n}{\partial y} + D_{xz}\frac{\partial n}{\partial z} \right) - \\
&- \int\int_{i-\frac{1}{2},j,k} \mathrm{d}y\mathrm{d}z \left(n(u+U_x) + D_{xx}\frac{\partial n}{\partial x} + D_{xy}\frac{\partial n}{\partial y} + D_{xz}\frac{\partial n}{\partial z} \right) + \\
&+ \int\int_{i,j+\frac{1}{2},k} \mathrm{d}x\mathrm{d}z \left(n(v+U_y) + D_{yx}\frac{\partial n}{\partial x} + D_{yy}\frac{\partial n}{\partial y} + D_{yz}\frac{\partial n}{\partial z} \right) - \\
&- \int\int_{i,j-\frac{1}{2},k} \mathrm{d}x\mathrm{d}z \left(n(v+U_y) + D_{yx}\frac{\partial n}{\partial x} + D_{yy}\frac{\partial n}{\partial y} + D_{yz}\frac{\partial n}{\partial z} \right) + \\
&+ \int\int_{i,j,k+\frac{1}{2}} \mathrm{d}x\mathrm{d}y \left(n(w+U_z) + D_{zx}\frac{\partial n}{\partial x} + D_{zy}\frac{\partial n}{\partial y} + D_{zz}\frac{\partial n}{\partial z} \right) - \\
&- \int\int_{i,j,k-\frac{1}{2}} \mathrm{d}x\mathrm{d}y \left(n(w+U_z) + D_{zx}\frac{\partial n}{\partial x} + D_{zy}\frac{\partial n}{\partial y} + D_{zz}\frac{\partial n}{\partial z} \right)
\end{aligned}
\tag{3.7}
$$

Ezt követően a fenti integrálokat numerikusan a megfelelő kvadratúra képletekkel helyettesíthetjük. Mivel nekünk csak az adott pontokban áll rendelkezésünkre számítási érték, így kézenfekvő egypontos kvadratúrát használni. Továbbiakban az első integrálon mutatjuk be a számítást a többire magától érthetődően elvégezhető az indexek megfelelő cserélgetésével:

$$
\begin{aligned}
&\int\int_{i+\frac{1}{2},j,k} \mathrm{d}y\mathrm{d}z \left(n(u+U_x) + D_{xx}\frac{\partial n}{\partial x} + D_{xy}\frac{\partial n}{\partial y} + D_{xz}\frac{\partial n}{\partial z} \right) \approx \\
&\approx \Delta x \Delta y \Big((n(u+U_x))_{i+\frac{1}{2},j,k} + \\
&\left(D_{xx}\frac{\partial n}{\partial x} \right)_{i+\frac{1}{2},j,k} + \left(D_{xy}\frac{\partial n}{\partial y} \right)_{i+\frac{1}{2},j,k} + \left(D_{xz}\frac{\partial n}{\partial z} \right)_{i+\frac{1}{2},j,k} \Big) \approx
\end{aligned}
\tag{3.8}
$$

Látható, hogy a kifejezés kiszámolásához olyan pontokban is szükségünk van az n értékere ahol nem áll rendelkezésünkre. Ebben az esetben egyszerű lineáris interpolációt fogunk alkalmazni a kívánt pontokra az ismert pontokból. Így nyerjük a fenti integrálkvadratúra kifejtését olyan

pontok segítségével melyek már ismertek.

$$
\begin{aligned}
\text{3.8 folytatása} \approx & \frac{h_2 h_3}{2}(n_{i+1,j,k} + n_{i,j,k})(u_{i+\frac{1}{2},j,k} + U_{x,i+\frac{1}{2},j,k}) + \\
& + D_{xx}\frac{h_2 h_3}{h_1}(n_{i+1,j,k} - n_{i,j,k}) + \\
& + D_{xy}\frac{h_3}{4}(n_{i+1,j-1,k} + n_{i,j-1,k} - n_{i+1,j+1,k} - n_{i,j+1,k}) + \\
& + D_{xz}\frac{h_2}{4}(n_{i+1,j,k+1} + n_{i,j,k-1} - n_{i+1,j,k+1} - n_{i,j,k+1})
\end{aligned}
\tag{3.9}
$$

Az 3.7-ben az összes integrára elvégezve a fenti számításokat megkapjuk a részecskeszám szűrtség egyenlet diszkretizációját:

$$
\begin{aligned}
& \left(\frac{\partial n}{\partial t}\right)_{i,j,k} = \\
& - \frac{1}{2h_1}\left[(n_{i+1} + n_i)_{j,k}(u_{i+\frac{1}{2}} + U_{x,i+\frac{1}{2}})_{j,k} - (n_i + n_{i-1})_{j,k}(u_{i-\frac{1}{2}} + U_{x,i-\frac{1}{2}})_{j,k}\right] - \\
& - D_{xx}\frac{1}{h_1^2}(n_{i+1} - 2n_i + n_{i-1})_{j,k} - \\
& - D_{xy}\frac{1}{4h_1 h_2}\left[(n_{i+1} - n_{i-1})_{j+1,k} - (n_{i+1} - n_{i-1})_{j-1,k}\right] - \\
& - D_{xz}\frac{1}{4h_1 h_3}\left[(n_{i+1} - n_{i-1})_{j,k+1} - (n_{i+1} - n_{i-1})_{j,k-1}\right] - \\
& \frac{1}{2h_2}\left[(n_{j+1} + n_j)_{i,k}(v_{j+\frac{1}{2}} + U_{y,j+\frac{1}{2}})_{i,k} - (n_j + n_{j-1})_{i,k}(v_{j-\frac{1}{2}} + U_{y,j-\frac{1}{2}})_{i,k}\right] - \\
& - D_{yx}\frac{1}{4h_1 h_2}\left[(n_{j+1} - n_{j-1})_{i+1,k} - (n_{j+1} - n_{j-1})_{i-1,k}\right] - \\
& - D_{yy}\frac{1}{h_2^2}(n_{j+1} - 2n_j + n_{j-1})_{i,k} - \\
& - D_{yz}\frac{1}{4h_2 h_3}\left[(n_{j+1} - n_{j-1})_{i,k+1} - (n_{j+1} - n_{j-1})_{i,k-1}\right] - \\
& \frac{1}{2h_3}\left[(n_{k+1} + n_k)_{i,j}(w_{k+\frac{1}{2}} + U_{z,k+\frac{1}{2}})_{i,j} - (n_k + n_{k-1})_{i,j}(w_{k-\frac{1}{2}} + U_{z,k-\frac{1}{2}})_{i,j}\right] - \\
& - D_{zy}\frac{1}{4h_1 h_3}\left[(n_{k+1} - n_{k-1})_{i+1,j} - (n_{k+1} - n_{k-1})_{i-1,j}\right] - \\
& - D_{zy}\frac{1}{4h_2 h_3}\left[(n_{k+1} - n_{k-1})_{i,j+1} - (n_{k+1} - n_{k-1})_{i,j-1}\right] - \\
& - D_{zz}\frac{1}{h_3^2}(n_{k+1} - 2n_k + n_{k-1})_{i,j}
\end{aligned}
\tag{3.10}
$$

Az elsőre riasztónak tűnő formula sokat egyszerűsödik, amennyiben a diffúziós tenzor diagonális.

3.3. Diszkretizálás időben

Miután elkészültünk az egyenletek térbeli diszkretizációjával már csak az idővel kell valamit kezdeni. Itt hasonlóan járhatunk el, mint a térbeli esetben, az időre is rácsot fektetünk és azon az úgynevezett *Adams-Beshforth* módszert fogjuk használni.

Az időbeli rácsot hasonlóan a térbelihez az alábbi összefüggés definiálja:

$$\omega_\theta = \{t_l = t_0 + l \cdot \Delta t, l = 0, \ldots, N_t\} \tag{3.11}$$

ahol Δt az időlépést jelöli.

Ebben a fejezetben a térbeli diszkretizációra vonatkozó indexet elhagyjuk. Mivel az időbeli diszkretizációt egy adott l időszinten vizsgáljuk további egyszerűsítő jelölés képen használni fogjuk a

$$\hat{u}_h = u_h(t_{l+1}), u_h = u(t_l), \check{u}_h = u_h(t_{l-1}) \tag{3.12}$$

jelöléseket, ahol most u egy tetszőleges függvényt jelöl.

A módszert a 2.2-2.5 egyenletrendszeren diszkretizált alakján fogjuk bemutatni, majd a végén általánosítjuk az eredményeinket a többi esetre is.

A diszkretizált sebesség egyenlet jobb oldalának nyomástól független részének rövidítésére bevezetjük az alábbi jelölést:

$$\mathbf{f} \;=\; -\mathfrak{D}(\mathbf{v})\mathbf{v} - \Gamma \cdot Sc \cdot \hat{n}\mathbf{k} + Sc\nabla^2\mathbf{v} \tag{3.13}$$

Ezek után az időbeli diszkretizálása a 2.2-2.5 egyenletneknek az alábbi alakba irható:

$$\frac{1}{\Delta t}\left(\hat{\mathbf{v}} - \mathbf{v}\right) \;=\; \alpha\left(\mathbf{f} - Sc\nabla p\right) + \beta\left(\check{\mathbf{f}} - Sc\nabla\check{p}\right) \tag{3.14}$$

$$\nabla \cdot \hat{\mathbf{v}} \;=\; 0 \tag{3.15}$$

$$\frac{1}{\Delta t}\left(\hat{n} - n\right) \;=\; \alpha\nabla \cdot \mathbf{J} + \beta\nabla \cdot \check{\mathbf{J}} \tag{3.16}$$

Ahol az α, β konstansok jelölik hogy a különböző időszintek milyen arányban számítanak tipikus értékük $\alpha = \frac{3}{2}, \beta = -\frac{1}{2}$. A fenti egyenleteket formálisan összefoglalhatjuk az alábbi mátrix alakban.

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & 0 \\ A_{21} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{v}} \\ p \\ \hat{n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ 0 \\ r \end{pmatrix} \tag{3.17}$$

ahol a mátrix és a jobb oldali vektor elemei az alábbiak:

$$A_{11} = \frac{1}{\Delta t} I, A_{12} = Sc\nabla, A_{21} = \nabla\cdot, A_{33} = \frac{1}{\Delta t} \tag{3.18}$$

$$\mathbf{q} = \frac{1}{\Delta t}\mathbf{v} + \alpha\mathbf{f} + \beta\left(\check{\mathbf{f}} - Sc\nabla\check{p}\right) \tag{3.19}$$

$$r = \frac{1}{\Delta t} n + \alpha\nabla\cdot\mathbf{J} + \beta\nabla\cdot\check{\mathbf{J}} \tag{3.20}$$

Mivel a mátrixunk nem diagonális, így nem jutunk könnyen megoldára a hagyományos időlépéses módszerekkel. A Navier-Stokes egyenletek megoldásánál előszeretettel alkalmazott úgynevezett nyomáskorrekciós módszer megfelelő általánosításával juthatunk célba.

3.3.1. Nyomáskorrekciós módszer

A nyomáskorrekciós módszer lényegében a 3.17. egyenlet bal oldalán szereplő mátrix blokk LU felbontásával adható meg:

$$\underbrace{\begin{pmatrix} A_{11} & 0 & 0 \\ A_{21} & -A_{21}A_{11}^{-1}A_{12} & 0 \\ 0 & 0 & A_{33} \end{pmatrix}}_{L} \underbrace{\begin{pmatrix} I & A_{11}^{-1}A_{12} & 0 \\ 0 & I & 0 \\ 0 & 0 & I \end{pmatrix}}_{U} \tag{3.21}$$

Ebből a felbontásból egy két lépéses megoldási módszer adódik. Először előállítjuk a sebesség a nyomás és részecskeszám sűrűség egy közbenső állapotát úgy hogy a L mátrixot hattatjuk a megadott mennyiségeket tartalmazó vektorra:

$$\begin{pmatrix} A_{11} & 0 & 0 \\ A_{21} & -A_{21}A_{11}^{-1}A_{12} & 0 \\ 0 & 0 & A_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{v}^* \\ p^* \\ n^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ 0 \\ r \end{pmatrix} \tag{3.22}$$

Ennek eredménye képen kapjuk, hogy:

$$\mathbf{v}^* = \Delta t \cdot \mathbf{q} \tag{3.23}$$

$$\nabla^2 p^* = \frac{1}{\Delta t \cdot Sc \cdot \alpha}\nabla\cdot\mathbf{v}^* \tag{3.24}$$

$$n^* = \Delta t \cdot r \tag{3.25}$$

Majd ezt követően az U mátrix segítségével előállítjuk a végleges mennyiségeket:

$$\begin{pmatrix} I & A_{11}^{-1}A_{12} & 0 \\ 0 & I & 0 \\ 0 & 0 & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{v}} \\ p \\ \hat{n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{v}^* \\ p^* \\ n^* \end{pmatrix} \tag{3.26}$$

Ebből nyilvánvalóan látszik, hogy a nyomás és a részecskeszám szűrtség közbenső lépése megegyezik a végleges eredményekkel, így ott korrekcióra nincs szükség. Ezzel szemben a sebességben egy mátrixelemek behelyettesítésével nyerhető a közbenső nyomás értéktől függő korrekció adódik az alábbiak szerint:

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}^* - \alpha Sc \cdot \Delta t \cdot \nabla p \tag{3.27}$$

Némi vizsgálódás után általában is elmondhatjuk, hogy amennyiben az egyenletünk jobb oldala nem függ expliciten a nyomástól, úgy korrekcióra nem lesz szükség ebben a módszerben. Tehát minden nyomástól expliciten nem függő mennyiséget egy lépesen számolunk ki.

Tehát a nyomáskorrekciós módszer vagy más néven SIMPLER módszer az alábbi lépésekben foglalható össze:

1. Első lépésben kiszámítjuk a 3.23 egyenlet segítségével a sebesség egy közbenső értékét.
2. Ennek segítségével előállítjuk a 3.24 úgynevezett nyomás Poisson egyenlet jobb oldalát.
3. Korrigáljuk a sebességet a 3.27 egyenlet felhasználásával.
4. Kiszámítjuk az új időszinten a nyomástól expliciten nem függő mennyiségeket is (például 3.25 egyenlethez hasnlóan).

3.4. Nyomás Poisson egyenlet megoldása

A nyomáskorrekciós módszer végeredményeként keletkezett diszkrét Poisson egyenletet meg kell oldanunk minden időszinten. Ez a lépés a numerikus módszer legidőigényesebb és legkényesebb része. Fontos tehát, hogy hatékony módszert válasszunk különösen, ha sok rácsponttal dolgozunk, mely három dimenzióban fenyeget bennünket leginkább.

Az általam választott numerikus módszer a többrácsos (*mutigrid*) eljárás névre hallgat. Ebben a részben ezt mutatom be részletesebben.

A módszer hatékony bemutatásának érdekében néhány további egyszerűsítést vezetünk be a jelöléseken. Amikor is a ω_h rács pontjait alkalmasan átrendezve a rajta értelmezett $p_{i,j,k}$ nyomás eloszlást egy vektorba rendezhetjük. Ezt a módszert természetesen nem csak a nyomás, hanem a többi ismeretlen esetén is alkalmazhatjuk így megkönnyítve a tárolást valamint a program így minden dimenzióban ugyanazon típusú adatstruktúrákkal fog dolgozni. Az így kapott vektorokat h alsó indexel jelöljük a továbbikban, így p_h-t kapjuk a nyomás estén. Ezzel a művelettel a 3.24 egyenlet az alábbi alakra egyszerűsödik:

$$A_h p_h = b_h \tag{3.28}$$

ahol A_h a Laplace differenciál operátor diszkretizált sémáját tartalmazza, mely egy szimmetrikus pozitív definit mátrix lesz mérete pedig $n(h) = N \times N$, ahol N az összes rácspont száma.

A többrácsos eljárás alapötlete a következő: Ha a fenti egyenletrendszer p_h megoldásnak p_h^0 egy tetszőleges közelítése, akkor

$$p_h^1 = p_h^0 + d_h \tag{3.29}$$

máris a pontos megoldás, amennyiben

$$A_h d_h = r_h, r_h := b_h - A_h p_h^0 \tag{3.30}$$

Abból, hogy a 3.28 egyenlet helyett a 3.30 egyenletet oldottuk meg semmilyen nyereség nem származna hiszen ugyanolyan méretű feladatról van szó. Ha viszont d_h-t csak közelítőleg álltjuk elő egy durvább rácson (d_H, H-val jelöljük a durva rácson számolt vektorokat) való diszkretizálásból eredő egyenletből, akkor d_h kiszámítása jóval kevesebb műveletbe kerülhet. Ezt követően egy megfelelő interpolációs operátor P_H^h segítségével előállíthatjuk a kívánt d_h-t a d_H-ból. A finom rácsról durva rácsra való átmenetet egy restrikciós operátorral (R_h^H) oldhatjuk meg legkönnyeben.

Miért áljuk meg itt egy lépés után! Iteráljuk a fenti gondolatmenetet addig, míg a legdurvább rácson a megoldást nem ismerjük, vagy triviálisan kiszámolhatjuk.

Sajnos azonban az alapos vizsgálat megmutatja, hogy az így kapott iteráció általában nem konvergens ennek az az oka, hogy d_h-hoz jóval több pont tartozik, mint d_H-hoz, azaz van olyan $v_h \neq 0$ vektor, amelyre $R_h^H v_h = 0_H$. Ha most r_h helyre ezt a v_h helyettesítjük a 3.30 egyenletben akkor akkor d_h-ra 0_h-t kapunk és így az iteráció megtorpan és ráadásul nem is a megoldásban vagyunk. Feltéve, hogy A_H mátrixok mindegyike szimmetrikus és pozitív definit (ez a mi konkrét esetünkben nem kérdés, mivel az elliptikus önnadjugált problémával áltunk szemben) az A_H sajátvektorjai közelítik az A_h első $n(H)$ sajátvektorját. Viszont a A_h utolsó $n(h) - n(H)$ sajátvektorjának nincs megfelelője a durva rácson. Ezért csak akkor lehet konvergens az eljárásunk a magasabb sorszámú sajátvektorokra vonatkozó információ már $\{d_h^i\}_{i \in \mathbb{N}}$-ban jelen van azaz d_h^i hibája sima abban az értelemben, hogy lényegében nincs benne magasabb sorszámú sajátvektor. Ehhez szükségünk lesz néhány úgynevezett *simító iterációra* a finomabb rácsokon.

3.4.1. Simító iterációk

Mint simító iterációk jó megoldást jelenthetnek a lineáris egyenletek megoldására szokásosan használatos iterációs módszerek. Ezek általában lassan konvergálnak, de a megoldás hibáját gyorsan simítják a korábban bemutatott értelemben. Ezt a tulajdonságukat mutatjuk be az alábbiakban.

Jelölje p^i az i-edik iterációs lépésben kapott közelítő értéket. Akkor általában az iterációs eljárás az alábbi általános alakba írható:

$$p^i = p^{i-1} + Q^{-1}(b_h - A_h p^{i-1}) \tag{3.31}$$

ahol Q az iteráció mátrixa. Az i-edik iterációs lépés után a közelítés hibája:

$$v^i = p^i - p_h \tag{3.32}$$

ahol p_h a pontos megoldás egy adott rácson. Konvergens iteráció esetén természetesen elmondhajuk, hogy $v^i \to 0$, ha $i \to \infty$. A 3.31 és 3.32 egyenletekből a hibára az alábbi egyenlet adódik:

$$v^i = (I - Q^{-1}A_h)^i v^0 \tag{3.33}$$

ahol v^0 a kezdeti közelítés hibája.

Amennyiben az A_h mátrix szimmetrikus, úgy van $n(h)$ sajátvektora, $\{s_k\}_{k=1}^{n(h)}$, melyek egy ortogonális bázist alkotnak. Mivel A_h pozitív definit is az s_k-khoz tartozó sajátértékek λ_k pozitív valósak. Jelölje $\lambda_{\texttt{min}}$ a legkisebb a $\lambda_{\texttt{max}}$ pedig a legnagyobb sajátértéket. A kezdeti közelítés a sajátvektorok bázisában kifejthető az alábbiak szerint:

$$v^0 = \sum_{k=1}^{n(h)} c_k s_k \tag{3.34}$$

Egyszerű iteráció esetén $Q^{-1} = \alpha I$ a hibára kapjuk, hogy:

$$v^i = \sum_{k=1}^{n(h)} c_k (1 - \alpha\lambda_k)^i s_k \tag{3.35}$$

Rosszul kondicionált esetben, azaz, ha $\lambda_{\texttt{min}} \ll \lambda_{\texttt{max}}$ azt kapjuk, hogy:

$$|1 - \alpha\lambda_{\texttt{max}}| \ll |1 - \alpha\lambda_{\texttt{min}}| \leq 1 \tag{3.36}$$

Ebből jól látszik, hogy a nagyobb sajátértékekhez tartozó sajátvektorokkal kapcsolatos hibakomponensek gyorsan eltűnnek. És pont ezt vártuk a simító iterációktól.

Bár itt a számolást az egyszerű iterációra mutattuk meg a legelterjedtebb simító iterációs eljárások, mint például a Gauss-Seidel iteráció esetén is hasonlóan elvégezhető ugyanezzel az eredménnyel. Míg a Gauss-Seidel iteráció, mint hagyományos megoldási módszer nem kifejezetten hatékony, de simítási tulajdonsága igen jó. Ez a simító tulajdonság tovább javítható ha nem a sorfojtonos Gauss-Seidel iterációt, hanem a sakktáblás vagy piros-fekete vagy az úgynevezett négyszínű változatát használjuk.

3.4.2. Interpoláció és restrikció

Láthattuk, hogy az interpolációs és a restrikciós operátorok fontos szerepet töltenek be a többrácsos módszer alkalmazása során. Az alábbiakban felsorolunk néhány szokásos választást mindkét operátortípusra (az elnevezések általában a két dimenziós változatból eredeztethetőek).

Restrikciók:

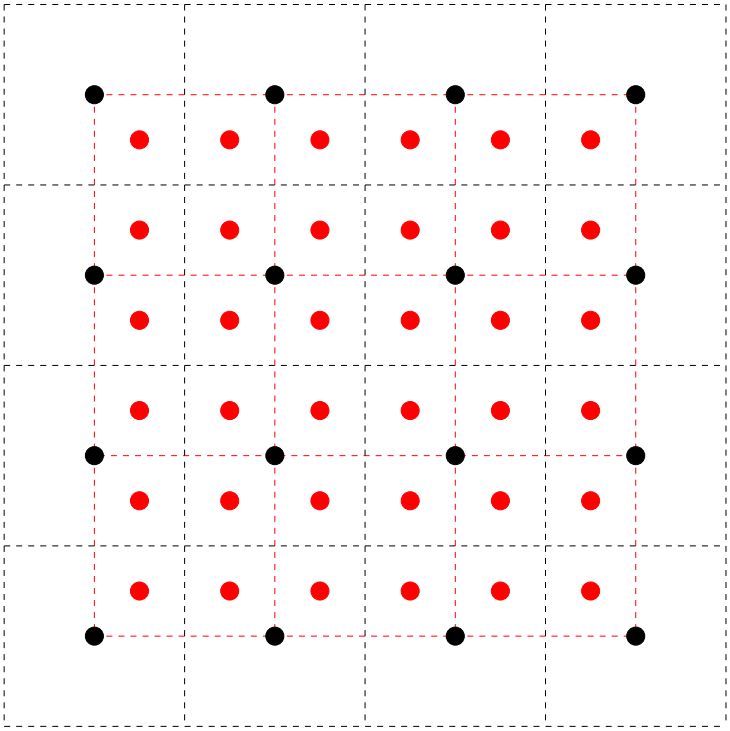
- direkt átvitel: a függvényérték szorozva egy alkalmasan választott konstanssal.
- lineáris.

- 5-pontos restrikció.
- 7-pontos restrikció (lineáris háromszög végeselemek esetén).
- 9-pontos restrikció. stb.

Interpolációk:

- bilineáris.
- 7-pontos (lineáris háromszög végeselem esetén).
- harmadrendű. stb.

Ezen operátorok nem tetszőleges kombinációja választható. Úgy kell őket párosítani, hogy a restrikciós és interpolációs operátor rendjének összege nagyobb legyen, mint a megoldandó egyenletrendszer által közelített differenciál egyenlet rendje.



3.4. ábra. Az ω_1 és ω_2 rácsok

A mi esetünkben a differenciál egyenlet rendje, Poisson feladatról lévén szó, 2.
A P_h^H interpolációs operátor m rendje:

$$||P_h^H p_H - p_h|| \leq O(h^m) \tag{3.37}$$

ahol p_h és p_H a finom és durva rácson vett közelítése a p-nek.

A restrikciós operátor rendje a transzponált interpoláció rendjével definiáljuk. Látható, hogy ezek után a másodrendű bilineáris interpolációhoz a lineáris restrikciót választhatjuk, míg a direkt átvitelhez a harmadrendű interpolációt kell legalább választanunk.

Én a lineáris operátorok mellett döntöttem könnyű programozhatóságuk és relatív kevés művelet igényük miatt. Két dimenziós esetben ezeknek az operátoroknak az alakját mutatom meg a választott cella középpontos rácson. Vegyünk egy finom ω_1 és egy durva ω_2 rácsot - ezek láthatóak a 3.4 ábrán.

A bilineáris interpoláció esetén a durva rácson értelmezett p_H egy tetszőleges i,j koordináta pontjához négy pont tartozik a finom rácson, ezek értekeit az alábbi képletek segítségével számolhatjuk ki:

$$p_{h_{i,j}} = \frac{1}{16}\left(9p_{H_{i,j}} + 3p_{H_{i+1,j}} + 3p_{H_{i,j+1}} + p_{H_{i+1,j+1}}\right) \tag{3.38}$$

$$p_{h_{i+1,j}} = \frac{1}{16}\left(3p_{H_{i,j}} + 9p_{H_{i+1,j}} + p_{H_{i,j+1}} + 3p_{H_{i+1,j+1}}\right) \tag{3.39}$$

$$p_{h_{i,j+1}} = \frac{1}{16}\left(3p_{H_{i,j}} + p_{H_{i+1,j}} + 9p_{H_{i,j+1}} + 3p_{H_{i+1,j+1}}\right) \tag{3.40}$$

$$p_{h_{i+1,j+1}} = \frac{1}{16}\left(p_{H_{i,j}} + 3p_{H_{i+1,j}} + 3p_{H_{i,j+1}} + 9p_{H_{i+1,j+1}}\right) \tag{3.41}$$

A lineáris restrikció pedig könnyen belátható, hogy a finom rács egy tetszőleges i,j koordinátája körüli értékek átlagaként adódik:

$$p_{H_{i,j}} = \frac{1}{4}\left(p_{h_{i,j}} + p_{h_{i+1,j}} + p_{h_{i,j+1}} + p_{h_{i+1,j+1}}\right) \tag{3.42}$$

3.4.3. Többrácsos iteráció algoritmusa

A fentiek alapján a *sima többrácsos módszer* vagy V-ciklus pszeudo algoritmusát könnyen megadhatjuk az alábbiak szerint:

```
prodecure SMG(l,p,b)
begin
        if l = 1 then p:=A_1^{-1}*b;
        else begin
                p:=S_h^{ν-1}(A_l,b)*p;
                r:=R(b-A_l*b);
                γ*:=γ;
                if l=2 then γ*:=1;
                w:=0;
                for i = 1 step 1 until γ* do
                begin
```

```
12                    SMG(l-1,w,r);
13                end
14                p:=y+Pw;
15                p:=S_h^{ν-2}(A_l,b)*p;
16        end
17 end
```

Az algoritmus 3. sorban található az egyenlet direkt megoldása a legdurvább rácson. Ez általában valamilyen ritka mátrixra specializált LU felbontás, de lehet a simítások során használt Gauss-Seidel iteráció is. A 5. és 15. sorokban használjuk az elő és utósimítást a $S_h^{\nu_1}$ illetve a $S_h^{\nu_2}$ operátorokkal jelezve. A 6. sorban számíjuk ki a reziduumot és restrikcióját az R operátor segítségével. A 14. sorban P jelöli az interpolációt. Mint látható az algoritmus rekurzív, ez kevés rács esetén nem jelent különösebb problémát, nagy mennyiségű rács esetén viszont javasolt a fenti algoritmus nem rekurzív változatát használni.

A legtöbb esetben néhány (1,2,3) iterációt végrehajtva a legfinomabb rácson jutunk az 3.28 egyenletrendszer kielégítően pontos megoldásához.

Ennél egy kicsivel hatékonyabb az úgynevezett *teljes többrácsos módszer*, melynek pszeudo algoritmusa az alábbi:

```
procedure TMG(p,b)
begin
      SMG(1,p_1,b_1);
      for l:=2 step 1 until l_max do
      begin
           p_l:=P_{l-1}^l p_{l-1};
           μ:=μ_1;
           if l:=l_max then μ:=μ_2;
           for i = 1 step 1 until μ do
           begin
               SMP(l,p_l,b^l);
           end
      end
end
```

Mivel gyakran jó választás a $\mu_1 = \mu_2 = 1$ így végül is ezzel az algoritmussal bizonyíthatóan $O(N_{l_{\max}})$ nagyságrendű művelet igényel és ugyanekkora tárigénnyel tudjuk megoldani a 3.28 feladatot. Így elmondhatjuk, hogy a teljes többrácsos módszer nagyságrend szerint optimális.

4. fejezet

Tesztfeladatok

A numerikus módszer implemetációja során több lépést különítettem el. Mindenek előtt egy három dimenziós többrácsos megoldót valósítottam meg majd ennek felhasználásával készültek el a Navier-Stokes feladatot megoldó programok, végül ezek lettek kiegészítve a mikroorganizmusok részecskeszám eloszlását leíró konvekciós diffúziós egyenletekkel. Minden lépeben ellenőrzés képen tesztfeladatokat oldottam meg a már elkészült kóddal, hogy ellenőrizem a program hatékonyságát, pontosságát és helyességét. A tesztfeladatok során szerzett tapasztalatokat foglalom össze ebben a fejezetben.

4.1. Tesztfeladat a többrácsos módszerhez

A nyomás Poisson egyenlet megoldásakor keletkező egyenleterendszer megoldására egy az előző fejezetben bemutatott többrácsos módszert használó program lett készítve. Az algoritmus tesztelésére az alábbi klasszikus feladatott használtam:

$$\nabla^2 p = -(\cos(x) + \cos(y) + \cos(z)), p \in \Omega \tag{4.1}$$

$$\frac{\partial p}{\partial x} = \frac{\partial p}{\partial y} = \frac{\partial p}{\partial z} = 0, p \in \partial\Omega \tag{4.2}$$

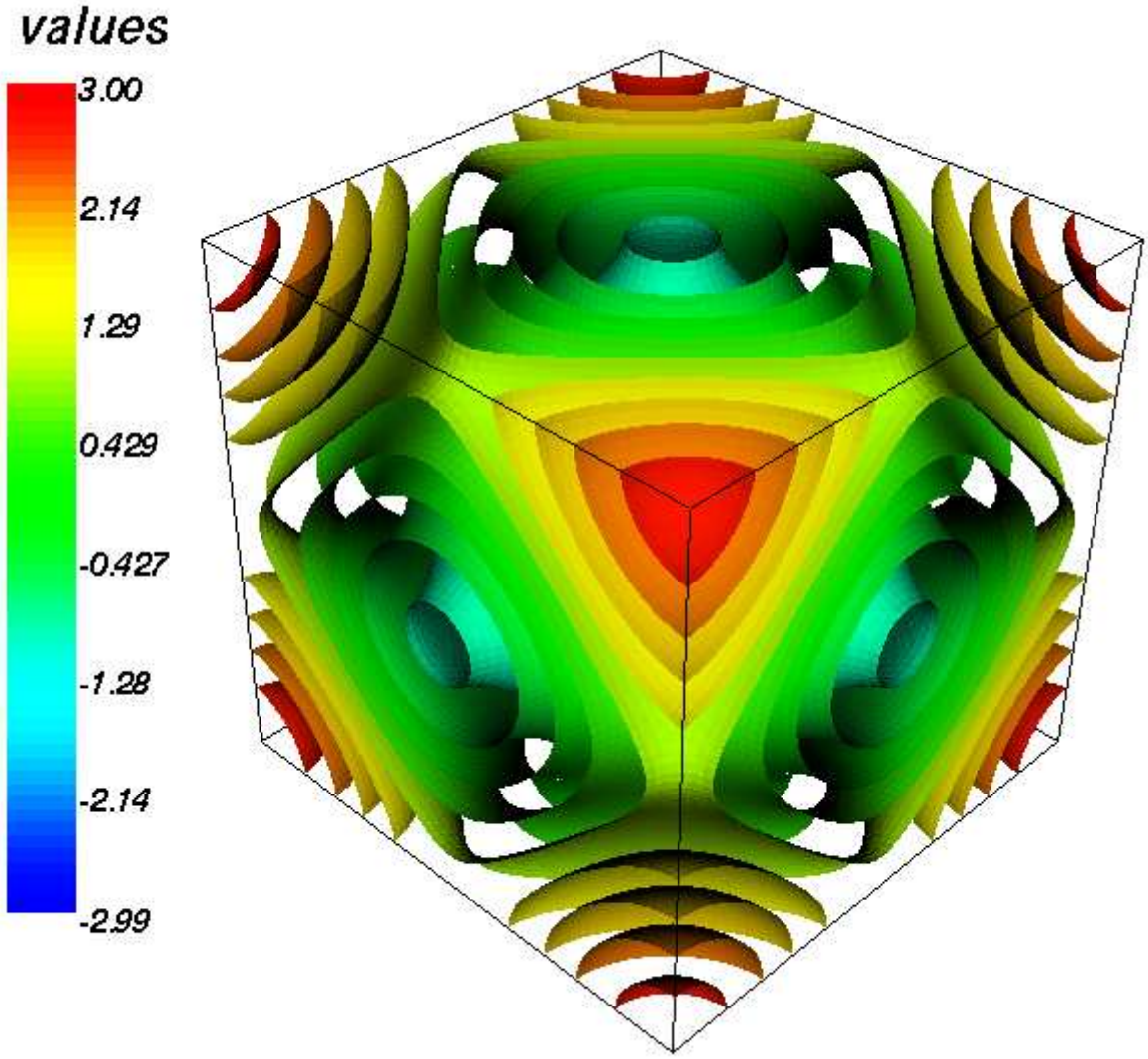
Ennek egzakt megoldása pedig:

$$p = \cos(x) + \cos(y) + \cos(z), p \in \Omega \tag{4.3}$$

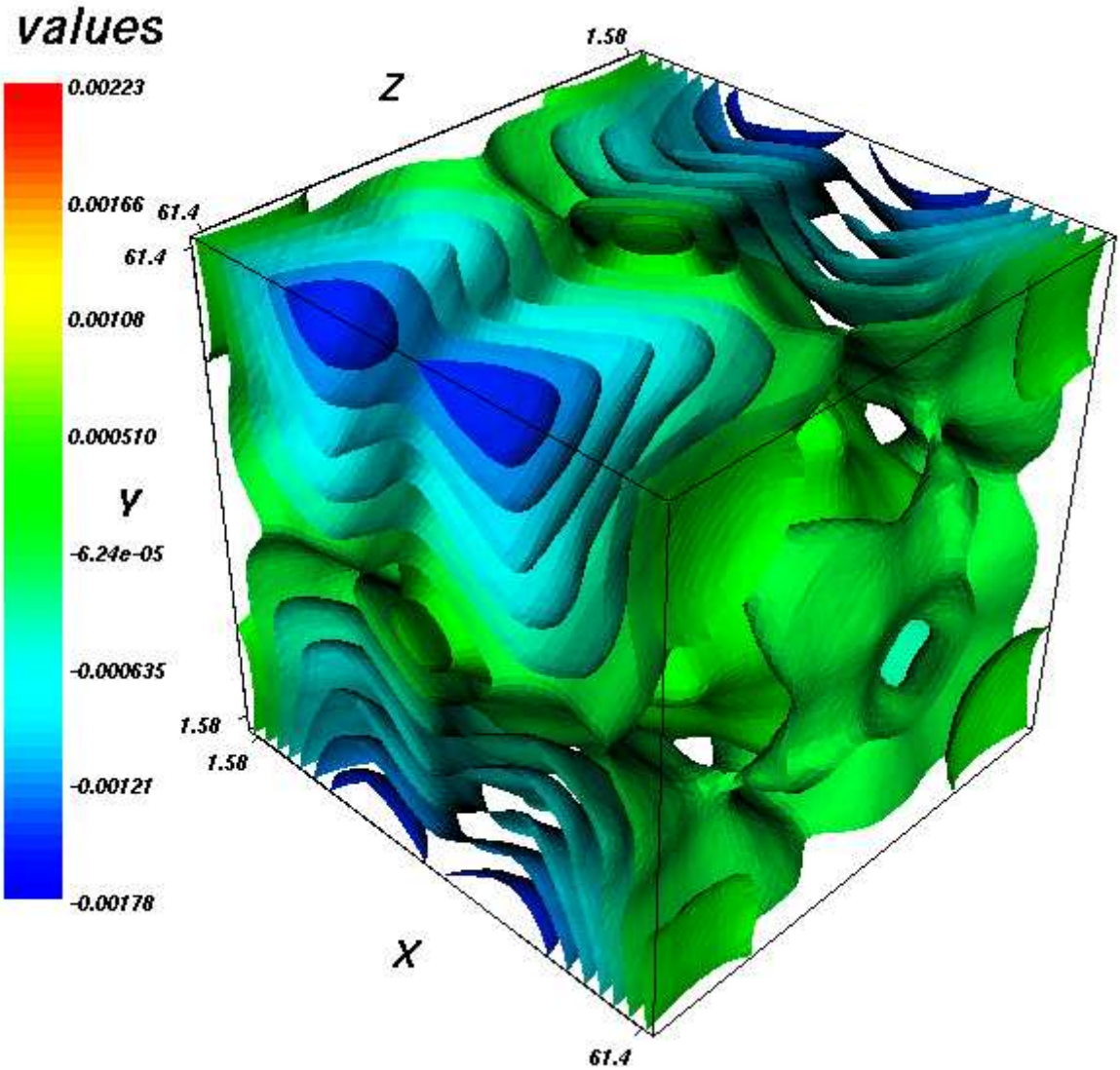
A feladat megoldásához $\Omega = [0, 2\pi] \times [0, 2\pi] \times [0, 2\pi]$ egység kocát választottam szimulációs térnek. A megoldás során az x és y koordináta irányokba periodikus határfeltételt választottam (ekkor sem válrozik a fennti megoldás a koszinus függvény kedvező tulajdonságai miatt), hogy az eredeti biokonvekciós feladat elrendezésében vizsgáljam a megoldó viselkedését. Természetesen más konfiguráció mellett is ellenőriztem a megoldó helyességét.

Az 4.1 ábra mutatja egy 64x64x64 rácsméretű egységkockában a tesztfeladat megoldásának izofelületeit, valamint a 4.2 ábra az egzakt megoldástól való eltérés az az a hiba izofelületeit. Jól

látható, hogy a hiba nagysága megfelel az elvárásainknak, hiszen annak $\frac{1}{64^2}$-en nagyságrendbe esik, továbbá az is látható, hogy a legnagyobb az alsó és a felső falaknál Z irányokban. A hiba átlagos értéke ebben az esetben 0.00044-nek adódott.



4.1. ábra. Többrácsos tesztfeladat megoldásának izofelületei 64x64x64-es rácson.



4.2. ábra. Többrácsos tesztfeladat megoldásának hibájának izofelületei 64x64x64-es rácson.

4.2. Tesztfeladat a Navier-Stokes megoldóhoz

A következő lépésben az előző program lett az alapja a Navier-Stokes feleadat megoldó programnak, ahol az előző fejezetben bemutatott SIMPLER módszert és diszkretizációt használtam.

Test feladatnak egy önmagában is érdekes problémát a sík Couette áramlást választottam. Ebben a konfigurációban két egymáshoz képest állandó sebességgel mozgó síklap között kialakuló áramlást vizsgálják.

A választásom azért esett erre a modellre, mert egyfelől a szokásos peremfeltételek - itt is x és y irányokban periodikus határfeltételek szokás választani - megegyeznek a biokonvekcióban használtakkal. Másfelől célom volt, hogy a keletkező Navier-Stokes megoldó program alkalmas legyen a turbulencia modellezésére is. A sík Couette áramlás pedig az egyik legegyszerűbb modell, amin a turbulencia kialakulása vizsgálható.

4.2.1. Lamináris eset

Mozogjon csak a felső fal w_f sebességgel az alsó fal maradjon állva. A felső lap mozgása hatja a közeget és a két fal között kialakuló sebességmező a folyadék belső súrlódásának következménye. Lamináris esetben kialakul egy stacionárius áramlás mely a határfeltételek figyelembe vételével az alábbi alakú:

$$w(z) = \frac{w_f}{H} z \tag{4.4}$$

x, y irányokban a közeg végtelen kiterjedésű ezért ezekben az irányokban a sebességnek mindenhol egyformának kell lennie.

A 4.3. ábra ezt az esetet mutatja amikor a Reynolds szám 100. A szimulációs tér $\Omega = [0,1] \times [0,1] \times [0,1]$ az időlépés $\Delta t = 0.01$. A felső fal sebessége pedig $w_f = 1$ volt. A rács pedig 32x32x32-es volt.

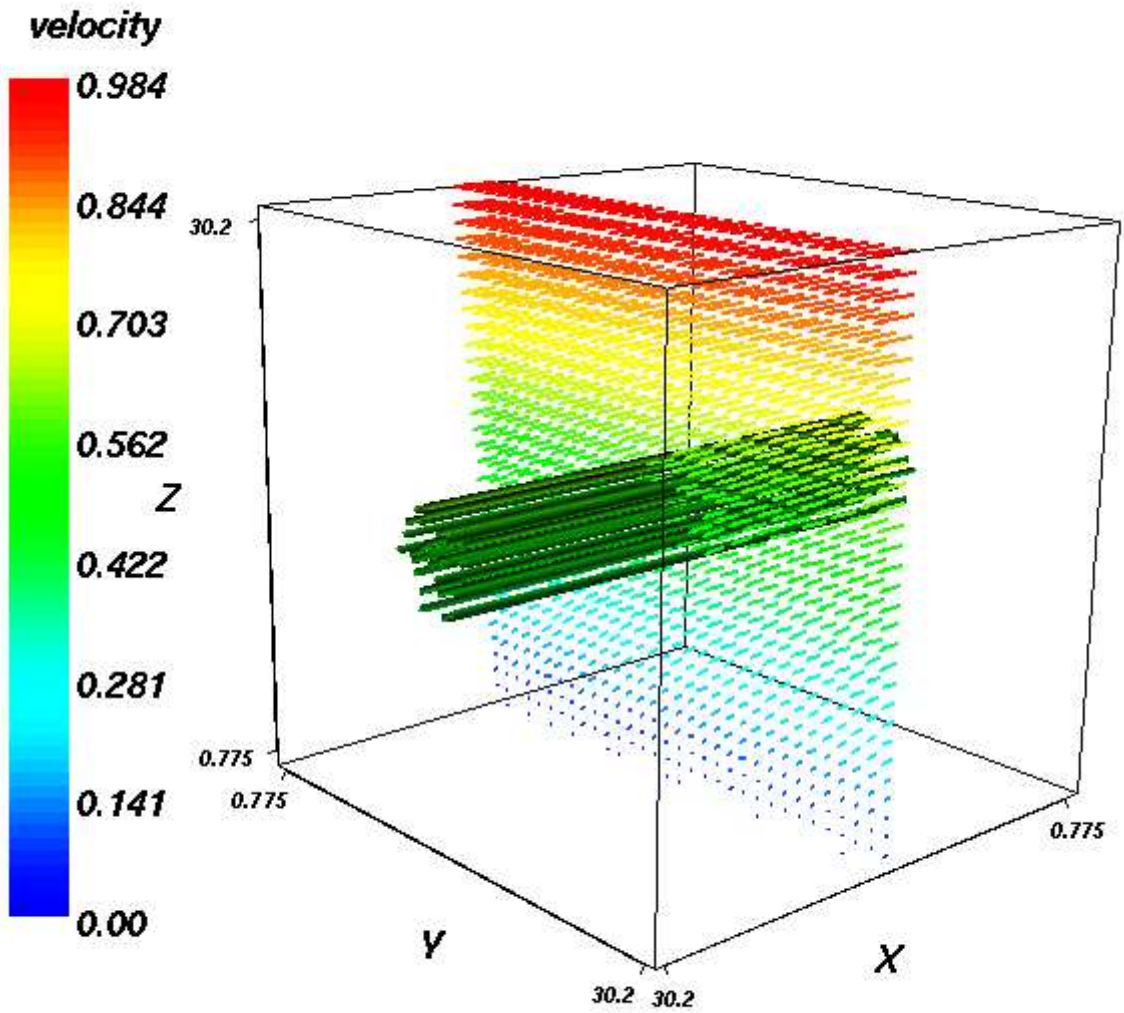
4.2.2. Turbulens eset

Mint ismeretes bizonyos paraméterek, különösen a Raynolds szám kritikus értéke felett a lamináris eset elveszíti stabilitását és turbulens áramlás alakul ki.

A sík Couette áramlás esetén a lamináris és turbulens átmenet részletei sok tekintetben tisztázatlanok. Ennek leginkább az az oka, hogy itt az átmenet nem egy kritikus értéknél, hanem egy nem lineáris átmeneti szakaszon keresztül valósul meg. A kísérleti eredmények az mutatják, hogy az átmeneti szakasz körülbelül $Re = 320$-nál jelentkezik. Ennél jóval nagyobb Reynolds számoknál az áramlás teljesen kifejlődött turbulens viselkedést mutat.

Az áramlás viselkedését jól jellemzi a turbulens kinetikus energia:

$$k = ? \tag{4.5}$$



4.3. ábra. Sík Couette áramlás lamináris esete 32x32x32-es rácson ($Re = 100$). A sebességmező a szimulációs térfogat felező síkjában valamint néhány áramvonal látható. $\Omega = [0,1] \times [0,1] \times [0,1]$, $w_f = 1$, $\Delta t = 0.01$.

A 4.4 ábra az egy turbulens áramlás turbulens kinetikus energiáját mutatja az időben függvényében. A rendszer egy $\Omega =?$ téglatest a rács 16x16x16-os. A felső fal sebessége $W_f =?$ az időlépés $\Delta t =?$, míg a Raynolds szám $Re =?$. A sebességek véletlenszerű eloszlásúak voltak kezdetben kicsiny abszolút értékkel. Az eredmények az irodalomban közölt hasonló szimulációs eredményekkel jó egyezést mutattak.

4.4. ábra. Turbulens kinetikus energa az idő függvényében.

A 4.5. ábra pedig az néhány áramvonalát mutat a fenti szimulációból.

Összefoglalva azt mondhatjuk hogy a Navier-Stokes egyenlet megoldó programunk alkalmas alacsony és magas Raynolds számok mellett bekövetkező áramlásokat is kielégítően pontosan előállítani.

4.3. Tesztfeladat a konvekciós diffúziós egyenlet megoldóhoz

A konvekciós diffúziós egyenlet megoldásának helyességének ellenőrzéséhez kézenfekvőnek adódott a gravotaxis egyenletrendszer stacionárius megoldásának keresése.

A 2.5 és 2.4 egyenletek a $\mathbf{v} = \mathbf{0}$ esetet figyelembe véve a stacionárius megoldás az alábbi alakú lesz:

$$n(z) = N_0 \frac{\lambda}{1 - e^{-\lambda}} e^{-\frac{\lambda}{H} z} \tag{4.6}$$

$$\lambda = \frac{U_0 H}{D_v} \tag{4.7}$$

ahol N_0 a kezdeti részecskeszám szűrtség U_0 a $\mathbf{U}$ organizmus sebesség z komponense.

4.5. ábra. Turbulens áramvonalak.

5. fejezet

Eredmények

6. fejezet

Összefoglalás

A dolgozatban összefoglaltuk az úszó organizmusok mozgása során kialakuló mintázatok eddigi elméleti és kísérleti eredményeit. Bemutattuk azokat a fizikai-biológiai modelleket, melyek a kialakult mintázatok jellemző tulajdonságaira (pl. karakterisztikus hullámhossz függése a közegmélységtől) magyarázatot kívánnak adni. Realizáltuk, hogy az eddigi két dimenziós modellek nem nyújtanak kimerítő magyarázatot a kísérletekben megfigyelt eredményekre. Továbbá több modellt például az oxotaxist egyáltalán nem vizsgálták direkt szimulációs módszerekkel.

Figyelmünket ezért egy olyan három dimenziós hidrodinamikai szimuláció elkészítésére fókuszáltuk, mely a modellek részletes szimulációs vizsgálatát lehetővé teszi.

Bemutattuk a Navier-Stokes és a kapcsolódó konvekciós diffúziós egyenletek megoldásának egy hatékony módszerét, mely egy többrácsos Poisson egyenlet megoldóra épül.

Külön figyelmet szenteltünk a bonyolult szimulációs program részletes tesztelésének, melyben olyan izgalmas problémák, mint a sík Couette áramlás turbulens esetével is foglalkozunk tesztelés gyanánt. Megmutattuk, hogy az elkészített szimulációs program a biokonvekció jelenségkörén kívül általánosan is alkalmazható turbulencia modellezésére is.

Az elkészült programrendszerrel a geotaxis modellt vizsgáltuk.

A modellek részletes vizsgálatára nem maradt időnk a dolgozat elkészítéséig, de ez egyben kijelöli a jövőbeni tevékenységünk fő irányát is. Reméljük, hogy a részletes vizsgálatok lehetőséget biztosítanak majd a kísérleti eredmények pontos értelmezésére és hozzájárulnak a biokonvekció jelenségkörének alaposabb megismeréséhez.

7. fejezet

Köszönetnyilvánítás

Szeretném megköszönni mindenek előtt témavezetőmnek Jánosi Imrének, hogy türelmesen szemlélte a munkámat a legnehezebb időszakokban is. Czirók Andrásnak, hogy felhívta a figyelmemet a biokonvekció jelenségkörére. Végül, de nem utolsó sorban köszönöm Balaton Zoltánnak, hogy rendelkezésemre bocsátotta a szakdolgozatának eredményét és, hogy konzultációval segítette a munkámat.

Irodalomjegyzék

[1] M. A. Bees and N. A. Hill. Wavelengths of bioconvection patterns. *The Journal of Experimental Biology*, 200:1515–1526, 1997.

[2] M. A. Bees and N. A. Hill. Linear bioconvection in a suspension of randomly swimming, gyrotactic micro-organizm. *Physis of Fluids*, 10(8):1864–1881, 1998.

[3] M. A. Bees and N. A. Hill. Non-linear bioconvection in deep suspension of gyrotactic swimming micro-organisms. *Journal of Mathematical Biology*, 38:138–168, 1999.

[4] Martin Alan Bees. *Non-Linear Pattern Generation By Swimming Micro-ogranisms*. PhD tézis, Univercity of Leeds, 1998.

[5] S. Chandrasekhar. *Hydrodynamics and Hydromagnetics Stability*. Oxford University Press, 1996.

[6] S. Childress, M. Levandowsky, and E. A. Spiegel. Pattern formulatrion in suspension of swimming microoganisms: equations and stability theory. *Journal of Fluid Mechanics*, 75:591–613, 1975.

[7] A. Czirók, I. M. Jánosi, and J. O. Kessler. Aerotatic bioconvection patterns in suspensions of bactilius subtilis. *?*, 2000.

[8] S. Ghorai. *Bioconvection and plumes*. PhD tézis, Univercity of Leeds, 1997.

[9] S. Ghorai and N. A. Hill. Development and stability of gyrotatctic plumes in bioconvection. *Journal of Fluid Mechanics*, 400:1–31, 1999.

[10] S. Ghorai and N. A. Hill. Wavelenghts of gyrotactic plumes in bioconvection. *Bulletion of Mathematical Biology*, 62:429–450, 2000.

[11] S. Ghorai and N. A. Hill. Asymmetric bioconvection in cylinder. *Journal of Theoretical Biology*, 219:137–152, 2002.

[12] Stolyan Gisbert and Takó Galina. *Numerikus Módszerek I-III*. ELTE és Typotex Kiadó, 1993.

[13] S. Gohari and N. A. Hill. Periodic array of gyrotactic plumes in bioconvection. *Physics of Fluids*, 12(1):5–22, 2000.

[14] A. Harashima, M. Watanabe, and Fujishiro I. Evolution of bioconvection patterns in culture of motile flagellates. *Physics of Fluids*, 31(4):764–775, 1988.

[15] A. J. Hillesdon and T. J. Pedley. Bioconvection in suspections of oxytactic bacteria: linear theory. *Journal of Fluid Mechanics*, 324:223–259, 1996.

[16] A. J. Hillesdon, T. J. Pedley, and J. O. Kessler. The development of concetratio gradients in suspension of chemotatic bacteria. *Bulletin of Mathematical Biology*, 57(2):299–344, 1995.

[17] M. M. Hopkins and L. J. Fauci. A computational modell of the collective fluid dynamics of motile micro-organizms. *Journal of Fluid Mechanics*, 455:149–174, 2002.

[18] I. M. Jánosi, A. Czirók, D. Shilhavy, and A. Holczinger. Is bioconvection enhancing bacterial growth in quiescent environment? *Environmental Microbiology*, 4(9):525–531, 2002.

[19] I. M. Jánosi, J. O. Kessler, and V. K. Horváth. Oneset of bioconvection in suspensions of bactilius subtilis. *Physical Review E*, 58(4), 1998.

[20] J. O. Kessler, P. R. Strittmatter, D. L. Swartz, D. A. Wiseley, and M. F. Wojciechowski. Paths and patterns: The biology and physics of swimming bacterial populations. *?*, 1995.

[21] L. D. Landau and E. M. Lifsic. *Elméleti Fizika VI. - Hidrodinamika*. Tankönyvkiadó, 1980.

[22] A. M. Metcalfe and T. J. Pedley. Bacterial bioconvection: wakly nonlinear theory for pattern selection. *Journal of Fluid Mechanics*, 370:249–270, 1998.

[23] A. M. Metcalfe and T. J. Pedley. Falling plumes in bacterial bioconvection. *Journalk of Fluid Mechanics*, pages 121–149, 2001.

[24] T. J. Pedley and J. O. Kessler. A new continuum model for suspensions of gyrotactic micro-organisms. *Journal of Fluid Mechanics*, 212:155–182, 1990.

[25] M. S. Plesett and H. Winet. Bioconvection patterns in swimming microoganism cultures as an example of reyligh-taylor instability. *Nature*, 248:441–443, 1974.

[26] Balaton Zoltán. *Turbulens áramlások direkt numerikus szimulációja párhuzamos feldolgozással*. BME Szakdolgozat, 2000.

A. Függelék

Geotaxis - diszkretizáció

Ebben a megadjuk a ... egyenletek véges térfogat diszkretizácóval kapott formulájit is, különös tekintettel a Navier-Stokes egyenletre.

Mindenek előtt néhány differenciál operátor diszkertizált alakját adjuk meg a jelölések egyszerűsítése érdekében. Az első ilyen a klasszikusnak mondható Laplace operátor diszkrét alakja:

$$\begin{aligned}\nabla^2 p \approx \nabla_h^2 p_h =& \frac{1}{h_1^2}(p_{i+1}+p_{i-1})_{j,k} + \frac{1}{h_2^2}(p_{j+1}+p_{j-1})_{i,k} + \frac{1}{h_3^2}(p_{k+1}+p_{k-1})_{i,j} - \\ & -2\left(\frac{1}{h_1^2}+\frac{1}{h_2^2}+\frac{1}{h_3^2}\right)p_{i,j,k}\end{aligned} \tag{A.1}$$

Ehhez hasonlóan a sebesség megző három komponensére az alábbi összefüggések adódnak:

$$\begin{aligned}\nabla^2 u \approx \nabla_h^2 u_h =& \frac{1}{h_1^2}(u_{i+\frac{3}{2}}+u_{i-\frac{1}{2}})_{j,k} + \frac{1}{h_2^2}(u_{j+1}+u_{j-1})_{i+\frac{1}{2},k} + \\ & + \frac{1}{h_3^2}(u_{k+1}+u_{k-1})_{i+\frac{1}{2},j} - 2\left(\frac{1}{h_1^2}+\frac{1}{h_2^2}+\frac{1}{h_3^2}\right)u_{i+\frac{1}{2},j,k}\end{aligned} \tag{A.2}$$

$$\begin{aligned}\nabla^2 v \approx \nabla_h^2 v_h =& \frac{1}{h_1^2}(v_{i+1}+v_{i-1})_{j+\frac{1}{2},k} + \frac{1}{h_2^2}(v_{j+\frac{3}{2}}+v_{j-\frac{1}{2}})_{i,k} + \\ & + \frac{1}{h_3^2}(u_{k+1}+v_{k-1})_{i,j+\frac{1}{2}} - 2\left(\frac{1}{h_1^2}+\frac{1}{h_2^2}+\frac{1}{h_3^2}\right)v_{i,j+\frac{1}{2},k}\end{aligned} \tag{A.3}$$

$$\begin{aligned}\nabla^2 w \approx \nabla_h^2 w_h =& \frac{1}{h_1^2}(w_{i+1}+w_{i-1})_{j,k+\frac{1}{2}} + \frac{1}{h_2^2}(w_{j+1}+w_{j-1})_{i,k+\frac{1}{2}} + \\ & + \frac{1}{h_3^2}(w_{k+\frac{3}{2}}+w_{k-\frac{1}{2}})_{i,j} - 2\left(\frac{1}{h_1^2}+\frac{1}{h_2^2}+\frac{1}{h_3^2}\right)w_{i,j,k+\frac{1}{2}}\end{aligned} \tag{A.4}$$

A konvekciós tagok diszkretizálását is könnyen elvégezhetjük. Itt lényegében a $\mathfrak{D}$ differenciál operátor diszkretizálását végezzük.

$$\begin{aligned}\mathfrak{D}(\mathbf{v})u =& \frac{\partial u^2}{\partial x} + \frac{\partial (uv)}{\partial y} + \frac{\partial (uw)}{\partial z} \approx \mathfrak{D}_h(\mathbf{v}_h)u_h = \\ &= \frac{1}{4h_1}\left[(u_{i+\frac{3}{2}} - u_{i-\frac{1}{2}})(u_{i+\frac{3}{2}} + u_{i-\frac{1}{2}} + 2u_{i+\frac{1}{2}})\right]_{j,k} + \\ &+ \frac{1}{4h_2}\Big[(u_{j+1} + u_j)_{i+\frac{1}{2}}(v_{i+1} + v_i)_{j+\frac{1}{2}} - \\ &(u_j + u_{j-1})_{i+\frac{1}{2}}(v_{i+1} + v_i)_{j-\frac{1}{2}})\Big]_k + \\ &+ \frac{1}{4h_3}\Big[(u_{k+1} + u_k)_{i+\frac{1}{2}}(w_{i+1} + w_i)_{k+\frac{1}{2}} - \\ &(u_k + u_{k-1})_{i+\frac{1}{2}}(w_{i+1} + w_i)_{k-\frac{1}{2}})\Big]_j\end{aligned} \tag{A.5}$$

$$\begin{aligned}\mathfrak{D}(\mathbf{v})v =& \frac{\partial (uv)}{\partial x} + \frac{\partial (v^2)}{\partial y} + \frac{\partial (vw)}{\partial z} \approx \mathfrak{D}_h(\mathbf{v}_h)v_h = \\ &= \frac{1}{4h_2}\left[(v_{j+\frac{3}{2}} - v_{j-\frac{1}{2}})(v_{j+\frac{3}{2}} + v_{j-\frac{1}{2}} + 2v_{j+\frac{1}{2}})\right]_{i,k} +\end{aligned} \tag{A.6}$$

$$\begin{aligned}\mathfrak{D}(\mathbf{v})w =& \frac{\partial (uw)}{\partial x} + \frac{\partial (vw)}{\partial y} + \frac{\partial w^2}{\partial z} \approx \mathfrak{D}_h(\mathbf{v}_h)w_h = \\ &= \frac{1}{4h_3}\left[(w_{k+\frac{3}{2}} - w_{k-\frac{1}{2}})(w_{k+\frac{3}{2}} + w_{k-\frac{1}{2}} + 2w_{k+\frac{1}{2}})\right]_{i,j} +\end{aligned} \tag{A.7}$$

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_{i+\frac{1}{2},j,k} = -Sc\frac{1}{h_1}(p_{i+1} - p_i)_{j,k} - \mathfrak{D}_h(\mathbf{v}_h)u_h + Sc\nabla_h^2 u_h \tag{A.8}$$

$$\left(\frac{\partial v}{\partial t}\right)_{i,j+\frac{1}{2},k} = -Sc\frac{1}{h_2}(p_{j+1} - p_j)_{i,k} - \mathfrak{D}_h(\mathbf{v}_h)v_h + Sc\nabla_h^2 v_h \tag{A.9}$$

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial w}{\partial t}\right)_{i,j,k+\frac{1}{2}} =& - Sc\frac{1}{h_3}(p_{k+1} - p_k)_{i,j} - \mathfrak{D}_h(\mathbf{v}_h)w_h + Sc\nabla_h^2 w_h - \\ &- \frac{\Gamma \cdot Sc}{2}(n_{k+1} + n_k)_{i,j} - \frac{gL^3}{D_0^2}\end{aligned} \tag{A.10}$$