

Powszechnie przyjętą metodą zapobiegania chorobom uzębienia i najbardziej znanym zastosowaniem opisywanego pierwiastka jest dodawanie fluorków (np. fluorek sodu NaF, aminofluorki) do pasty do



Ryc. 10. Etykieta trucizny zawierającej fluoroocetan sodu ostrzegająca przed przypadkowym spożyciem.. Źródło: en.wikipedia.org.

zębów. Prawdopodobny mechanizm działania fluorków polega na formowaniu fluoroapatytu w szkliwie

zębowym. Istnieje coraz więcej dowodów na to, że chroniczne narażenie na nawet niewielkie dawki fluoru zwiększa ryzyko poważnych chorób, w tym przewlekłej niewydolności nerek. Z drugiej strony suplementacja pasty fluorkami uznawana jest za jedno z dziesięciu największych przełomów medycznych XX wieku. Fluorowanie pozwala znacznie ograniczyć rozwój próchnicy i powstawanie chorób przyzębia, które bardzo poważnie zwiększają ryzyko chorób serca; zastosowanie fluorowanej pasty przynosi znacznie więcej korzyści niż szkód. Kontrowersje budzi natomiast dodawanie fluorków do wody pitnej, w USA niemal wszystkie sieci wodociągowe dostarczają wodę wzbogaconą jonami fluorkowymi (F^-).

Mimo niebezpieczeństw związanych z zastosowaniem fluoru do modyfikacji wielu substancji chemicznych należy z całą pewnością podkreślić jego rolę w rozwoju naszej cywilizacji. Zdolność zapanowania nad najbardziej reaktywnym z pierwiastków pozwoliła nam otworzyć nowe rozdziały w historii chemii, energetyki, przemysłu, jak i medycyny.

Adam Hogendorf, Instytut Farmakologii PAN, Kraków. Zakład Chemii Leków. E-mail: ahogendorf@gmail.com

ZGADYWANIE CZY PRZEWIDYWANIE POGODY? SUPERKOMPUTERY KONTRA WIELOSKALOWY CHARAKTER NATURY

Ziemowit Malecha (Wrocław)

W poniższym artykule zostaną przybliżone zagadnienia wieloskalowości i nieliniowości nierozdzielnie związane z pogodą i klimatem. Wyjaśnione zostanie, dlaczego nawet najlepsze superkomputery mają bardzo duże trudności z modelowaniem ruchu atmosfery oraz oceanów. Przedstawiona będzie filozofia i metodologia radzenia sobie z powyższymi trudnościami.

Jedno równanie – niezliczoność możliwości

Druga zasada dynamiki Newtona mówi, że ruch ciała może ulec zmianie tylko na skutek działających na niego sił zewnętrznych. Ujmując to bardziej ogólnie: przyspieszenie (czyli zmiana prędkości w czasie) jest wywoływane przez siły zewnętrzne:

$$F = m \cdot a$$

W powyższym równaniu $a = du/dt$ oznacza przyspieszenie, m jest masą, natomiast F zawiera w sobie wszystkie siły zewnętrzne wywołujące przyspieszenie a . W przypadku swobodnie spadającego obiektu jest to siła grawitacji.

Na ruch atmosfery oraz oceanu, który bezpośrednio wpływa na pogodę i klimat, dodatkowo wpływa siła tarcia wewnętrznego (lepkość), siła wyporu (związaną z różnicą gęstości oraz temperatury), różnica ciśnień oraz siła Coriolisa związana z ruchem obrotowym Ziemi. Ponieważ atmosfera jest mieszaniną gazów i cieczy, których właściwości dodatkowo zależą od warunków zewnętrznych (ciśnienie, temperatura), jej ruch jest bardzo skomplikowany. Z perspektywy obserwatora charakteryzuje go wieloskalowość, czyli współistnienie struktur (obiektów) o różnej skali wielkości. Olbrzymie cyklony, prądy

morskie, większe i mniejsze wiry (ruchy cyrkulacyjne) oraz zupełnie małe zawirowania. Natomiast z perspektywy opisu matematycznego równania omawianego ruchu charakteryzuje nieliniowość.

Nieliniowość jest głównym wyzwaniem dla modeli klimatycznych oraz obliczeń komputerowych. Jest ona źródłem bezustannego tworzenia się coraz mniejszych skal (struktur wirowych). Uwzględnienie ich wszystkich w modelach obliczeniowych wymaga coraz większej precyzji oraz mocy komputerów. Prosta analogia ilustrującą powyższe zagadnienie może być iteracyjne mnożenie liczby przez samą siebie, czyli podnoszenie do kwadratu. Załóżmy, że początkowa wartość naszej zmiennej wynosi $u_0 = 0,1$. W kolejnej iteracji mamy $u_1 = u_0 \cdot u_0 = 0,01$, w następnej $u_2 = u_1 \cdot u_1 = 0,0001$ i tak dalej, aż do momentu wyczerpania się precyzyjnej możliwości reprezentowania liczby przez komputer.

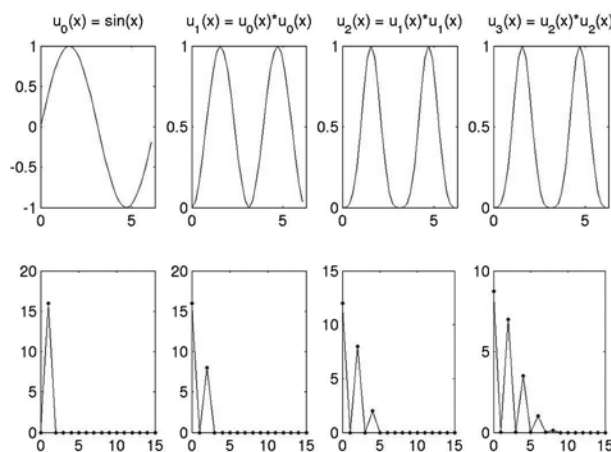
Bardziej rzeczywistą ilustracją tworzenia się coraz mniejszych struktur na skutek oddziaływania nieliniowego będzie, gdy zamiast pojedynczej wartości nasza zmienna będzie miała formę funkcji $u_0 = \sin(x)$. W kolejnych iteracjach otrzymamy: $u_1 = \sin(x) \cdot \sin(x)$, $u_2 = \sin(x) \cdot \sin(x) \cdot \sin(x) \cdot \sin(x)$ i tak dalej.

Rycina 1. przedstawia ewolucję zmiennej u w kolejnych iteracjach. Górny rząd prezentuje wykresy funkcji u_0 , u_1 , u_2 oraz u_3 , natomiast dolny rząd przedstawia odpowiadające im widma częstotliwości¹. Oś pozioma wykresów z dolnego rzędu numeruje częstotliwość. Większa liczba oznacza mniejszą skalę. Widać więc, że nieliniowość powoduje powstawanie coraz to mniejszych skal, reprezentowanych na wykresie jako odpowiednie częstotliwości o niezerowej energii.

Powyższa kaskada skal może być z łatwością zaobserwowana w naszym otoczeniu. Na mapie pogody bez trudu można dostrzec wielkie krążące masy powietrza. Jeżeli przybliżymy się do jednej z nich, zauważymy, że znajdują się tam mniejsze wiry, a w tych mniejszych jeszcze mniejsze i tak dalej. Pytaniem zasadniczym jest, czy proces ten ma koniec? Pocięszające może być, że odpowiedź jest pozytywna. Jednak z punktu widzenia wielości skal potrzebnych do uwzględnienia w precyzyjnym modelowaniu pogody lub klimatu proces ten jest niemalże nieskończony.

Aby lepiej to zrozumieć, przyjrzyjmy się sile tarcia wewnętrznego, która odpowiada za „rozmywanie” się małych zaburzeń, zamieniając je w energię ciepłą. Struktury o granicznej wielkości ulegają anihilacji na skutek tarcia i nie stanowią kłopotu w procesie obliczeniowym. W płynach siła tarcia związana jest

lepkością. Duża lepkość oznacza duże tarcie i dlatego w cieczach takich jak np. miód bardzo trudno jest wywołać skomplikowany ruch. Można to łatwo sprawdzić doświadczalnie porównując rezultat mieszania łyżeczką miodu oraz wody.



Ryc. 1. Tworzenie się mniejszych skal na skutek oddziaływania nieliniowego. Górny rząd przedstawia funkcję $u_0 = \sin(x)$ oraz jej kolejne iteracje w procesie mnożenia przez siebie. Dolny rząd przedstawia odpowiadające im widma częstotliwości. Niezerowe wartości częstotliwości odpowiadają pojawianiu się mniejszych skal.

Atmosfera w przeważającej części składa się z powietrza oraz wody, których lepkość jest o wiele mniejsza niż miodu, więc generowanie się skomplikowanego ruchu i powstawanie coraz mniejszych struktur wirowych jest niemalże nieograniczone. W praktyce oznacza to, że aby precyzyjnie modelować przyszły stan pogody, w obliczeniach komputerowych należy ująć skale rzędu od tysięcy kilometrów do kilku milimetrów. Dla współczesnych komputerów jest to zbyt wiele.

Ostatnie stwierdzenie jest prawdziwe, gdy chcemy zmusić maszynę obliczeniową do uwzględnienia wszystkich skal, które mogą się zmanifestować w ewolucji oceanu bądź atmosfery (tkz. obliczenia DNS – *Direct Numerical Simulations*). Na szczęście wgląd w zagadnienia fizyki płynów pozwala na rozwijanie dużo mniej kosztownych, uproszczonych metod obliczeniowych.

Upraszczanie modeli obliczeniowych poprzez wyizolowanie istoty rzeczy

Proces upraszczania jest bardzo wymagającym i trudnym zadaniem. Jest to wciąż domena, w której człowieka nie może zastąpić nawet najnowocześniejsza maszyna. Proces ten wymaga intuicji, wnioskowania i rozumienia praw natury.

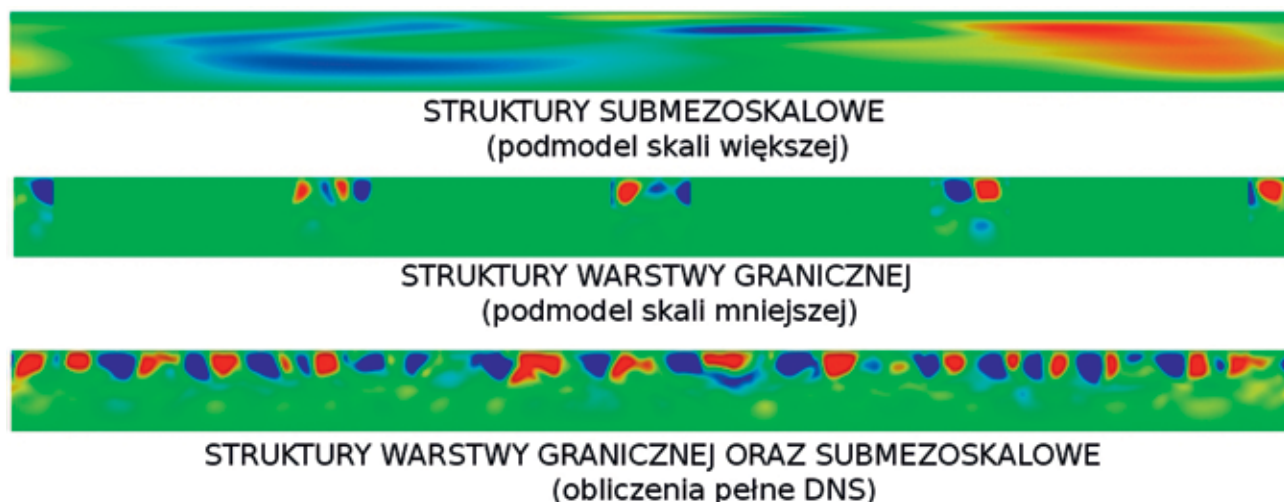
¹ Każdą funkcję rzeczywistą można przedstawić jednoznacznie w postaci nieskończonej sumy funkcji sinusoidalnych z odpowiednią amplitudą i współczynnikiem falowym. Na podstawie widma częstotliwości widać, które częstotliwości (skale) dominują w danym widmie (sygnale).

Obserwacje różnego rodzaju przepływów zaowocowały wyciągnięciem wielu przełomowych wniosków. Jednym z nich jest fakt, iż wielkość i czas życia poszczególnych struktur wirowych nie jest przypadkowa. W różnych zjawiskach hydrodynamicznych można zaobserwować charakterystyczne dla nich struktury, które są bardziej trwałe i dominujące (tzw. struktury koherentne).

Ruch skrzydeł owadów nie jest przypadkowy, lecz precyzyjnie zaprojektowany aby tworzyć specyficzne małe wiry, które pomagają w lataniu i manewrowaniu. Nagła zmiana średnicy rurociągu powoduje pojawienie się niekorzystnych stref przepływu wstecznego, których wielkość zależy od różnicy średnic i bezpośrednio wpływa na spadek ciśnienia. Natomiast wzajemne oddziaływanie wiatru i fal morskich tworzy długie cylindryczne pary wirów zwane cyrkulacją Langmuira (LC).

mająca swoje źródło w obrocie Ziemi wokół własnej osi. Dla warstwy brzegowej będzie to siła wiatru wywołująca naprężenia styczne na powierzchni wody, natomiast siła Coriolisa będzie tutaj praktycznie nieodczuwalna. Dla submezoskali istotna jest różnica temperatur oraz zasolenia wody skutkująca w powstawaniu różnicy gęstości i pojawieniu się siły wyporu. Patrząc na ocean, będziemy więc przeważnie widzieli tych kilka wielkości struktur wirowych, ponieważ ich istnienie jest nieprzerwanie wspomagane wyżej wymienionymi siłami zewnętrznymi.

Obecnie istnieją uproszczone modele matematyczne, bazujące na równowadze dominujących sił, ale nie uwzględniające, w sposób wystarczająco rzetelny, wpływu mniejszych struktur na większe. Wyzwaniem jest włączenie do modelu tych małych skal z jednoczesnym niezwiększaniem zapotrzebowania na moc obliczeniową. Jedną z obiecujących metod



Ryc. 2. Modelowanie górnej warstwy oceanu metodą wieloskalową. Górny i środkowy obrazek przedstawiają odpowiednio chwilowy stan struktur submezoskali oraz warstwy granicznej. Obliczenia dla mniejszych skal odbywają się tylko w 4 małych podobszarach. Dolny obrazek przedstawia odpowiadające wyniki obliczeń DNS.

Innym kluczowym zagadnieniem jest wzajemne oddziaływanie struktur wirowych oraz sposób i kierunek przekazywania między nimi energii. Aby lepiej zrozumieć relacje między poszczególnymi skalami wirów, pomocne jest zdefiniowanie charakterystycznego rozmiaru i charakterystycznego czasu ewolucji (życia) danego wiru. W oceanie możemy wyodrębnić min. mezoskalę, submezoskalę oraz warstwę graniczną². Charakterystyczny rozmiar mezoskali to setki kilometrów, charakterystyczny czas życia to miesiące, dla submezoskali są to dziesiątki kilometrów i tygodnie, dla warstwy granicznej setki metrów i dziesiątki godziny.

Podział ten nie jest przypadkowy lecz jest ściśle związany z charakterystyczną równowagą dominujących sił. W mezoskali dominująca jest siła Coriolisa,

jest tzw. metoda wieloskalowa (multiple-scale method). Opiera się ona na wprowadzeniu dwóch formalnie niezależnych skal czasowych (wolnej i szybkiej) i przestrzennych (dużej i małej) w ramach jednego modelu. Kluczowym wyzwaniem jest zidentyfikowanie wspólnego parametru ε , który wiąże ze sobą wszystkie ważne siły występujące w danym systemie. Może to być np. stosunek charakterystycznych wymiarów poszczególnych wirów. W przypadku submezoskali i warstwy granicznej $\varepsilon \sim 0,01$.

Powyższe postępowanie prowadzi do zdefiniowania dwóch oddzielnych podmodeli w ramach jednego modelu. Są one zdefiniowane w różnych zmiennych czasowych oraz przestrzennych, jednak mają możliwość wymiany niezbędnych informacji.

² Podobnie w atmosferze, z tym że tutaj charakterystyczny rozmiar i czas dla poszczególnych skali jest około 10 razy większy.

Głównym zyskiem jest tutaj fakt, że podmodel symulujący dynamikę większych struktur nie musi bezpośrednio uwzględniać wpływu małych wirów, więc nie wymaga zwiększonej mocy obliczeniowej. Informacje o wpływie małych struktur są przekazywane z drugiego podmodelu, który liczony jest osobno.

Od słów do czynów

W oceanie w submezoskali tworzą się struktury wirowe na skutek np. różnicy gęstości wody. Natomiast w warstwie granicznej występuje cyrkulacja Langmuira, pary przeciwnie wirujących, wydłużonych struktury wirowych o walcowatym kształcie. Rycina 2. przedstawia wyniki obliczeń ukazujących wzajemne oddziaływanie powyższych struktur oraz obrazuje działanie metody wieloskalowej w praktyce.

Dolny obrazek z ryciny 2. demonstruje wynik pełnych obliczeń DNS, gdzie uwzględnione są wszystkie skale wielkości struktur wirowych. Możemy

zauważyć szereg rotujących par LC, które dodatkowo są zatopione w strukturze wirowej o większych rozmiarach³. Obrazek górny i środkowy przedstawia wynik obliczeń uproszczonego modelu wieloskalowego, odpowiednio dla podmodelu skal większych i mniejszych. Ponieważ struktury LC powtarzają się wzdłuż całego obszaru, nie ma potrzeby obliczania ich wszędzie, tak jak ma to miejsce w przypadku pełnych obliczeń DNS. Zamiast tego można je symulować tylko w kilku niezależnych małych podobszarach, do których przekazywana jest niezbędna informacja o stanie przepływu submezoskalowego (środkowy obrazek). Struktury większe oddziałują na struktury mniejsze i odwrotnie.

Powyższe badania pokazały przede wszystkim, że małe wiry mogą znacząco wpływać na większe struktury, więc pomijanie ich (lub niepoprawne uwzględnianie) może prowadzić do błędów w przewidywaniu pogody czy klimatu. Ponadto zaproponowana metoda wieloskalowa daje wyniki zbliżone z obliczeniami DNS, ale jest znacząco od niej szybsza.

³ Rycina przedstawia wynik obliczeń dwuwymiarowych. Widzimy więc na nim przekrój poprzeczny przez wiry LC.

Dr inż Ziemowit Miłosz Malecha jest adiunktem w Katedrze Inżynierii Kriogenicznej, Lotniczej i Procesowej Politechniki Wrocławskiej. E-mail: ziemowit.malecha@pwr.edu.pl

MOST ŁĄCZĄCY NAUKI BIOLOGICZNE Z TECHNIKĄ – BIOCYBERNETYKA

Ryszard Tadeusiewicz (Kraków)

Rozwój nauk biologicznych oraz medycyny jest naprawdę imponujący. Ogromnie szybki jest także rozwój i postęp techniki. Natomiast przepływ idei naukowych pomiędzy dziedziną biologii a dziedziną techniki jest wciąż bardzo utrudniony. I nie wynika to z czyjejkolwiek złej woli. Po prostu właśnie ten postęp biologii i medycyny z jednej strony i rozwój techniki z drugiej strony doprowadziły do tego, że pomiędzy tymi dziedzinami wyrósł swoisty mentalny „mur” (Ryc. 1). Mur odmiennych metodologii, różnych tradycji rozwoju, a także hermetycznej, odmiennej terminologii.



Ryc. 1. Symboliczne wyobrażenie różnic między dziedzinami biologii i techniki jako „muru”.

Jako przykład obecności tego „muru” przytoczyć można odmienny sposób przedstawiania takich samych (lub przynajmniej bardzo zbliżonych) systemów i problemów – odpowiednio w biologii i w technice. Rozważmy jako przykład rycinę 2. Przedstawia ona dwa systemy stabilizacji ciśnienia.

Pierwszy jest system stabilizacji ciśnienia krwi. W każdym bardziej złożonym organizmie żywym funkcjonuje system krążenia, dzięki któremu krew niosąca tlen i substancje odżywcze dociera do wszystkich narządów i tkanek zapewniając odpowiednie warunki dla życia komórek. Krew ta musi mieć stabilizowane ciśnienie (dopasowane do potrzeb). Przyroda wytworzyła więc wiele mechanizmów (nerwowych i hormonalnych), które służą do tego celu. Przykładowy schemat systemu stabilizacji ciśnienia krwi w organizmie człowieka odkryty przez biologów i wykorzystywany przez lekarzy przedstawia rycina 2. po lewej stronie.