



Kémiai szimuláció II.

Kémiai modellek

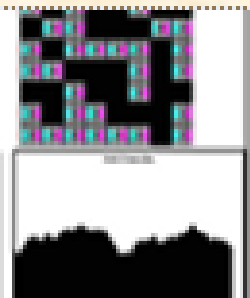
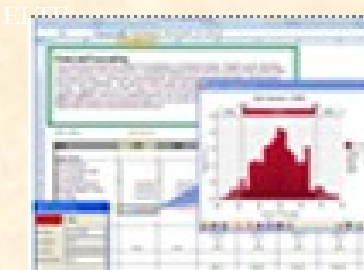
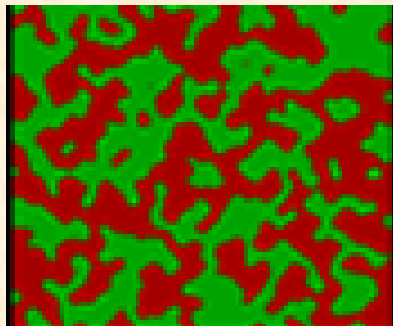
Kémiai körfolyamatok

- nyílt rendszer (van belépés és kilépés);
- vannak belső komponensek (molekulák, amelyek nem lépnek be és nem lépnek ki);
- a belső komponensek egymásba alakulnak át.

Probléma a be- és kilépés megoldása, különösen akkor, ha nem akárhol történhet.

Megoldás:

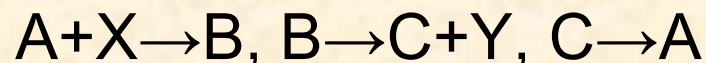
- vegyük körül a szimulációs teret fallal;
- a falban speciális elemmel jelezzük a belépés, illetve a kilépés helyét!



Kémiai modellek

Kémiai körfolyamat

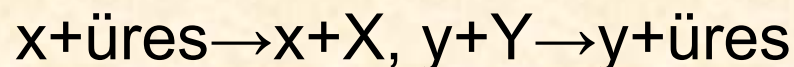
A körfolyamat lépései:



belép: X

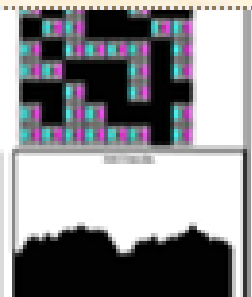
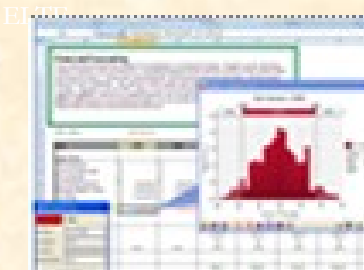
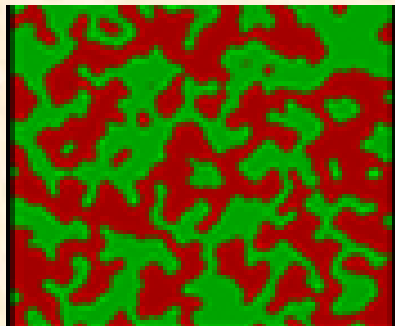
kilép: Y

A belépés és a kilépés reakciószerűen:

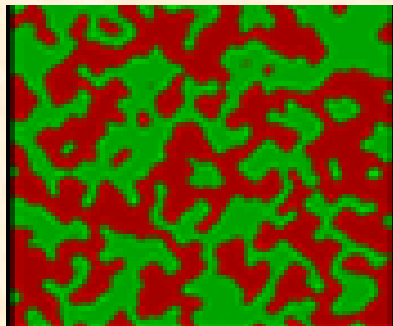


Azaz tegyük a falba x-eket, ahol belépés lehet, illetve y-okat, ahol kilépés lehet!

Ez egy nyílt rendszer!



Kémiai modellek



Kémiai körfolyamat

Reakció (i, j, k, l) :

Ha $T(i, j) = "A"$ és $T(k, l) = "X"$ vagy

$T(i, j) = "X"$ és $T(k, l) = "A"$ akkor $A+X \rightarrow B$ reakció
különben ha $T(i, j) = "B"$ akkor $B \rightarrow C+Y$ reakció

különben ha $T(i, j) = "C"$ akkor $C \rightarrow A$ reakció

különben ha $T(i, j) = "x"$ és $T(k, l) = " "$ vagy

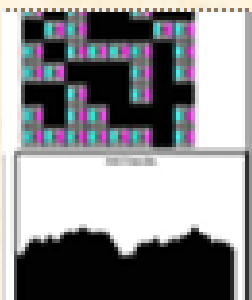
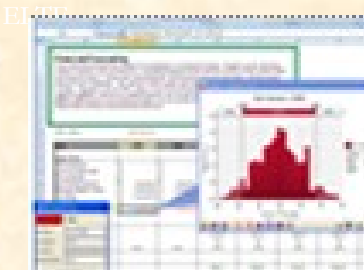
$T(i, j) = " "$ és $T(k, l) = "x"$ akkor $x + \text{üres} \rightarrow x + X$ reakció

különben ha $T(i, j) = "y"$ és $T(k, l) = "Y"$ vagy

$T(i, j) = "Y"$ és $T(k, l) = "y"$ akkor $y + Y \rightarrow y + \text{üres}$ reakció

Eljárás vége.

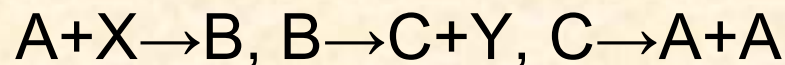
A reakciószerűen megvalósított mozgásoknál figyelni kell a fal helyben maradására!



Kémiai modellek

Önreprodukáló kémiai körfolyamat

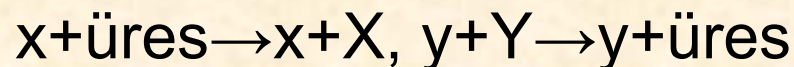
A körfolyamat lépései:



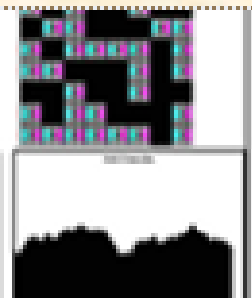
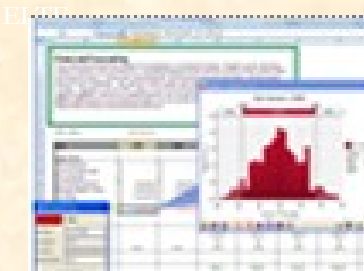
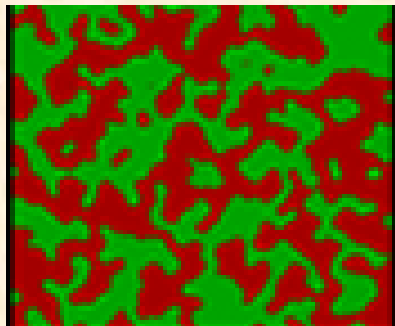
belép: X

kilép: Y

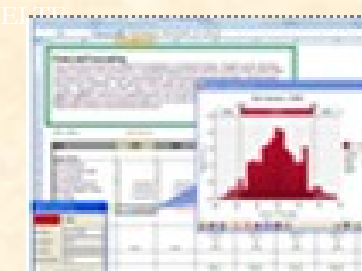
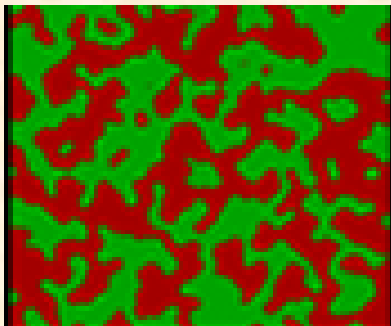
A belépés és a kilépés újra reakciószerűen:



Ez a rendszer nyílt és növekvő!



Kémiai modellek



Önreprodukáló kémiai körfolyamat

Reakció (i, j, k, l) :

Ha $T(i, j) = "A"$ és $T(k, l) = "X"$ vagy

$T(i, j) = "X"$ és $T(k, l) = "A"$ akkor $A+X \rightarrow B$ reakció
különben ha $T(i, j) = "B"$ akkor $B \rightarrow C+Y$ reakció

különben ha $T(i, j) = "C"$ akkor $C \rightarrow A+A$ reakció

különben ha $T(i, j) = "x"$ és $T(k, l) = " "$ vagy

$T(i, j) = " "$ és $T(k, l) = "x"$ akkor $x + \text{üres} \rightarrow x + X$ reakció

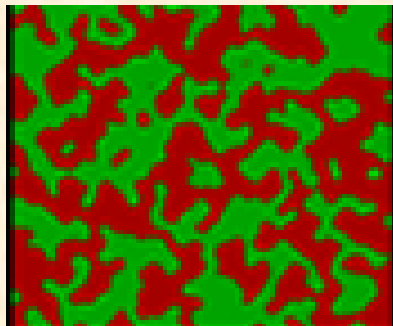
különben ha $T(i, j) = "y"$ és $T(k, l) = "Y"$ vagy

$T(i, j) = "Y"$ és $T(k, l) = "y"$ akkor $y + Y \rightarrow y + \text{üres}$ reakció

Eljárás vége.

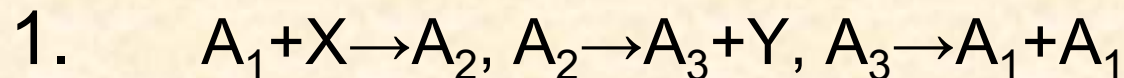
A szimulációs tér be fog telni!

Mintázatképződés



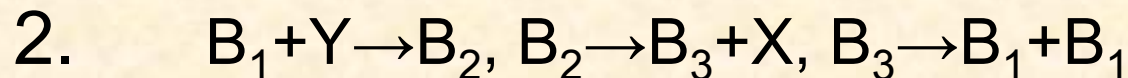
Kis foltok

Vegyünk két önreprodukáló körfolyamatot:



belép: X

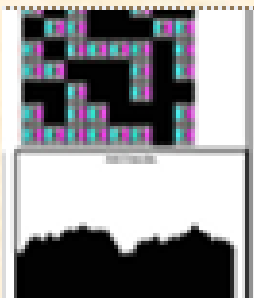
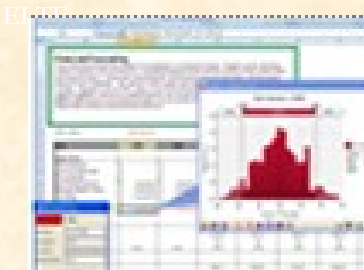
kilép: Y



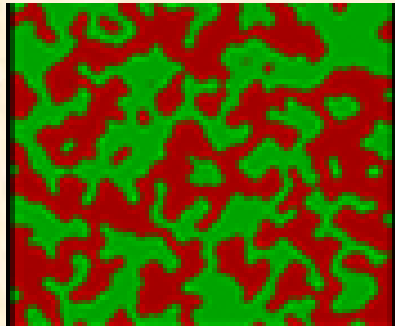
belép: Y

kilép: X

Azaz az egyik körfolyamat a másik termékét, a másik körfolyamat pedig az egyik termékét fogyasztja!

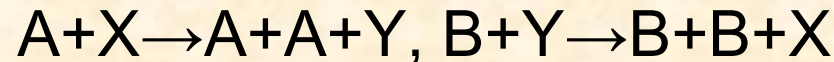


Mintázatképződés



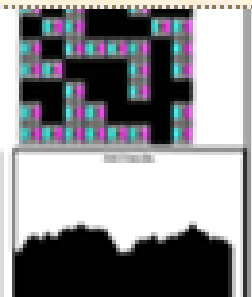
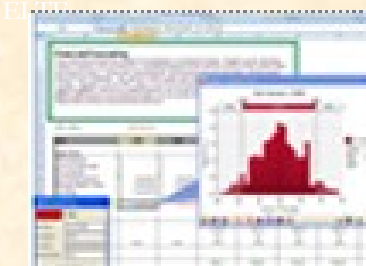
Kis foltok

A két önreprodukáló körfolyamat összegképlete:

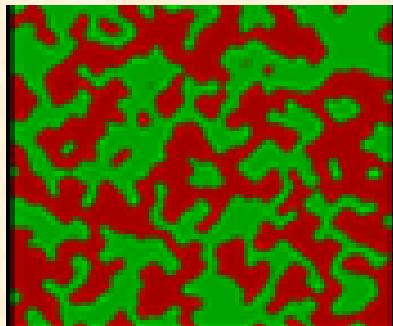


Általánosítás:

- A és B sejtek, A fekete, B pedig fehér színű.
- X és Y molekulák, amelyek a sejtek között mozognak.
- $ST()$ – a sejtek tere, $MT()$ – a molekulák tere
- Az A és a B sejtek elpusztulhatnak, a pusztulásuk valószínűségét jelölje P, illetve Q!



Kémiai modellek



Kis foltok

Szimulációs lépés:

$(i, j) := \text{Véletlen_hely}(N, M)$

$(k, l) := \text{Véletlen_szomszéd}(i, j)$

Csere $(MT(i, j), MT(k, l))$; $x := \text{Véletlenszám}$

Elágazás

$ST(i, j) = "A"$ és $x < P$ esetén $ST(i, j) := " "$

$ST(i, j) = "B"$ és $x < Q$ esetén $ST(i, j) := " "$

Elágazás vége

Elágazás

$MT(i, j) = "X"$ és $ST(i, j) = "A"$ esetén

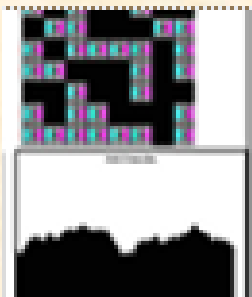
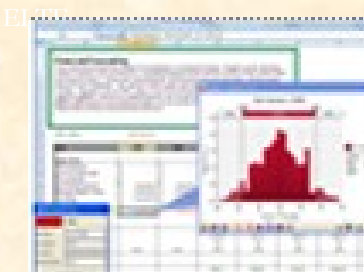
Keletkezés $(i, j, "A", "Y")$

$MT(i, j) = "Y"$ és $ST(i, j) = "B"$ esetén

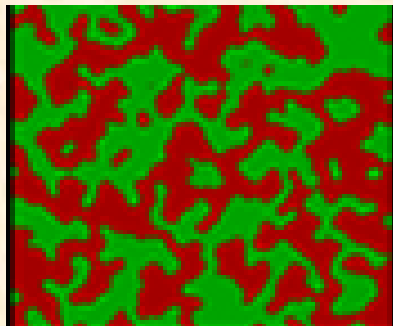
Keletkezés $(i, j, "B", "X")$

Elágazás vége

Eljárás vége.



Kémiai modellek



Kis foltok

Keletkezés (i, j, SE, MO) :

$MT(i, j) := MO$

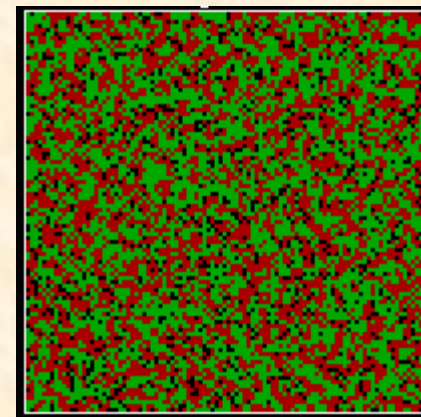
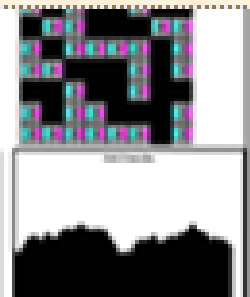
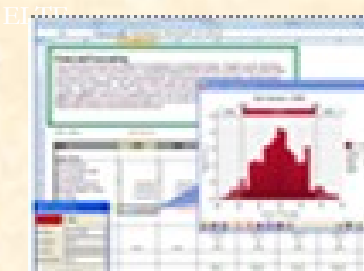
Ha van szomszéd üres (i, j)

akkor $(k, l) := \text{Véletlen_üres_szomszéd}(i, j)$

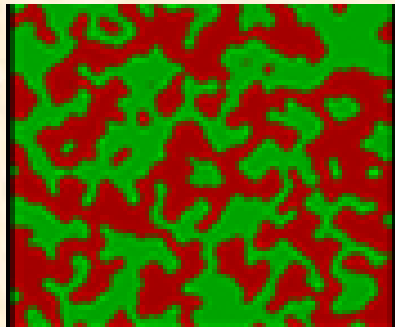
$ST(k, l) := SE$

Eljárás vége.

A kapott eredmény, bár dinamikusan változik, a következőféle lesz:



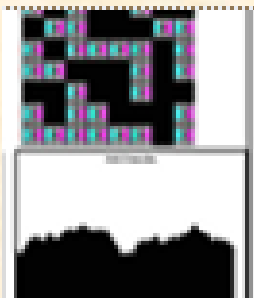
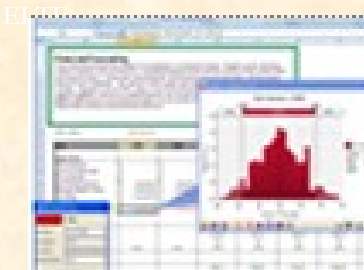
Mintázatképződés



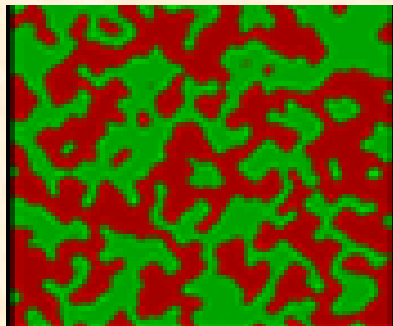
Nagy foltok

Általánosítás:

- a molekulákkal nem foglalkozunk;
- hatásukat a sejtek szomszédszáma alapján vesszük figyelembe;
- minden sejt olyanná alakul, amilyen szomszédjából több van;
- a sejtábrázolat mindig tele van A- és B-típusú sejtekkel.



Kémiai modellek



Nagy foltok

Szimulációs lépés:

$(i, j) := \text{Véletlen_hely}(N, M)$

$SA := \text{Szomszédyszámolás}(i, j, "A")$

$SB := \text{Szomszédyszámolás}(i, j, "B")$

Elágazás

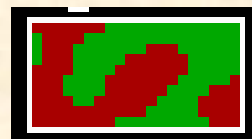
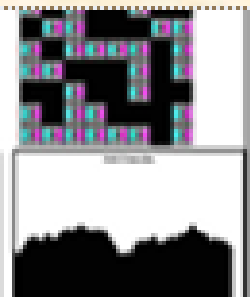
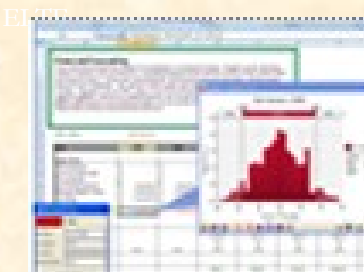
$ST(i, j) = "B"$ és $SA > SB$ esetén $ST(i, j) := "A"$

$ST(i, j) = "A"$ és $SA < SB$ esetén $ST(i, j) := "B"$

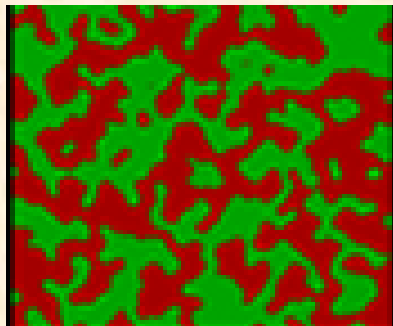
Elágazás vége

Eljárás vége.

Ha a szimulációs területünk kicsi, akkor az eredmény egy egyszínű tér lesz, vagy esetleg egy-két folt látható:

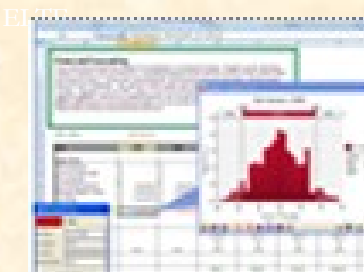
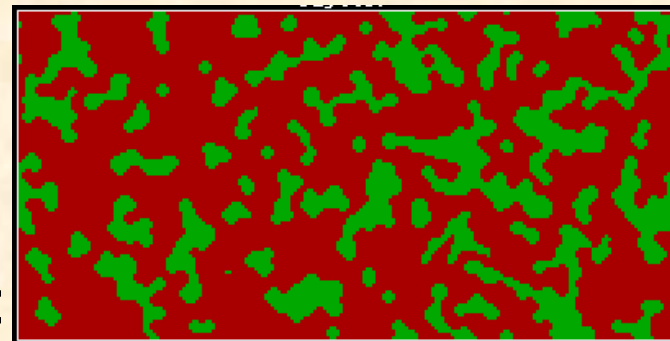


Kémiai modellek

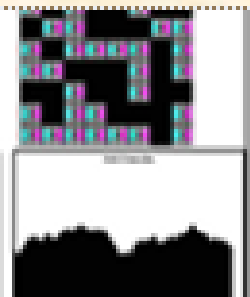


Nagy foltok

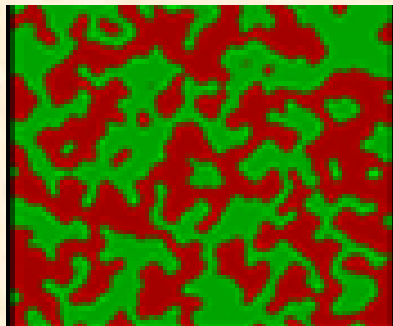
Ha a tér mérete nagy, akkor több nagyméretű folt fog keletkezni, véletlenszerű eloszlásban:



Ha a tér egy csíkhöz hasonlít (azaz pl. oszlop-száma lényegesen nagyobb, mint a sorai száma), akkor csíkos mintázat alakul ki:



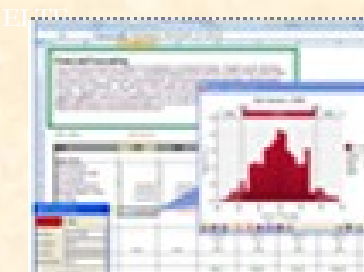
Kémiai modellek



Nagy foltok

Ha a szomszédszámot nagyobb távolságra számoljuk, a foltok határvonala simább lesz!

Ha a szomszédszámok között 1-nél nagyobb különbséget vá-runk el, akkor görbébb lehet a határ.



Szimulációs lépés:

$(i, j) := \text{Véletlen_hely}(N, M)$

$SA := \text{Szomszédszámolás}(i, j, "A", T)$

$SB := \text{Szomszédszámolás}(i, j, "B", T)$

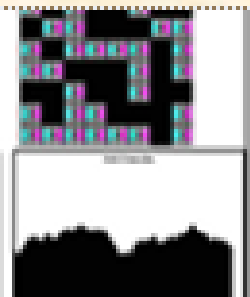
Elágazás

$ST(i, j) = "B"$ és $SA > SB - DB$ esetén $ST(i, j) := "A"$

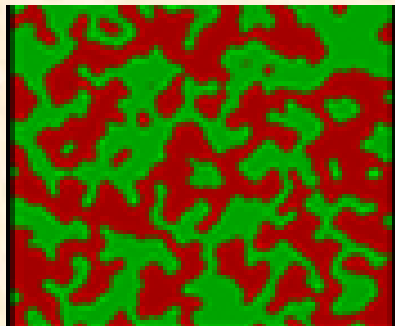
$ST(i, j) = "A"$ és $SA - DB < SB$ esetén $ST(i, j) := "B"$

Elágazás vége

Eljárás vége.



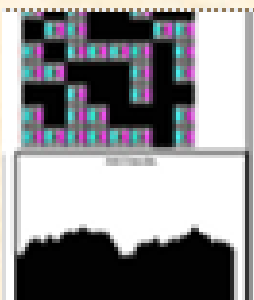
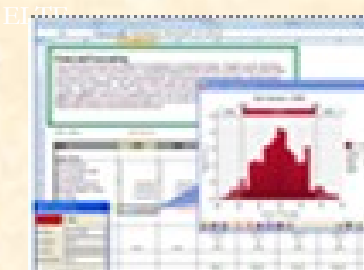
Mintázatképződés



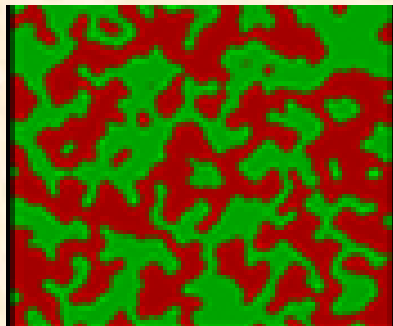
Nagy foltok pöttyökkel

Általánosítás:

- a molekulákkal nem foglalkozunk;
- hatásukat a sejtek szomszédszáma alapján vesszük figyelembe;
- minden sejt olyanná alakul, amilyen szomszédjából több van;
- a sejtábrázolat mindig tele van A- és B-típusú sejtekkel;
- nem engedjük meg olyan sejtek kialakulását, amelyeket csak velük azonos típusú sejt vesz körül.



Kémiai modellek



Nagy foltok pöttyökkel

Szimulációs lépés:

$(i, j) := \text{Véletlen_hely}(N, M)$

$SA := \text{Szomszédyszámolás}(i, j, "A")$

$SB := \text{Szomszédyszámolás}(i, j, "B")$

Elágazás

$ST(i, j) = "B"$ és $SA > SB$ esetén $ST(i, j) := "A"$

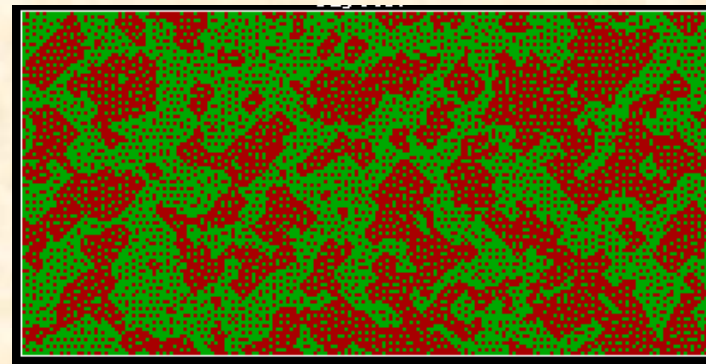
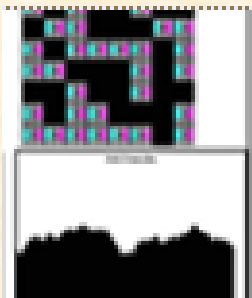
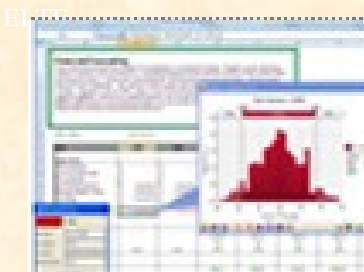
$ST(i, j) = "A"$ és $SA < SB$ esetén $ST(i, j) := "B"$

Elágazás vége

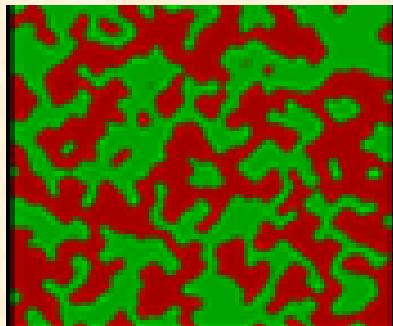
Ha $ST(i, j) = "A"$ és $SB = 0$ akkor $ST(i, j) := "B"$

Ha $ST(i, j) = "B"$ és $SA = 0$ akkor $ST(i, j) := "A"$

Eljárás vége.



Kémiai modellek



Nagy foltok pöttyökkel

Ha nagyobb pöttyöket akarunk megengedni, akkor az $A=0$, $B=0$ feltételeket kell kicserélnünk:

Szimulációs lépés:

$(i, j) := \text{Véletlen_hely}(N, M)$

$SA := \text{Szomszédyszámolás}(i, j, "A")$

$SB := \text{Szomszédyszámolás}(i, j, "B")$

Elágazás

$ST(i, j) = "B"$ és $SA > SB$ esetén $ST(i, j) := "A"$

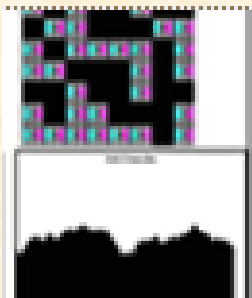
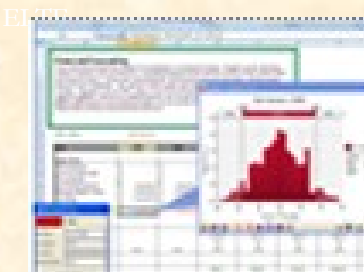
$ST(i, j) = "A"$ és $SA < SB$ esetén $ST(i, j) := "B"$


Elágazás vége

Ha $ST(i, j) = "A"$ és $SB < MH$ akkor $ST(i, j) := "B"$

Ha $ST(i, j) = "B"$ és $SA < MH$ akkor $ST(i, j) := "A"$

Eljárás vége.



A high-angle, wide shot of a modern building's atrium. The building's facade is a vibrant red, composed of a grid of square panels. Many of these panels are replaced by windows of various sizes, some with white frames and others with white grilles. The atrium floor is a light, neutral color, and the ceiling is a white, ribbed structure. A yellow rectangular box is centered in the image, containing the word "Vége" in a black, serif font.

Vége