

2 Einführung in die nichtlineare Dynamik

Da die nichtlineare Dynamik eine Fachrichtung ist, die noch nicht ihren festen Platz im Lehrkanon gefunden hat, werden in diesem Kapitel kurz die wichtigsten Ergebnisse zusammengefaßt, welche zum Verständnis der vorliegenden Arbeit benötigt werden. Einführende Literatur ist z.B. in [40, 80-83] zu finden.

2.1 Grundlagen

Wie in der Einleitung bereits erwähnt, sind Reaktions-Diffusions-Modelle (RD-Modelle) paradigmatisch, so daß hier anhand dieses Systemtyps die Haupteigenschaften der raumzeitlichen Modellierung zusammengefaßt werden. Es werden in dieser Arbeit ausschließlich räumlich eindimensionale Systeme betrachtet, so daß ich mich in dieser Einführung auf diese beschränke.

Mathematisch beschreibt folgender Satz partieller Differentialgleichungen für die Variablen u_i die zeitliche Dynamik eines Systems aus gegebenen Anfangsbedingungen:

$$\frac{\partial u_i(x, t)}{\partial t} = f(u_1, u_2, u_3, \dots, u_n, p_1, p_2, p_3, \dots, p_k), \quad i=1, \dots, n, \quad (2.1)$$

wobei $f(u_1, u_2, u_3, \dots, u_n, p_1, p_2, p_3, \dots, p_k)$ eine nichtlineare Funktion von u_1, \dots, u_n darstellt, die von den Parametern $p = (p_1, p_2, \dots, p_k)$ abhängig ist.

Bei RD-Systemen wird die räumliche Kopplung durch den Diffusionsoperator ausgedrückt, so daß man bei konstanten Diffusionskoeffizienten D_i , die raumzeitliche Dynamik des System beschreiben kann durch:

$$\frac{\partial u_i(x, t)}{\partial t} = f(u_1, u_2, u_3, \dots, u_n, p_1, p_2, p_3, \dots, p_k) + D_i \cdot \frac{\partial^2 u_i(x, t)}{\partial x^2}. \quad (2.2)$$

Dabei ist x die Richtung entlang des (eindimensionalen) Systems. Diese Gleichung bringt zum Ausdruck, daß die zeitliche Entwicklung einer Variablen (in RD-Systemen meistens die Konzentration einer reagierenden Spezies) am Ort x einerseits von der lokalen Reaktion $f(u_1, u_2, u_3, \dots, u_n, p_1, p_2, p_3, \dots, p_k)$ an diesem Ort bestimmt wird und andererseits durch diffusionsbedingten Konzentrationsfluß aus den benachbarten Orten. In Kapitel 5 wird

gezeigt, daß der Laplace-Operator einen kurzreichweitigen Kommunikationsprozeß beschreibt.

Um den Satz von Gleichungen (2. 2) lösen zu können müssen die Randbedingungen spezifiziert werden. Drei sehr verbreitete Randbedingungen sind die von Neuman-Randbedingungen (der Fluß durch den Rand wird auf Null gesetzt), die Dirichlet-Bedingung (die Variable wird am Rand auf einen Wert gesetzt) und periodischen Randbedingungen (jeder Rand wird auf den gleichen Wert gesetzt). In dieser Arbeit werden ausschließlich periodische Randbedingungen verwendet.

Je nachdem, welches System man beschreiben will, wird man eine adäquate Anzahl an Variablen wählen und die Nichtlinearität angepaßt wählen. Für die allermeisten Systeme ist die Gleichung analytisch nicht lösbar, man muß auf numerische Methoden zurückgreifen.

Nehmen wir nun an, wir hätten es mit einem raum-zeitlichen Prozeß zu tun, der mit zwei Variablen $u(x,t)$ und $v(x,t)$ charakterisiert werden kann, z. B. der Konzentrationen zweier Spezies. Dann kann man in Analogie zu (2. 2) schreiben

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = f(u, v, p) + D_u \cdot \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2}, \quad (2. 3)$$

$$\frac{\partial v(x,t)}{\partial t} = g(u, v, p^*) + D_v \cdot \frac{\partial^2 v(x,t)}{\partial x^2}, \quad (2. 4)$$

wobei u und v die Konzentrationen der beiden Spezies darstellen, $f(u, v, p)$ und $g(u, v, p^*)$ ihre Reaktionsterme, und D_u und D_v ihre Diffusionskonstanten benennen. Die beiden Gleichungen sind über die Funktionen f und g gekoppelt, wovon mindestens eine nichtlinear ist.

Das Gleichungssystem (2. 3) - (2. 4) wird als Aktivator-Inhibitor-System bezeichnet, falls u sich selbst produziert (autokatalytisch ist) und die Produktion von v "aktiviert", v hingegen die Produktion von u „inhibiert“: u wird dann Aktivator und v Inhibitor genannt. Pulse und Wellen im anregbaren und oszillatorischen Regime (oder auch Spiralen in zwei und drei Dimensionen), sowie stationäre, räumlich inhomogene Strukturen können, je nach Wahl von f und g und in Abhängigkeit der Parameter, mit einem solchen Gleichungssystem modelliert werden.

Es muß also einerseits die Dynamik des homogenen Systems analysiert werden und andererseits die Wechselwirkung zwischen der räumlichen Kopplung und der homogenen Dynamik untersucht werden. Dazu werden einige mathematische Konzepte benötigt, die im folgenden kurz vorgestellt werden. Ein sehr nützliches Hilfsmittel zur Bestimmung der möglichen dynamischen Regime ist es z. B., den oder die Fixpunkte des Systems zu ermitteln sowie seine oder ihre Stabilität zu bestimmen.

2.2 Homogene Systeme

Der oder die homogenen Fixpunkte des Systems sind die simultane Lösung der beiden Gleichungen:

$$0 = f(u, v, p), \quad (2.5)$$

$$0 = g(u, v, p^*). \quad (2.6)$$

Um herauszufinden, ob ein Fixpunkt (u_0, v_0) stabil oder instabil ist, kann die lineare Stabilitätsanalyse verwendet werden.

2.2.1 Lineare Stabilitätsanalyse des homogenen Systems

Bei der linearen Stabilitätsanalyse werden die Funktionen f und g um den Fixpunkt herum linearisiert, und man verfolgt die zeitliche Dynamik einer kleinen Auslenkung aus dem Fixpunkt (u_0, v_0) . Wächst die Störung heran, handelt es sich um einen instabilen Fixpunkt, schrumpft sie, handelt es sich um einen stabilen Fixpunkt.

$$\text{Mit der Störung } w = \begin{pmatrix} u - u_0 \\ v - v_0 \end{pmatrix}, \quad (2.7)$$

kann man für kleine w die Gleichungen (2.3)-(2.4) linearisieren, so daß gilt

$$\frac{\partial w}{\partial t} = J \cdot w. \quad (2.8)$$

Mit der Jacobi-Matrix J des Gleichungssystems genommen an der Stelle (u_0, v_0) :

$$J = \begin{pmatrix} f_u & f_v \\ g_u & g_v \end{pmatrix}_{u_0, v_0}, \quad (2.9)$$

wobei f_u die Ableitung von f nach der Variablen u ist (analog für die weiteren Größen).

Die Bedingungen dafür, daß die Modellgleichungen in einem bestimmten Parameterbereich ein Aktivator-Inhibitor Modell darstellen, können mit Hilfe der Ableitungen der lokalen Terme nach den Variablen ausgedrückt werden. Ist u eine autokatalytische Variable, dann muß ein Parameterbereich existieren, in dem $f_u > 0$ (u produziert sich selbst) ist. Damit v die Inhibitorvariable ist, muss in einem Parameterbereich gelten $f_v < 0$ (v inhibiert u). Weiterhin muß, wenn u die Aktivatorvariable ist, ein Parameterbereich existieren, in dem gilt $g_u > 0$ (u aktiviert v). Die Bedingung schließlich dafür, daß sich der Inhibitor selbst abbaut, ist $g_v < 0$ (v reduziert sich selbst). Damit ist klar, daß die Vorzeichen von f_u , f_v , g_u und g_v in den Parameterbereichen, in denen das Modell ein Aktivator-Inhibitor-System beschreibt, nicht beliebig sein können.

Das Gleichungssystem (2. 8) läßt Lösungen der Form $k \cdot e^{\lambda t}$ zu, wobei λ der Eigenwert der Jacobi-Matrix ist und k eine Konstante bezeichnet, die durch die Anfangsbedingungen bestimmt ist.

Um die Stabilität des Fixpunktes zu ermitteln, müssen die Vorzeichen der Eigenwerte bestimmt werden. Mindestens ein positiver Eigenwert deutet auf Instabilität, da eine Störung wachsen wird. Alle Eigenwerte negativ verbürgt hingegen Stabilität, da in diesem Fall eine Störung ausgedämpft wird. Die Eigenwerte ergeben sich als Lösung von:

$$\text{Det}(J - \lambda \cdot I) = \begin{vmatrix} f_u - \lambda & f_v \\ g_u & g_v - \lambda \end{vmatrix} = 0. \quad (2.10)$$

Das charakteristische Polynom für die Eigenwerte lautet dann

$$\lambda^2 - (f_u + g_v) \cdot \lambda + (f_u \cdot g_v - f_v \cdot g_u) = 0, \quad (2.11)$$

oder anders ausgedrückt:

$$\lambda^2 - \text{Tr}(J) \cdot \lambda + \text{Det}(J) = 0, \quad (2.12)$$

wobei $\text{Tr}(J)$ die Spur und $\text{Det}(J)$ die Determinante der Jacobi-Matrix bezeichnen. Die Eigenwerte sind demnach durch folgenden Ausdruck gegeben:

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{2} \cdot \left[\text{Tr}(J) \pm \sqrt{\text{Tr}(J)^2 - 4 \cdot \text{Det}(J)} \right] \quad (2.13)$$

Linear stabil ist der Fixpunkt dann, wenn der Realteil aller Eigenwerte negativ ist, also genau dann, wenn

$$\text{Tr}(J) < 0 \text{ und } \text{Det}(J) > 0 \text{ gilt.} \quad (2.14)$$

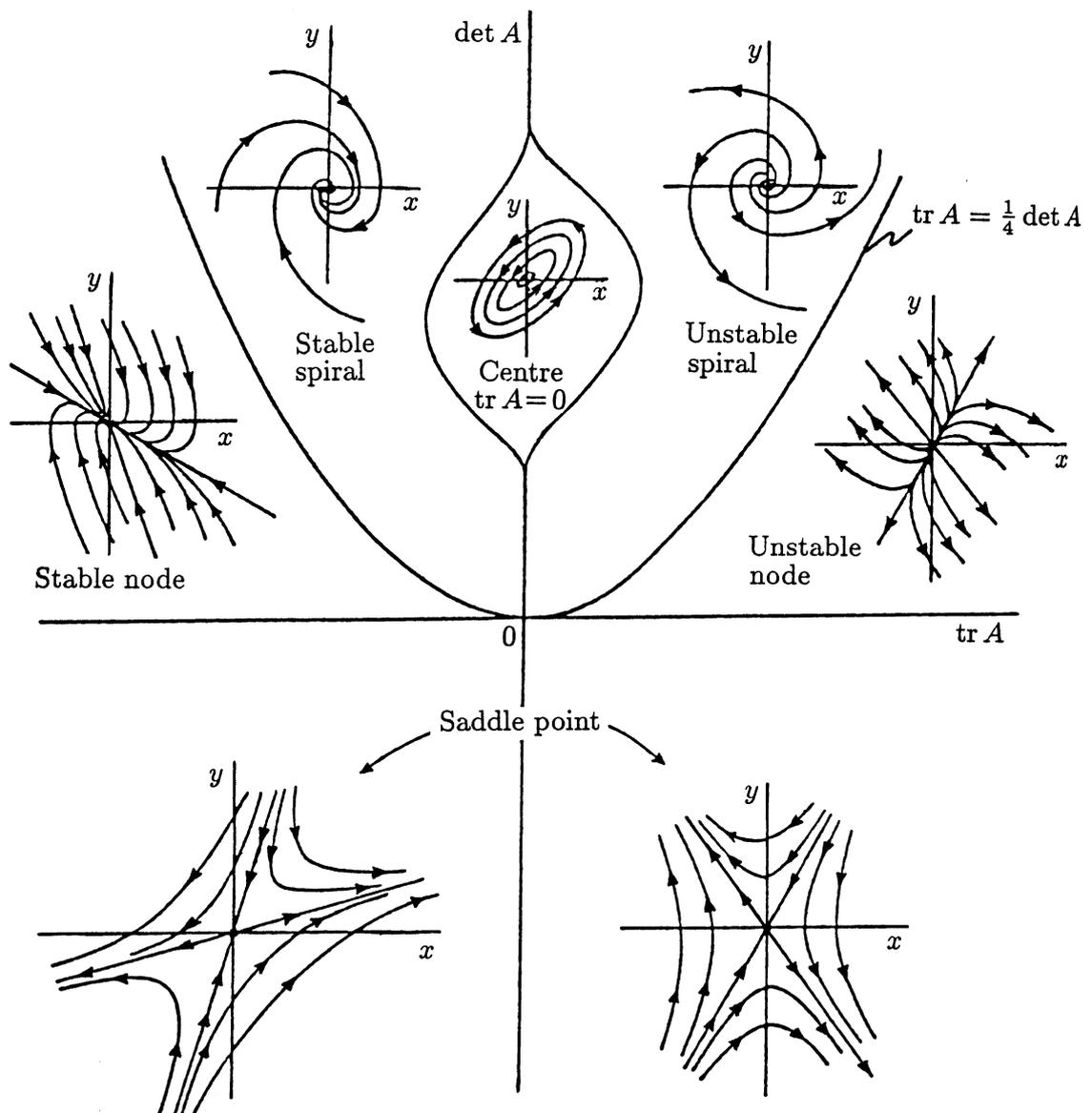


Abb. 2. 1 Schematisches Diagramm, welches zeigt, wie $\text{Tr}(J)$ und $\text{Det}(J)$ die möglichen Grenzmengen bestimmen (aus [40]). In der Abbildung werden die Variablen mit x und y bezeichnet, die Jacobi-Matrix mit A .

Es können zwei Fälle auftreten für $\text{Tr}(J) < 0$: Der Term unter der Wurzel kann positiv oder negativ sein. Ist er positiv, so hat der Eigenwert einen Imaginärteil Null, ist er hingegen negativ, so ist der Imaginärteil des Eigenwertes von Null verschieden. In Zwei-Variablen-Modellen kann es also zwei Typen von Fixpunkten geben: Knoten sind Fixpunkte mit Imaginärteil Null und Foci Fixpunkte mit einem Imaginärteil ungleich Null. Weiterhin sind entweder beide Richtungen stabil oder beide instabil, oder eine Richtung ist stabil und eine instabil (Sattelpunkt). In Abb. 2. 1 sind für die verschiedenen Vorzeichen von $\text{Tr}(J)$ und $\text{Det}(J)$ die möglichen Grenzmengen im Phasenraum und ihre Stabilität gezeigt.

2.2.2 Nullklinen

Um sich einen ersten Überblick über das mögliche dynamische Verhalten eines Systems zu verschaffen, ist es sehr nützlich, zunächst die Nullklinen zu analysieren. Dies sind die Kurven $du/dt=0$ und $dv/dt=0$, also:

$$0 = f(u, v, p), \quad (2.15)$$

$$0 = g(u, v, p^*). \quad (2.16)$$

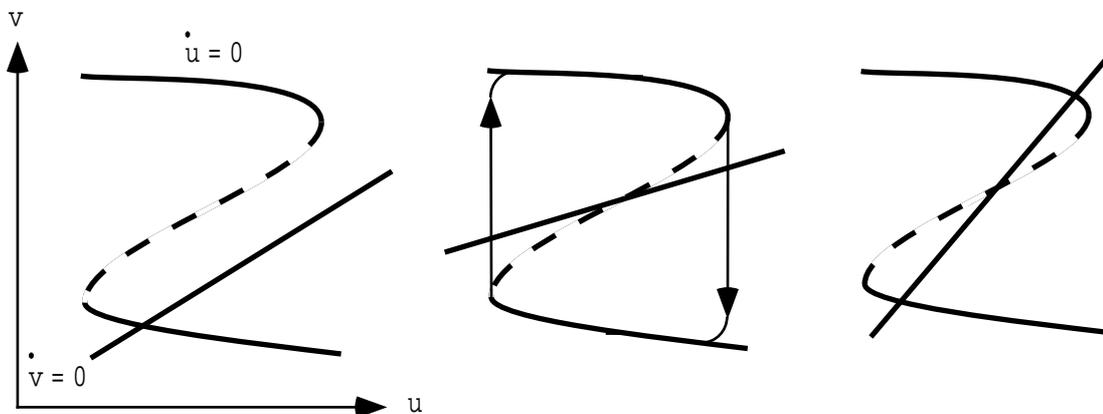


Abb. 2. 2 Schematische Nullklinenbilder für eine kubische Nichtlinearität des Aktivators. Der autokatalytische Ast des Aktivators ist gestrichelt eingezeichnet. (links) Ein Schnittpunkt auf einem nicht-autokatalytischen Ast; (mitte) ein Schnittpunkt auf dem autokatalytischen Ast und (rechts) drei Schnittpunkte.

Die Schnittpunkte der Nullklinen sind die Fixpunkte des Systems. Für typische Systeme gibt es einen, zwei oder drei Schnittpunkte. (Natürlich gibt es auch Systeme mit mehr Schnittpunkten, sie werden hier aber nicht mitbehandelt). In Abb. 2. 2 sind drei typische Nullklinenlagen gezeigt.

Schneiden sich die Nullklinen in einem einzigen Schnittpunkt auf einem der beiden nicht autokatalytischen Äste des Aktivators (siehe Abb. 2. 2 (links)), so ist der Fixpunkt stabil. Je nachdem, wie groß der Zeitskalenunterschied zwischen den beiden Variablen ist, kann das System in so einem Fall anregbar sein: Ist die Aktivatorvariable schneller als die Inhibitorvariable, so wird das System bei einer Auslenkung aus dem stabilen Fixpunkt, die groß genug ist, das System über den autokatalytischen Ast zu bringen, einen Ausflug durch den Phasenraum machen, bevor es zum stabilen Fixpunkt zurückkehrt. Schneiden sich die Nullklinen auf dem autokatalytischen Ast des Aktivators (siehe Abb. 2. 2 (mitte)), so kann das System dann oszillatorisch werden, wenn der Zeitskalenunterschied zwischen Aktivator und Inhibitor groß genug ist. In Abb. 2. 2 (rechts) ist ein Fall gezeigt, wo es drei Schnittpunkte der Nullklinen gibt: Die beiden äußeren Schnittpunkte sind notwendig stabile Fixpunkte, der mittlere ist ein Sattel-Fixpunkt.

Es werden insgesamt drei wichtige dynamische Regime des homogenen Systems unterschieden: Ein *bistabiles Regime*, welches zwei stabile Fixpunkte hat, die durch einen Sattelpunkt getrennt sind, ist das einfachste Regime. Es kann mit nur einer Variablen (also nur einer Gleichung) beschrieben werden. Das *oszillatorische Regime* besitzt einen instabilen Fokus und einen stabilen Grenzzyklus. Schließlich das *anregbare Regime* mit einem stabilen Fixpunkt, welches dadurch charakterisiert wird, daß eine kritische Störung um den Fixpunkt nicht sofort ausgedämpft wird, sondern zu einem Ausflug im Phasenraum führt. Die beiden letzten dynamischen Regime können nicht mit einer Variablen beschrieben werden, es bedarf mindestens eines weiteren Freiheitsgrades.

2.2.3 Bifurkationen

Ändert der Realteil eines Eigenwertes bei Variation eines Systemparameters sein Vorzeichen, ändert der Fixpunkt seine Stabilität. Das System wird dann sein dynamisches Verhalten qualitativ verändern. Solch ein Prozeß wird lokale Bifurkation genannt. Die beiden wesentlichen lokalen Bifurkationen sind die Sattel-Knoten-Bifurkation und die Hopf-Bifurkation.

Bei der *Sattel-Knoten-Bifurkation* wird ein Eigenwert Null und somit auch die Determinante der Jacobi-Matrix. Ihren Namen hat die Bifurkation daher, daß am Bifurkationspunkt zwei Fixpunkte (ein Sattel und ein Knoten) vernichtet oder erzeugt werden. Allgemein ist einer der beiden stabilen Fixpunkte stabiler als der andere, d.h., die

zugehörigen Eigenwerte sind negativer. Haben beide Fixpunkte am Bifurkationspunkt die gleichen Eigenwerte, so tritt eine symmetrische Variante der Sattel-Knoten-Bifurkation auf: die sogenannte Pitchfork-Bifurkation. Bei der Pitchfork-Bifurkation ändert ein Fixpunkt seine Stabilität, gleichzeitig entstehen zwei neue symmetrische Fixpunkte, die die ursprüngliche Stabilität des zentralen Fixpunktes erben. Die Pitchfork-Bifurkation tritt in zwei Varianten auf: In der superkritischen Variante entstehen zwei stabile und ein instabiler Fixpunkt aus einem stabilen. In der subkritischen Variante vererbt ein instabiler Fixpunkt seine (In)Stabilität an die beiden neu entstehenden Fixpunkte und wird selbst stabilisiert.

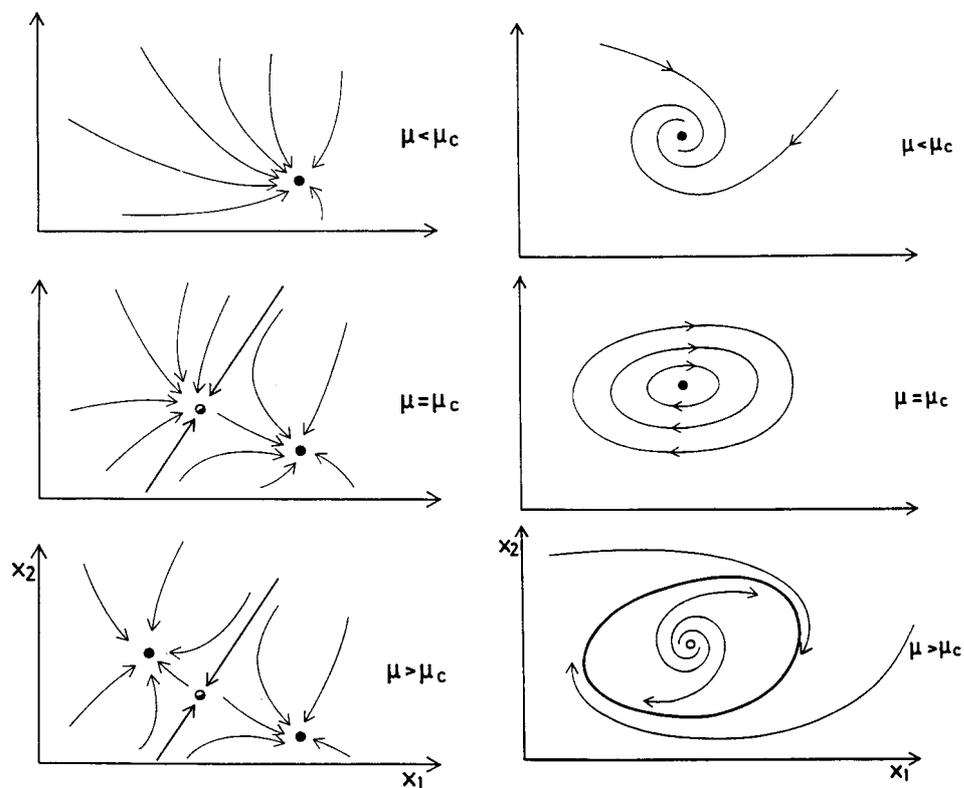


Abb. 2. 3 Schematische Phasenraumportraits vor ($\mu < \mu_c$), während ($\mu = \mu_c$) und nach ($\mu > \mu_c$) einer (links) Sattel-Knoten-Bifurkation (sn) sowie (rechts) Hopf-Bifurkation (h). μ stellt dabei den variierten Parameter dar.

Bei der Hopf-Bifurkation wechselt der Realteil zweier konjugiert komplexer Eigenwerte das Vorzeichen, hierbei entsteht ein Grenzzyklus. Diese Bifurkation wird durch das Verschwinden der Spur der Jacobi-Matrix angezeigt. Die Hopf-Bifurkation kann ebenfalls in zwei Varianten auftreten: Entstehen aus einem stabilen Fokus ein instabiler Fokus sowie ein stabiler Grenzzyklus, ist es eine superkritische Hopf-Bifurkation. Entstehen hingegen aus einem instabilen Fokus ein stabiler Fokus und ein instabiler Grenzzyklus, so ist es eine

subkritische Hopf-Bifurkation. In Abb. 2. 3 sind Phasenraumportraits der Sattel-Knoten- sowie der Hopf-Bifurkation gezeigt.

Bifurkationen können parameterabhängig verfolgt werden. Für den Fall, daß mindestens zwei Parameter das System bestimmen, können auch Bifurkationen höherer Kodimension auftreten. Dies sind Bifurkationen, die durch die simultane Erfüllung mehrerer Bedingungen gegeben sind. Man muß dann so viele Parameter verfolgen, wie die Kodimensionszahl angibt. Zwei Sattel-Knoten-Linien können sich in einer Kuspel (C) treffen. Der Schnittpunkt einer Hopf- mit einer Sattel-Knoten-Linie wird Takens-Bogdanov-Punkt (TB) genannt und zeichnet sich durch einen doppelten Eigenwert Null aus.

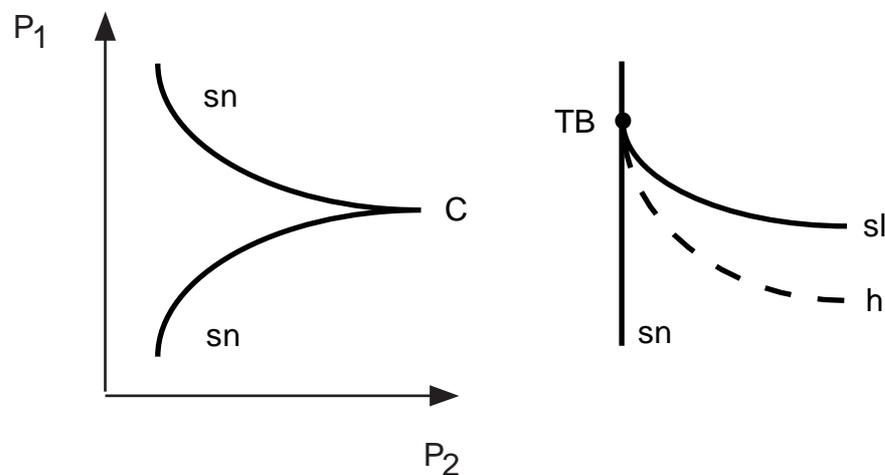


Abb. 2. 4 Schematische Zeichnung in der Parameterebene der Lage von Kodimension-Eins-Bifurkationen in der Nähe einer Kuspel (C) (links) und eines TB-Punktes (rechts).

Es gibt auch globale Bifurkationen, die dadurch charakterisiert sind, daß das Systemverhalten nicht allein aus der Stabilität der Fixpunkte geschlossen werden kann, wie z.B. die Sattel-Schleifen-Bifurkation (Saddle-Loop), bei der ein Grenzzyklus durch Kollision mit einem Sattel-Fixpunkt zerstört wird. Übrig bleibt ein instabiler Fixpunkt sowie der Sattel-Fixpunkt. Eine Analyse des Vektorfeldes in der Nähe eines TB-Punktes hat gezeigt, daß in einem TB-Punkt neben der Hopf-Bifurkation immer auch eine Sattel-Schleifen-Bifurkation endet. Bifurkation im TB-Punkt. In Abb. 2. 4 sind eine schematische Zeichnung der Kuspel, des TB-Punktes und der Saddle-Loop gezeigt.

2.3 Räumlich ausgedehnte Systeme

Bei räumlich ausgedehnten Systemen bestimmt das Wechselspiel von räumlicher Kopplung und homogener Dynamik das Systemverhalten, wie schon oben erwähnt. Die räumliche Kopplung durch Diffusion hat im Normalfall einen dämpfenden Einfluß auf das System, d.h. eventuelle Unterschiede in den Zustandsvariablen an den verschiedenen Orten werden ausgeglichen. In der Einleitung wurde aber bereits erwähnt, daß die Diffusion unter bestimmten Bedingungen eine Destabilisierung des homogenen Zustandes hervorrufen kann und sich räumlich inhomogene stationäre Muster ausbilden können (Turing-Strukturen).

In diesem Abschnitt werden zunächst Fronten in Ein-Variablen-Modellen vorgestellt. Danach werden einige Musterbildungsprozesse in Zwei-Variablen-Modellen diskutiert.

2.3.1 Fronten in Ein-Variablen-Modellen

Hat man es mit einem raum-zeitlichen Prozeß zu tun, der mit einer Variablen $u(x,t)$ ausreichend charakterisiert werden kann, z.B. der Konzentration u einer Spezies, kann man diese durch folgende Gleichung beschreiben:

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = \mu \cdot f(u) + D_u \cdot \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2}, \quad (2.17)$$

mit μ der Stärke des lokalen Teils der Gleichung. In chemischen Systemen stellt μ die Reaktionsrate dar. Allgemein ist es so, daß mit Hilfe eines solchen Modells lediglich einfache Muster beschrieben werden können; laufende Fronten in einem bistabilen System: Ist ein Teil des Systems in einem der beiden stabilen Zustände, ein anderer Teil im anderen, so bildet sich eine Front zwischen beiden Teilen aus. Der Reaktionsteil aus Gl. (2.17) ist bestrebt, die Systemteile in ihren jeweiligen stabilen Zuständen zu halten, mithin die Front steiler zu machen. Der Kopplungsterm hingegen ist bestrebt, das Konzentrationsgefälle auszugleichen, also die Front auszusmieren. Dabei gelangen Bereiche des Systems, die sich unterhalb der Separatrix befanden, auf die andere Seite der Separatrix. Diese Bereiche werden dann durch die Reaktion zum anderen Fixpunkt getrieben. So kann sich eine Front durch die Interaktion von Reaktion und Diffusion fortbewegen (siehe Abb. 2.5).

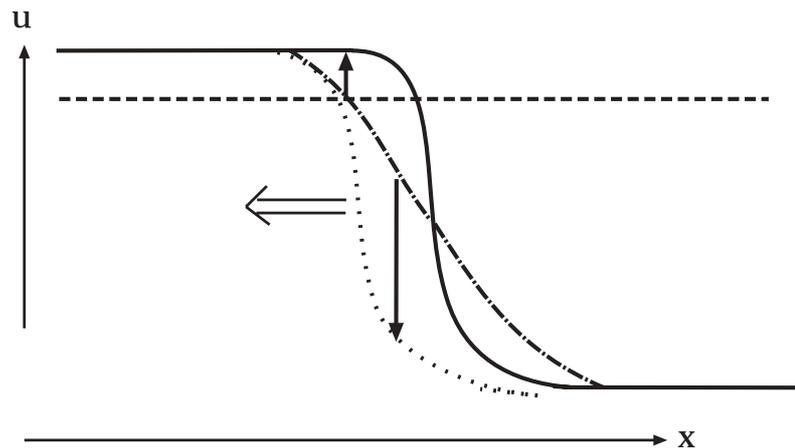


Abb. 2. 5 Schematische Darstellung einer laufenden Front

Man kann allgemein zeigen (siehe z.B. [80]), daß die Fronten sich mit konstanter Geschwindigkeit bewegen. Die Geschwindigkeit v ist dann eine Funktion von μ und D :

$$v \propto \sqrt{\mu \cdot D} . \quad (2. 18)$$

2.3.2 Zwei-Variablen-Modelle

Im weiteren werden wir nun Zwei-Variablen-Aktivator-Inhibitor Modelle betrachten. Diese werden durch ein Gleichungssystem des Typs (2. 3)-(2. 4).beschrieben.

Werden periodische Randbedingungen verwendet, so ist eine sinnvolle Normierung des Ortes x

$$\frac{2\pi}{L} \cdot x \rightarrow x . \quad (2. 19)$$

Die Zeit wird durch $\frac{2\pi}{L} \cdot D_u \cdot t \rightarrow t$ (2. 20)

transformiert. Werden u und v durch geeignete Transformationen ebenfalls dimensionslos gemacht und $d=Dv/Du$ verwendet, so kann man für das Gleichungssystem (2. 3)-(2. 4) in dimensionslosen Größen schreiben

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = f(u, v, p) + \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} , \quad (2. 21)$$

$$\frac{\partial v(x, t)}{\partial t} = g(u, v, p^*) + d \cdot \frac{\partial^2 v(x, t)}{\partial x^2}. \quad (2. 22)$$

2.3.3 Modengleichungen

Partielle Differentialgleichungen können entweder direkt (analytisch oder numerisch) gelöst, oder in eine andere Darstellung überführt, und dann gelöst werden. Eine nützliche Umformung ist durch die Fourier-Moden gegeben. Die Variablen werden in Fourier-Reihen entwickelt, die bei periodischen Randbedingungen, welche in dieser Arbeit ausschließlich verwendet werden, folgendermaßen aussehen:

$$u(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n^u(t) \cdot \cos[n \cdot x] + b_n^u(t) \cdot \sin[n \cdot x], \quad (2. 23)$$

$$v(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n^v(t) \cdot \cos[n \cdot x] + b_n^v(t) \cdot \sin[n \cdot x], \quad (2. 24)$$

mit der dimensionslosen Wellenzahl n . Dabei ergibt sich n aus der dimensionsbehafteten Wellenzahl q durch

$$n \rightarrow \frac{L}{2\pi} \cdot q. \quad (2. 25)$$

(2. 23)-(2. 24) werden in die partiellen Differentialgleichungen (2. 3) und (2. 4) eingesetzt. So ergeben sich (unendlich viele) gewöhnlich Differentialgleichungen, die die zeitliche Entwicklung der Fourier-Moden beschreiben.

$$\dot{a}_n^u = P_f(a_i^u, b_i^u, a_i^v, b_i^v) - n^2 \cdot a_n^u, \quad n=0, 1, 2, 3 \dots, i=0, 1, 2 \dots, \quad (2. 26)$$

$$\dot{a}_n^v = P_g(a_i^u, b_i^u, a_i^v, b_i^v) - d \cdot n^2 \cdot a_n^v, \quad n=0, 1, 2, 3 \dots, i=0, 1, 2 \dots, \quad (2. 27)$$

wobei P_f die Projektion des Reaktionsteils der Gleichung (2. 3) in den Modenraum darstellt und P_g die Projektion des Reaktionsteils der Gleichung (2. 4) in den Modenraum. Die Sinus-Moden ergeben sich völlig analog zu den Cosinus-Moden, weil der Diffusionsoperator keine Asymmetrie erzeugt.

Der erste Term, der von dem lokalen Teil der partiellen Differentialgleichungen herrührt, ist eine nichtlineare Funktion der verschiedenen Moden. Er koppelt die Moden aneinander, je nach Grad der Nichtlinearität. Der zweite Term hingegen, der von dem Diffusionsoperator der partiellen Differentialgleichung herrührt, ist eine lineare Funktion der jeweiligen Variablen. Da die diffusive Kopplung die Moden quadratisch dämpft, sind schon relativ wenig Moden ausreichend, um die Dynamik des Systems zu erfassen.

2.3.4 Lineare Stabilitätsanalyse des räumlich ausgedehnten Systems

Wir gehen aus von einem homogen stabilen Fixpunkt (u_0, v_0) des Gleichungssystems (2. 3)-(2. 4), der demnach die Bedingungen (2.14) erfüllt. Um zu ermitteln, ob dieser gegen räumliche Störungen instabil ist, wird die lineare Stabilitätsanalyse des räumlich ausgedehnten Systems ausgeführt. Die in Betracht zu ziehende Determinante lautet nun:

$$\text{Det}(J - \lambda \cdot I - D \cdot n^2) = \begin{vmatrix} f_u - \lambda - n^2 & f_v \\ g_u & g_v - \lambda - d \cdot n^2 \end{vmatrix} = 0, \quad (2.28)$$

$$\text{mit } D = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & d \end{pmatrix}. \quad (2.29)$$

Dann ist das charakteristische Polynom:

$$\lambda^2 + [-(f_u + g_v) + n^2 \cdot (1 + d)] \cdot \lambda + h(n) = 0, \quad (2.30)$$

$$\text{mit } h(n) = d \cdot n^4 - (g_v + d \cdot f_u) \cdot n^2 + (f_u \cdot g_v - f_v \cdot g_u). \quad (2.31)$$

Die Eigenwerte als Funktionen der Wellenzahlen werden bestimmt durch:

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{2} \cdot \left[-n^2 \cdot (1 + d) + (f_u + g_v) \pm \sqrt{(n^2 \cdot (1 + d) - (f_u + g_v))^2 - 4 \cdot h(n^2)} \right]. \quad (2.32)$$

Die Stabilität des homogenen Systems gegen räumliche Störungen läßt sich am Vorzeichen des Realteils des Eigenwertes ablesen. Sind alle $\lambda(n \neq 0) < 0$, so ist der homogene Fixpunkt gegen räumliche Störungen stabil, existiert hingegen ein $\lambda(n \neq 0) > 0$, so ist er instabil. Die Stabilität des homogenen Systems gegen räumliche Störungen läßt sich an der Kurve $\lambda(n)$ ablesen, welche Dispersionsrelation genannt wird.

Die Wellenlänge ist gegeben durch:

$$\omega = \frac{L}{n}. \quad (2.33)$$

2.3.5 Räumliche Bifurkationen

2.3.5.1 Turing-Instabilität

Im Normalfall hat die Diffusion einen synchronisierenden Einfluß, Unterschiede der Zustandsvariablen an den verschiedenen Orten werden ausgeglichen. Turing rechnete aber schon 1952 aus, daß in einem Aktivator-Inhibitor-Modell mit Diffusionskopplung stationäre räumlich inhomogene Strukturen entstehen können, wenn die Diffusionskonstanten von Aktivator und Inhibitor sich unterscheiden und einige weitere Bedingungen erfüllt sind [26]. Erst Jahrzehnte später erfolgte die erste experimentelle Bestätigung durch De Kepper und Mitarbeiter [29, 30]. Da Diffusion ja eigentlich ein stabilisierender Prozeß ist, ist dies zunächst verwunderlich. Anschaulich läßt es sich so verstehen: Breitet sich der Aktivator aus, so produziert er gleichzeitig seinen Inhibitor. Wenn die Diffusionskonstante des Inhibitors größer ist als die des Aktivators, so bildet sich um einen Aktivatorkeim herum eine Inhibitor-Wolke. Da der Inhibitor für einen Abbau des Aktivators sorgt, verhindert die Inhibitorwolke die Ausbreitung des Aktivators. Es entstehen diffusionsinduzierte stationäre Strukturen.

Das System ist Turing-instabil, wenn der homogene Fixpunkt stabil ist gegen homogene Störungen, aber instabil gegen kleine räumliche Störungen. Aus den Überlegungen von Abschnitt 2.3.1 können die Bedingungen für das Auftreten einer solchen Instabilität hergeleitet werden.

Da der homogene Fixpunkt stabil sein soll gegen homogene Störungen, ist $\text{Tr}(J) < 0$ (siehe (2.14)), so daß immer gilt

$$n^2 \cdot (1 + d) - (f_u + g_v) > 0. \quad (2.34)$$

Damit mindestens ein positiver Eigenwert für ein $n > 0$ existiert, muß also $h(n)$ negativ sein für ein $n > 0$. Da aber $\text{Det}(J) > 0$ vorausgesetzt wurde ((2.14)), ist eine notwendige Bedingung dafür, daß $h(n)$ negativ ist, gegeben durch

$$d \cdot f_u + g_v > 0. \quad (2.35)$$

Wegen $\text{Tr}(J) < 0$, bedeutet dies, daß f_u und g_v unterschiedliche Vorzeichen haben müssen. Ist nun $f_u > 0$ und $g_v < 0$, d.h. u ist autkatalytisch und v baut sich selber ab (siehe Abschnitt 2.2.1), sowie $|g_v| > |f_u|$ dann lautet eine Bedingung für das Vorliegen mindestens eines positiven Eigenwertes:

$$d > 1, \quad (2.36)$$

d.h. die Diffusionskonstante des Inhibitors muß größer sein als die des Aktivators. Diese Bedingung ist jedoch nicht hinreichend. Zusammen mit der Forderung, daß das Minimum von $h(n)$ für mindestens ein $n > 0$ negativ sein muß, sind die Bedingungen aber hinreichend. Aus dieser zweiten Bedingung kann durch Differentiation nach $m = n^2$ die kritische Wellenzahl n_c berechnet werden:

$$\frac{dh(m)}{dm} = 2d \cdot m - (g_v + d \cdot f_u) = 0 \Leftrightarrow n_c^2 = m = \frac{(g_v + d \cdot f_u)}{2d}, \quad (2.37)$$

mit $m = n^2$.

In (2.31) eingesetzt ergibt sich für $h(n_c)$

$$h(n_c) = -\frac{(g_v + d \cdot f_u)^2}{4d} + \text{Det}(J). \quad (2.38)$$

D.h. damit $h(n_c) < 0$ muß (wegen $\text{Det}(J) > 0$) gelten

$$\frac{(g_v + d \cdot f_u)^2}{4d} > \text{Det}(J). \quad (2.39)$$

An der Bifurkation muß für ein kritisches Verhältnis d_c der Diffusionskonstanten die Gleichheit von (2.39) gelten. In (2.37) eingesetzt, folgt für die kritische Wellenzahl

$$n_c = \frac{\sqrt{|\text{Det}(J)|}}{d_c}. \quad (2.40)$$

Die Wellenzahl ist also nicht nur eine Funktion der räumlichen Kopplung, sondern auch der Parameter des homogenen Systems. Sie ist aber unabhängig von der Ausdehnung des Systems selbst. Die kritische Wellenzahl ist die instabilste des Systems. Dies ist die Mode, die am schnellsten wächst. In dieser linearen Näherung würde eine instabile Wellenzahl immer weiter anwachsen; im vollständigen Gleichungssystem verhindert aber die Nichtlinearität, daß die Mode divergiert.

Der Ausdruck (2. 40) gibt die Eigenschaft der Turing-Instabilität wieder, daß sich die dimensionsbehaftete Wellenzahl q_c der stationären Muster bei Vervielfachung der Länge des Systems entlang der Achse der Wellenzahlen nach rechts verschiebt, wie folgende Überlegung zeigt. Sei L die Länge des Systems, dann gilt dimensionsbehaftet (siehe (2. 41)):

$$q_c = \sqrt{\frac{|\text{Det}(J)|}{d_c}} \cdot \left(\frac{L}{2\pi} \right), \quad (2. 41)$$

wenn $\text{Det}(J)'$ die dimensionsbehaftete Jacobi-Matrix bezeichnet. Verdoppelt man also die Länge des Systems, so wird die kritische Wellenzahl ebenfalls verdoppelt.

Zusammenfassend kann man die Bedingungen für das Auftreten von Turing Mustern, für den Fall, daß $f_u > 0$ und $g_v < 0$ ist, in vier Gleichungen formulieren:

$$\text{Tr}(J) < 0, \quad (2. 42)$$

$$\text{Det}(J) > 0, \quad (2. 43)$$

$$g_v + d \cdot f_u > 0, \quad (2. 44)$$

$$\frac{1}{4d} \cdot (g_v + d \cdot f_u)^2 > \text{Det}(J), \quad (2. 45)$$

Wie das Verhältnis der Diffusionskonstanten d und insbesondere die Aktivator- oder die Inhibitordiffusion die Dispersionsrelation verändern, wird in Abb. 2. 6 gezeigt.

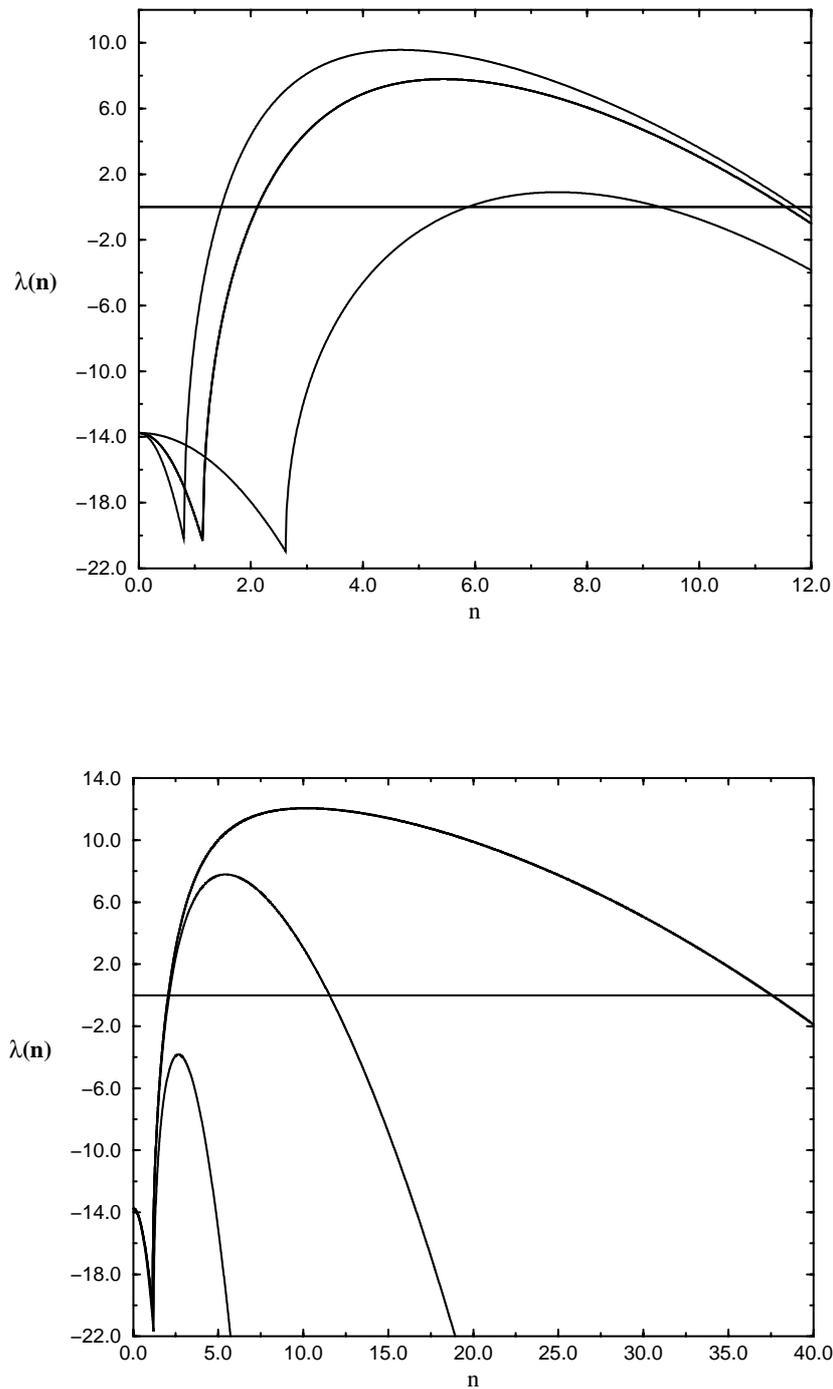


Abb. 2. 6 Dispersionsrelation für verschiedenen Werte von $d=D_v/D_u$. Oben wurde die Inhibitordiffusion D_v verändert. Dabei ist von unten nach oben: $D_v=2$, $D_v=10$ und $D_v=20$. Unten wurde die Aktivator diffusion D_u variiert. Dabei ist von unten nach oben: $D_u=0.001$, $D_u=0.0001$ und $D_u=0.00001$. Die Rechnung wurde mit dem homogenen System aus Abschnitt 7.2.1 durchgeführt mit $k(n)=n^2$, $\epsilon'=1000$, $V=-247$, $\sigma_c=0.015$, $\kappa=0.04$.

Aus Abb. 2. 6 (oben) wird deutlich, daß die Turing-Bifurkation ab einer bestimmten Inhibitordiffusion einsetzt (bei fester Aktivatordiffusion). Weiterhin wird die Steigung insbesondere des ersten ansteigenden Astes der Dispersionskurve mit steigender Inhibitordiffusion steiler. Dies hat zur Folge, daß die kritische Wellenzahl mit wachsendem D_v kleiner wird. Wie in Abb. 2. 6 (unten) zu sehen ist, ist dies auch der Fall bei wachsendem D_u : Die kritische Wellenzahl nimmt auch hier zu. Offensichtlich wirkt die Aktivatordiffusion auf den zweiten Teil der Turing-Parabel, auf den abfallenden Ast, der erste Teil wird überhaupt nicht beeinflußt.

2.3.5.2 Turing-Hopf-Bifurkation

Ein interessante Kodimension-2-Bifurkation ist die Turing-Hopf-Bifurkation, bei der die Parameter des Systems so gewählt sind, daß sowohl die Turing- als auch Hopf-Bedingungen simultan erfüllt sind [84-86]. In ihrer Nachbarschaft im Parameterraum existieren also sowohl die Hopf- als auch die Turing-Bifurkation, und die Wechselwirkung beider kann zu komplexem raum-zeitlichen Verhalten führen. Bei Variation eines Parameters kann entweder erst die Hopf-Bifurkation und dann die Turing-Bifurkation erfolgen oder umgekehrt (siehe Abb. 2. 7) [85].

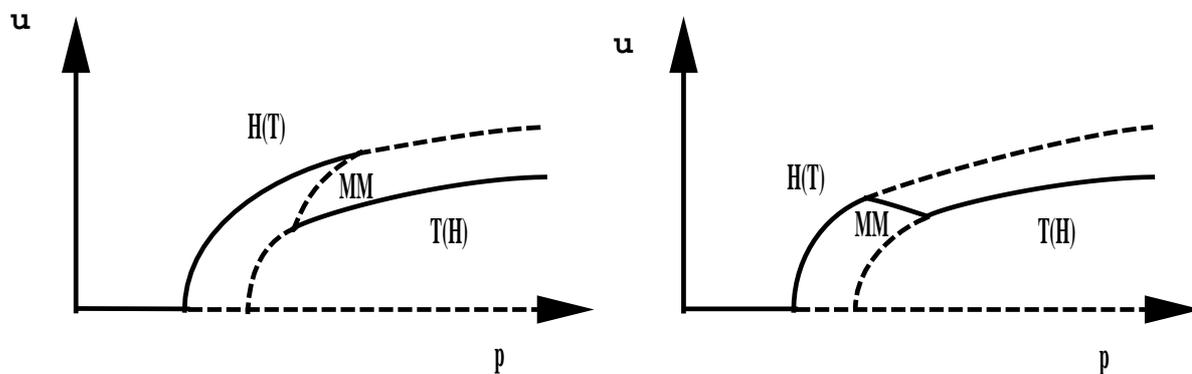


Abb. 2. 7 Zwei mögliche Szenarien für die Interaktion zwischen Hopf- und Turing-Bifurkationen (nach [85]).

In der linken Schemazeichnung in Abb. 2. 7 ist der Fall gezeigt, daß Bistabilität zwischen Oszillationen und stationären Mustern auftritt. Dabei besteht die Sattलगrenzmenge aus instabilen mixed-mode-Oszillationen. Dies sind raum-zeitliche Strukturen, die die räumliche Periodizität der kritischen Turing-Wellenlänge aufweisen und die Frequenz der homogenen Oszillation. Im rechten Bild ist der umgekehrte Fall zu sehen, die Mixed Mode Oszillationen sind stabil, und die “einfachen Attraktoren” des Systems (homogene

Oszillation sowie stationäre Struktur) sind instabil geworden, es tritt also keine Bistabilität zwischen oszillatorischem Verhalten und Turing-Strukturen auf.

A. De Wit hat diese mixed-mode-Oszillationen in Simulationen des Brusselators gefunden und im Ginzburg-Landau Formalismus für den Brusselator vorhergesagt [85]. Solche stabilen Mix-Mode Oszillationen wurden in Simulationen von Hildebrand und Ulmer [71], [87] in einem Modell der Musterbildung bei Wechselwirkung von Adsorbaten an Oberflächen gefunden, sowie von Schöll et al. in einem Gleichungssystem zur Beschreibung der Musterbildung in Halbleitern [88, 89].

Anhand von Simulationen des Brusselator-Modells in der Nähe dieses Turing-Hopf-Kodimension-2-Punktes wurden auch sogenannte lokalisierte Strukturen identifiziert, die auch in der CIMA-Reaktion experimentell gefunden wurden (chemical flip flop) [85, 90]: Es sind entweder oszillatorische Gebiete in Turing-Gebieten eingeschlossen oder umgekehrt. Weiterhin wurde eine langwellige Phaseninstabilität gefunden, die zu chaotischem Verhalten führt [91, 85, 84].

2.3.5.3 Wellenbifurkation

Sogenannte Wellenbifurkationen sind ebenfalls von Turing schon 1952 in seinem Artikel vorhergesagt worden. Bei einer Wellenbifurkation zweigt ein Ast mit laufenden Wellen mit einer Frequenz $\omega \neq 0$ und einer Wellenzahl $n \neq 0$ vom homogenen stabilen Ast ab. Es ist leicht zu sehen, daß laufende Wellen in Zwei-Variablen-RD-Modellen nicht auftreten können. Für laufende Strukturen muß nämlich sowohl der Realteil mindestens eines Eigenwertes für $n \neq 0$ positiv sein und der dazugehörige Imaginärteil von Null verschieden. Dies ist aber nicht möglich, da der erste Term von (2.32) immer negativ ist, also der Realteil immer negativ ist, wenn der Imaginärteil von Null verschieden ist. Erst in Drei-Variablen-Modellen kann es laufende Strukturen geben [26, 40, 6].

2.3.6 Ginzburg-Landau-Gleichung

Zur Beschreibung der raum-zeitlichen Dynamik von zwei-Variablen-RD-Modellen im oszillatorischen Regime wird eine sehr nützliche Normalform verwendet [25]. In der Nähe der Hopf-Bifurkation kann eine universell gültige Gleichung für die (komplexe) Oszillationsamplitude W , ausgehend von einem Netz an diffusionsgekoppelten Oszillatoren, hergeleitet werden: die Ginzburg-Landau-Gleichung.

$$\frac{\partial W}{\partial t} = W + (1 + ic_1) \cdot \Delta W - (1 - ic_2) \cdot |W|^2 \cdot W. \quad (2.46)$$

Die Parameter c_1 und c_2 können aus den reellen Parametern des Systems berechnet werden. Der zweite Term gibt die Kopplung über Diffusion der benachbarten Oszillatoren wieder. Der letzte Term beschreibt die nichtlineare Verschiebung der Oszillationsfrequenz einzelner Oszillatoren.

Eine Stabilitätsanalyse homogener Oszillationen zeigt, daß diese instabil gegen Phasenmodulationen (Benjamin-Feir-Instabilität [92]) werden, wenn die folgende Bedingung erfüllt ist:

$$1 + c_1 \cdot c_2 < 0. \quad (2.47)$$

Die (komplexe) Ginzburg-Landau-Gleichung weist eine universelle Route ins raumzeitliche Chaos auf, wie z.B. Kuramoto in [25] schon zeigen konnte und Luce im Detail beschrieben hat [93]. In Kap. 7 werden wir diese Route wiederfinden und näher beschreiben.

2.4 Numerik

Bei den in dieser Arbeit gezeigten Simulationen werden die Modengleichungen der jeweils untersuchten Modelle mit Hilfe der Pseudospektralmethode integriert (siehe [94]). Es werden verschiedene Programmpakete verwendet: Die parameterabhängigen Kontinuationen der Bifurkation wurden mit dem "public domain"-Programm AUTO [95] durchgeführt. Mit Hilfe des Programms SCIGMA wurden die Modengleichungen im Modenraum integriert und visualisiert. Um die Modengleichungen im Realraum zu integrieren, wird LSODE (Livermore solver for ordinary differential equations [96]) verwendet. Die Anzahl der "Collocation Points" variiert mit der Anzahl der betrachteten Variablen. Die Ein-Variablen-Modelle werden mit 300 „Collocation Points“ integriert, für die Zwei-Variablen-Modelle werden 1000 verwendet.