

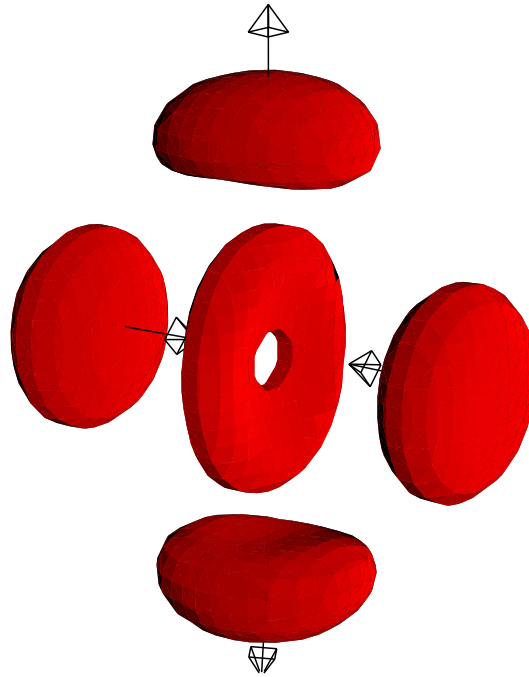
Dissipative Quasiteilchen in  
dreidimensionalen  
Reaktions-Diffusions-Systemen

Diplomarbeit im Fach Physik  
vorgelegt von

Andreas W. Liehr  
aus Hemer

an der Westfälischen Wilhelms Universität Münster  
im Institut für Angewandte Physik

Mai 1999



Titelbild: *Kurzzeitige Verschmelzung zweier Quasiteilchen. Dargestellt sind die Aktivatorisflächen einer kurzzeitigen Quasiteilchenverschmelzung zu den Zeitpunkten  $t=26$ ,  $t=66$  und  $t=88$ , wobei die Parameter dieser Simulation mit den Angaben in Abbildung 4.5 übereinstimmen. Da die Vektoren die Laufrichtung der Quasiteilchen anzeigen, wird deutlich, dass sich zwei Quasiteilchen frontal aufeinander zu bewegen. Bei dem Zusammenstoß bilden sie einen Verschmelzungszustand, der in einen Aktivatorortorus übergeht. Aus diesem bilden sich durch Symmetriebrechung zwei neue Quasiteilchen aus, die sich von dem Verschmelzungspunkt fortbewegen. Ein Film, der die Ausbildung des Aktivatorortorus zeigt, befindet sich auf der beigelegten CD-ROM (Vgl. Anhang D).*

Für meine Eltern,  
Elli und Werner Liehr,  
die diese Arbeit ermöglicht haben.

## Zusammenfassung

In der vorliegenden Diplomarbeit werden dissipative Quasiteilchen als Lösungen dreidimensionaler Reaktions-Diffusions-Systeme untersucht. Dazu werden die für diese Arbeit grundlegenden Lösungen der Systeme diskutiert und ein Programm vorgestellt, das die gekoppelten partiellen Differentialgleichungen der Reaktions-Diffusions-Systeme auf dreidimensionalen Grundgebieten löst. Anhand der numerischen Simulationen eines dreikomponentigen Systems wird die Bifurkation von stationären zu laufenden Quasiteilchen mit analytischen Ergebnissen verglichen. Desweiteren wird der Teilchencharakter dissipativer Quasiteilchen durch Stoßprozesse verdeutlicht, wobei elastische Stöße, Quasiteilchenvernichtungen und kurzzeitige Quasiteilchenverschmelzungen dokumentiert werden. Darüberhinaus wird in einem zweikomponentigen Reaktions-Diffusions-System die Entstehung dissipativer Quasiteilchen in der Folge von Turing-Destabilisierung untersucht.

# Inhaltsverzeichnis

<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>1 Das dreikomponentige Reaktions-Diffusions-System und seine fundamentalen Lösungen</b>	<b>3</b>
1.1 Die Einführung der Lösungen . . . . .	3
1.2 Das dreikomponentige Reaktions-Diffusions-System . . . . .	3
1.3 Die lokale Dynamik . . . . .	5
1.3.1 Die Fixpunkte der lokalen Dynamik . . . . .	5
1.3.2 Die Stabilität der Fixpunkte der lokalen Dynamik . . . . .	8
1.4 Das räumlich ausgedehnte Reaktions-Diffusions-System . . . . .	9
1.4.1 Die globale Zustandsraumkurve $\zeta$ . . . . .	9
1.4.2 Homogene Lösungen und ihre Stabilität . . . . .	11
1.4.3 Fronten-Lösungen . . . . .	12
1.4.4 Stationäre Quasiteilchen . . . . .	13
1.4.5 Die Darstellung dreidimensionaler Quasiteilchen . . . . .	14
1.4.6 Laufende Quasiteilchen . . . . .	16
<b>2 Die Beschreibung der numerischen Methoden zur Lösung des dreikomponentigen dreidimensionalen Reaktions-Diffusions-Systems</b>	<b>19</b>
2.1 Anforderungen an die Numerik . . . . .	19
2.2 Die diskreten Reaktions-Diffusions-Gleichungen . . . . .	20
2.2.1 Der Übergang von kontinuierlichen zu diskreten Reaktions-Diffusions-Komponenten . . . . .	20
2.2.2 Die Definition der Grundgebietsränder . . . . .	21
2.2.3 Herleitung der diskreten Differentialoperatoren . . . . .	23
2.2.4 Bestimmung der diskreten Reaktions-Diffusions-Gleichungen . . . . .	25
2.3 Das iterative Lösungsverfahren für einen Zeitschritt . . . . .	25
2.4 Das Programm 3k3d zur Lösung des dreikomponentigen dreidimensionalen Reaktions-Diffusions-Systems . . . . .	28

2.4.1	Die Funktionsweise des Programms 3k3d . . . . .	28
2.4.2	Die Performance des parallelen Programms 3k3d . . . . .	30
<b>3</b>	<b>Die Bifurkation vom stationären zum laufenden Quasiteilchen</b>	<b>39</b>
3.1	Der Bezug dieser Untersuchung . . . . .	39
3.2	Die analytischen Ergebnisse . . . . .	39
3.3	Die Durchführung des Vergleichs zwischen Analyse und Simulation . . . . .	40
3.4	Der Vergleich von Simulation und Analyse . . . . .	41
<b>4</b>	<b>Stoßende Quasiteilchen auf dreidimensionalen Grundgebieten</b>	<b>44</b>
4.1	Klassifizierung des Stoßverhaltens von Quasiteilchen . . . . .	44
4.2	Der elastische Stoß . . . . .	46
4.3	Die Quasiteilchenverschmelzung . . . . .	46
4.3.1	Das normierte Aktivatorintegral als Maß für die Quasiteilchenanzahl auf einem Grundgebiet . . . . .	46
4.3.2	Die Darstellung von Quasiteilchenverschmelzungen . . . . .	49
4.3.3	Die Quasiteilchenvernichtung . . . . .	49
4.3.4	Kurzzeitige Quasiteilchenverschmelzung unter Ausbildung eines transienten Aktivatororus . . . . .	52
<b>5</b>	<b>Die Erzeugung von Quasiteilchen durch Turing-Destabilisierung</b>	<b>56</b>
5.1	Die Erzeugung von Quasiteilchen . . . . .	56
5.2	Der Destabilisierungsmechanismus . . . . .	56
5.3	Die Erzeugung von Filamenten auf zweidimensionalen Grundgebieten . . . . .	60
5.3.1	Die Darstellung zweidimensionaler Simulationen . . . . .	60
5.3.2	Die Destabilisierung eines homogenen zweidimensionalen Systems . . . . .	60
5.3.3	Destabilisierung eines Filaments in der Nähe der Turing-Bifurkation . . . . .	64
5.3.4	Die Wechselwirkung zwischen globaler Rückkopplung und der Entstehung neuer Quasiteilchen . . . . .	67
5.4	Destabilisierung dreidimensionaler Systeme in der Nähe der Turing-Bifurkation . . . . .	69
5.4.1	Destabilisierung eines Quasiteilchens in der Nähe der Turing-Bifurkation . . . . .	69

5.4.2 Die Turing-Destabilisierung eines homogenen dreidimensionalen Systems . . . . .	72
<b>Diskussion und Ausblick</b>	<b>74</b>
<b>A Die Steuerung des Programms 3k3d über die BTC-Dateien</b>	<b>76</b>
<b>B Die Dateiformate der binären Ergebnisdateien des Programms 3k3d</b>	<b>80</b>
B.1 Die Fileheader der binären Ergebnisdateien . . . . .	80
B.2 Die VBI-Datei . . . . .	80
B.3 Die EXF-Datei . . . . .	81
<b>C Das Programm exf2a3k zur Berechnung von Aktivatorschwerpunkten aus EXF-Dateien</b>	<b>83</b>
C.1 Die Funktionsweise des Programms exf2a3k . . . . .	83
C.2 Das Format der a3k-Dateien . . . . .	84
<b>D Die Filme ausgewählter Simulationen</b>	<b>86</b>
<b>E Der Zugriff auf die Rohdaten</b>	<b>87</b>
<b>F Die beigelegte CD-ROM</b>	<b>89</b>
<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>93</b>

# Einleitung

Das wohl bekannteste Beispiel für Strukturbildung in der Natur sind die vielfältigen Fellzeichnungen von Säugetieren. Diese entstehen in den Pigmentzellen (Melanocyten) der untersten Hautschicht, die im Wesentlichen einen braun-schwarzen oder einen gelben, rötlich-orangen Farbstoff (Eumelanin oder Phaeomelanin) produzieren können. Welcher Farbstoff von den Pigmentzellen erzeugt wird, hängt nach James D. Murray von bisher unbekanntem chemischen Aktivator und Inhibitor ab, die die Struktur der Fellzeichnung zu einem bestimmten Zeitpunkt der Embryonalentwicklung festlegen [Murray 1988].

Ein mathematisches Modell, das auf der Wechselwirkung zwischen Aktivator und Inhibitor beruht und in der Simulation den Fellzeichnungen ähnliche Muster aufweist, wurde bereits 1952 von Turing vorgestellt [Turing 1952], wobei die von Turing diskutierten Destabilisierungen, die zu punkt- oder streifenförmigen Mustern führen, nicht nur in der belebten, sondern auch in der unbelebten Natur gefunden werden. Als Beispiel hierfür



Abbildung 1: *Die Fellzeichnungen der Hauskatze Joschi (felis catus) als Beispiel für Strukturbildung in der belebten Natur. James D. Murray führt die Strukturierung der Fellzeichnung auf bisher unbekanntem chemischen Aktivator und Inhibitor zurück, die zu einem bestimmten Zeitpunkt der Embryonalentwicklung mit den Pigmentzellen der untersten Hautschicht (Melanocyten) wechselwirken. Diese produzieren unter dem Einfluss der Aktivator und Inhibitor verschiedene Farbstoffe, von denen es im Wesentlichen zwei Sorten gibt: Den braun-schwarzen Farbstoff Eumelanin und den gelben oder orange-roten Farbstoff Phaeomelanin.*



mögen chemische Reaktions-Diffusions-Systeme [De Kepper et al. 1994] und Gleichspannungs-Gasentladungs-Systeme [Ammelt et al. 1998] genannt werden, wobei im Letzteren die Muster in Form von regelmäßig angeordneten Leucht-Filamenten entstehen.

In diesem dissipativem System wirkt der Stromfluss durch Ladungsträgervervielfachung aktivierend, während der erhöhte Stromfluss gleichzeitig zu einem Abfall der Spannung führt, was sich inhibierend auf den Stromfluss auswirkt. Durch die Abbildung dieser Eigenschaften auf ein zweilagiges elektrisches Netzwerk mit nichtlinearem Widerstand, konnte ein zweikomponentiges Reaktions-Diffusions-System hergeleitet werden [Purwins, Radehaus 1988]. Berücksichtigt man in diesem System einen maximalen Stromfluss in Form einer globalen Rückkopplung, so zeigen numerische Lösungen des zweikomponentigen Reaktions-Diffusions-Systems dieselben Strukturbildungen wie das Gleichspannungs-Gasentladungs-System [Or-Guil et al. 1995, Astrov, Logvin 1997]. Darüberhinaus werden in dem Gasentladungssystem auch stationäre oder bewegte Filamente beobachtet, die vereinzelt oder auch zu mehreren auftreten [Astrov 1999]. Da diese Phänomene nicht mit dem zweikomponentigen Reaktions-Diffusions-System erklärt werden können, wurde dieses Modell um einen zweiten, schnell reagierenden und weit diffundierenden Inhibitor erweitert [Schenk 1999].

Dieses gekoppelte Differentialgleichungssystem entspricht einem dreilagigen elektrischen Netzwerk [Or-Guil 1997, S. 135] und zeigt ebenfalls die Strukturbildungsmechanismen der Gleichspannungs-Gasentladung. Darüberhinaus weist das dreikomponentige Reaktions-Diffusions-System in der numerischen Simulation auf zweidimensionalen Grundgebieten die bei Gasentladungssystemen beobachteten solitären dissipativen Strukturen auf. Diese Filamente existieren in Abhängigkeit von den Systemparametern als stationäre oder laufende Strukturen [Or-Guil et al. 1998] und haben einen ausgeprägten Teilchencharakter, der sich in der numerischen Simulation zeigt: So stoßen diese dissipativen Quasiteilchen ähnlich den Teilchen der klassischen Mechanik in einem elastischen Stoß miteinander oder Vernichten sich gegenseitig [Schenk 1997].

Die Tatsache, dass diese Simulationen des dreikomponentigen Reaktions-Diffusions-Systems bisher nur auf zweidimensionalen Grundgebieten durchgeführt wurden, unsere tägliche Erfahrungswelt jedoch dreidimensional ist, führt zu dieser Diplomarbeit. Hier werden die grundlegenden Lösungen des dreikomponentigen Reaktions-Diffusions-Systems diskutiert und ein Programm vorgestellt, das dieses gekoppelte Differentialgleichungssystem auf dreidimensionalen Grundgebieten löst. Anhand der Simulationen dieses Programms werden verschiedene Eigenschaften dissipativer Quasiteilchen untersucht. Dies umfasst die Bifurkation vom stationären zum laufenden Quasiteilchen, die Wechselwirkung laufender Quasiteilchen bei Stoßprozessen und Strukturbildungsmechanismen durch Turing-Destabilisierung. Dabei werden sowohl bekannte, als auch vollkommen neuartige Phänomene dokumentiert.

# Kapitel 1

## Das dreikomponentige Reaktions-Diffusions-System und seine fundamentalen Lösungen

### 1.1 Die Einführung der Lösungen

In diesem Kapitel wird das dreikomponentige Reaktions-Diffusions-System vorgestellt, und seine Lösungen ausgehend von der lokalen Dynamik diskutiert. Die Übertragung der Lösungen der lokalen Dynamik auf räumlich ausgedehnte Reaktions-Diffusions-Systeme führt zu Fronten-Lösungen, stationären Quasiteilchen und laufenden Quasiteilchen, deren Symmetrieeigenschaften anhand einer globalen Zustandsraumkurve untersucht werden.

### 1.2 Das dreikomponentige Reaktions-Diffusions-System

Bei dem in dieser Diplomarbeit untersuchten Reaktions-Diffusions-System handelt es sich um drei gekoppelte partielle Differentialgleichungen parabolischen Typs:

$$\begin{aligned} \dot{u} &= D_u \Delta u + f(u) - v - \kappa_3 w + \kappa_1, \\ \tau \dot{v} &= D_v \Delta v + u - v, \\ \theta \dot{w} &= D_w \Delta w + u - w. \end{aligned} \tag{1.1}$$

Die Variablen  $u(\underline{x}, t)$ ,  $v(\underline{x}, t)$  und  $w(\underline{x}, t)$  mit  $\underline{x} \in \mathbb{R}^3$  bezeichnen räumlich und zeitlich abhängige skalare Felder und werden die Komponenten des

Reaktions-Diffusions-Systemen genannt, welche in diesem Kapitel auf unendlich ausgedehnten Grundgebieten untersucht werden.

In der gewählten Notation kennzeichnet ein Punkt über den Komponenten die zeitliche partielle Ableitung  $\dot{u} := \frac{\partial}{\partial t}u$  und  $\Delta$  den Laplace-Operator

$$\Delta := \sum_{i=1}^n \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \quad (1.2)$$

wobei  $n$  die Dimension des Raumes ist, in dem das System untersucht wird. Die Funktion  $f(u)$  stellt eine Nichtlinearität dar, die in diesem Fall kubische Form

$$f(u) = \lambda u - u^3 \quad (1.3)$$

hat. Hier können prinzipiell auch andere Nichtlinearitäten verwendet werden [Koga, Kuramoto 1989], jedoch gewährleistet die gewählte Nichtlinearität für

$$f'(u) = \lambda - 3u^2 > 0 \quad (1.4)$$

einen Autokatalyseeffekt bezüglich  $u$ , der durch die Ungleichung (1.4) auf das Intervall

$$u \in \left] -\sqrt{\frac{\lambda}{3}} ; \sqrt{\frac{\lambda}{3}} \right[ \quad (1.5)$$

beschränkt ist, so dass sich die Autokatalyse nicht ins Unendliche steigern kann.

Die mathematische Struktur des Reaktions-Diffusions-Systems wird insbesondere deutlich, wenn man das zu untersuchende Differentialgleichungssystem gemäß seiner mathematischen Struktur in funktionelle Gruppen gliedert

$$\begin{array}{rcl} \dot{u} & = & D_u \Delta u + \lambda u - u^3 - v - \kappa_3 w + \kappa_1, \\ \tau \dot{v} & = & D_v \Delta v + u - v, \\ \theta \dot{w} & = & D_w \Delta w + u - w, \end{array} \quad (1.6)$$

Terme der zeitlichen Entwicklung
Diffusionsterme
Reaktionsterme

und die Reaktionsterme betrachtet. Diese koppeln die skalaren Felder  $u$ ,  $v$  und  $w$  lokal miteinander. Sie definieren ihre Wechselwirkung derart, dass die Komponente  $u$  sowohl sich selber (Autokatalyse), als auch die Komponenten  $v$  und  $w$  erzeugt. Diese verringern wiederum die  $u$ -Komponente, so dass auch

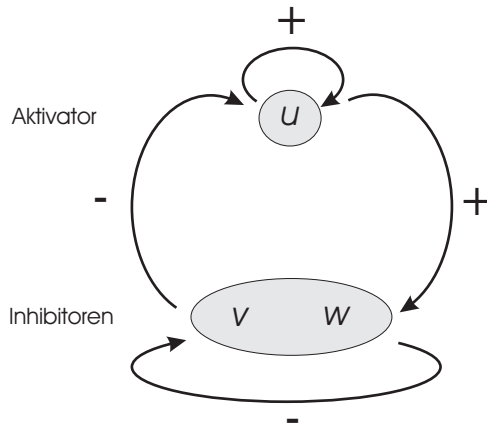


Abbildung 1.1: Die Wechselwirkung zwischen dem Aktivator  $u$  und den Inhibitoren  $v$  und  $w$  wird in den Reaktionstermen des dreikomponentigen Reaktions-Diffusions-Systems (1.6) definiert. Im Fall  $f'(u) > 0$  erzeugt der Aktivator  $u$  sowohl sich selber als auch die Inhibitoren  $v$  und  $w$ . Diese verringern wiederum den Aktivator  $u$  und auch sich selbst.

ihre eigene Produktion herabgesetzt wird (Autoinhibition) (Vgl. Abbildung 1.1).

Da  $u$  für  $f'(u_0) > 0$  auf sich selbst, sowie auf  $v$  und  $w$  aktivierend wirkt, wird die  $u$ -Komponente Aktivator genannt. Entsprechend leitet sich die Bezeichnung Inhibitor für  $v$  und  $w$  von deren inhibierender Wirkung ab.

Die zeitliche Entwicklung der Komponenten hängt entscheidend von den Zeitskalenparametern  $\tau$  und  $\theta$  ab. Je größer ein Zeitskalenparameter ist, desto langsamer reagiert der zugehörige Inhibitor auf eine Änderung des Aktivators, der Autoinhibition und der eigenen Diffusion. Da  $\tau$  im Folgenden größer als  $\theta$  gewählt wird, erhält  $v$  die Bezeichnung langsamer Inhibitor und  $w$  die Bezeichnung schneller Inhibitor.

Die Diffusionsterme bewirken eine räumliche Kopplung der Komponenten. Das allgemeine physikalische Prinzip der Diffusion kennzeichnet einen ungerichteten Transport, der durch Zufallsbewegungen im Mikrokosmos ausgelöst wird [Huntington 1991] und zu einem Konzentrationsausgleich führt. Dadurch sind die stationären, also zeitlich unabhängigen Strukturen dieses Reaktions-Diffusions-Systems Gleichgewichtszustände, die aus dem Wechselspiel zwischen Reaktion und Diffusion entstehen.

Hierbei haben die Quadratwurzeln der Diffusionskonstanten die Bedeutung von Diffusionslängenskalen  $L_D \sim \sqrt{D}$ . Je größer diese gewählt werden, desto weiter breiten sich die Komponenten  $u$ ,  $v$  und  $w$  aus.

## 1.3 Die lokale Dynamik

### 1.3.1 Die Fixpunkte der lokalen Dynamik

Um einen Zugang zu den Lösungen des dreikomponentigen Differentialgleichungssystems (1.6) zu finden, ist es zunächst sinnvoll die Gleichungen zu ver-

einfachen. So können die Gleichungen durch die Annahme homogener Lösungen, d.h

$$\begin{aligned} u(\underline{x}, t) = u(t) &\implies \Delta u = 0 \\ v(\underline{x}, t) = v(t) &\implies \Delta v = 0 \\ w(\underline{x}, t) = w(t) &\implies \Delta w = 0 \end{aligned} \quad (1.7)$$

räumlich entkoppelt und in die Gleichungen der lokalen Kinetik überführt werden:

$$\begin{aligned} \dot{u} &= \lambda u - u^3 - v - \kappa_3 w + \kappa_1 \\ \dot{v} &= (u - v)/\tau \\ \dot{w} &= (u - w)/\theta \end{aligned} \quad (1.8)$$

Da jedes Tripel  $(u', v', w')$  einen eindeutigen Zustand des Systems (1.8) definiert, entspricht der von  $u$ ,  $v$  und  $w$  aufgespannte Raum  $\mathbb{M}$  mit

$$u \times v \times w = \mathbb{M} \subseteq \mathbb{R}^3 \quad (1.9)$$

einem Phasenraum der lokalen Kinetik. In diesem ist jedem Punkt  $(u', v', w') \in \mathbb{M}$  durch das Gleichungssystem der lokalen Dynamik (1.8) ein Phasenfluss

$$\underline{\Phi}(u, v, w) := \begin{pmatrix} \dot{u}(u, v, w) \\ \dot{v}(u, v, w) \\ \dot{w}(u, v, w) \end{pmatrix} \quad (1.10)$$

zugeordnet, der den geometrischen Betrachtungen eines Vektorfeldes genügt [Vgl. Strogatz 1996, S. 16]. Anschaulich hat dies zur Folge, dass sich ein Zustand  $(u_1, v_1, w_1)$  im Phasenraum in Richtung des Phasenflusses  $\Phi(u_1, v_1, w_1)$  ändert. Die Menge der Punkte, die durch den Fluss  $\Phi$  aus  $(u_1, v_1, w_1)$  hervorgehen, bilden eine Trajektorie [Vgl. Jetschke 1989, S. 24], also eine Kurve im Phasenraum.

Allgemeine Aussagen über den Phasenfluss können an den Punkten im Phasenraum  $\mathbb{M}$  gemacht werden, an denen der Phasenfluss einer Raumrichtung gleich Null ist. Diese Punktmenge bilden im Phasenraum  $\mathbb{M} \subseteq \mathbb{R}^3$  Flächen mit der Bezeichnung Nullklinen und werden wie folgt definiert:

$$\begin{aligned} N_u &:= \{(u, v, w) \in \mathbb{M} \mid w = (\lambda u - u^3 - v + \kappa_1)/\kappa_3\}, \\ N_v &:= \{(u, v, w) \in \mathbb{M} \mid u = v\}, \\ N_w &:= \{(u, v, w) \in \mathbb{M} \mid w = u\}. \end{aligned} \quad (1.11)$$

Zwei Nullklinen schneiden sich jeweils entlang einer Linie, welche die dritte Nullkline an einem oder drei Punkten durchstößt (Vgl. Abb. 1.2). Diese

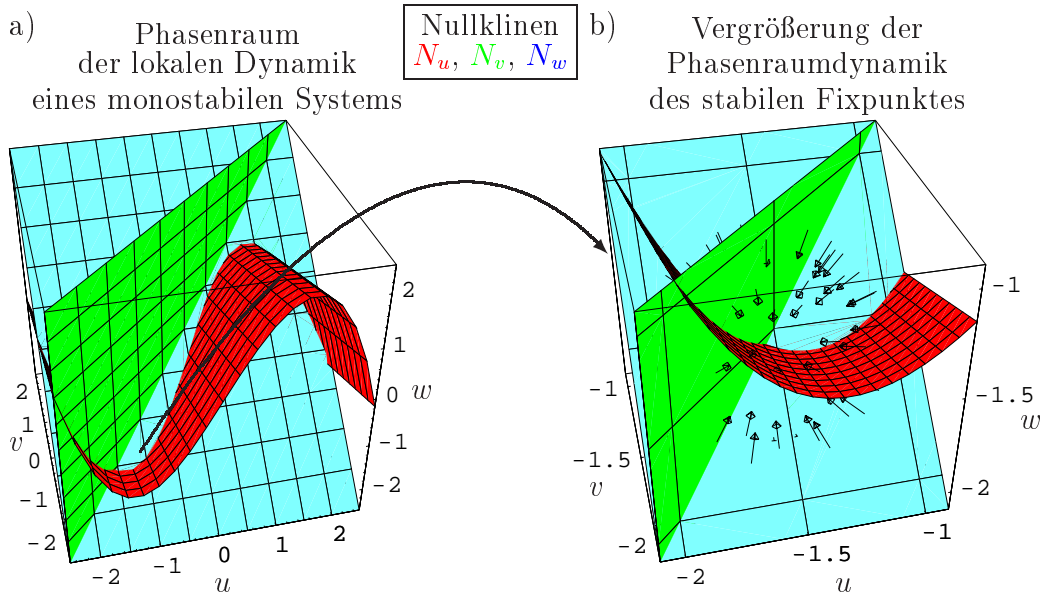


Abbildung 1.2: Dargestellt sind der Phasenraum a) und die Phasenraumdynamik b) eines monostabilen Systems für die Parameter  $\lambda = 5.55$ ,  $\kappa_1 = -1.2$  und  $\kappa_3 = 2.95$ . Die eingefärbten Flächen sind die Nullklinen der lokalen Dynamik (1.11). Die Nullklinen  $N_v$  und  $N_w$  schneiden sich entlang einer Linie, die die  $N_u$ -Nullkline an dem Fixpunkt  $\underline{\xi}_{0,1} = (-1.542, -1.542, -1.542)$  (Vgl. (1.14)) durchstößt. Die Stabilität wird durch die Phasenraumdynamik in der Nähe des Fixpunktes b) verdeutlicht. Die Anfangspunkte der Vektoren kennzeichnen jeweils eine Störung  $(\tilde{u}, \tilde{v}, \tilde{w})$ , die das System aus dem Fixpunkt  $\underline{\xi}_{0,1}$  auslenken. Die Richtung der Vektoren weist auf den Systemzustand, indem sich das System nach  $t = 100$  Systemzeiteinheiten befindet. Da alle Vektoren zum Fixpunkt  $\underline{\xi}_{0,1}$  zeigen, wird jede Störung  $(\tilde{u}, \tilde{v}, \tilde{w})$  des Fixpunktes  $\underline{\xi}_{0,1}$  abgebaut. Somit ist  $\underline{\xi}_{0,1}$  ein stabiler Fixpunkt. Da er der einzige ist, heißt das System monostabil.

Punkte, an denen alle drei Nullklinen zusammenlaufen, haben eine besondere Bedeutung, da der Phasenfluss an diesen Punkten gleich Null ist.

$$\underline{\Phi}(u_0, v_0, w_0) = \underline{0}. \quad (1.12)$$

Ein Zustand  $(u_0, v_0, w_0)$ , der genau dem Schnittpunkt aller drei Nullklinen entspricht, wird also für alle Zeiten in diesem Zustand bleiben und wird Fixpunkt genannt. Die analytische Lösung der Gleichung (1.12) führt zu der kubischen Gleichung

$$\kappa_1 = u_0 (1 + u_0^2 - \lambda + \kappa_3) \quad \text{mit} \quad u_0 = v_0 = w_0, \quad (1.13)$$

die durch folgende Vektoren  $\underline{\xi}_{0,1}, \underline{\xi}_{0,2}, \underline{\xi}_{0,3} \in \mathbb{M}$  erfüllt wird:

$$\begin{aligned}
\underline{\xi}_{0,i} &= (u_{0,i}, v_{0,i}, w_{0,i}) \quad \text{mit} \quad u_{0,i} = v_{0,i} = w_{0,i} \quad \text{und} \quad i = 1, 2, 3 \\
u_{0,1} &= \frac{(1-i\sqrt{3})(1-\lambda-\kappa_3)}{\mu \sqrt[3]{2}} - \frac{(1+i\sqrt{3})\mu}{6 \sqrt[3]{2}}, \\
u_{0,2} &= \frac{(1+i\sqrt{3})(1-\lambda-\kappa_3)}{\mu \sqrt[3]{2}} - \frac{(1-i\sqrt{3})\mu}{6 \sqrt[3]{2}}, \\
u_{0,3} &= -\frac{\sqrt[3]{2}(1-\lambda-\kappa_3)}{\mu} + \frac{\mu}{3 \sqrt[3]{2}}, \text{ sowie} \\
\mu &= \mu(\lambda, \kappa_1, \kappa_3) = 27\kappa_1 + 3 \sqrt[3]{27\kappa_1^2 + 4(1-\lambda-\kappa_3)^3}.
\end{aligned} \tag{1.14}$$

Ein Lösungsvektor  $\underline{\xi}_{0,i}$  ist Fixpunkt der lokalen Dynamik (1.8), wenn seine Komponenten  $u_{0,i} = v_{0,i} = w_{0,i}$  keine Imaginärteile haben.

$$\text{Im}(u_{0,i}) = 0 \quad \text{für} \quad i \in \{1, 2, 3\} \tag{1.15}$$

### 1.3.2 Die Stabilität der Fixpunkte der lokalen Dynamik

Ein Fixpunkt  $\underline{\xi}_0 = (u_0, v_0, w_0)$  wird als stabil bezeichnet, wenn eine kleine Störung  $\tilde{\underline{\xi}} = (\tilde{u}, \tilde{v}, \tilde{w})$  dieses Fixpunktes für  $t \rightarrow \infty$  abgebaut wird, also

$$\underline{\xi}_0 + \tilde{\underline{\xi}} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \underline{\xi}_0. \tag{1.16}$$

Um diesen Zusammenhang analytisch zu erfassen, wird die zeitliche Entwicklung der Störung  $\dot{\tilde{\underline{\xi}}}$  betrachtet

$$\dot{\tilde{\underline{\xi}}} = \underline{F}(\underline{\xi}_0 + \tilde{\underline{\xi}}) \tag{1.17}$$

und um den Fixpunkt  $\underline{\xi}_0$  linearisiert

$$\dot{\tilde{\underline{\xi}}} = \tilde{\underline{F}}'(\underline{\xi}_0) \tilde{\underline{\xi}}. \tag{1.18}$$

Dies stellt ein lineares Gleichungssystem der Form

$$\dot{\tilde{\underline{\xi}}} = \nu \tilde{\underline{\xi}} = \underbrace{\begin{pmatrix} \lambda - 3u_0^2 & -1 & -\kappa_3 \\ \frac{1}{\tau} & -\frac{1}{\tau} & 0 \\ \frac{1}{\theta} & 0 & -\frac{1}{\theta} \end{pmatrix}}_{=: \underline{A}} \tilde{\underline{\xi}} \quad \text{mit} \quad p = 1, 2, 3 \tag{1.19}$$

dar, anhand dessen Eigenwerte  $\nu_p$  die Stabilität des Fixpunktes  $\underline{\xi}_0$  beurteilt werden kann.

So weist der Fixpunkt  $\underline{\xi}_0$  genau dann asymptotische Stabilität auf, wenn es eine Zahl  $\epsilon$  gibt, für die alle Eigenwerte  $\nu_p$  folgende Ungleichung erfüllen

$$\Re \nu_p \leq \epsilon < 0 \quad \text{mit} \quad p = 1, 2, 3 \quad (1.20)$$

[Jetschke 1989, S. 187]. Mittels des HURWITZ-Kriteriums [Jetschke 1989, S. 44 f.] lassen sich folgende Stabilitätsbedingungen für den Fixpunkt  $\underline{\xi}_0$  herleiten:

$$\begin{aligned} \text{Spur } \underline{A} &< 0, \\ |\underline{A}| &< 0, \\ |\underline{A}| - (\text{Spur } \underline{A}) \frac{(3u_0^2 - \lambda)(\tau + \theta) + \theta + 1 + \kappa_3\tau}{\tau\theta} &> 0. \end{aligned} \quad (1.21)$$

Da dieses Ungleichungssystem nicht analytisch gelöst werden kann, soll die Fixpunktstabilität der lokalen Dynamik anhand einiger Beispiele betrachtet werden. Hier kann man zwei Fälle unterscheiden, da in Abhängigkeit der Parameter  $\lambda$ ,  $\kappa_1$  und  $\kappa_3$  im Allgemeinen ein oder drei Fixpunkte der lokalen Dynamik existieren.

Liegt ein System mit einem Fixpunkt vor, der die Ungleichungen (1.21) erfüllt, so wird eine kleine Störung dieses Fixpunktes wieder abgebaut (Vgl. Abb. 1.2b), was auf einen stabilen Fixpunkt hinweist. Es liegt ein monostabiles System vor.

Existieren drei Fixpunkte der lokalen Dynamik (Vgl. Abb. 1.3a), so werden kleine Störungen der äußeren Fixpunkte  $\underline{\xi}_{0,1}$  und  $\underline{\xi}_{0,3}$  (1.14) im Allgemeinen wieder abgebaut (Abb. 1.3c und Abb. 1.3b), während selbst kleine Störungen des mittleren Fixpunktes  $\underline{\xi}_{0,2}$  (1.14) weiter anwachsen (Abb. 1.3d).

Es liegt also ein System mit einem instabilen Fixpunkt und zwei stabilen Fixpunkten vor, so dass das System als bistabil bezeichnet wird.

## 1.4 Das räumlich ausgedehnte Reaktions-Diffusions-System

### 1.4.1 Die globale Zustandsraumkurve $\zeta$

Im Folgenden werden die Lösungen der lokalen Dynamik (1.8) als Ausgangspunkt verwendet, um die fundamentalen Lösungen des dreikomponentigen Reaktions-Diffusions-Systems (1.6) auf räumlich ausgedehnten Grundgebieten darzustellen. Dabei sollen vornehmlich zwei- und dreidimensionale Grundgebiete  $\mathbb{G}$  betrachtet werden, für die alle Aussagen gleichberechtigt gelten.

$$\mathbb{G} \in \{\mathbb{R}^2, \mathbb{R}^3\} \quad (1.22)$$



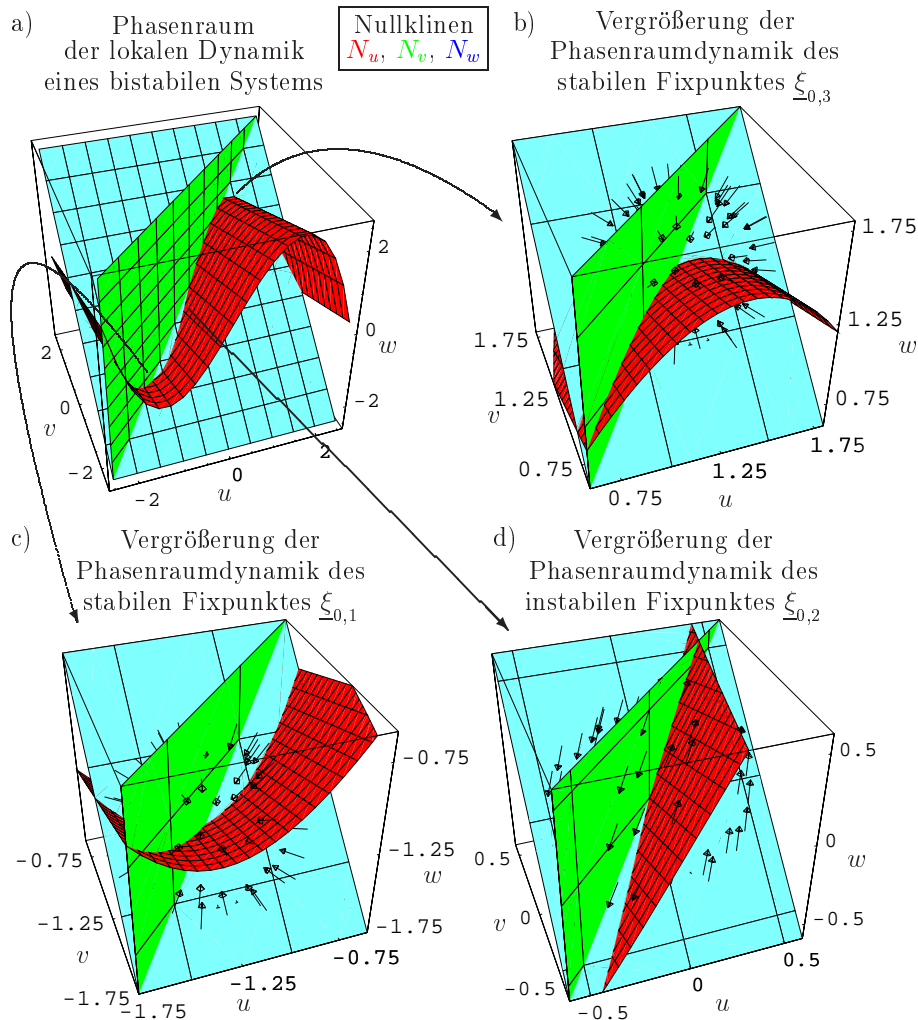


Abbildung 1.3: Dargestellt sind der Phasenraum a) und die Phasenraumdynamik b), c) und d) eines bistabilen Systems für die Parameter  $\lambda = 5.55$ ,  $\kappa_1 = 0$  und  $\kappa_3 = 2.95$ . Die eingefärbten Flächen sind die Nullklinen der lokalen Dynamik (1.11). Die Nullklinen  $N_v$  und  $N_w$  schneiden sich entlang einer Linie, die die  $N_u$ -Nullkline an den Fixpunkten  $\xi_{0,1} = (-1.265, -1.265, -1.265)$ ,  $\xi_{0,2} = (0, 0, 0)$  und  $\xi_{0,3} = (1.265, 1.265, 1.265)$  (Vgl. (1.14)) durchstößt. Die Stabilität der Fixpunkte wird durch die Phasenraumdynamik in der Nähe des Fixpunktes b), c) und d) verdeutlicht. Die Anfangspunkte der Vektoren kennzeichnen jeweils eine Störung  $(\tilde{u}, \tilde{v}, \tilde{w})$ , die das System aus den Fixpunkten auslenken. Die Richtung der Vektoren weist auf den Systemzustand, indem sich das System nach  $t = 100$  Systemzeiteinheiten befindet. Da alle Störungsvektoren der äußeren Fixpunkte  $\xi_{0,1}$  c) und  $\xi_{0,3}$  b) zu diesen zurückzeigen, wird jede Störung  $(\tilde{u}, \tilde{v}, \tilde{w})$  dieser Fixpunkte abgebaut. Somit sind die Fixpunkte  $\xi_{0,1}$  und  $\xi_{0,3}$  stabil. Die Störungsvektoren des inneren Fixpunktes  $\xi_{0,2}$  weisen in verschiedene Richtungen. Eine Störung des Fixpunktes  $\xi_{0,2}$  d) wird also weiter anwachsen, ein instabiler Fixpunkt liegt vor. Da in diesem System ein instabiler und zwei stabile Fixpunkte existieren, wird es bistabil genannt.

Um die Diskussion der Lösungen übersichtlich darstellen zu können, werden die Zeitskalenparameter  $\tau$  und  $\theta$  so gewählt, dass alle Lösungen für  $t \rightarrow \infty$  stationär sind.

Desweiteren wird das Konzept des Phasenraums, welches sich bei der Diskussion der Lösungen der lokalen Dynamik (1.8) bewährt hat, auf räumlich ausgedehnte Systeme übertragen. Da die Komponenten  $\bar{u}(\underline{x})$ ,  $\bar{v}(\underline{x})$  und  $\bar{w}(\underline{x})$  einer Lösung des Reaktions-Diffusions-Systems (1.6) räumlich abhängige skalare Felder sind, wird bei einer speziellen Lösung  $(\bar{u}(\underline{x}), \bar{v}(\underline{x}), \bar{w}(\underline{x}))$  des Reaktions-Diffusions-Systems für jeden Punkt  $\underline{x} \in \mathbb{G}$  ein Zustand  $(u, v, w) \in \mathbb{M}$  der lokalen Dynamik definiert. Um eine räumlich ausgedehnten Lösungen

$$(\bar{u}(\underline{x}), \bar{v}(\underline{x}), \bar{w}(\underline{x})) \in \mathbb{M} \times \mathbb{G} \quad (1.23)$$

systematisch betrachten zu können, wird für diese Lösung eine globale Zustandsraumkurve  $\zeta_{(\bar{u}, \bar{v}, \bar{w})}$  definiert

$$\zeta_{(\bar{u}, \bar{v}, \bar{w})} := \{(u, v, w) \in \mathbb{M} \mid \exists \underline{x} \in \mathbb{G} \text{ mit} \\ (u, v, w) = (\bar{u}(\underline{x}), \bar{v}(\underline{x}), \bar{w}(\underline{x}))\}, \quad (1.24)$$

die in dem von  $u$ ,  $v$  und  $w$  aufgespannten globalen Zustandsraum  $\mathbb{Z} = u \times v \times w$  abgebildet wird.

### 1.4.2 Homogene Lösungen und ihre Stabilität

Um die stationären Lösungen der lokalen Dynamik (1.8) auf Lösungen des räumlich ausgedehnten Systems zu übertragen, muss man sich in Erinnerung rufen, dass die Gleichungen der lokalen Dynamik (1.8) für homogene Zustände (1.7) hergeleitet wurden. Insofern entsprechen die stationären Lösungen der lokalen Dynamik (1.8) im einfachsten Fall den homogenen, stationären Lösungen des räumlich ausgedehnten Systems (1.6) mit

$$\underline{\xi}_{0,i}(\underline{x}, t) = (u_{0,i}, v_{0,i}, w_{0,i}) \quad \forall \underline{x} \in \mathbb{G} \quad \forall t \\ \text{mit } u_{0,i} = v_{0,i} = w_{0,i} \quad \text{aus (1.14)}. \quad (1.25)$$

Im globalen Zustandsraum  $\mathbb{Z}$  werden diese Lösungen - ebenso wie im Phasenraum  $\mathbb{M}$  der lokalen Dynamik - als Schnittmengen der Nullklinen (1.11) repräsentiert (Vgl. Abb. 1.2 und Abb. 1.3).

Diese homogenen Lösungen können instabil gegen Hopf- und Turing-Bifurkationen werden. Im Fall großer Diffusionskonstanten  $D_w$  leitet P. Schütz folgende Stabilitätsbedingungen her, wobei  $k$  der Wellenzahl der in Fourier-

komponenten zerlegten Störung entspricht:

$$f'(u_0) < \frac{1}{\tau} + \left( D_u + \frac{1}{\tau} D_v \right) k^2, \quad (1.26a)$$

$$f'(u_0) < \frac{1}{1 + D_v k^2} + D_u k^2, \quad (1.26b)$$

[Schütz 1995, S. 10]. Diese Stabilitätsbedingungen der homogenen Lösungen des dreikomponentigen Reaktions-Diffusions-Systems entsprechen den Stabilitätsbedingungen der homogenen Lösungen eines zweikomponentigen Reaktions-Diffusions-Systems, das man aus (1.6) durch  $\kappa_3 = 0$  erhält

$$\begin{aligned} \dot{u} &= D_u \Delta u + f(u) - v + \kappa_1, \\ \tau \dot{v} &= D_v \Delta v + u - v, \end{aligned} \quad (1.27)$$

[Schenk 1995, S. 9f]. Demnach führt die Verletzung der ersten Stabilitätsbedingung (1.26a) im Grenzfall großer Diffusionskonstanten  $D_w$  zu einer Hopf-Bifurkation, so dass das zunächst homogene System mit exponentiell anwachsender Amplitude oszilliert. Desweiteren ergibt die Verletzung der zweiten Stabilitätsbedingung (1.26b) räumlich periodische Strukturen, die Turing-Strukturen genannt werden.

### 1.4.3 Fronten-Lösungen

Weitere Lösungen des Reaktions-Diffusions-Systems (1.6) erhält man, indem man das System in einem Parameterbereich  $(\lambda', \kappa'_1, \kappa'_3)$  betrachtet, der zur Bistabilität führt (Vgl. S.9). In diesem Fall kann sich ein Teil des Grundgebietes  $\mathbb{G}$  im unteren Fixpunkt  $(u_{0,1}, v_{0,1}, w_{0,1})$ , ein anderer Teil im oberen Fixpunkt  $(u_{0,3}, v_{0,3}, w_{0,3})$  befinden. Wenn der Übergang von einem Fixpunkt  $(u_{0,1}, v_{0,1}, w_{0,1})$  zum anderen Fixpunkt  $(u_{0,3}, v_{0,3}, w_{0,3})$  parallel zur Raumrichtung  $x_k$  verläuft, dann liefern die Diffusionsterme der verbleibenden Raumrichtungen  $x_{l, k \neq l}$  keinen Beitrag

$$\frac{\partial^2}{\partial x_k^2}(u, v, w) \neq \underline{0} \wedge \frac{\partial^2}{\partial x_l^2}(u, v, w) = \underline{0}. \quad (1.28)$$

Der Übergang zwischen den Fixpunkten  $(u_{0,1}, v_{0,1}, w_{0,1})$  und  $(u_{0,3}, v_{0,3}, w_{0,3})$  ist eine Front (Vgl. Abb. 1.4a), deren Abbildung in den globalen Zustandsraum  $\mathbb{Z}$  eine eindimensionale hakenförmige Zustandsraumkurve  $\zeta_{Front}(u, v, w)$  ergibt, die in einem Fixpunkt  $(u_{0,1}, v_{0,1}, w_{0,1})$  beginnt und im anderen Fixpunkt  $(u_{0,3}, v_{0,3}, w_{0,3})$  endet (Vgl. Abb. 1.4b).

Die Dimension der globalen Zustandsraumkurve  $\zeta_{Front}$  resultiert aus der Symmetrie der Fronten-Lösung auf dem Grundgebiet  $\mathbb{G}$ , da diese nach (1.28)

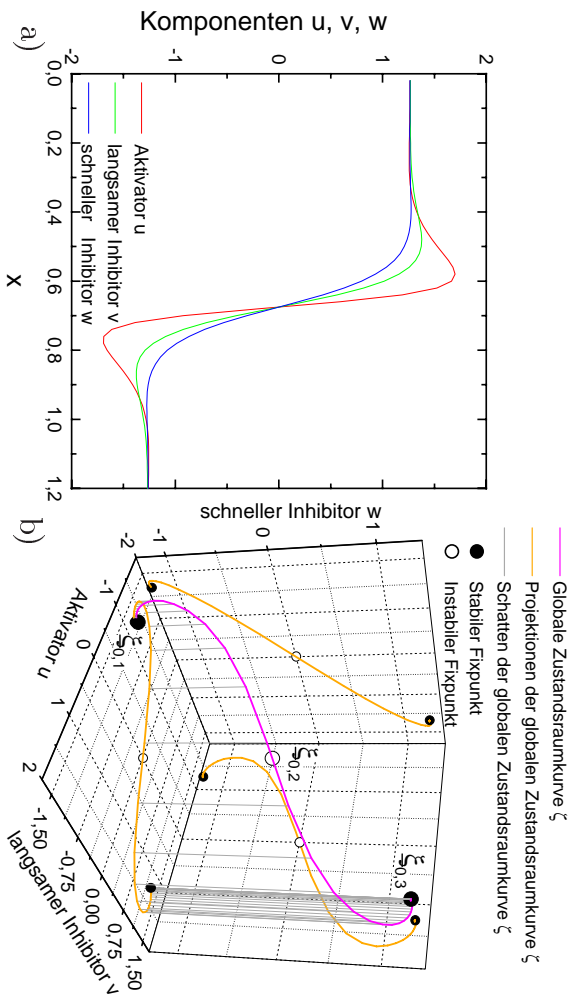


Abbildung 1.4: Schnitt a) und globale Zustandsraumkurve b) einer stationären Front. Der Simulation liegen folgende Parameter zugrunde: Diskretisierung  $= 120 \times 60 \times 1$ ,  $l_x = 1.2$ ,  $\tau = 1$ ,  $\theta = 0.01$ ,  $D_u = 4.67 \cdot 10^{-3}$ ,  $D_v = 4.8 \cdot 10^{-3}$ ,  $D_w = 0.01$ ,  $\lambda = 5.55$ ,  $\kappa_1 = 0$ ,  $\kappa_3 = 2.95$ ,  $ht = 10^{-3}$ , Neumann-Ränder. Der Schnitt a) längs der  $x$ -Achse zeigt die Front bei  $y = 0.3$ . Der linke Teil der Front befindet sich im oberen stabilen Fixpunkt  $\xi_{0,1}$ ; der rechte Teil der Kurve im unteren Fixpunkt  $\xi_{0,1}$ . Die globale Zustandsraumkurve  $\zeta_{Front}$  b) verläuft vom unteren stabilen Fixpunkt  $\xi_{0,1}$  zum oberen stabilen Fixpunkt  $\xi_{0,3}$ .

vollständig durch einen eindimensionalen Schnitt parallel zur Grundgebietenachse  $x_k$  beschrieben wird.

Als stationäre Lösung des Reaktions-Diffusions-Systems (1.6) existiert im bistabilen Parameterbereich  $(\lambda', \kappa'_1, \kappa'_3)$  auch die Überlagerung zweier Fronten, also der Übergang von  $(u_{0,1}, v_{0,1}, w_{0,1})$  über  $(u_{0,3}, v_{0,3}, w_{0,3})$  nach  $(u_{0,1}, v_{0,1}, w_{0,1})$  [Bode 1992], wobei der Abstand der Fronten im stationären Fall wohldefiniert ist.

#### 1.4.4 Stationäre Quasiteilchen

Weitere fundamentale Lösungen des dreikomponentigen Reaktions-Diffusions-Systems erhält man für weit diffundierende Inhibitoren  $D_v, D_w > D_u$ , die durch ihre kleinen Zeitskalenparameter  $\tau, \theta \rightarrow 0$  schnell auf Änderungen des Aktivators  $u$  reagieren können. Unter diesen Voraussetzungen existieren für geeignete  $\lambda, \kappa_1$  und  $\kappa_3$  großplattidige, lokalisierte Strukturen - sogenannte Quasiteilchen, die sich durch ihre Radialsymmetrie auszeichnen.

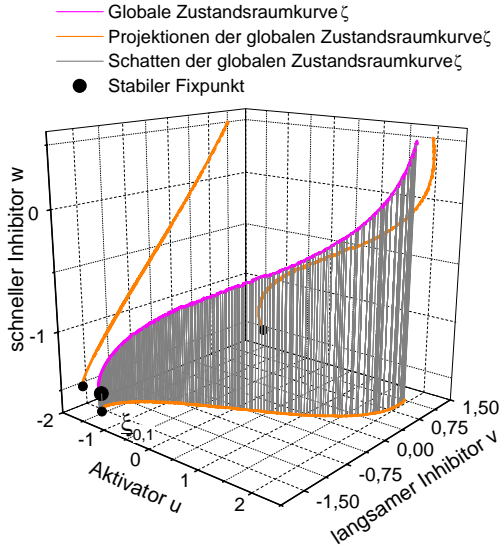


Abbildung 1.5: Globale Zustandsraumkurve  $\zeta_{QT}(u, v, w)$  eines stationären Quasiteilchens. Der Simulation liegen folgende Parameter zugrunde: Diskretisierung =  $40 \times 40 \times 40$ ,  $l_x = 1.2$ ,  $\tau = 0$ ,  $\theta = 0.01$ ,  $D_u = 4.67 \cdot 10^{-3}$ ,  $D_v = 4.8 \cdot 10^{-3}$ ,  $D_w = 0.01$ ,  $\lambda = 5.55$ ,  $\kappa_1 = -1.2$ ,  $\kappa_3 = 2.95$ , zyklische Ränder. Aufgrund der Radialsymmetrie eines stationären Quasiteilchens ist die globale Zustandsraumkurve eindimensional.

Ein Quasiteilchen  $(u_{QT}(\underline{x}), v_{QT}(\underline{x}), w_{QT}(\underline{x}))$  als Lösung des dreikomponentigen Reaktions-Diffusions-Systems auf einem dreidimensionalen Grundgebiet  $\underline{x} \in \mathbb{G} = \mathbb{R}^3$  wird also in einem Kugelkoordinatensystem  $r \times \varphi \times \vartheta$  vollständig durch den eindimensionalen Schnitt  $(u_{QT}(r), v_{QT}(r), w_{QT}(r))$  beschrieben. Demzufolge ist auch die globale Zustandsraumkurve  $\zeta_{QT}(u, v, w)$  eines stationären Quasiteilchens eindimensional (Abb. 1.5), wie auch die globale Zustandsraumkurve einer Front  $\zeta_{Front}(u, v, w)$  aufgrund seiner Symmetrie (1.28) eindimensional ist (Abb. 1.4b).

### 1.4.5 Die Darstellung dreidimensionaler Quasiteilchen

Bei der Darstellung eines dreidimensionalen Quasiteilchens als Schnitt durch eine Symmetrieachse gewinnt man einen Eindruck von der räumlichen Verteilung, von den Amplituden und von der gegenseitigen Wechselwirkung der Komponenten  $u$ ,  $v$  und  $w$ .

So kann man aus Abbildung 1.6a entnehmen, dass die Inhibitoren  $v$  und  $w$  den Aktivator  $u$  durch ihre größeren Diffusionslängenskalen  $\sqrt{D_v}, \sqrt{D_w} > \sqrt{D_u}$  den Aktivator  $u$  an allen Seiten umgeben. Dies führt dazu, dass sich an den Rändern des Quasiteilchens weniger Aktivator, als in den homogenen Teilen des Grundgebietes  $\mathbb{G}$  befindet

$$u(\underline{x})|_{Rand} < u_0. \quad (1.29)$$

Dadurch kann sich der Aktivator räumlich nicht ausbreiten und wird somit stabilisiert.

Der Schnitt durch die Symmetrieachse eines dreidimensionalen Quasiteilchens kann allerdings keinen Eindruck über die räumliche Anordnung der

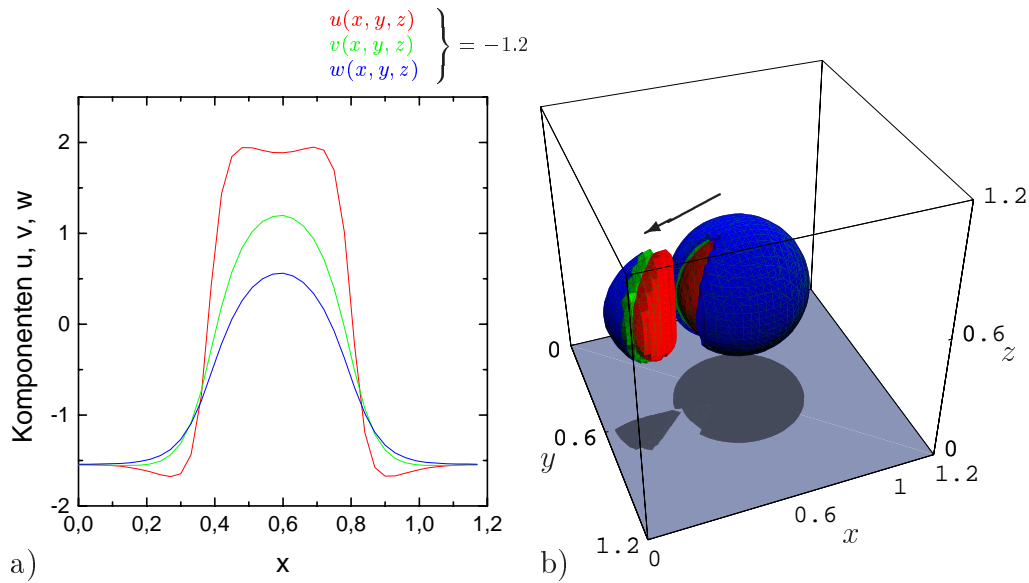


Abbildung 1.6: Schnitt a) und Isoflächen b) eines stationären dreidimensionalen Quasiteilchens. Diese Diagramme entstammen derselben Simulation wie in Abb. 1.5. Der Schnitt des Quasiteilchens a) verläuft parallel zur  $x$ -Achse bei  $y = 0.6$  und  $z = 0.6$  und zeigt, dass die Inhibitoren  $v$  und  $w$  weiter diffundieren als der Aktivator  $u$ . Da der schnelle Inhibitor von allen Komponenten am weitesten diffundiert, würde man in der Isoflächendarstellung b) des radialsymmetrischen Quasiteilchens nur die außenliegende Isofläche des schnellen Inhibitors sehen. Um zu zeigen, dass der schnelle Inhibitor  $w$  sowohl den langsamen Inhibitor  $v$  und den Aktivator  $u$  vollständig umgibt, wurde eine Scheibe des Quasiteilchens ausgeschnitten und separat dargestellt.

Komponenten  $u$ ,  $v$  und  $w$  zueinander vermitteln, was insbesondere im Hinblick auf komplexere Lösungen des Reaktions-Diffusions-Systems, wie z. Bsp. Quasiteilchenstöße wichtig ist (Kapitel 5).

Um die räumliche Anordnung der Komponenten  $\bar{u}$ ,  $\bar{v}$  und  $\bar{w}$  als Lösung des dreikomponentigen Reaktions-Diffusions-Systems auf einem Grundgebiet  $\mathbb{G} = \mathbb{R}^3$  darzustellen, bieten sich dreidimensionale Isoflächen an. Hierfür wird die Aktivatorisofläche  $F_{\bar{u}}$  definiert als die Menge aller Punkte  $\underline{x} \in \mathbb{G}$ , an denen die Aktivatorlösung  $\bar{u}(\underline{x})$  den Schwellwert  $u_S$  hat

$$F_{\bar{u}} := \{ \underline{x} \in \mathbb{G} \mid \bar{u}(\underline{x}) = u_S \}. \quad (1.30)$$

Entsprechende Definitionen gelten auch für die Isoflächen  $F_{\bar{v}}$  und  $F_{\bar{w}}$  des langsamen Inhibitors  $v$  und des schnellen Inhibitors  $w$ , wobei die Schwellwerte  $u_S$ ,  $v_S$  und  $w_S$  definitionsgemäß den gleichen Wert haben und über dem

homogenen Zustand des Systems  $(u_0, v_0, w_0)$  (1.14) liegen

$$u_S, v_S, w_S > u_0. \quad (1.31)$$

Während die gleiche Wahl der Schwellwerte  $u_S, v_S$  und  $w_S$  gewährleistet, dass die Isoflächen  $F_{\bar{u}}, F_{\bar{v}}$  und  $F_{\bar{w}}$  miteinander verglichen werden können, bewirkt die Bedingung (1.31), dass die Isoflächen  $F_{\bar{u}}, F_{\bar{v}}$  und  $F_{\bar{w}}$  die räumlichen Gebiete  $V_{\bar{u}}, V_{\bar{v}}, V_{\bar{w}} \subset \mathbb{G}$  des Grundgebiets  $\mathbb{G}$  umschließen, für die

$$V_{\bar{u}} = \{\underline{x} \in \mathbb{G} \mid \bar{u}(\underline{x}) \geq u_S\} \supset F_{\bar{u}} \quad (1.32)$$

sowie entsprechendes für die Volumina  $V_{\bar{v}}$  und  $V_{\bar{w}}$  gilt.

Durch diese Eigenschaft vermitteln die Isoflächen Aussagen über die räumliche Anordnung der Komponenten zueinander. Gleichzeitig muss man sich allerdings verdeutlichen, dass Isoflächen  $F_{\bar{u}}, F_{\bar{v}}$  und  $F_{\bar{w}}$  immer Interpretationen der Lösung  $(\bar{u}(\underline{x}), \bar{v}(\underline{x}), \bar{w}(\underline{x}))$  sind, da sie verschiedene Eigenschaften der Lösung in Abhängigkeit vom Schwellwert  $u_S$  darstellen.

Während zum Beispiel ein Schwellwert  $u_{S,1}$  knapp über dem Fixpunkt  $u_0$  die weit diffundierenden Inhibitoren  $v_{QT}$  und  $w_{QT}$  eines stationären Quasiteilchens betont, da die Inhibitorflächen  $F_{v_{QT}}(u_{S,1})$  und  $F_{w_{QT}}(u_{S,1})$  größere Volumina  $V_{v_{QT}}(u_{S,1}), V_{w_{QT}}(u_{S,1})$  einschließen als die Aktivatorisofläche

$$\|V_{v_{QT}}(u_{S,1})\|, \|V_{w_{QT}}(u_{S,1})\| > \|V_{u_{QT}}(u_{S,1})\| \quad (1.33)$$

(Abb. 1.6b), kann im Gegensatz dazu ein sehr hoch gewählter Schwellwert  $u_{S,2}$  die große Amplitude des Aktivators betonen, da die Aktivatorisofläche  $F_{u_{QT}}(u_{S,2})$  in diesem Fall ein größeres Volumen  $V_{u_{QT}}(u_{S,2})$  einschließt als die Inhibitorisoflächen

$$\|V_{u_{QT}}(u_{S,2})\| > \|V_{v_{QT}}(u_{S,2})\|, \|V_{w_{QT}}(u_{S,2})\|. \quad (1.34)$$

Es kann also zusammenfassend festgestellt werden, dass die graphische Darstellung dreidimensionaler Lösungen des Reaktions-Diffusions-Systems nur in der Kombination von Schnittdiagrammen einer Symmetrieachse und einer Isoflächendarstellung sinnvoll ist.

### 1.4.6 Laufende Quasiteilchen

Bisher wurde von Zeitskalenparameter  $\tau$  und  $\theta$  ausgegangen, die für  $t \rightarrow \infty$  lediglich stationäre stabile Quasiteilchen zulassen. Wird der Zeitskalenparameter  $\tau$  des langsamen Inhibitors jedoch hinreichend vergrößert, so kann der langsame Inhibitor  $v$  nicht mehr schnell genug auf Änderungen des Aktivators  $u$  reagieren [Or-Guil et al. 1998]. Ein kleiner räumlicher Versatz des

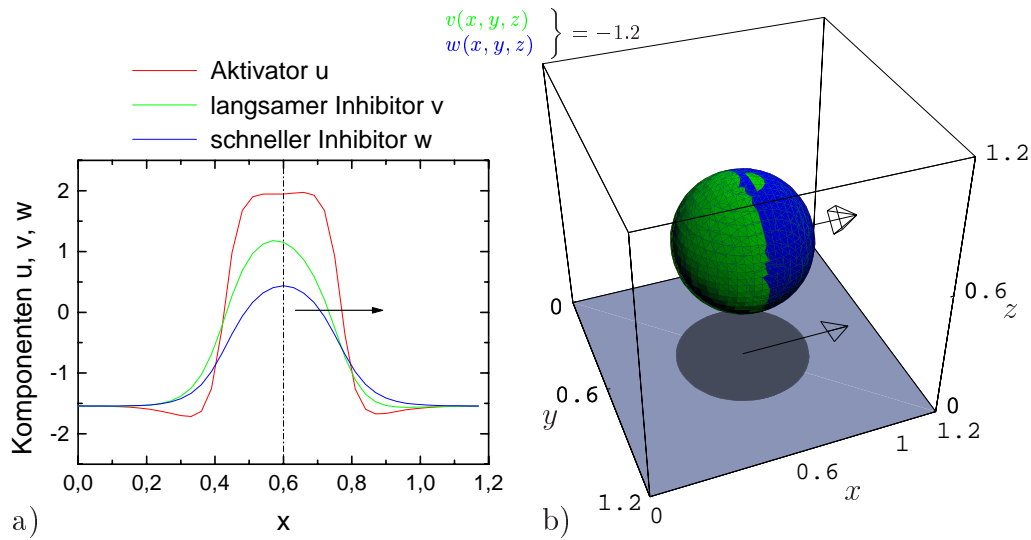


Abbildung 1.7: *Schnitt a) und Isoflächen b) eines laufenden dreidimensionalen Quasiteilchens. Die Parameter dieser Simulation entsprechen Abb. 1.5 mit  $\tau = 3.9$ . Der Schnitt a) zeigt die Komponenten  $u$ ,  $v$  und  $w$  in Laufrichtung parallel zur  $x$ -Achse bei  $y=0.6$  und  $z=0.6$ , während in der Isoflächendarstellung b) nur die Inhibitoren  $v$  und  $w$  sichtbar sind, da der Aktivator  $u$  komplett von ihnen umhüllt wird. In beiden Diagrammen wird deutlich, dass der langsame Inhibitor  $v$  aufgrund seines großen Zeitskalenparameters  $\tau$  einen Versatz entgegen der Laufrichtung aufweist, die durch einen Pfeil angedeutet ist.*

Aktivators  $u$  gegen den langsamen Inhibitor  $v$  führt zu einer Störung des Gleichgewichts zwischen dem gegenseitigen Erzeugen und Vernichten von Aktivator und Inhibitor. Demnach breitet sich der Aktivator in Richtungen aus, in denen er weniger Inhibitor sieht (Vgl. Abb. 1.7). Hierbei zeichnet sich die Richtung, die genau der dem Inhibitor  $v$  abgewandten Seite entspricht, als die Bewegungsrichtung des Quasiteilchens aus. Der Aktivator  $u$  kann sich aber auch senkrecht zu dieser Laufrichtung ausbreiten, was allerdings durch den schnellen Inhibitor  $w$  unterbunden wird. Diese Stabilisierung erzielt der schnelle Inhibitor  $w$  zum Einen durch seine große Diffusionskonstante  $D_w$ , so dass der Aktivator  $u$  in allen Raumrichtungen von schnellem Inhibitor umgeben wird, und zum Anderen durch seinen kleinen Zeitskalenparameter  $\theta$ , wodurch der Inhibitor  $w$  schnell auf Änderungen des Aktivators  $u$  reagieren kann.

Betrachtet man die globale Zustandsraumkurve  $\zeta_{IQT}$  eines laufenden Quasiteilchens (Vgl. Abb. 1.8), so fällt als Erstes auf, dass die globale Zustandsraumkurve  $\zeta_{IQT}$  keine Kurve, sondern eine Punktmenge ist, die ein Fläche im globalen Zustandsraum  $\mathbb{Z}$  approximiert. Folglich verschwindet die Radi-



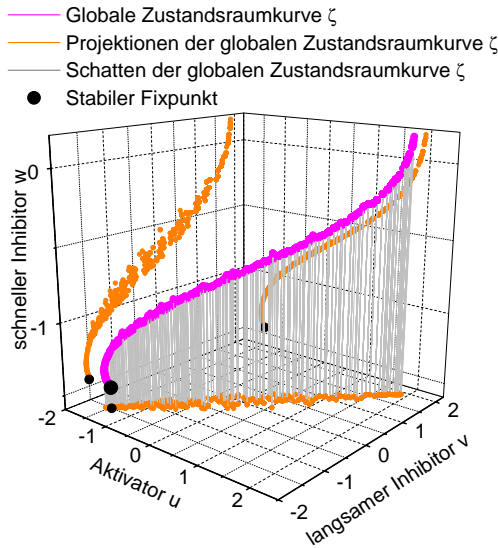


Abbildung 1.8: Globale Zustandsraumkurve eines laufenden dreidimensionalen Quasiteilchens. Der Simulation liegen folgende Parameter zugrunde: Diskretisierung =  $40 \times 60 \times 40$ ,  $l_x = 1.125$ ,  $\tau = 1.03$ ,  $\theta = 0.01$ ,  $D_u = 4.67 \cdot 10^{-3}$ ,  $D_v = 0$ ,  $D_w = 0.01$ ,  $\lambda = 5.67$ ,  $\kappa_1 = -1.126$ ,  $\kappa_3 = 3.33$ , zyklische Ränder. Da mit der Bifurkation vom stationären zum laufenden Quasiteilchen die Radialsymmetrie des Quasiteilchens in eine Zylindersymmetrie übergeht, ist die globale Zustandsraumkurve  $\zeta_{IQT}$  des laufenden Quasiteilchens eine Fläche, die durch die Diskretisierungspunkte des Grundgebiets approximiert wird. In dieser Darstellung wird dies durch die Projektion der Zustandsraumkurve  $\zeta_{IQT}$  auf die Ebenen  $u \times v$  und  $v \times w$  deutlich.

alsymmetrie mit der Bifurkation vom stationären zum laufenden Quasiteilchen. Da jedoch die Dimension der globalen Zustandsraumfläche  $\zeta_{IQT}$  immer noch kleiner ist als die Dimension des Grundgebiets  $\mathbb{G} = \mathbb{R}^3$ , liegt die Vermutung nahe, dass auch hier eine räumliche Symmetrie vorliegt. Tatsächlich zeichnen sich laufende, stabile Quasiteilchen durch Zylindersymmetrie aus. Transformiert man also ein laufendes Quasiteilchen in den Ursprung  $\underline{0}$  eines Zylinderkoordinatensystems  $r \times h \times \varphi$  und legt die Laufrichtung des Quasiteilchens in Richtung der  $h$ -Achse, so verschwindet der Winkelanteil  $\varphi$  der Diffusionstherme. Dementsprechend ist ein stabiles laufendes Quasiteilchen vollständig durch den zweidimensionalen Schnitt  $r \times h$  im Zylinderkoordinatensystem beschrieben.

# Kapitel 2

## Die Beschreibung der numerischen Methoden zur Lösung des dreikomponentigen dreidimensionalen Reaktions-Diffusions-Systems

### 2.1 Anforderungen an die Numerik

Da die numerische Lösung des dreidimensionalen dreikomponentigen Reaktions-Diffusions-Systems nur auf einem räumlich begrenzten Grundgebiet und an abzählbar vielen Punkten erfolgen kann, müssen die Komponenten  $u$ ,  $v$  und  $w$  diskretisiert (Abschnitt 2.2.1) und die Ränder des Grundgebietes definiert werden (Abschnitt 2.2.2).

Ausgehend von den diskreten Reaktions-Diffusions-Komponenten werden die notwendigen diskreten Differentialoperatoren hergeleitet (Abschnitt 2.2.3) und die diskreten Reaktions-Diffusions-Gleichungen formuliert (Abschnitt 2.2.4). Da diese mittels eines iterativen Lösungsverfahrens (Abschnitt 2.3) gelöst werden sollen, muss bereits bei der Formulierung der diskreten Reaktions-Diffusions-Gleichungen darauf geachtet werden, dass diese Gleichungen auch bei großen Zeitschritten  $\delta_t$  schnell konvergieren und eine hohe numerische Genauigkeit erreichen.

Die Anwendung des iterativen Lösungsverfahrens erfolgt in dem C-Programm 3k3d (Abschnitt 2.4), das auf Alpha Workstations und auf Parallelrechnern des Typs *Intel Paragon* und *Cray T3E* ausgeführt werden kann. Die Performance dieses Programms wird in Abschnitt 2.4.2 untersucht.

## 2.2 Die diskreten Reaktions-Diffusions-Gleichungen

### 2.2.1 Der Übergang von kontinuierlichen zu diskreten Reaktions-Diffusions-Komponenten

Die Komponenten  $u$ ,  $v$  und  $w$  des untersuchten Reaktions-Diffusions-Systems (1.1) wurden als räumlich und zeitlich abhängige skalare Felder eingeführt. Dabei sind die Reaktions-Diffusions-Gleichungen (1.1) für unendlich große Grundgebiete  $\mathbb{G}$  (1.22) und für alle Zeiten definiert. Um die Lösungen dieser Gleichungen zu untersuchen, reicht es in der Regel jedoch aus ein räumlich begrenztes Grundgebiet zu betrachten

$$\mathbb{G} = [0, l_x] \times [0, l_y] \times [0, l_z] \subset \mathbb{R}^3. \quad (2.1)$$

Hierbei bezeichnen  $l_x$ ,  $l_y$  und  $l_z$  die Kantenlängen des Grundgebietes  $\mathbb{G}$  parallel zu den x-, y- und z-Achsen. Desweiteren genügt es, die Komponenten  $u$ ,  $v$  und  $w$  lediglich an wohldefinierten Punkten  $(x_l, y_m, z_n) \in \mathbb{G}$  mit  $l, m, n \in \mathbb{N}_0$  zu kennen, weil die dazwischenliegenden Punkte durch Interpolation genähert werden können.

Dies gewinnt seine Bedeutung dadurch, dass es im Allgemeinen keine analytisch zugänglichen Lösungen des Reaktions-Diffusions-Systems gibt, so dass die Lösungen rein numerisch berechnet werden müssen. Somit wird die Anzahl der Diskretisierungspunkte des Grundgebietes durch die Rechenleistung des zur Verfügung stehenden Computers beschränkt. Dementsprechend wird das Grundgebiet  $\mathbb{G}$  mit einer Auflösung von

$$a_x \times a_y \times a_z \quad (2.2)$$

Punkten diskretisiert, wobei der Abstand  $\delta_x$  zwischen zwei Diskretisierungspunkten, die parallel zu einer Raumachse liegen, durch

$$\delta_x := \frac{l_x}{a_x} = \frac{l_y}{a_y} = \frac{l_z}{a_z} \quad (2.3)$$

definiert wird. Hiernach ergeben sich die Diskretisierungspunkte  $x_l$ ,  $y_m$ ,  $z_n$  des Grundgebietes  $\mathbb{G}$  als

$$\begin{aligned} x_l = l \delta_x & \wedge l \in [0, 1, \dots, a_x, a_{x+1}], \\ y_m = m \delta_x & \wedge m \in [0, 1, \dots, a_y, a_{y+1}], \\ z_n = n \delta_x & \wedge n \in [0, 1, \dots, a_z, a_{z+1}]. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Diese Diskretisierung des Grundgebietes berücksichtigt bereits die Randpunkte, die zur Lösung des Randwertproblems benötigt werden (Vgl. Abschnitt 2.2.2).

Auch die zeitliche Entwicklung der Lösungen des Reaktions-Diffusions-Systems unterliegt einer Diskretisierung. Hier bezeichnet die Zeitschrittweite  $\delta_t$  die Differenz zwischen dem Zustand des Systems zur Zeit  $t$  und dem Zustand des Systems zur Zeit  $(t + \delta_t)$ , so dass die zu berechnenden Zeitpunkte  $t_k$  über den Zeitpunkt  $t_0$  festgelegt sind als

$$t_k := t_0 + k \delta_t \quad \text{mit} \quad k \in \mathbb{N}_0. \quad (2.5)$$

Folglich gehen die in Raum und Zeit kontinuierlichen Komponenten  $u(x, y, z, t)$ ,  $v(x, y, z, t)$  und  $w(x, y, z, t)$  in die diskreten Komponenten

$$\begin{aligned} u_{l,m,n}^k &:= u(x_l, y_m, z_n, t_k), \\ v_{l,m,n}^k &:= v(x_l, y_m, z_n, t_k), \\ w_{l,m,n}^k &:= w(x_l, y_m, z_n, t_k), \end{aligned} \quad (2.6)$$

mit  $l, m, n$  aus (2.4) und  $k$  aus (2.5) über.

### 2.2.2 Die Definition der Grundgebietsränder

Da die Reaktions-Diffusions-Gleichungen lediglich auf einem räumlich begrenzten Grundgebiet gelöst werden können, stellt sich die Frage, wie die Ränder  $\mathbb{G}_R \subset \mathbb{G}$  des Grundgebietes definiert werden. Dieses Problem wird gelöst, indem man das Grundgebiet mit Randpunkten umgibt und diesen Randpunkten jeweils Zustände  $(u, v, w)|_{\text{Randpunkte}}$  zuweist, die durch sogenannte Randbedingungen definiert sind. Bei der Lösung des dreikomponentigen Reaktions-Diffusions-Systems werden folgende Randbedingungen verwendet:

- Neumann-Ränder
- Zyklische Ränder
- Ring-Randbedingung

Die Ränder der Neumann-Randbedingung zeichnen sich dadurch aus, dass die Ableitungen auf diesen Rändern gleich Null sind

$$\hat{\underline{n}} \cdot \nabla(u, v, w)|_{\text{Neumann Rand}} = \underline{0}, \quad (2.7)$$

wobei  $\hat{\underline{n}}$  den Normalenvektor der Randfläche darstellt. Dies erreicht man durch das Kopieren der äußeren Diskretisierungspunkte des Grundgebietes

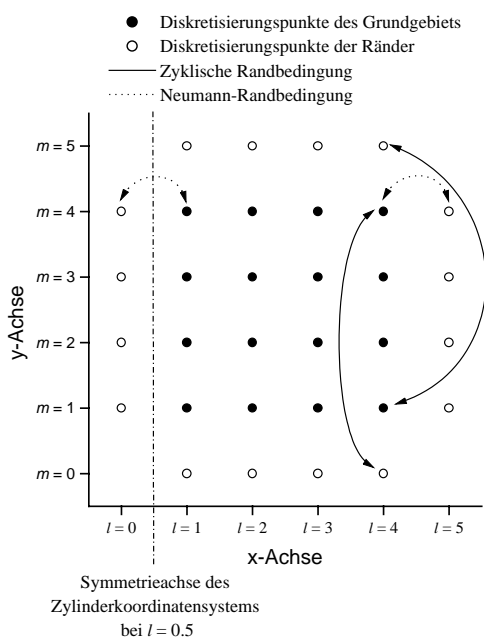


Abbildung 2.1: Dieses Diagramm zeigt den Schnitt eines diskretisierten Grundgebiets  $\mathbb{G}$  bei  $n=1$ . Das Grundgebiet ist mit einer Auflösung von  $4 \times 4 \times 1$  Punkten diskretisiert und an allen Seiten mit Randpunkten umgeben. Diese erfüllen die sogenannte Ring-Randbedingung, so dass die Ränder parallel zur  $y$ -Achse die Neumann-Randbedingung und die Ränder parallel zur  $x$ -Achse die zyklische Randbedingung erfüllen. Dabei werden die Randpunkte der Neumann-Randbedingung gleich den benachbarten Grundgebietspunkten gesetzt. Desweiteren

werden den Randpunkten der zyklischen Randbedingung die Zustände der Grundgebietspunkte zugewiesen, die sich auf der gegenüberliegenden Grundgebietsseite befinden (2.8).

Betrachtet man dieses Grundgebiet als Zylinderkoordinatensystem, so ist zu beachten, dass die Symmetrieachse dieses Systems bei  $l = \frac{1}{2}$  liegt. Aus diesem Grund muss bei der Berechnung des  $\frac{1}{x}$ -Terms im Diffusions-Operator ein Offset von  $-\frac{1}{2}$  berücksichtigt werden (2.16).

auf die benachbarten Randpunkte. Dadurch wirken Neumann-Ränder wie Spiegel. Ein Quasiteilchen, das sich auf einen Neumann-Rand zubewegt, stößt also gewissermaßen mit sich selbst.

Die Ränder der zyklischen Randbedingung erhalten die Werte der äußeren Diskretisierungspunkte der gegenüberliegenden Grundgebietsseite. Für die zyklischen Randflächen eines dreidimensionalen Grundgebiets gilt also:

$$\begin{aligned}
 u_{0,m,n}^k &= u_{a_x,m,n}^k \wedge u_{a_x+1,m,n}^k = u_{1,m,n}^k \quad \forall m,n, \\
 u_{l,0,n}^k &= u_{l,a_y,n}^k \wedge u_{l,a_y+1,n}^k = u_{l,1,n}^k \quad \forall l,n, \\
 u_{l,m,0}^k &= u_{l,m,a_z}^k \wedge u_{l,m,a_z+1}^k = u_{l,m,1}^k \quad \forall l,m.
 \end{aligned} \tag{2.8}$$

Somit erweisen sich die zyklischen Randbedingungen vor allem für die Simulation laufender Quasiteilchen als sinnvoll, da diese beim Kontakt mit einem zyklischen Grundgebietsrand über die gegenüberliegende Grundgebietsseite wieder in das Grundgebiet eintreten können.

Die Ring-Randbedingung ist eine Mischform aus Neumann- und zyklischen Rändern. Dabei sind die Ebenen parallel zu  $y \times z$  und  $y \times x$  als Neumann-Ränder definiert, während die Ebenen parallel zu  $x \times z$  zyklische Ränder darstellen. Diese Randbedingung eignet sich vor allem bei der Simulation von zylindersymmetrischen Strukturen, also laufenden Quasiteilchen. Dabei muss die Symmetrieachse gleich der  $y$ -Achse sein (Vgl. Abb. 2.1).

### 2.2.3 Herleitung der diskreten Differentialoperatoren

Für die Herleitung der diskreten Reaktions-Diffusions-Gleichungen müssen zunächst die Differentialoperatoren des kontinuierlichen Reaktions-Diffusions-Systems (1.1) als diskrete Differentialoperatoren formuliert werden. Dies sind die zeitlichen Ableitungen  $\frac{\partial}{\partial t}(u, v, w)$  und der Diffusionsoperator  $\Delta(u, v, w)$ , die jeweils exemplarisch an dem diskreten Aktivator  $u_{l,m,n}^k$  gezeigt werden. Während die Zeitabteilung  $\frac{\partial}{\partial t}u_{l,m,n}^k$  als einfacher Differenzenquotient

$$\frac{\partial}{\partial t}u_{l,m,n}^k = \frac{u_{l,m,n}^{k+1} - u_{l,m,n}^k}{\delta_t} \quad (2.9)$$

definiert ist [Press 1989, S.857], wird der diskrete dreidimensionale Diffusions-Operator über seine sechs nächsten Nachbarn berechnet (Vgl. Abb. 2.2). Dies ergibt im kartesischen Koordinatensystem:

$$\Delta_{KK}u_{l,m,n}^k = \frac{1}{\delta_x^2} \left( \underbrace{u_{l-1,m,n}^k + u_{l+1,m,n}^k + u_{l,m-1,n}^k + u_{l,m+1,n}^k + u_{l,m,n-1}^k + u_{l,m,n+1}^k}_{:=\Sigma u_{l,m,n}^k} - 6u_{l,m,n}^k \right) \quad (2.10)$$

[Vgl. Kopetsch 1989, S.32.6]. Dieser diskrete Diffusions-Operator kann erweitert werden, um die in Abschnitt 1.4.6 diskutierte Zylindersymmetrie laufender Quasiteilchen zur Verringerung der Rechenzeit auszunutzen. Hierbei wird das Grundgebiet auf einen zweidimensionalen zylindersymmetrischen Schnitt des laufenden Quasiteilchens reduziert, so dass der Diffusions-Operator an Zylinderkoordinatensysteme angepaßt werden muss. In diesen berechnet sich der Diffusions-Operator nach

$$\Delta_Z = \frac{1}{\varrho} \frac{\partial}{\partial \varrho} \left( \varrho \frac{\partial}{\partial \varrho} \right) + \frac{1}{\varrho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial}{\partial h^2} \quad (2.11)$$

[Bronštejn 1989, S.575]. Hierbei liefert die Winkelableitung  $\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$  aufgrund der Zylindersymmetrie keinen Beitrag, so dass man mit der Substitution  $\varrho = x$  und  $h = y$  folgenden zweidimensionalen Diffusions-Operator erhält:

$$\Delta_{Z,2D} = \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial x} \left( x \frac{\partial}{\partial x} \right) + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \quad (2.12)$$

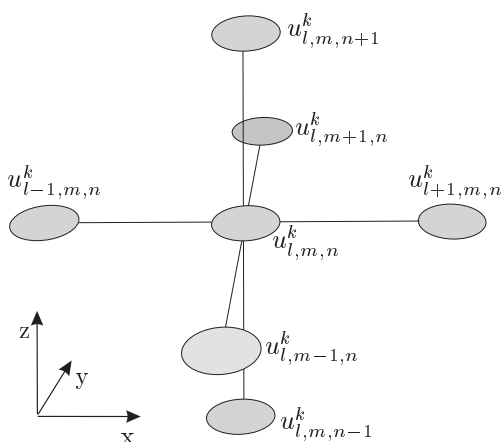


Abbildung 2.2: Der diskrete dreidimensionale Diffusions-Operator an dem Diskretisierungspunkt  $u_{l,m,n}^k$  zum Zeitpunkt  $k$  berechnet sich über seine sechs nächsten Nachbarn (2.10).

Dieser lässt sich durch partielle Differentiation in einem  $\frac{1}{x}$ -Term und den kartesischen zweidimensionalen Diffusions-Operator aufteilen:

$$\Delta'_{Z,2D} = \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \quad (2.13)$$

Um den obigen Operator in den diskreten Reaktions-Diffusions-Gleichungen anwenden zu können, muss ein zweidimensionales Grundgebiet  $a_x \times a_y \times 1$  vorausgesetzt werden, bei dem die Symmetrieachse mit der  $y$ -Achse identisch ist. Diese Symmetriebedingung wird sowohl von der Neumann-, als auch von der Ring-Randbedingung erfüllt, wenn man berücksichtigt, dass die Symmetrieachse nicht bei  $y = 0$ , sondern bei  $y = \frac{1}{2}$  liegt und diesen Offset in dem  $\frac{1}{x}$ -Term des Diffusions-Operators berücksichtigt (Vgl. Abb. 2.1).

$$\Delta'_{Z,2D} = \frac{1}{x - \frac{1}{2}} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \quad (2.14)$$

Um die einheitliche Schreibweise der folgenden Gleichungen zu gewährleisten, führt man desweiteren einen Faktor  $K_S$  mit

$$K_S := \begin{cases} 0, & \text{wenn ein kartesisches Koordinatensystem} \\ & \text{beliebiger Dimension vorliegt,} \\ 1, & \text{wenn ein zweidimensionales} \\ & \text{Zylinderkoordinatensystem vorliegt.} \end{cases} \quad (2.15)$$

ein, der den  $\frac{1}{x}$ -Term des  $\Delta_{Z,2D}$  Diffusions-Operators nur bei zweidimensionalen Zylinderkoordinatensystemen wirksam werden lässt, so dass man einen verallgemeinerten kontinuierlichen Diffusionsoperator

$$\Delta_A = K_S \frac{1}{x - \frac{1}{2}} \frac{\partial}{\partial x} + \Delta \quad (2.16)$$

erhält. Dieser lautet in seiner diskretisierten Form

$$\Delta_d u_{l,m,n}^k := \underbrace{K_S \frac{1}{\left(l - \frac{1}{2}\right) \delta_x} \frac{u_{l+1,m,n}^k - u_{l-1,m,n}^k}{2\delta_x}}_{=: \Delta_{ZK} u_{l,m,n}^k} + \Delta_{KK} u_{l,m,n}^k \quad (2.17)$$

## 2.2.4 Bestimmung der diskreten Reaktions-Diffusions-Gleichungen

Ausgehend von den diskreten Differentialoperatoren der zeitlichen Entwicklung (2.9) und der Diffusion (2.17) muss auch das dreikomponentige Reaktions-Diffusions-System in ein diskretisiertes Gleichungssystem überführt werden. Um bei der iterativen Lösung dieses diskreten Gleichungs-Systems sowohl ein gutes Konvergenzverhalten bei großen Zeitschritten  $\delta_t$ , als auch eine hohe numerische Genauigkeit zu erreichen, werden die diskreten Reaktions-Diffusions-Gleichungen nach der *Crank-Nicholson*-Methode formuliert [Vgl. Press 1995, S.849 ff.]. Dabei wird die zeitliche Entwicklung aus dem Ausgangszustand  $(u_{l,m,n}^k, v_{l,m,n}^k, w_{l,m,n}^k)$  und dem zu berechnenden Zustand  $(u_{l,m,n}^{k+1}, v_{l,m,n}^{k+1}, w_{l,m,n}^{k+1})$  gemittelt:

$$u_{l,m,n}^{k+\frac{1}{2}} := \frac{1}{2} (u_{l,m,n}^{k+1} + u_{l,m,n}^k). \quad (2.18)$$

Diese Definition gilt exemplarisch auch für  $v_{l,m,n}^{k+\frac{1}{2}}$  und  $w_{l,m,n}^{k+\frac{1}{2}}$ , so dass das diskretisierte dreikomponentige Reaktions-Diffusions-System wie folgt lautet:

$$\begin{aligned} \frac{u_{l,m,n}^{k+1} - u_{l,m,n}^k}{\delta_t} &= D_u \Delta_d u_{l,m,n}^{k+\frac{1}{2}} + f\left(u_{l,m,n}^{k+\frac{1}{2}}\right) - v_{l,m,n}^{k+\frac{1}{2}} - \kappa_3 w_{l,m,n}^{k+\frac{1}{2}} + \kappa_1, \\ \tau \frac{v_{l,m,n}^{k+1} - v_{l,m,n}^k}{\delta_t} &= D_v \Delta_d v_{l,m,n}^{k+\frac{1}{2}} + u_{l,m,n}^{k+\frac{1}{2}} - v_{l,m,n}^{k+\frac{1}{2}}, \\ \theta \frac{w_{l,m,n}^{k+1} - w_{l,m,n}^k}{\delta_t} &= D_w \Delta_d w_{l,m,n}^{k+\frac{1}{2}} + u_{l,m,n}^{k+\frac{1}{2}} - w_{l,m,n}^{k+\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (2.19)$$

## 2.3 Das iterative Lösungsverfahren für einen Zeitschritt

Die Lösung der diskretisierten Reaktions-Diffusions-Gleichungen erfolgt in einzelnen Zeitschritten (2.5), die jeweils iterativ berechnet werden. Dazu werden die diskretisierten dreikomponentigen Reaktions-Diffusions-Gleichungen



(2.19) in ein Iterationssystem überführt, dessen Anwendung in einer Iterationsvorschrift eine schrittweise Annäherung von  $(u_{l,m,n}^k, v_{l,m,n}^k, w_{l,m,n}^k)$  nach  $(u_{l,m,n}^{k+1}, v_{l,m,n}^{k+1}, w_{l,m,n}^{k+1})$  ergibt.

Die Iterationsgleichungen werden nach der Gauss-Seidel Methode formuliert, die sich dadurch auszeichnet, dass die bereits berechneten Werte sofort in die Lösung der noch zu berechnenden Werte miteinfließen.

Zur Herleitung der Iterationsgleichungen werden die Terme des zu berechnenden Zeitpunkts  $(u_{l,m,n}^{k+1}, v_{l,m,n}^{k+1}, w_{l,m,n}^{k+1})$  aus der diskreten zeitlichen Ableitung (2.9) und dem diskreten Diffusionsoperator (2.17) auf die linke Seite der diskreten Reaktions-Diffusions-Gleichungen (2.19) gebracht

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\delta_t}u_{l,m,n}^{k+1} + \frac{3D_u}{\delta_x^2}u_{l,m,n}^{k+1} &= D_u \left( \frac{1}{\delta_x} \Delta_{ZK} u_{l,m,n}^{k+\frac{1}{2}} + \frac{1}{\delta_x^2} \Sigma u_{l,m,n}^{k+\frac{1}{2}} - 3u_{l,m,n}^k \right) + \\
&\quad f \left( u_{l,m,n}^{k+\frac{1}{2}} \right) - v_{l,m,n}^{k+\frac{1}{2}} - \kappa_3 u_{l,m,n}^{k+\frac{1}{2}} + \kappa_1 + \frac{1}{\delta_t} u_{l,m,n}^k, \\
\frac{\tau}{\delta_t}v_{l,m,n}^{k+1} + \frac{3D_v}{\delta_x^2}v_{l,m,n}^{k+1} &= D_v \left( \frac{1}{\delta_x} \Delta_{ZK} v_{l,m,n}^{k+\frac{1}{2}} + \frac{1}{\delta_x^2} \Sigma v_{l,m,n}^{k+\frac{1}{2}} - 3v_{l,m,n}^k \right) + \\
&\quad u_{l,m,n}^{k+\frac{1}{2}} - v_{l,m,n}^{k+\frac{1}{2}} + \frac{\tau}{\delta_t} v_{l,m,n}^k, \\
\frac{\theta}{\delta_t}w_{l,m,n}^{k+1} + \frac{3D_w}{\delta_x^2}w_{l,m,n}^{k+1} &= D_w \left( \frac{1}{\delta_x} \Delta_{ZK} w_{l,m,n}^{k+\frac{1}{2}} + \frac{1}{\delta_x^2} \Sigma w_{l,m,n}^{k+\frac{1}{2}} - 3w_{l,m,n}^k \right) + \\
&\quad u_{l,m,n}^{k+\frac{1}{2}} - w_{l,m,n}^{k+\frac{1}{2}} + \frac{\theta}{\delta_t} w_{l,m,n}^k.
\end{aligned} \tag{2.20}$$

Sodann werden  $u_{l,m,n}^{k+1}$ ,  $v_{l,m,n}^{k+1}$  und  $w_{l,m,n}^{k+1}$  durch die Hilfsgrößen  $u'_{l,m,n}$ ,  $v'_{l,m,n}$  und  $w'_{l,m,n}$  substituiert und nach diesen aufgelöst, so dass man die Iterationsgleichungen zur Lösung des dreikomponentigen Reaktions-Diffusions-Systems erhält:

$$\begin{aligned}
u'_{l,m,n} &= K_1 u_{l,m,n}^k + K_1 \delta_t \left[ D_u \left( \frac{1}{\delta_x} \Delta_{ZK} u_{l,m,n}^{k+\frac{1}{2}} + \frac{1}{\delta_x^2} \Sigma u_{l,m,n}^{k+\frac{1}{2}} - 3u_{l,m,n}^k \right) + \right. \\
&\quad \left. f \left( u_{l,m,n}^{k+\frac{1}{2}} \right) - v_{l,m,n}^{k+\frac{1}{2}} - \kappa_3 u_{l,m,n}^{k+\frac{1}{2}} + \kappa_1 \right], \\
v'_{l,m,n} &= K_2 v_{l,m,n}^k + K_2 \frac{\delta_t}{\tau} \left[ D_v \left( \frac{1}{\delta_x} \Delta_{ZK} v_{l,m,n}^{k+\frac{1}{2}} + \frac{1}{\delta_x^2} \Sigma v_{l,m,n}^{k+\frac{1}{2}} - 3v_{l,m,n}^k \right) + \right. \\
&\quad \left. u_{l,m,n}^{k+\frac{1}{2}} - v_{l,m,n}^{k+\frac{1}{2}} \right], \\
w'_{l,m,n} &= K_3 v_{l,m,n}^k + K_3 \frac{\delta_t}{\theta} \left[ D_w \left( \frac{1}{\delta_x} \Delta_{ZK} w_{l,m,n}^{k+\frac{1}{2}} + \frac{1}{\delta_x^2} \Sigma w_{l,m,n}^{k+\frac{1}{2}} - 3w_{l,m,n}^k \right) + \right. \\
&\quad \left. u_{l,m,n}^{k+\frac{1}{2}} - w_{l,m,n}^{k+\frac{1}{2}} \right].
\end{aligned} \tag{2.21}$$

Die Konstanten  $K_1$ ,  $K_2$  und  $K_3$  sind dabei wie folgt definiert:

$$\begin{aligned} K_1 &:= \left(1 + 3 \frac{\delta_t D_u}{\delta_x^2}\right)^{-1}, \\ K_2 &:= \left(1 + 3 \frac{\delta_t D_v}{\tau \delta_x^2}\right)^{-1}, \\ K_3 &:= \left(1 + 3 \frac{\delta_t D_w}{\theta \delta_x^2}\right)^{-1}. \end{aligned} \quad (2.22)$$

Die Berechnung des  $(k + 1)$ ten Zeitschritts erfolgt über Iterationsschritte  $(u_{l,m,n}^{k+1}, v_{l,m,n}^{k+1}, w_{l,m,n}^{k+1})_j$ , wobei der Nullte Iterationsschritt  $j = 0$  mit

$$(u_{l,m,n}^{k+1}, v_{l,m,n}^{k+1}, w_{l,m,n}^{k+1})_0 = (u_{l,m,n}^k, v_{l,m,n}^k, w_{l,m,n}^k) \quad (2.23)$$

vorgegeben wird. Die Vorschrift zur Berechnung des  $(j + 1)$ ten Iterationsschrittes lautet dann wie folgt:

1. Berechne  $(u'_{l,m,n}, v'_{l,m,n}, w'_{l,m,n})$  aus (2.21)
2. Berechne Änderung

$$\begin{pmatrix} \delta_u \\ \delta_v \\ \delta_w \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{l,m,n}^{k+1} \\ v_{l,m,n}^{k+1} \\ w_{l,m,n}^{k+1} \end{pmatrix}_j - \begin{pmatrix} u'_{l,m,n} \\ v'_{l,m,n} \\ w'_{l,m,n} \end{pmatrix}$$

3. Berechne den nächsten Iterationswert als

$$\begin{pmatrix} u_{l,m,n}^{k+1} \\ v_{l,m,n}^{k+1} \\ w_{l,m,n}^{k+1} \end{pmatrix}_{j+1} = \begin{pmatrix} u_{l,m,n}^{k+1} \\ v_{l,m,n}^{k+1} \\ w_{l,m,n}^{k+1} \end{pmatrix}_j + \omega \begin{pmatrix} \delta_u \\ \delta_v \\ \delta_w \end{pmatrix} \quad \text{mit } \omega \in [0, 2] \quad (2.24)$$

4. Wenn das Konvergenzkriterium

$$\max(\delta_u, \delta_v, \delta_w) < K_k \quad (2.25)$$

nicht erfüllt ist, fahre mit Punkt 1 der Iterationsvorschrift fort.

Der Faktor  $\omega$  der Iterationsvorschrift (2.24) heißt *Successive Overrelaxation*-Parameter und nimmt zukünftige Änderungen  $(\delta_u, \delta_v, \delta_w)$  vorweg, so dass der Algorithmus bei günstiger  $\omega$ -Wahl schneller konvergiert. Dieses Iterationsverfahren wird *Successive Overrelaxation (SOR)* genannt. Für  $\omega < 1$  spricht man von *Underrelaxation* [Press 1996, S. 866].

## 2.4 Das Programm 3k3d zur Lösung des dreikomponentigen dreidimensionalen Reaktions-Diffusions-Systems

### 2.4.1 Die Funktionsweise des Programms 3k3d

Die Lösung des dreikomponentigen dreidimensionalen Reaktions-Diffusions-Systems erfolgt mit dem C-Programm 3k3d. Dieses parallele Programm ist auf *Alpha*-Workstations unter dem Betriebssystem VMS und auf Parallelrechnern des Typs *Cray T3E* sowie dem *Intel Paragon* lauffähig. 3k3d wurde vom Autor im Rahmen einer SHK-Stelle von Januar bis Oktober 1997 für *Alpha*-Workstations und den Parallelrechner Intel Paragon entwickelt und basiert auf dem Sourcecode rd2d.c von M. Schilke [Schilke 1992], das in einer modifizierten Version von C.P. Schenk vorlag [Schenk 1995].

Die Parallelisierung der Lösungsalgorithmen auf einem Parallelrechner mit  $N$  Computern beruht dabei auf der Aufteilung des Grundgebietes  $\mathbb{G}$  in  $N$  gleich großer Teilgebiete  $\mathbb{G}_i$  mit

$$\bigcup_{i=1}^N \mathbb{G}_i = \mathbb{G}. \quad (2.26)$$

Diese Teilgebiete  $\mathbb{G}_i$  werden jeweils mit Randpunkten umgeben (Vgl. Abschnitt 2.2.2), wobei die im Inneren des Grundgebiets  $\mathbb{G}$  liegenden Randpunkte zur Koordinierung der Numerik zwischen den Prozessoren dienen, während die äußeren Randpunkte zur Lösung des Randwertproblems verwendet werden.

Die hierfür notwendigen Routinen wurden von J. Berkemeier in der C-Bibliothek `util3d` implementiert, die auf dem Parallelrechnerstandard *MPI* (*Message Passing Interface*) basiert [HLRS 1999a]. Dies ermöglichte die zügige Portierung von 3k3d auf Parallelrechnern der Cray T3E Klasse im Rahmen dieser Diplomarbeit, so dass das Programm 3k3d seit Juli 1998 auf der Cray T3E/512 im Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart als lauffähige Version vorliegt.

Der dokumentierte Sourcecode des Programms liegt dieser Diplomarbeit auf CD-ROM im Verzeichnis `../3k3d/` zur Einsicht bei. Zur Ausführung des Programms 3k3d benötigt man - neben dem compilierten Sourcecode - eine ASCII-Steuerungsdatei (Vgl. Anhang A) und eine binäre VBI-Startdatei (Vgl. Anhang B), die sowohl die Simulationsparameter als auch die Anfangsbedingung der Numerik enthält. Das Programm wird mit dem Namen der ASCII-Steuerungsdatei als Argument gestartet.

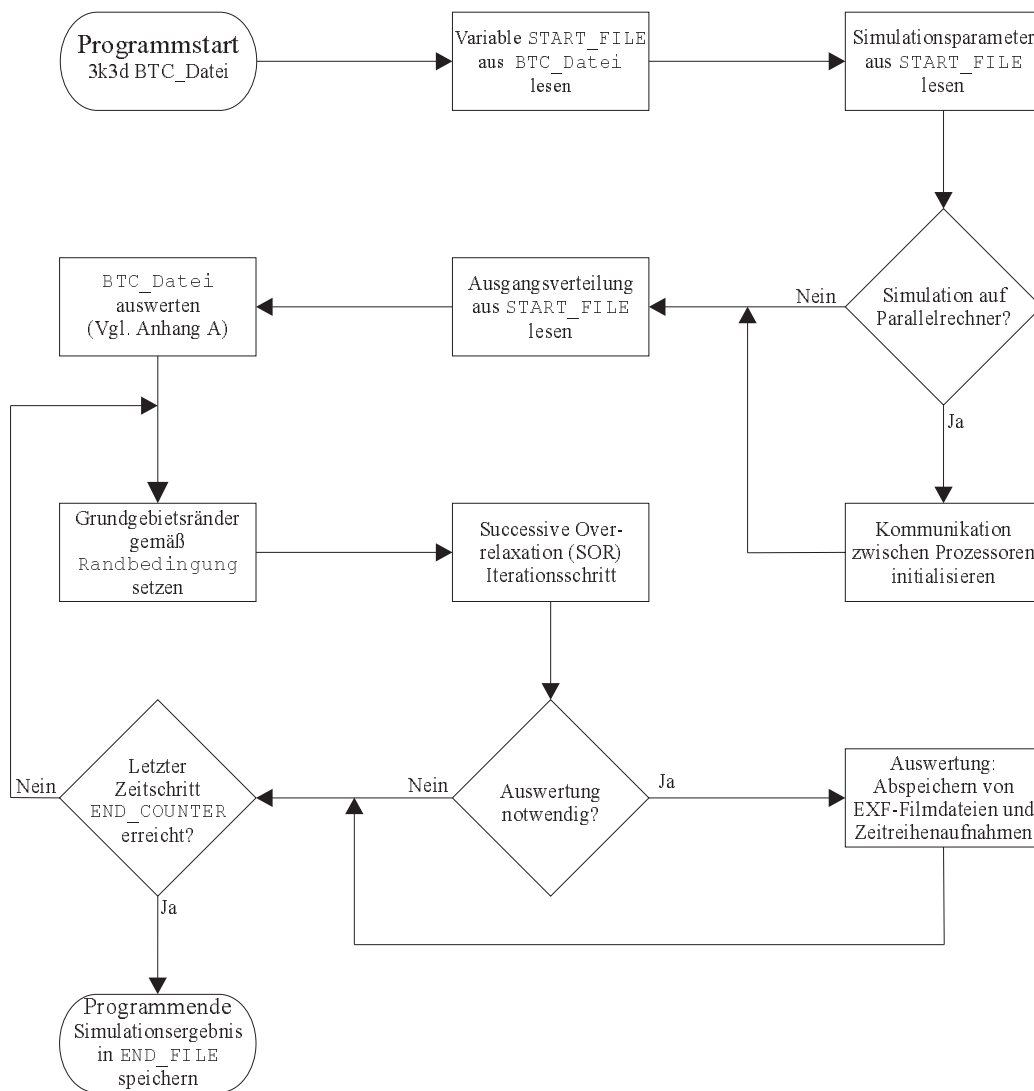


Abbildung 2.3: Flussdiagramm des Programms 3k3d: Das Programm 3k3d wird mit dem Namen der kompilierten EXE-Datei und dem Namen einer ASCII-Steuerungsdatei BTC\_Datei als Argument gestartet. In der BTC-Datei können verschiedenen Variablen Werte zugewiesen werden, dies ist ausführlich im Anhang A dokumentiert. Die in diesem Flussdiagramm erwähnten Variablen START\_FILE und END\_FILE enthalten die Namen von binären VBI-Dateien (Vgl. Anhang B), welche die Simulationsparameter und die Anfangs- bzw. Endverteilung der Simulation enthalten. Der Zeitpunkt der Endverteilung wird durch das Produkt  $(\text{END\_COUNTER} \cdot \text{ht})$  vorgegeben, wobei  $\text{ht}$  der Zeitschrittweite  $\delta_t$  entspricht.

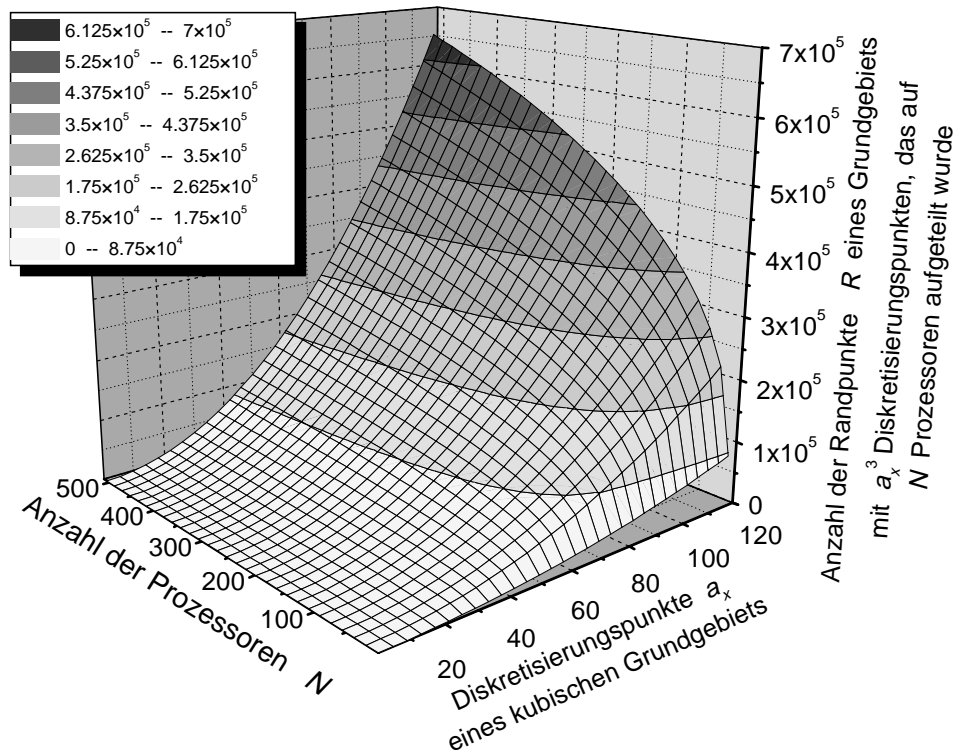


Abbildung 2.4: Dargestellt ist die Anzahl der Randpunkte  $R$  eines kubischen Grundgebiets der Diskretisierung  $a_x^3$ , das zur Bearbeitung auf  $N$  Prozessoren aufgeteilt ist. Die Anzahl der Randpunkte hängt nach (2.28) von der Kantenlänge  $a_x$  des Grundgebiets und der Anzahl  $N$  der verwendeten Prozessoren ab. Da die Prozessoren die Randpunkte zur Koordinierung der Numerik verwenden, ist die Anzahl der Randpunkte ein Maß für den Kommunikationsaufwand der Parallelisierung.

Die Ausgabe der Lösungen des dreikomponentigen Reaktions-Diffusions-Systems erfolgt in Form von binären VBI-Dateien und binären Filmdateien der Endung EXF (Vgl. Anhang B). Desweiteren kann eine Zeitreihe des normierten Aktivatorintegrals (4.2) als ASCII-Datei angelegt werden.

## 2.4.2 Die Performance des parallelen Programms 3k3d

### Die Untersuchung der Performance

Die Leistungsaspekte (Performance) eines parallelen Programms ändern sich mit der Anzahl  $N$  der eingesetzten Prozessoren. Dies ist darauf zurückzuführen, dass jeder Grundgebietsteil  $\mathbb{G}_i$  (2.26), der von einem Prozessor

bearbeitet wird, mit Randpunkten umgeben wird. Diese dienen den einzelnen Prozessoren unter anderem zur Koordinierung der Numerik, so dass der Kommunikationsaufwand linear mit der Anzahl der Randpunkte  $R$  eines aufgeteilten Grundgebiets wächst.

Um eine Vorstellung von dem Zusammenhang zwischen der Diskretisierung  $a_x^3$  eines kubischen Grundgebiets  $\mathbb{G}$ , der zur Parallelisierung eingesetzten Prozessoren  $N$  und der Gesamtzahl der Randpunkte  $R$  des diskretisierten Grundgebiets zu bekommen, muss über die Randpunkte  $R_i$  der Grundgebietsteile  $\mathbb{G}_i$  (2.26) summiert werden. Diese Randpunkte  $R_i$  befinden sich auf den sechs Randflächen der Grundgebietsteile  $\mathbb{G}_i$ . Da jedes  $\mathbb{G}_i$  im Durchschnitt über  $\frac{a_x^3}{N}$  Diskretisierungspunkten verfügt, berechnet sich die Anzahl der Randpunkte auf einer Randfläche zu

$$\left( \sqrt[3]{\frac{a_x^3}{N}} \right)^2 = \left( \frac{a_x}{\sqrt[3]{N}} \right)^2, \quad (2.27)$$

entsprechend ergibt die Gesamtzahl  $R$  aller Randpunkte

$$R = \sum_{i=1}^N R_i = \sum_{i=1}^N 6 \left( \frac{a_x}{\sqrt[3]{N}} \right)^2 = 6N \left( \frac{a_x}{\sqrt[3]{N}} \right)^2 = 6a_x^2 \sqrt[3]{N}. \quad (2.28)$$

Die graphische Darstellung dieses Zusammenhangs (Abb. 2.4) verdeutlicht die überproportionale Zunahme der Randpunkte  $R$  und somit auch des Kommunikationsaufwands, der mit großen Prozessorzahlen einhergeht.

Da sich die Rechenzeitkosten einer Simulation als Produkt aus Programmlaufzeit  $T$  und Anzahl  $N$  der verwendeten Prozessoren ergibt, und die Prozessoren durch den nichtlinear wachsenden Kommunikationsaufwand ausgebremst werden, lohnt es sich nicht eine Simulation mit beliebig vielen Prozessoren zu parallelisieren.

Die Untersuchung dieses Zusammenhangs wird durch den Wunsch nach einem günstigen Verhältnis zwischen Programmlaufzeit und Rechenzeitkosten motiviert und führt zu der Definition der Leistungsaspekte (Performance) eines parallelen Programms. Da die Leistungsaspekte auch wesentlich von der Hardware der verwendeten Parallelrechner abhängen, werden diese auf den Parallelrechnern Intel Paragon und Cray T3E/512 einzeln untersucht.

### Definition der Leistungsaspekte paralleler Programme

Die Leistungsaspekte eines parallelen Programms werden mit den Größen Parallelitätsgewinn (Speedup)  $S_p$ , Effizienz der Parallelisierung  $S_E$  und Skalierungsgewinn (Scaleup)  $S_k$  gemessen [Bräunl, S.247 f.].

Diese Größen basieren allesamt auf der Laufzeit  $T(K, N)$  des parallelen Programms, das ein Problem der Größe  $K$  auf  $N$  Prozessoren löst. Dabei wird die Laufzeit als der Zeitraum definiert, der vom Beginn des ersten Programmprozesses bis zum Ende des letzten Prozesses verstreicht [Burkhart 1997, S.496]. Die Problemgröße  $K$  stellt in diesem Fall die Anzahl der Diskretisierungspunkte des Grundgebiets dar. Aus der Messgröße  $T(K, N)$  leitet sich der Parallelitätsgewinn  $S_p(n)$  (Speedup) als das Verhältnis der Laufzeit  $T(K, 1)$  auf einem Prozessor und der Laufzeit  $T(K, N)$  auf  $N$  Prozessoren bei konstanter Problemgröße  $K$  mit

$$S_p(N) := \frac{T(K, 1)}{T(K, N)} \text{ und } K = \text{const} \quad (2.29)$$

ab [Bräunl, S.248]. Die Überlegung, dass  $N$  Prozessoren ein gegebenes Problem bestenfalls  $N$ -Mal schneller als ein einzelner Prozessor lösen können und somit

$$\max(S_p(N)) = N \quad (2.30)$$

der maximal mögliche Gewinn ist, trifft nicht für das Programm 3k3d zu. Dies ist darauf zurückzuführen, dass realistische Problemstellungen die Grenzen des Prozessorcaches eines einzelnen Computers erreichen. Die Auslagerung der überschüssigen Daten in den Arbeitsspeicher kann dann so viel Zeit kosten, dass der Parallelitätsgewinn  $S_p(N)$  einer  $N$  Prozessorrechnung größer als  $N$  wird.

Unabhängig von dieser Feststellung wird die Effizienz der Parallelisierung  $S_E(N)$  als Parallelitätsgewinn  $S_p(N)$  relativ zum theoretisch maximal erreichbaren Parallelitätsgewinn (2.30) definiert:

$$S_E(N) := \frac{S_p(N)}{N} \quad (2.31)$$

[Bräunl, S.248]. Die Angabe der Effizienz  $S_E(N)$  in Prozent gibt eine Auskunft darüber, wie viel Prozent des maximal erreichbaren Parallelitätsgewinns (2.29) erzielt werden.

Die Abnahme der Effizienz eines parallelen Programms mit dem Kehrwert der Prozessoranzahl ( $\frac{1}{N}$ -Hürde), führt zu dem Schluß, dass es sich nicht lohnt ein Problem mit vielen Prozessoren zu parallelisieren. Da jedoch eine größere Parallelität im Allgemeinen auch die Lösung größerer Probleme nach sich zieht [Gustafson 1988], sinkt der sequentielle Anteil eines Programms relativ zur Problemgröße, weshalb die  $\frac{1}{N}$ -Hürde der Effizienz faktisch überwunden wird. Hierzu definiert man den Skalierungsgewinn (Scaleup)  $S_k(K)$  eines Parallelprogramms wie folgt [Reuter 1992, S.73]: Wenn  $T(K, 1)$  die Laufzeit eines

Programms der Problemgröße  $K$  auf einem Prozessor ist und

$$T(K, 1) = T(L, N) \text{ für } L > K \quad (2.32)$$

gilt, dann definiert sich der Skalierungsgewinn  $S_k(N)$  zu:

$$S_k(N) = \frac{L}{K}. \quad (2.33)$$

Dies ist also ein Maß dafür, um wie viel größer ein Problem bei konstanter Rechenzeit und größerer Parallelität gewählt werden kann.

### Die Messung der Leistungsaspekte

Für die Messung des Parallelitätsgewinns  $S_p(N)$  (2.29) und der Effizienz der Parallelisierung  $S_E(N)$  (2.31) wurden die Laufzeit  $T(K, N)$  einer wohldefinierten Simulation  $K = \text{const}$  mit dem Programm 3k3d in Abhängigkeit von der Prozessoranzahl  $N$  gemessen. Dabei wurde die zeitliche Entwicklung eines Grundgebietes der Größe  $1^3$  und der Diskretisierung  $36^3$  über 500 Zeitschritte berechnet. Der Parallelitätsgewinn und die Effizienz der Parallelisierung ergeben sich dann nach (2.29) und (2.31).

Zur Bestimmung des Skalierungsgewinns (2.33) wurde die Laufzeit einer Simulation mit der Diskretisierung  $K = 15^3$  auf einem Prozessor, also  $T(K = 15^3, N = 1)$  gemessen. Danach wurde die Anzahl der Prozessoren auf  $M$  erhöht und die Anzahl der Diskretisierungspunkte  $L$  so weit vergrößert, dass (2.32) mit einer geduldeten Abweichung von 10% erfüllt wurde:

$$\Delta T = \frac{|T(L, M) - T(K = 15^3, L = 1)|}{T(K = 15^3, L = 1)} < 10\% \quad (2.34)$$

Diese relative Laufzeitabweichung  $\Delta T$  wird bei der Berechnung des Skalierungsgewinns  $S_k(N)$  nach (2.33) als relativer Fehler des Skalierungsgewinns  $\Delta S_k$  gewertet:

$$\Delta S_k = \Delta T. \quad (2.35)$$

### Die Performance des Intel Paragon

Der Parallelrechner Intel Paragon besteht aus 140 Rechenknoten, die in einem rechteckigen Gitter angeordnet sind. Jeder Knoten setzt sich jeweils aus einem Rechen- und einem Kommunikationsprozessor des Typs Intel i860 zusammen. Diese arbeiten mit einer Taktfrequenz von 50 MHz und verfügen über 16 MByte Arbeitsspeicher [Ölker 1995, S. 33 ff.].



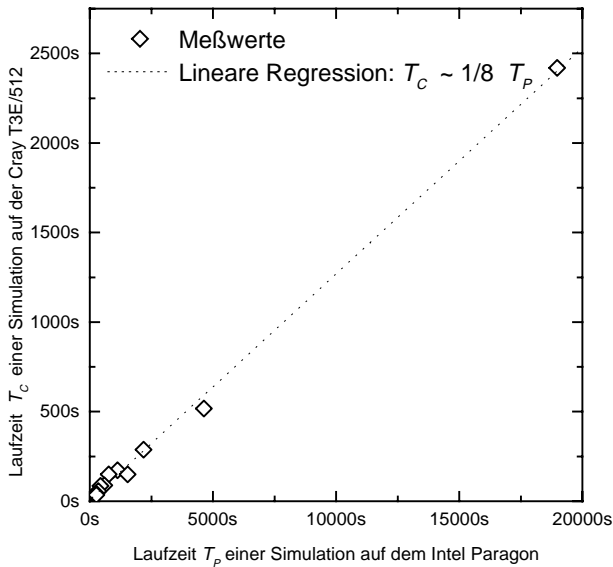


Abbildung 2.5: Vergleich der Laufzeiten einer Simulation auf dem Intel Paragon  $T_P$  und der Cray T3E/512  $T_C$ , die jeweils mit verschiedenen Prozessoranzahlen  $N$  durchgeführt wurden. Die lineare Regression zeigt, dass die Simulationen auf der Cray T3E/512 um einen Faktor acht schneller als auf dem Intel Paragon gerechnet werden.

Der Paragon des Höchstleistungsrechenzentrums Jülich (HLRZ) wurde im Juni 1998 abgeschaltet, da mittlerweile erheblich leistungsfähigere Parallelrechner zur Verfügung stehen. Diese zeichnen sich vor Allem dadurch aus, dass sie schnellere Prozessoren in größerer Anzahl zur Verfügung stellen. Ein Vergleich der Laufzeit des Programms 3k3d auf dem Intel Paragon und einem Parallelrechner des Typs Cray T3E zeigt, dass das Programm 3k3d auf letzterem um einen Faktor acht schneller ausgeführt wird (Vgl. Abbildung 2.5).

Der Parallelitätsgewinn  $S_p$  des Programms 3k3d streut um einen linearen Verlauf (Abb. 2.6a). Dies ist darauf zurückzuführen, dass verschiedene Prozessoranzahlen  $N$  das Grundgebiet unterschiedlich gut aufteilen können. Hier gilt allgemein: Je weniger Randflächen die einzelnen Teile  $\mathbb{G}_i$  des Grundgebietes besitzen, desto weniger Kommunikationsaufwand muss betrieben werden, um die Numerik zu koordinieren.

Trotz der Streuung des Parallelitätsgewinns ist deutlich zu erkennen, dass es für  $N = 125$  Prozessoren einen erheblichen Einbruch im Parallelitätsgewinn  $S_p(N)$  gibt. Dies kann nicht nur durch eine ungünstige Grundgebietsaufteilung erklärt werden. Vielmehr führt eine überproportional große Zunahme der Randflächen zu einem hohen Kommunikationsaufwand (Vgl. Abb. 2.4), der den Parallelrechner erheblich auslastet und somit zu längeren Wartezeiten der einzelnen Prozessoren führt. Dies schmälert den Parallelitätsgewinn. Es ist also ungünstig auf dem Paragon Simulationen mit großen Prozessoranzahlen  $N = 125$  rechnen zu lassen.

Die Effizienz der Parallelisierung  $S_E(N)$  (2.31) zeigt ebenfalls sehr deutlich, dass Simulationen mit großen Prozessoranzahlen als ungünstig einzustufen

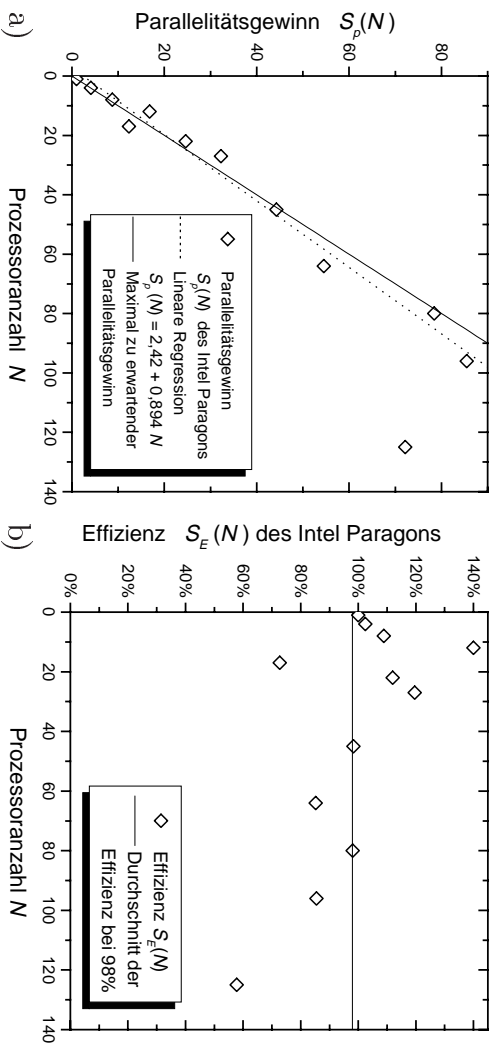


Abbildung 2.6: Parallelitätsgewinn  $S_p(N)$  a) und Effizienz  $S_e(N)$  b) des Paragons in Abhängigkeit von der Prozessoranzahl  $N$ . Die Diagramme dieser Leistungsaspekte zeigen, dass das Programm *3k3d* auf dem Intel Paragon für Prozessorzahlen  $N < 100$  eine sehr gute Performance aufweist und erst bei großen Prozessorzahlen  $N = 125$  erhebliche Einbußen in der Performance festzustellen sind.

sind, da die Effizienz für  $N = 125$  auf 57,7% einbricht (Abb. 2.6b), es werden also nur noch knapp 60% des maximal möglichen Parallelitätsgewinns erzielt. Ebenfalls erkennbar wird die ungünstige Grundgebietsaufteilung bei  $N = 17$ , was nicht weiter verwundert, wenn man sich verdeutlicht, dass eine günstige Grundgebietsaufteilung jedem Prozessor eine gleiche Anzahl von Diskretisierungspunkten zuweist, die jeweils Teilgebiete mit kleinen Randflächen ergeben. Dementsprechend schwierig sind diese Anforderungen zu erfüllen, wenn die Anzahl  $N$  der Prozessoren eine Primzahl ist.

Da der Skalierungsgewinn des Paragons innerhalb der Fehlergrenzen linear verläuft (Abb. 2.7), könnte man annehmen, dass es sich durchaus lohnt auf dem Paragon hohe Grundgebietsdiskretisierungen mit großen Prozessoranzahlen zu rechnen. Aufgrund der langsamen 1860 Prozessoren des Paragons, die zudem noch in geringer Anzahl zur Verfügung stehen, wäre es jedoch äußerst ineffektiv, auf dem Paragon zum Beispiel Quasiteilchenverschmelzungen zu simulieren (Vgl. Abb. 4.5), die Diskretisierungen von bis zu  $120 \times 160 \times 120$  benötigen. Trotz des guten Skalierungsgewinns sollten auf dem Paragon keine größeren Grundgebietsdiskretisierungen als  $60 \times 60 \times 60$  simuliert werden.

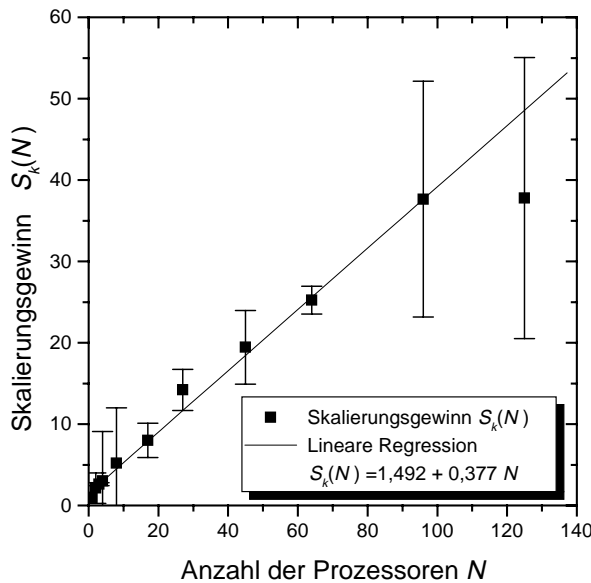


Abbildung 2.7: Der Skalierungsgewinn  $S_k(N)$  des Paragons in Abhängigkeit von der Prozessoranzahl  $N$  verläuft innerhalb der Fehlerbereiche (2.34) linear. Dies spricht eigentlich dafür auf dem Paragon große Grundgebietsdiskretisierungen mit großen Prozessoranzahlen zu rechnen. Allerdings ist es aufgrund der langsamen i860 Prozessoren des Paragon, von denen lediglich 128 zur Verfügung stehen, nicht effektiv, Grundgebietsdiskretisierungen von mehr als  $60 \times 60 \times 60$  zu rechnen.

### Die Performance der Cray T3E/512

Der Parallelrechner Cray T3E/512 des Hochleistungsrechenzentrums Stuttgart (HLRS) besteht aus 512 Alpha-Prozessoren, die mit 450MHz Taktfrequenz betrieben werden und jeweils über 128MByte Arbeitsspeicher verfügen [HLRS 1999b]. Diese Rechenknoten sind in einem dreidimensionalen Torus angeordnet [Oed 1996, S.7], so dass kurze Kommunikationszeiten gewährleistet sind.

Betrachtet man den Parallelitätsgewinn  $S_p(N)$  (2.29) der Cray T3E (Vgl. Abb. 2.8a), so fällt die gute Performance für Prozessorzahlen  $N \leq 27$  auf, die für größere Prozessorzahlen  $27 < N < 243$  zwar abnimmt, aber erst für  $N \approx 343$  so erheblich einbricht, dass es nicht als lohnenswert bezeichnet werden kann, eine Simulation mit kleiner Grundgebietsdiskretisierung durch derart große Prozessoranzahlen zu parallelisieren.

Die Untersuchung der Effizienz  $S_E(N)$  der Parallelisierung (Abb. 2.8b) bestätigt dieses Bild. Hier wird der Leistungsabfall bei größeren Prozessorzahlen  $N \geq 45$  durch eine niedrige durchschnittliche Effizienz von  $\overline{S_E}(N) = 67,8\%$  deutlich, während kleine Prozessorenanzahlen den maximal zu erwartenden Parallelitätsgewinn mit durchschnittlich  $S_E(N) = 101,5\%$  noch übertreffen. Bei sehr großen Prozessorzahlen wird der maximal zu erwartende Parallelitätsgewinn (2.30) nur noch zu knapp 30% erreicht.

Der Skalierungsgewinn  $S_k(N)$  (2.33) der Cray T3E in Abhängigkeit der Prozessoranzahl  $N$  weist innerhalb der Fehlerbereiche (2.34) zwei Bereiche mit linearem Anstieg auf, dabei ergibt die lineare Regression für kleine Prozes-

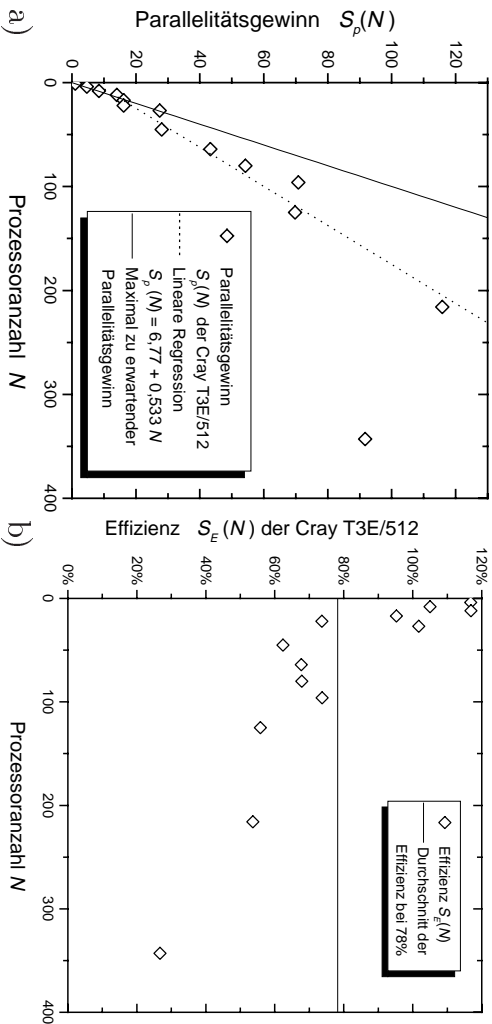


Abbildung 2.8: Parallelitätsgewinn  $S_p(N)$  a) und Effizienz  $S_e(N)$  b) der Cray T3E/512 in Abhängigkeit von der Prozessoranzahl  $N$ . Die Diagramme dienen Leistungsaspekte zeigen, dass die Parallelisierung des Programms 3k3d für große Prozessorzahlen  $N \geq 216$  erhebliche Performanceeinbußen hat. In diesem Bereich werden nur noch knapp 30% des maximal erreichbaren Parallelitätsgewinns erreicht.

sorenanzahlen  $N \leq 40$  eine Steigung von

$$\left. \frac{\partial S_k(N)}{\partial N} \right|_{N \leq 40} = 0.5 \quad (2.36)$$

(Abb. 2.9). Diese sinkt für größere Prozessoranzahlen zwar auf 0.167 ab, entscheidend ist an dieser Stelle allerdings der lineare Verlauf, der darauf hinweist, dass es sich durchaus lohnt auf der Cray T3E/512 hohe Grundgebotsdiskretisierungen mit großen Prozessoranzahlen zu rechnen.

### Diskussion der parallelen Performance

Aus der Betrachtung der Leistungsaspekte (Performance) des Programms 3k3d auf den Parallelrechnern Intel Paragon und Cray T3E/512 lässt sich allgemein feststellen, dass Simulationen mit kleinen Prozessoranzahlen  $N \leq 27$  eine gute Performance haben. Es ist also sinnvoll mit wenigen Prozessoren längere Simulationen rechnen zu lassen, da sich die Rechenzeitkosten einer Simulation als Produkt von der Programmlaufzeit  $T$  und der Anzahl der verwendeten Prozessoren ergibt.

Ein direkter Vergleich der Parallelrechner Intel Paragon und Cray T3E/512 zeigt zum Einen eine um den Faktor Acht höhere Geschwindigkeit der Cray

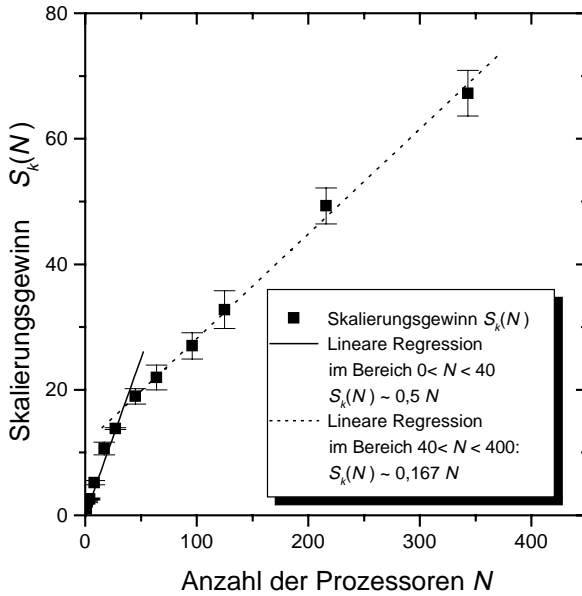


Abbildung 2.9: Der Skalierungsgewinn  $S_k(N)$  der Cray T3E/512 in Abhängigkeit von der Prozessoranzahl  $N$  weist innerhalb der Fehlergrenzen (2.34) zwei lineare Bereiche mit unterschiedlichen Steigungen auf. Entscheidend ist an dieser Stelle der lineare Zusammenhang zwischen Skalierungsgewinn und Prozessoranzahl, der darauf hinweist, dass es sich durchaus lohnt, auf der Cray T3E/512 hohe Grundgebiedsdiscretisierungen mit großen Prozessoranzahlen zu rechnen.

T3E/512 gegenüber dem Intel Paragon und zum Anderen eine bessere parallele Performance des Paragons gegenüber der Cray T3E/512 für kleine Prozessoranzahlen  $N < 100$ . Dieses verzerrte Bild kommt dadurch zustande, dass alle Leistungsaspekte auf eine Ein-Prozessorrechnung  $N = 1$  bezogen werden, bei denen der Intel Paragon an seine absoluten Leistungsgrenzen herangeführt wird. Dies wertet alle Mehr-Prozessorrechnungen des Paragons erheblich auf.

Für größere Prozessoranzahlen  $N > 100$  gleichen sich die Leistungsaspekte der beiden Parallelrechner aneinander an, wobei natürlich darauf hingewiesen werden muss, dass auf dem Paragon nicht mehr als 128 Prozessoren in die Untersuchungen miteinbezogen werden konnten.

Da die Cray T3E/512 auch für große Prozessoranzahlen  $N > 100$  eine beachtliche Performance aufweist, ist dieser Parallelrechner bestens geeignet hohe Grundgebiedsdiscretisierungen mit großen Prozessoranzahlen zu rechnen. Der Paragon ist dagegen aufgrund seiner wenigen, relativ langsamen i860 Prozessoren nur für Simulationen mit keiner höheren Diskretisierung als  $60 \times 60 \times 60$  geeignet.

# Kapitel 3

## Die Bifurkation vom stationären zum laufenden Quasiteilchen

### 3.1 Der Bezug dieser Untersuchung

Bereits in Abschnitt 1.4.6 wurde der Mechanismus erläutert, der dazu führt, dass sich stationäre Quasiteilchen in Bewegung setzen. Diese Bifurkation der Geschwindigkeit  $c$  eines Quasiteilchens kann im Grenzfall  $D_v, \theta \rightarrow 0$  in Abhängigkeit des Kontrollparameters  $\tau$  analytisch untersucht werden. Dabei wird der Bifurkationspunkt  $\tau_c$  und die Geschwindigkeit  $c(\tau)$  eines Quasiteilchens in der Nähe des Bifurkationspunktes aus der Verteilung  $(u_{QT}, v_{QT}, w_{QT})$  eines stationären Quasiteilchens bestimmt.

Da diese Ergebnisse bisher lediglich mit der Simulation von Quasiteilchengeschwindigkeiten auf ein- und zweidimensionalen Grundgebieten überprüft worden sind [Or-Guil et al. 1998], behandelt dieses Kapitel den Vergleich der analytischen Ergebnisse mit der Simulation von Quasiteilchengeschwindigkeiten auf dreidimensionalen Grundgebieten.

### 3.2 Die analytischen Ergebnisse

Der Bifurkationspunkt  $\tau_c$  vom stationären zum laufenden Quasiteilchen wird von der Verteilung des stationären Quasiteilchens  $(u_{QT}, v_{QT}, w_{QT})$  bestimmt:

$$\tau_c = \frac{\left\langle \left( \frac{\partial}{\partial x} u_{QT} \right)^2 \right\rangle - \kappa_3 \theta \left\langle \left( \frac{\partial}{\partial x} w_{QT} \right)^2 \right\rangle}{\left\langle \left( \frac{\partial}{\partial x} v_{QT} \right)^2 \right\rangle} \quad (3.1)$$

[Or-Guil et al. 1998], wobei die äußeren Klammern  $\langle u \rangle$  die Bedeutung einer Integration über das gesamte Grundgebiet haben

$$\langle u \rangle := \int dx \int dy \int dz u. \quad (3.2)$$

Im Grenzfall  $D_v, \theta \rightarrow 0$  wird die Diffusion des langsamen Inhibitors  $v$  ausgeschaltet, so dass die Verteilung  $v_{QT}$  gleich der Aktivatorverteilung  $u_{QT}$  ist und die schnellstmögliche Reaktion des  $w$ -Inhibitors auf Änderungen des Aktivators ermöglicht wird. Dadurch kann die Geschwindigkeit  $c$  des laufenden Quasiteilchens in der Nähe des Bifurkationspunktes  $\tau_c$  durch

$$c^2 = (\tau - 1) \frac{\left\langle \left( \frac{\partial}{\partial x} v_{QT} \right)^2 \right\rangle}{\underbrace{\left\langle \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} v_{QT} \right)^2 \right\rangle}_{=:S}} \quad (3.3)$$

bestimmt werden. Sie wird durch eine Pitchfork-Bifurkation  $c(\tau)$  bezüglich des Zeitskalenparameters  $\tau$  gekennzeichnet. Desweiteren wird die Variable  $S$  als sogenannter Formparameter eingeführt.

Darüberhinaus lässt sich der Bifurkationspunkt  $\tau_c$  (3.1) in dem diskutierten Grenzfall zu

$$\tau'_c = \frac{\left\langle \left( \frac{\partial}{\partial x} u_{QT} \right)^2 \right\rangle}{\left\langle \left( \frac{\partial}{\partial x} v_{QT} \right)^2 \right\rangle} = 1 \quad (3.4)$$

vereinfachen, da die Verteilungen  $u_{QT}$  und  $v_{QT}$  des stationären Quasiteilchens durch  $D_v = 0$  identisch sind.

### 3.3 Die Durchführung des Vergleichs zwischen Analyse und Simulation

Um die analytisch bestimmbaren Bifurkationspunkte  $\tau_c$  (3.1) und  $\tau'_c$  (3.4), sowie die analytisch bestimmbare Geschwindigkeit  $c$  (3.3) berechnen zu können, muss ein ausrelaxiertes stationäres Quasiteilchen  $(u_{QT}, v_{QT}, w_{QT})$  als Lösung des dreikomponentigen dreidimensionalen Reaktions-Diffusions-Systems im Grenzfall  $D_v, \theta \rightarrow 0$  vorliegen. Aus dem Formparameter  $S$  des stationären Quasiteilchens wird die Ableitung des Geschwindigkeitsquadrates  $c^2(\tau)$  nach  $\tau$  als

$$\frac{\partial c^2(\tau)}{\partial \tau} = S \quad (3.5)$$

gemäß (3.3) ermittelt.

Um diese analytischen Ergebnisse mit Simulationen vergleichen zu können, müssen laufende Quasiteilchen als Lösung des dreikomponentigen dreidimensionalen Reaktions-Diffusions-Systems berechnet werden. Dabei können die Lösungen des dreikomponentigen Reaktions-Diffusions-Systems für zylindersymmetrische Schnitte der Quasiteilchen simuliert werden. Desweiteren wird der diskutierte Grenzfall  $\theta \rightarrow 0$  in der numerischen Simulation durch  $\theta = 0.01$  und  $\theta = 0.05$  genähert.

Um die Geschwindigkeit der simulierten Quasiteilchen  $c = |\dot{\underline{x}}_{QT}|$  zu bestimmen, bedarf es eines festen Bezugspunktes  $\underline{x}_{QT}$ . Dazu eignet sich zum Beispiel der Schwerpunkt  $\underline{x}_u$  der Aktivatorverteilung  $u_{QT}$  eines Quasiteilchens, welcher als gewichteter Mittelwert aller Diskretisierungspunkte berechnet wird, die einen Aktivatorschwellwert  $u_S$  überschreiten:

$$\underline{x}_u = \frac{\sum u(\underline{x}) \underline{x}}{\sum u(\underline{x})} \quad \forall \underline{x} \in \mathbb{G} : u(\underline{x}) \geq u_S. \quad (3.6)$$

Die Bestimmung der Aktivator Schwerpunkte  $\underline{x}_u$  erfolgt mit dem C-Programm `exf2a3k` (Vgl. Anhang C), so dass aus der Schwerpunktsbewegung  $\dot{\underline{x}}_u$  die Geschwindigkeit

$$c(\tau) = |\dot{\underline{x}}_u| \quad (3.7)$$

jeweils für den Simulationsparameter  $\tau$  berechnet werden kann. Trägt man die Quadrate der simulierten Quasiteilchengeschwindigkeiten gegen den Zeitskalenparameter  $\tau$  ab (Abb. 3.1), so kann  $\frac{\partial c^2(\tau)}{\partial \tau}$  durch lineare Regression bestimmt und mit dem Betrag des Formparameters  $S$  (3.5) verglichen werden.

### 3.4 Der Vergleich von Simulation und Analyse

Die durchgeführten Simulationen für  $\theta = 0.05$  und  $\theta = 0.01$  zur Bestimmung der Bifurkationspunkte vom stationären zum laufenden Quasiteilchen stimmen fast exakt mit dem Bifurkationspunkt  $\tau_c$  der Analytik (3.1) überein. Darüberhinaus wird deutlich, dass die Simulation mit  $\theta = 0.01$  den Grenzfall  $\theta \rightarrow 0$  besser approximiert als die Simulation mit  $\theta = 0.05$ , da letztere von dem analytischen Bifurkationspunkt  $\tau'_c = 1$  (3.4) um 2.5% abweicht, während erstere nur einen Fehler von 0.6% aufweist.



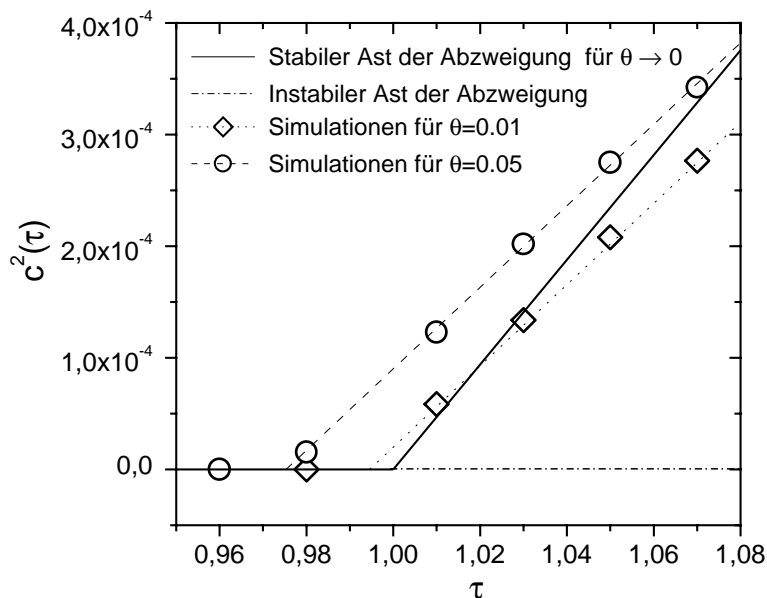


Abbildung 3.1: Vergleich des analytisch bestimmbaren Bifurkationspunktes vom stationären zum laufenden Quasiteilchen und der analytisch bestimmbaren Quasiteilchengeschwindigkeit in der Nähe des Bifurkationspunktes mit Simulationsergebnissen. Der Simulation liegen folgende Parameter zugrunde: Diskretisierung =  $40 \times 20 \times 1$ , Zylinder-Koordinaten,  $l_x = 0.75$ ,  $D_u = 4.67 \cdot 10^{-3}$ ,  $D_v = 0$ ,  $D_w = 0.01$ ,  $\lambda = 5.67$ ,  $\kappa_1 = -1.126$ ,  $\kappa_3 = 3.33$ , Ring-Randbedingung. Die Quasiteilchen werden für  $\tau > \tau_c$  instabil und bewegen sich mit der Geschwindigkeit  $c(\tau)$ . Während der Bifurkationspunkt  $\tau'_c = 1$  des Grenzfalls  $D_v, \theta \rightarrow 0$  in der Simulation bis auf einen Fehler von 2.5% mit der Analyse übereinstimmt, weist die Steigung der Geschwindigkeitsquadrate  $\frac{\partial c^2(\tau)}{\partial \tau}$  eine Abweichung von bis zu 22.4% auf. Diese enorme Abweichung zwischen Analyse und Simulation ist darauf zurückzuführen, dass die laufenden Quasiteilchen in diesem Grenzfall durch die Diskretisierung des Grundgebiets stark abgebremst werden.

Tabelle 3.1: Vergleich der aus Analyse und Simulation bestimmten Bifurkationspunkte, wobei die Simulationsergebnisse ausführlich in Abb. 3.1 dokumentiert sind.

	$\tau_c$ aus Simulation	$\tau_c$ aus (3.1)	Abweichung	$\tau'_c$ aus (3.4)	Abweichung
$\theta = 0.01$	0.9945	0.9959	0.1%	1	0.6%
$\theta = 0.05$	0.9753	0.9797	0.5%		2.5%

Der Vergleich der nach  $\tau$  abgeleiteten Geschwindigkeitsquadrate  $\frac{\partial c^2(\tau)}{\partial \tau}$  fällt dagegen erheblich schlechter aus, hier weichen die Geschwindigkeitssteigungen der simulierten laufenden Quasiteilchen um bis zu 22.4% von den Qua-

sichteilchengeschwindigkeiten des diskutierten theoretischen Grenzfalles ab:

Tabelle 3.2: Vergleich der aus Analyse und Simulation bestimmten Geschwindigkeitsquadrate der Quasiteilchen im Grenzfall  $D_v, \theta \rightarrow 0$ . Die Simulationsergebnisse sind ausführlich in Abb. 3.1 dokumentiert.

	$\frac{\partial c^2}{\partial \tau}$ aus Simulation	$\frac{\partial c^2}{\partial \tau}$ aus (3.3)	Abweichung
$\theta = 0.01$	$3.64 \cdot 10^{-4}$	$4.69 \cdot 10^{-4}$	22.4%
$\theta = 0.05$	$3.65 \cdot 10^{-4}$		22.2%

Da Analyse und Simulation bezüglich der Bifurkationspunkte zufriedenstellend miteinander übereinstimmen, der Geschwindigkeitsvergleich gleichzeitig jedoch große Abweichungen aufweist, scheint die numerische Lösung laufender dreidimensionaler Quasiteilchen fehlerbehaftet zu sein. So weisen beide Simulationen annähernd dieselben Steigungen ihrer Geschwindigkeitsquadrate  $\frac{\partial c^2(\tau)}{\partial \tau}$  auf, obwohl die Simulationen für unterschiedliche Zeitskalenparameter  $\theta = 0.05$  und  $\theta = 0.01$  auch unterschiedliche Steigungen der Geschwindigkeitsquadrate ergeben sollten.

Bei diesen Simulationen scheint die Geschwindigkeit der Quasiteilchen also weniger von den Parametern des Reaktions-Diffusions-Systems, als von systemunabhängigen Faktoren bestimmt zu werden. Vermutlich spielt hier die Diskretisierung des Grundgebiets eine entscheidende Rolle. Um den Einfluss des diskretisierten Grundgebiets zu verringern, müsste die Auflösung des Grundgebiets erheblich erhöht werden, so dass sich die Quasiteilchen mit einer ihren Systemparametern entsprechenden Geschwindigkeit fortbewegen könnten. Da dies mit einem sehr großen Rechenaufwand der Simulationen einhergeht, ist diese Möglichkeit bisher nicht überprüft worden.

# Kapitel 4

## Stoßende Quasiteilchen auf dreidimensionalen Grundgebieten

### 4.1 Klassifizierung des Stoßverhaltens von Quasiteilchen

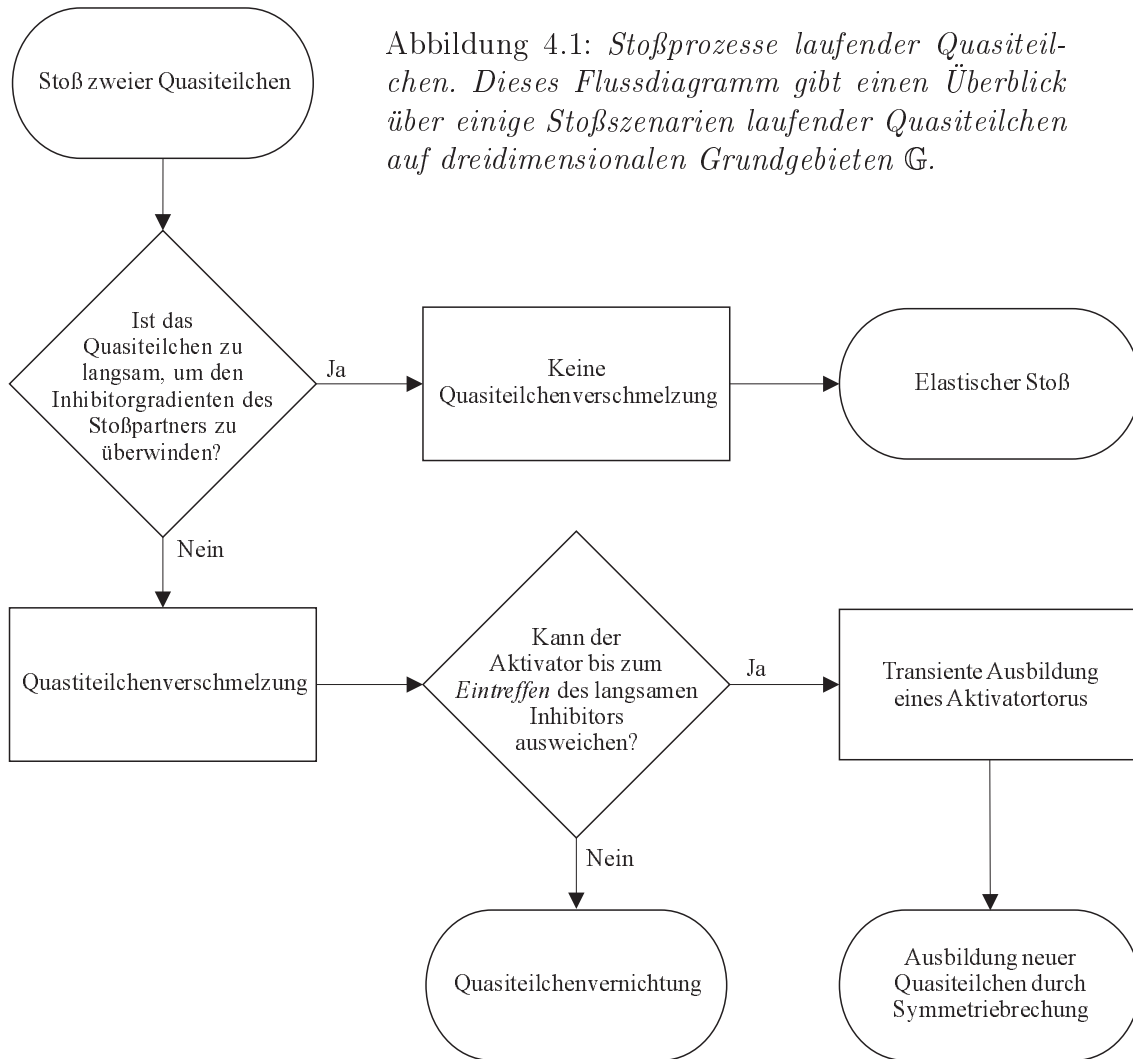
Nachdem bewegte Quasiteilchen als stabile Lösungen des dreikomponentigen Reaktions-Diffusions-Systems in den Kapiteln 1 und 3 vorgestellt wurden, stellt sich die Frage, wie mehrere dieser großamplitudigen laufenden Strukturen auf dreidimensionalen Grundgebieten miteinander wechselwirken.

Um diese Fragestellung systematisch zu untersuchen und um den Rechenzeitaufwand der hierfür notwendigen Simulationen in Grenzen zu halten, werden die Simulationen auf die Stoßprozesse von jeweils zwei laufenden Quasiteilchen beschränkt.

Die gezielte Untersuchung von Stoßprozessen wird dadurch ermöglicht, dass die Bewegungsrichtung  $\hat{c}$  eines Quasiteilchens durch den Versatz  $(\underline{x}_u - \underline{x}_v)$  des Aktivatorschwerpunkts  $\underline{x}_u$  (3.6) zum Schwerpunkt  $\underline{x}_v$  des langsamen Inhibitors bestimmt wird

$$\hat{c} = \frac{\underline{x}_u - \underline{x}_v}{|\underline{x}_u - \underline{x}_v|}. \quad (4.1)$$

Es können daher Quasiteilchen mit beliebiger Bewegungsrichtung erzeugt werden, weshalb wiederum zwei laufende ausrelaxierte Quasiteilchen genau so auf einem Grundgebiet  $\mathbb{G}$  angeordnet werden können, dass sie miteinander kollidieren. Da die Inhibitoren  $v$  und  $w$  im Allgemeinen weiter diffundieren als der Aktivator  $u$ , sehen die stoßenden Quasiteilchen bei der gegenseitigen



Annäherung zuerst die Inhibitorausläufer des Stoßpartners. Dies stellt eine Störung dar, die dazu führen kann, dass die ansonsten stabilen Quasiteilchen in einer bestimmten Entfernung zueinander verlöschen.

Da dieser Effekt bisher nur auf zweidimensionalen Grundgebieten simuliert wurde, werden im Folgenden ausschließlich Quasiteilchenstöße behandelt, bei denen die Teilchen beim Kontakt mit den Inhibitorausläufern des Stoßpartners nicht verlöschen.

In diesen Fällen müssen die Quasiteilchen bei der gegenseitigen Annäherung gegen den Inhibitorgradienten des Stoßpartners anlaufen. Sind die Quasiteilchen zu langsam um den Inhibitorgradienten zu überwinden, so stoßen die Quasiteilchen elastisch, ansonsten kommt es zu einer Verschmelzung der Quasiteilchen.

In diesem Fall hängt der weitere Verlauf des Stoßprozesses davon ab, wie weit der langsame Inhibitor  $v$  gegen den Aktivator  $u$  versetzt ist. Je größer der Versatz  $|\underline{x}_u - \underline{x}_v|$ , desto mehr Zeit steht dem Aktivator  $u$  zur Verfügung um dem herannahenden Inhibitor  $v$  auszuweichen. Verbleibt dem Aktivator  $u$  zu wenig Zeit zum Ausweichen, so kommt es zu einer Quasiteilchenvernichtung. Andernfalls bildet sich ein transienter Aktivator-torus, aus dem durch Symmetriebrechung neue Quasiteilchen entstehen.

## 4.2 Der elastische Stoß

Der elastische Stoß zweier Quasiteilchen verdeutlicht den Teilchencharakter dieser großamplitudigen Lösungen des dreikomponentigen Reaktions-Diffusions-Systems (1.6), da sich zwei Quasiteilchen beim elastischen Stoß ähnlich den Teilchen der klassischen Mechanik verhalten (Abb. 4.2a).

Im Grenzfall  $D_v, \theta \rightarrow 0$  kann dieser Stoß analytisch untersucht werden, da Aktivator- und langsame Inhibitorverteilung der laufenden Quasiteilchen gleich sind. Dadurch können die partiellen Differentialgleichungen des dreikomponentigen Reaktions-Diffusions-Systems (1.6) mittels einer Störungsrechnung auf gewöhnliche Differentialgleichungen reduziert werden

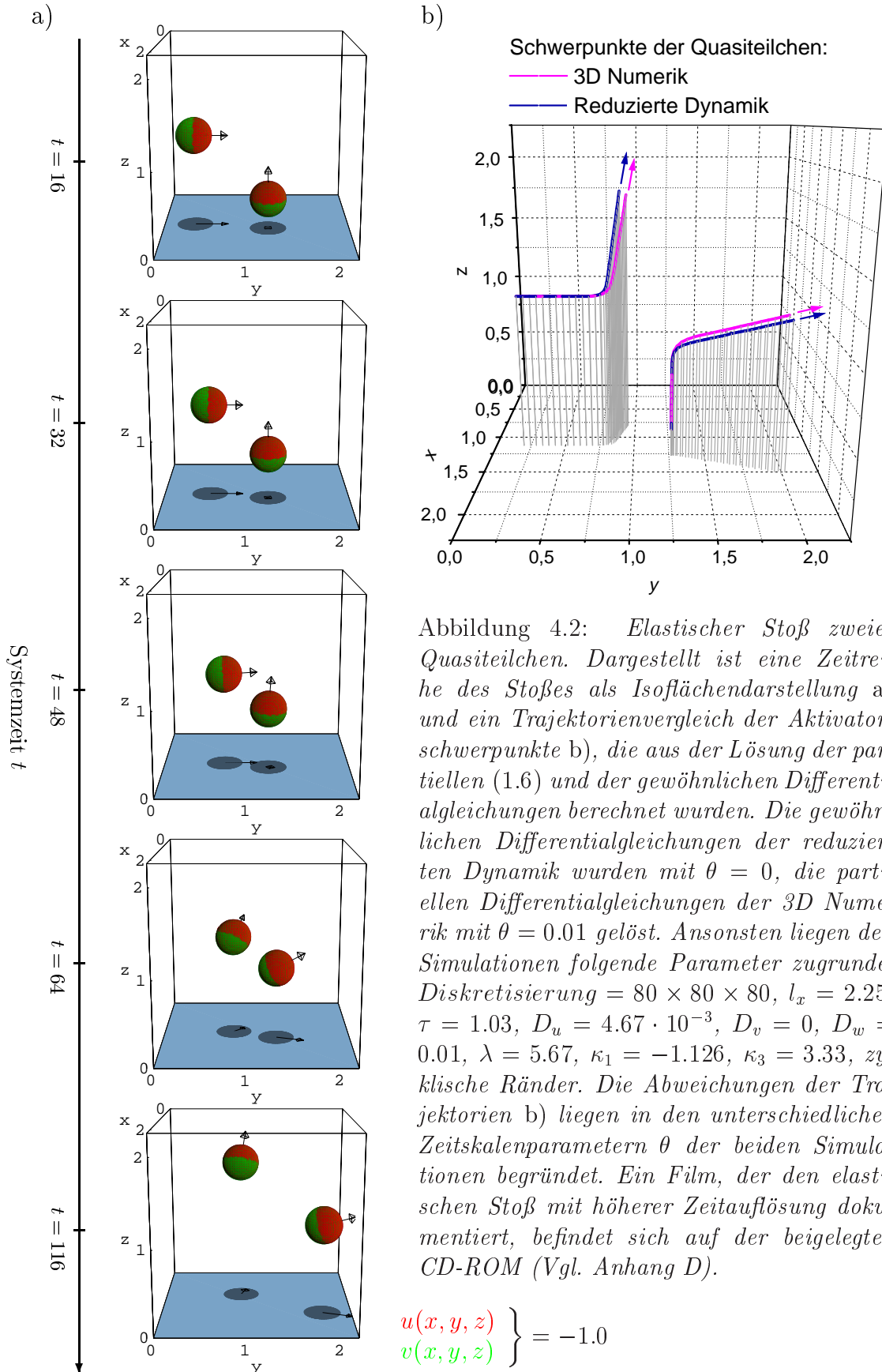
[Schenk 1999], wobei die Störungsrechnung in der Nähe des Bifurkationspunktes  $\tau_c = 1$  vom stehenden zum laufenden Quasiteilchen durchgeführt wird (Vgl. Kapitel 3).

Da der elastische Stoß zweier Quasiteilchen als zeitlich integrierte Kurve der Schwerpunktsbewegungen auf dem Grundgebiet dargestellt werden kann, können die Simulationen eines elastischen Stoßes, die als Lösung des partiellen (1.6) und des gewöhnlichen Differentialgleichungssystems berechnet wurden, miteinander verglichen werden (Abb. 4.2b).

## 4.3 Die Quasiteilchenverschmelzung

### 4.3.1 Das normierte Aktivatorintegral als Maß für die Quasiteilchenanzahl auf einem Grundgebiet

Da bei der Simulation von Quasiteilchenverschmelzungen sehr große Datenmengen entstehen, ist es zur zügigen Beurteilung des Stoßverhaltens notwendig auf die Zeitreihe eines charakteristischen Simulationwertes zugreifen zu können. Hierfür eignet sich das normierte Aktivatorintegral  $m_A$  aufgrund



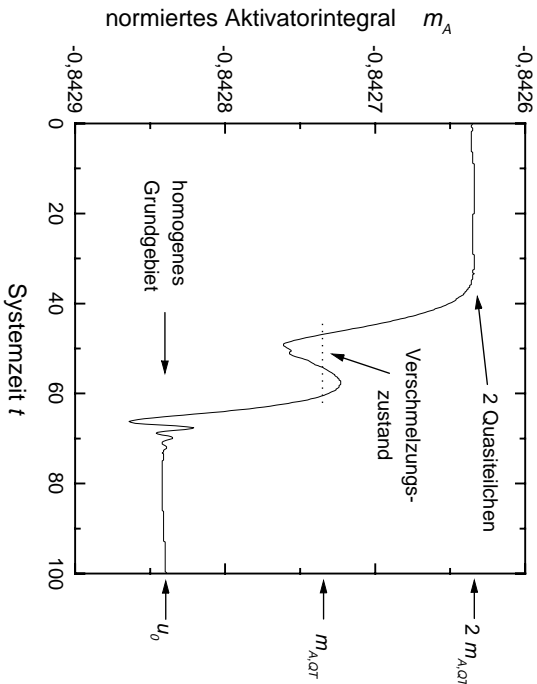


Abbildung 4.3: Das normierte Aktivatorintegral  $m_A$  als Maß für die Quasiteilchenanzahl bei einer Quasiteilchenverwichtung. Die Parameter dieser Simulation entsprechen der Simulation in Abb. 4.4. Da bekannt ist, dass sich zu Beginn  $t=0$  der Simulation zwei Quasiteilchen auf dem Grundgebiet befinden und das Grundgebiet am Ende der Simulation  $t=100$  homogen ist, kann

seiner Definition

$$m_A := \frac{1}{\|\mathbb{G}\|} \int_{\mathbb{G}} u \, dV \quad (4.2)$$

besonders, da es im Fall eines homogenen Grundgebiets (1.7) den Wert des homogenen Aktivatorzustands  $u_0$  liefert

$$m_{A,0} = u_0, \quad (4.3)$$

welcher bei diesen Simulationen ein stabiler Fixpunkt war, der sich nach (1.14) berechnen lässt.

Da die Anzahl  $N_{QT}(t=0)$  der Quasiteilchen auf einem Grundgebiet  $\mathbb{G}$  zu Beginn der Simulation ebenfalls bekannt ist, kann die Aktivatormasse  $m_{A,QT}$  eines Quasiteilchens über

$$m_{A,QT} = \frac{m_A - m_{A,0}}{N_{QT}} = \frac{m_A - u_0}{N_{QT}} \quad (4.4)$$

abgeschätzt werden.

Andererseits kann man im Laufe der Simulation über (4.4) und der Zeitreihe des normierten Aktivatorintegrals  $m_A(t)$  Aussagen über die aktuelle Anzahl  $N_{QT}(t)$  der Quasiteilchenanzahl auf dem Grundgebiet  $\mathbb{G}$  machen (Abb. 4.3)

$$N_{QT}(t) = \frac{m_A(t) - u_0}{m_{A,QT}}. \quad (4.5)$$

### 4.3.2 Die Darstellung von Quasiteilchenverschmelzungen

Die Quasiteilchenvernichtung und die kurzzeitige Quasiteilchenverschmelzung mit transientem Aktivatorring werden im Folgenden anhand ausgewählter Simulationen diskutiert, die in den Abbildungen 4.4 und 4.5 dargestellt sind. Dabei werden jeweils fünf Momentaufnahmen (Reihen der Abbildungen 4.4 und 4.5) herausgegriffen, bei denen charakteristische Vorgänge der Stoßprozesse deutlich hervortreten.

Um verschiedene Details der Stoßprozesse diskutieren zu können, wird jede Momentaufnahme in drei verschiedenen Diagrammen betrachtet.

**Linke Spalte:** Die linken Spalten der Abbildungen 4.4 und 4.5 zeigen die Zeitreihe des normierten Aktivatorintegrals über den gesamten Stoßprozess. Eine Raute markiert in diesen Zeitreihen jeweils den Wert des normierten Aktivatorintegrals  $m_A(t)$  (4.2) zum Zeitpunkt  $t$  der Momentaufnahme. Dies ermöglicht es, die jeweilige Momentaufnahme in den Gesamtzusammenhang des Stoßes einzuordnen.

**Mittlere Spalte:** Die mittleren Spalten der Abbildungen 4.4 und 4.5 zeigen Isoflächendarstellungen des Aktivators  $u$  (rot) und des langsamen Inhibitors  $v$  (grün), wobei die Bewegungsrichtung der Quasiteilchen durch Vektoren angezeigt wird, deren Aufpunkt sich jeweils im Schwerpunkt  $\underline{x}_u$  des Aktivators befindet. Um die räumliche Anordnung der Quasiteilchen zueinander sichtbar zu machen, werden die Isoflächen und die Bewegungsvektoren als Schatten auf die  $x \times y$ -Ebene projiziert.

**Rechte Spalte:** Die dritten Spalten der Abbildungen 4.4 und 4.5 zeigen jeweils charakteristische Schnitte der Verteilungen, in denen der Aktivator  $u$  (rot), der langsame Inhibitor  $v$  (grün) und der schnelle Inhibitor  $w$  (blau) dargestellt werden. Diese Schnitte vermitteln einen Eindruck über die Amplituden, Gradienten und die Lage der Komponenten  $u$ ,  $v$  und  $w$  zueinander.

### 4.3.3 Die Quasiteilchenvernichtung

Die Vernichtung zweier Quasiteilchen wird in diesem Abschnitt qualitativ anhand der Simulation in Abbildung 4.4 diskutiert, wobei fünf Momentaufnahmen des Stoßes (Reihen in Abb. 4.4) detailliert betrachtet werden.

**Reihe 1 ( $t = 22$ ):** Die erste Momentaufnahme zeigt zwei Quasiteilchen, die sich frontal aufeinander zubewegen. Aus der Zeitreihe des normierten Aktivatorintegrals ist zu entnehmen, dass es sich hierbei um zwei ausrelaxierte Quasiteilchen handelt, da das normierte Aktivatorintegral in den ersten 30 Systemzeiteinheiten fast konstant ist (Vgl. auch Abb. 4.3). Die Isoflächendarstellung zeigt den großen Versatz des langsamen



Abbildung 4.4: *Quasiteilchenvernichtung (folgende Seite). Dargestellt sind in fünf Reihen jeweils Momentaufnahmen einer Quasiteilchenvernichtung, wobei die Zeit von oben nach unten verläuft. Jede Momentaufnahme besteht aus drei Diagrammen. Die linke Spalte zeigt das normierte Aktivatorintegral (4.2) des gesamten Stoßprozesses mit einer Raute als Zeitindex, der den Zeitpunkt der jeweiligen Momentaufnahme markiert. Die mittlere Spalte zeigt Isoflächendarstellungen des Aktivators  $u$  (rot) und des langsamen Inhibitors  $v$  (grün), jeweils für  $u(x,y,z)=-0.5$  und  $v(x,y,z)=-0.5$ . In der rechten Spalte wird ein Schnitt durch den Aktivator  $u$  (rot), den langsamen Inhibitor  $v$  (grün) und den schnellen Inhibitor  $w$  (blau) dargestellt. Der Schnitt verläuft parallel zur  $y$ -Achse bei  $x=0.5$  und  $z=0.5$ . Dieser Simulation liegen folgende Parameter zugrunde: Diskretisierung =  $120 \times 120 \times 120$ ,  $l_x = 1.0$ ,  $\tau = 25.0$ ,  $\theta = 1.0$ ,  $D_u = 1.5 \cdot 10^{-4}$ ,  $D_v = 1.5 \cdot 10^{-4}$ ,  $D_w = 1.86 \cdot 10^{-4}$ ,  $\lambda = 2.0$ ,  $\kappa_1 = -6.92$ ,  $\kappa_3 = 8.5$ . Aus den Abbildungen wird deutlich, dass sich zwei Quasiteilchen frontal aufeinander zubewegen (1. Reihe) und miteinander zu einem Compound-State verschmelzen (3. Reihe). Dieser ist instabil und verlöscht (4. Reihe), so dass sich das System dem homogenen Zustand annähert (5. Reihe). Ein Film, der die Quasiteilchenvernichtung mit höherer Zeitauflösung dokumentiert, befindet sich auf der beigelegten CD-ROM.*

Inhibitors  $v$  (grün) gegen den Aktivator  $u$  (rot). Betrachtet man diesen Versatz im Schnittdiagramm, so ist deutlich zu erkennen, dass sich vor dem Aktivator (rot) eines Quasiteilchens kaum langsamer Inhibitor (grün) befindet. Folglich besteht der beim Stoß zu überwindende Inhibitorgradient ( $\text{grad } I$ ) in diesem Fall nur aus dem sehr flachen Gradienten ( $\text{grad } w$ ) des schnellen Inhibitors (blau).

**Reihe 2** ( $t = 36$ ): Die zweite Momentaufnahme zeigt den Beginn des Verschmelzungsprozesses. Zwar sind die Quasiteilchen noch relativ weit voneinander entfernt (Isoflächendarstellung), aber im Schnittdiagramm wird sichtbar, dass sich die weit diffundierenden schnellen Inhibitorverteilungen  $w$  (blau) bereits überlagern  $w(y = 0.3) > w_0$ , wobei  $w_0 = u_0 = v_0$  der Fixpunkt der lokalen Dynamik ist (1.14).

**Reihe 3** ( $t = 54$ ): Die Isoflächendarstellung und das Schnittdiagramm der dritten Momentaufnahme zeigen, dass die Aktivatorverteilungen  $u$  (rot) der Quasiteilchen bereits miteinander verschmolzen sind. Ebenfalls verschmolzen sind die schnellen Inhibitorverteilungen  $w$  (blau) der beiden Quasiteilchen. Noch nicht miteinander verschmolzen sind die langsamen Inhibitorverteilungen  $v$  (grün) der beiden Quasiteilchen. Sie bewegen sich weiterhin auf den Verschmelzungspunkt zu, so dass die verschmolzene Aktivatorverteilung  $u$  (rot) zwischen ihnen zusammengedrückt wird, wobei dem Aktivator keine Zeit verbleibt, um senkrecht

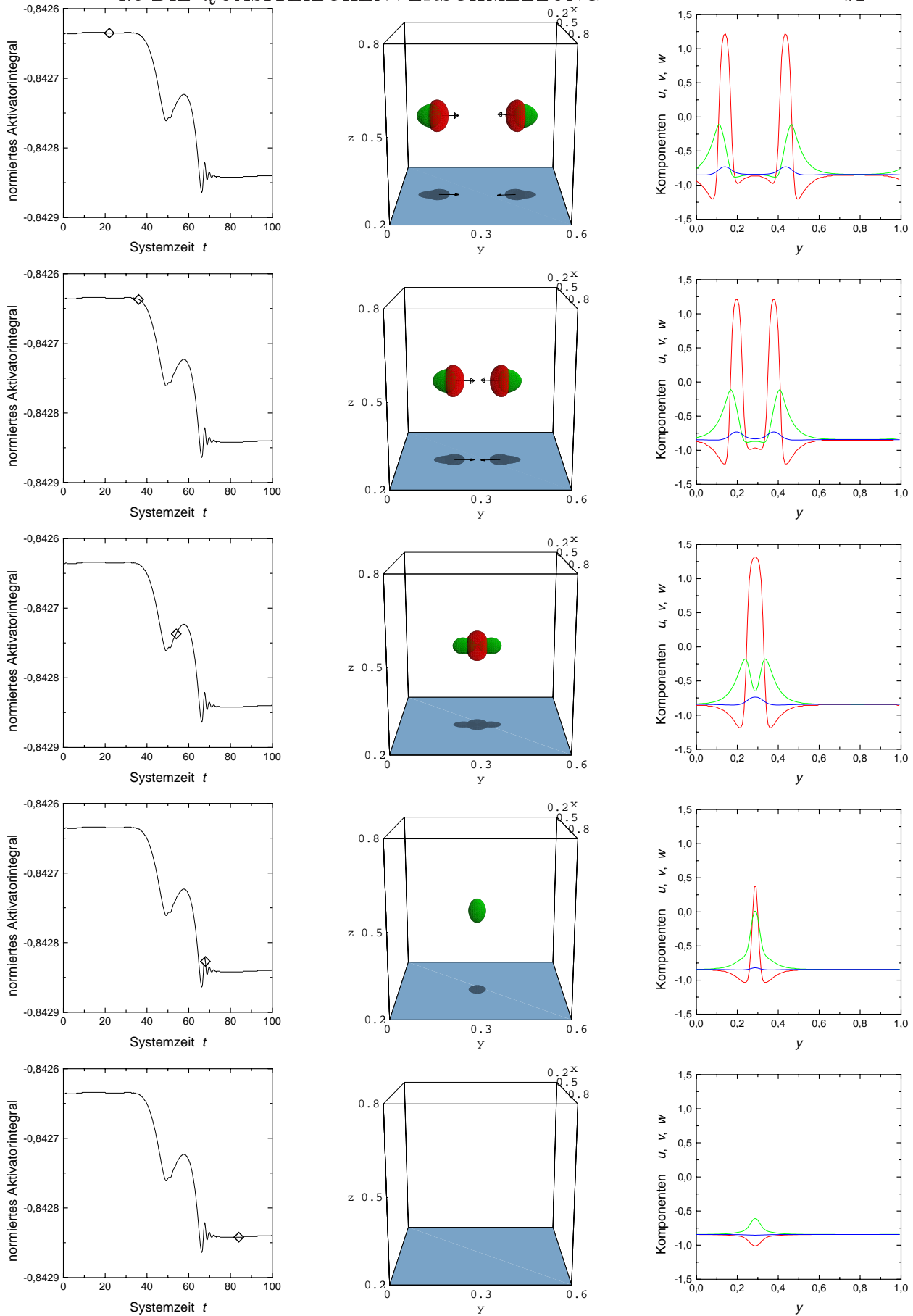


Abb. 4.4: Quasiteilchenvernichtung. Bildunterschrift auf vorheriger Seite.

zur ursprünglichen Bewegungsrichtung auszuberechnen. Aus dem Zeitindex (Raute) der Zeitreihe des normierten Aktivatorintegrals ist zu entnehmen, dass sich ein Zustand mit der ungefähren Aktivatormasse eines Quasiteilchens gebildet hat (Vgl. (4.5) und Abb. 4.3). Dies führt zu der Bezeichnung Compound-State-Quasiteilchen.

**Reihe 4** ( $t = 68$ ): Die Isoflächendarstellung dieser Momentaufnahme zeigt, dass der langsame Inhibitor  $v$  (grün) den Aktivator  $u$  (nicht mehr sichtbar) vollständig umschlossen hat. Infolgedessen wird die Aktivatormenge so stark abgebaut, dass die Aktivatoramplitude auf circa  $\frac{2}{3}$  der ursprünglichen Größe gesunken ist und auch die Breite der Aktivatorverteilung wesentlich abgenommen hat (Schnittdiagramm). Das normierte Aktivatorintegral zeigt in dieser Phase (Raute) Relaxationsschwingungen bezüglich des homogenen Zustands  $m_A = u_0$  des Systems.

**Reihe 5** ( $r = 84$ ): Der Compound-State ist vollständig verloschen. Dabei ist der Aktivator (rot) so stark abgebaut worden, dass sich eine Aktivatorsenke  $u(y = 0.3) < u_0$  im homogenen Grundgebiet gebildet hat (Schnittdiagramm). Diese verkleinert sich jedoch, so dass das System den homogenen Zustand annimmt.

#### 4.3.4 Kurzzeitige Quasiteilchenverschmelzung unter Ausbildung eines transienten Aktivatororus

Auch in der zweiten Variante der Quasiteilchenverschmelzung bildet sich mit der Verschmelzung ein instabiler Compound-State aus (Abb. 4.5). Jedoch hat der Aktivator  $u$  in diesem Fall genügend Zeit, um bis zum Eintreffen des langsamen Inhibitors  $v$  auszuweichen. Dazu stehen ihm alle Raumrichtungen senkrecht zur ursprünglichen Bewegungsrichtung der stoßenden Quasiteilchen zur Verfügung, so dass sich aus dem Compound-State-Quasiteilchen ein Aktivatororus ausbildet (Abb. 4.6). Aus diesem entstehen durch Symmetriebrechung neue Quasiteilchen.

Dieser Stoßprozess wird im Folgenden detailliert anhand der Simulation in Abbildung 4.5 diskutiert, die in der in Abschnitt 4.3.2 vorgestellten Darstellungsweise vorliegt.

**1. Reihe** ( $t = 8$ ): Die Isoflächendarstellung verdeutlicht die Anfangsbedingung dieser Simulation: Zwei Quasiteilchen bewegen sich frontal aufeinander zu, wobei der langsame Inhibitor  $v$  (grün) aufgrund seines großen Zeitskalenparameters  $\tau$  sehr weit auseinandergezogen ist. Im oberen Schnittdiagramm dieser Momentaufnahme wird desweiteren deutlich,

dass der große Zeitskalenparameter  $\tau$  auch in einem großen Versatz des langsamen Inhibitors  $v$  (grün) gegen den Aktivator  $u$  (rot) resultiert. Dadurch befindet sich vor den Quasiteilchen ausschließlich ein Gradient des schnellen Inhibitors  $w$  (blau), der zudem sehr flach ist. Aus der Zeitreihe des normierten Aktivatorintegrals kann geschlossen werden, dass die stoßenden Quasiteilchen ausrelaxiert sind, da das normierte Aktivatorintegral in den ersten 20 Systemzeiteinheiten konstant ist.

Abbildung 4.5: Kurzzeitige Quasiteilchenverschmelzung unter Ausbildung eines transienten Aktivatororus (folgende Seite). Dargestellt sind in fünf Reihen jeweils Momentaufnahmen einer kurzzeitigen Quasiteilchenverschmelzung, wobei die Zeit von oben nach unten verläuft. Jede Momentaufnahme besteht aus drei Diagrammen. Die linke Spalte zeigt das normierte Aktivatorintegral (4.2) des gesamten Stoßprozesses mit einer Raute als Zeitindex, der den Zeitpunkt der jeweiligen Momentaufnahme markiert. Die mittlere Spalte zeigt Isoflächendarstellungen des Aktivators  $u$  (rot) und des langsamen Inhibitors  $v$  (grün), jeweils für  $u(x,y,z)=-0.5$  und  $v(x,y,z)=-0.5$ . In der rechten Spalte werden zwei Schnitte (oben und unten) durch den Aktivator  $u$  (rot), den langsamen Inhibitor  $v$  (grün) und den schnellen Inhibitor  $w$  (blau) gezeigt. Der obere Schnitt verläuft parallel zur  $y$ -Achse bei  $x=0.5$  und  $z=0.5$  durch die Schwerpunktsachse der stoßenden Quasiteilchen. Der untere Schnitt verläuft parallel zur  $z$ -Achse bei  $x=0.5$  und  $y=0.54$  durch die Schwerpunktsachse der neu entstehenden Quasiteilchen. Dieser Simulation liegen dieselben Parameter wie der Simulation in Abbildung 4.4 zugrunde, jedoch mit folgenden Abweichungen: Diskretisierung =  $120 \times 160 \times 120$ ,  $\tau = 48.0$ . Aus den Abbildungen wird deutlich, dass sich zwei Quasiteilchen frontal aufeinander zubewegen (1. Reihe) und miteinander zu einem Compound-State-Quasiteilchen verschmelzen (2. Reihe). Da der Aktivator  $u$  (rot) senkrecht zur ursprünglichen Bewegungsrichtung (unteres Schnittdiagramm der 2. Reihe) kaum Inhibitor sieht und er genügend Zeit hat vor dem herannahenden langsamen Inhibitor  $v$  (grün) (oberes Schnittdiagramm der 2. Reihe) in diese Richtung auszuweichen, bildet sich ein Aktivatororus aus (Abb. 4.6). Dieser bildet durch Symmetriebrechung zwei neue Quasiteilchen aus (Reihe 3), die sich senkrecht zur ursprünglichen Bewegungsrichtung voneinander fortbewegen (Reihen 4 und 5). Ein Film, der die kurzzeitige Quasiteilchenverschmelzung mit höherer Zeitauflösung dokumentiert, befindet sich auf der beigelegten CD-ROM.

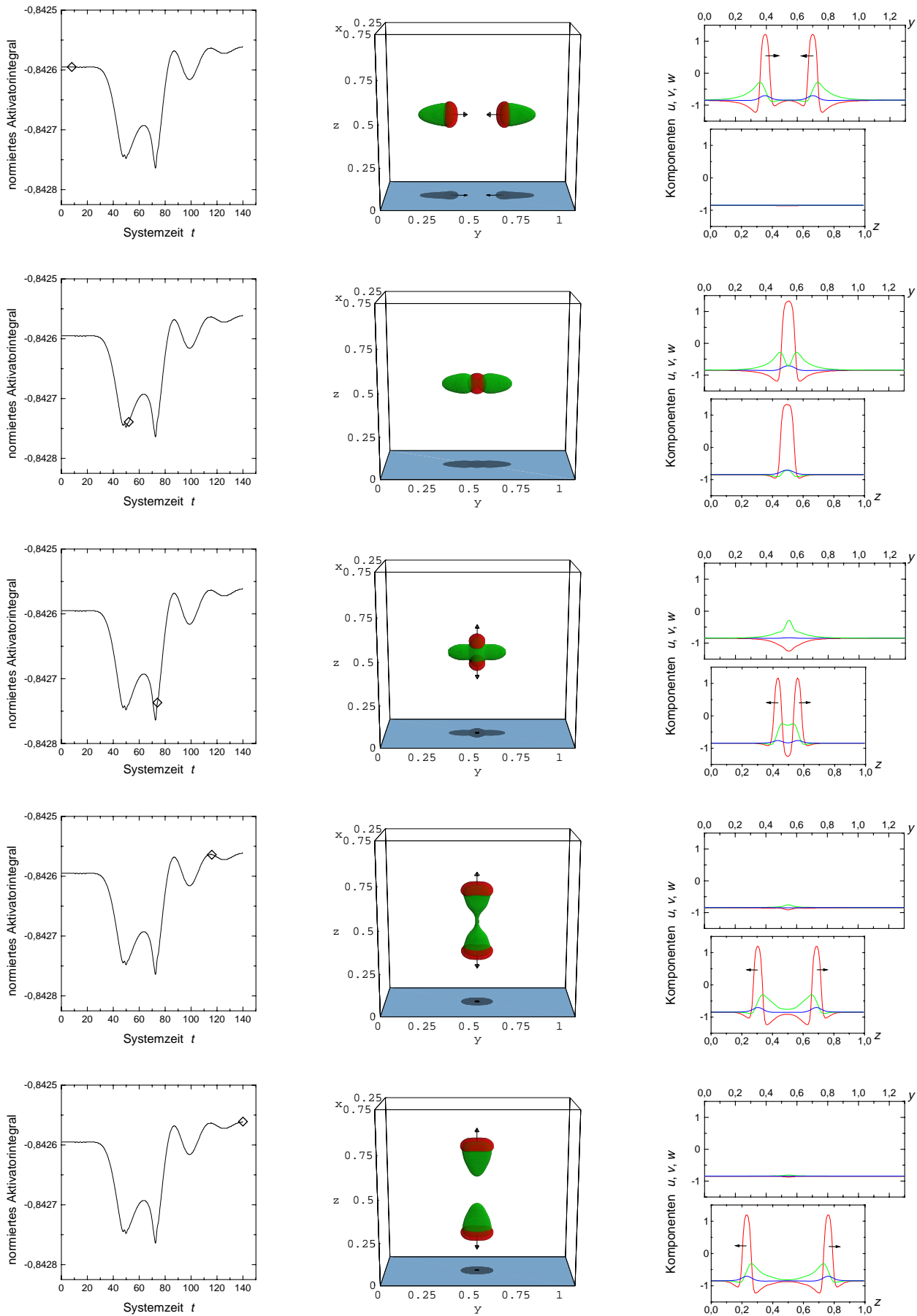


Abb. 4.5: Kurzzeitige Quasiteilchenverschmelzung. Bildunterschrift auf vorheriger Seite.

- 2. Reihe ( $t = 52$ ):** In der zweiten Momentaufnahme sind die Verteilungen des Aktivators  $u$  (rot) und des schnellen Inhibitors  $w$  (blau) bereits miteinander verschmolzen (Isoflächendarstellung und oberes Schnittdiagramm). Desweiteren ist das normierte Aktivatorintegral auf die Aktivatormasse eines einzelnen Quasiteilchens  $m_{A,QT}$  herabgesunken. Die beiden stoßenden Quasiteilchen haben also bereits einen Compound-State gebildet. Aus dem oberen Schnittdiagramm wird desweiteren deutlich, dass die langsamen Inhibitorverteilungen  $v$  (grün) noch nicht miteinander verschmolzen sind, aber weiterhin zum Verschmelzungspunkt vordrängen. Gleichzeitig wird im unteren Schnittdiagramm deutlich, dass der Aktivator  $u$  (rot) senkrecht zur ursprünglichen Bewegungsrichtung kaum Inhibitor (blau und grün) sieht. Er kann also dem herannahenden langsamen Inhibitor  $v$  (grün) senkrecht zur ursprünglichen Bewegungsrichtung ausweichen, so dass sich kurzzeitig ein Aktivator-torus ausbildet (Abb. 4.6).
- 3. Reihe ( $t = 74$ ):** Die Isoflächendarstellung zeigt, dass sich aus dem Aktivator-torus der Abbildung 4.6 durch Symmetriebrechung zwei neue Quasiteilchen ausbilden, die sich parallel zur z-Achse voneinander fortbewegen (unteres Schnittdiagramm).
- 4. Reihe ( $t = 116$ ):** Die Isoflächendarstellung und das untere Schnittdiagramm zeigen, dass sich die zwei neuen Quasiteilchen fast vollständig ausgebildet haben, allerdings sind die langsamen Inhibitorverteilungen  $v$  (grün) noch über einen dünnen Steg miteinander verbunden.
- 5. Reihe ( $t = 140$ ):** Die beiden neuen Quasiteilchen haben sich vollständig voneinander gelöst (Isoflächendarstellung und unteres Schnittdiagramm). Allerdings befinden sie sich noch in einer Relaxationsphase, da das normierte Aktivatorintegral (Raute) noch nicht konstant verläuft.

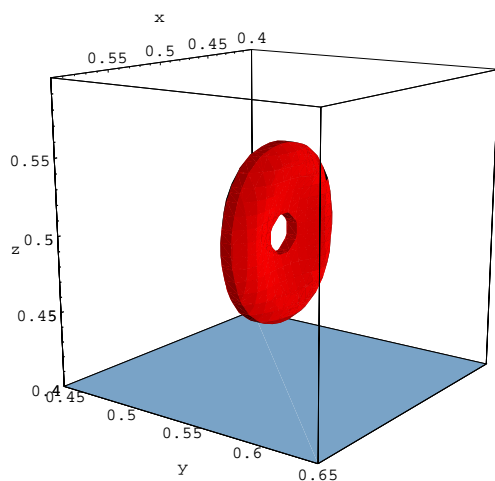


Abbildung 4.6: *Transienter Aktivator-torus. Momentaufnahme einer Isoflächendarstellung des Aktivators  $u$  (rot) der Simulation einer kurzzeitigen Quasiteilchenverschmelzung in Abbildung 4.5 bei  $t=66$ . Um dem herannahenden langsamen Inhibitor  $v$  auszuweichen (Abb. 4.5, Reihe 3), stehen dem Aktivator  $u$  des Compound-State-Quasiteilchens alle Raumrichtungen senkrecht zur ursprünglichen Bewegungsrichtung zur Verfügung, so dass ein Aktivator-*

*torus entsteht. Dieser bildet durch Symmetriebrechung zwei neue Quasiteilchen aus (Abb. 4.5, Reihen 4 und 5). Ein Film, der die Ausbildung des Aktivator-torus zeigt, befindet sich auf der beigelegten CD-ROM (Vgl. Anhang D).*

# Kapitel 5

## Die Erzeugung von Quasiteilchen durch Turing-Destabilisierung

### 5.1 Die Erzeugung von Quasiteilchen

Nachdem in den vorangegangenen Kapiteln Quasiteilchen als Lösungen des dreikomponentigen Reaktions-Diffusions-Systems diskutiert wurden, stellt sich die Frage, durch welche Mechanismen diese Quasiteilchen erzeugt werden können. Dazu wird das dreikomponentige Reaktions-Diffusions-System auf ein zweidimensionales Reaktions-Diffusions-System mit globaler Rückkopplung reduziert und der Strukturbildungsmechanismus der Turing-Destabilisierung untersucht.

Anhand ausgewählter Simulationen wird die Destabilisierung homogener Systeme und die Destabilisierung von Systemen mit großamplitudigen Strukturen untersucht. Um den Rechenaufwand dieser Simulationen in Grenzen zu halten, werden die Destabilisierungsmechanismen anhand zweidimensionaler Systeme geklärt und anschließend in die Diskussion dreidimensionaler Systeme miteinbezogen.

### 5.2 Der Destabilisierungsmechanismus

Das bisher diskutierte dreikomponentige Reaktions-Diffusions-System (1.6) geht im Grenzfall eines weit diffundierenden und schnell reagierenden zweiten Inhibitors  $\theta \rightarrow 0$ , sowie  $D_w \rightarrow \infty$  in ein zweikomponentiges Reaktions-Diffusions-System über, da der 2. Inhibitor im Reaktionsterm des Aktivators

(1.6) in diesem Fall in ein normiertes Aktivatorintegral

$$w = \frac{1}{\|\mathbb{G}\|} \int_{\mathbb{G}} u \, dV \quad (5.1)$$

übergeht und die Aktivatormenge durch diese globale Rückkopplung beschränkt.

Durch Substitution von  $\kappa_3$  und  $\kappa_2$  in (1.6) erhält man das zweikomponentige Reaktions-Diffusions-System:

$$\begin{aligned} \dot{u} &= D_u \Delta u + \lambda u - u^3 - v + \kappa_1 - \kappa_2 \frac{1}{\|\mathbb{G}\|} \int_{\mathbb{G}} u \, dV, \\ \tau \dot{v} &= D_v \Delta v + u - v, \end{aligned} \quad (5.2)$$

wobei die letzten beiden Terme der Aktivatorgleichung auch als

$$\kappa_{eff} = \kappa_1 - \kappa_2 \frac{1}{\|\mathbb{G}\|} \int_{\mathbb{G}} u \, dV \quad (5.3)$$

zusammengefasst werden können. Da das normierte Aktivatorintegral  $\frac{1}{\|\mathbb{G}\|} \int_{\mathbb{G}} u \, dV$  für homogene Systeme gleich dem Fixpunkt  $u_0$  des Aktivators ist (1.14), gilt

$$\kappa_{eff} = \kappa_1 - \kappa_2 u_0. \quad (5.4)$$

Die Fixpunkte  $u_0$  und  $v_0$  des zweikomponentigen Systems berechnen sich durch folgende kubische Gleichung:

$$\kappa_1 = u_0(1 + u_0^2 - \lambda + \kappa_2) \quad \text{mit} \quad u_0 = v_0. \quad (5.5)$$

Die Lösung dieser Gleichung entspricht (1.14), wenn man in (1.14)  $\kappa_3$  durch  $\kappa_2$  substituiert. Desweiteren wird die Destabilisierung des homogenen Systems durch die Kennliniensteigung  $f'(u_0)$  (1.26b) bestimmt, wobei der Aktivatorfixpunkt  $u_0$  nach (1.14) mit  $\kappa_3 = \kappa_2$  eine Funktion von  $\kappa_1$  ist, so dass sich die Turing-Destabilisierung (1.26b) als

$$f'(u_0(\kappa_1)) = \lambda - 3(u_0(\kappa_1))^2 < \underbrace{\frac{1}{1 + D_v k^2} + D_u k^2}_{=: f_T(k)} \quad (5.6)$$

schreiben lässt. Hierbei bezeichnet  $k$  die Wellenzahl der in Fourier-Komponenten zerlegten Störung, die bei der Verletzung des Kriteriums (5.6) angeregt wird.



Dieser Zusammenhang wird insbesondere dann deutlich, wenn man die Kennliniensteigung  $f'(u_0(\kappa_1))$  in Abhängigkeit des Bifurkationsparameters  $\kappa_1$  und die Funktion  $f_T(k)$  in Abhängigkeit der Störungswellenzahl  $k$  für gegebene Parameter in ein Diagramm aufträgt (Abb. 5.1). Aus diesem Diagramm läßt sich ablesen, welche kritische Wellenzahl  $k_c$  bei Verletzung der Bedingung (5.6) angeregt wird und welcher Bifurkationspunkt  $\kappa_{1,c}$  dafür überschritten werden muss. Desweiteren wird deutlich, dass für ein  $\kappa'_1 > \kappa_{1,c}$  ein kontinuierliches Wellenband  $\bar{k}$  an Störungen angeregt wird, von denen sich allerdings auf einem endlichen Grundgebiet der Kantenlänge  $l_x$  mit Neumann-Randbedingung nur diskrete Störungen

$$|\underline{k}_\nu| = \frac{\pi\nu}{l_x} \quad \text{mit } |\underline{k}_\nu| \in \bar{k} \quad \text{und } \nu \in \mathbb{N} \quad (5.7)$$

ausbilden können [Schenk 1995, S. 9]. Die entsprechenden Wellenzahlvektoren  $\underline{k}$  liegen auf einem Kreis um den Nullpunkt mit dem Radius  $|\underline{k}|$  [Schütz 1995, S. 105].

Für homogene Systeme kann jedem  $\kappa_{1,c}$  nach (5.4) auch ein  $\kappa_{eff,c}$  zugeordnet werden

$$\kappa_{eff,c} = \kappa_{1,c} - \kappa_2 u_0(\kappa_{1,c}). \quad (5.8)$$

Da diese Störungen zu großamplitudigen Strukturen anwachsen, vergrößert sich das normierte Aktivatorintegral, weshalb  $\kappa_{eff}$  (5.3) absinkt. Dabei kann  $\kappa_{eff}$  sogar so weit absinken, dass der Bifurkationspunkt  $\kappa_{eff,c}$  unterschritten wird. Dennoch können weitere Störungen anwachsen, da der Bifurkationspunkt  $\kappa_{eff,c}$  aus der linearen Stabilitätsanalyse des homogenen Systems gewonnen wurde. Sobald sich jedoch eine großamplitudige Störung ausgebildet hat, gilt die lineare Stabilitätsanalyse des homogenen Systems nicht mehr. Erfahrungsgemäß führen großamplitudige Strukturen zu einem Absinken des Bifurkationspunktes  $\kappa'_{eff,c} < \kappa_{eff,c}$ , so dass das System erst dann gegen Turing-Destabilisierung stabil wird, wenn der Bifurkationspunkt  $\kappa'_{eff,c}$  unterschritten wird. Dies ist darauf zurückzuführen, dass großamplitudige Strukturen in der Nähe des Turing-Bifurkationspunktes oszillierende Ausläufer haben, aus denen sich weitere Quasiteilchen bevorzugt ausbilden.

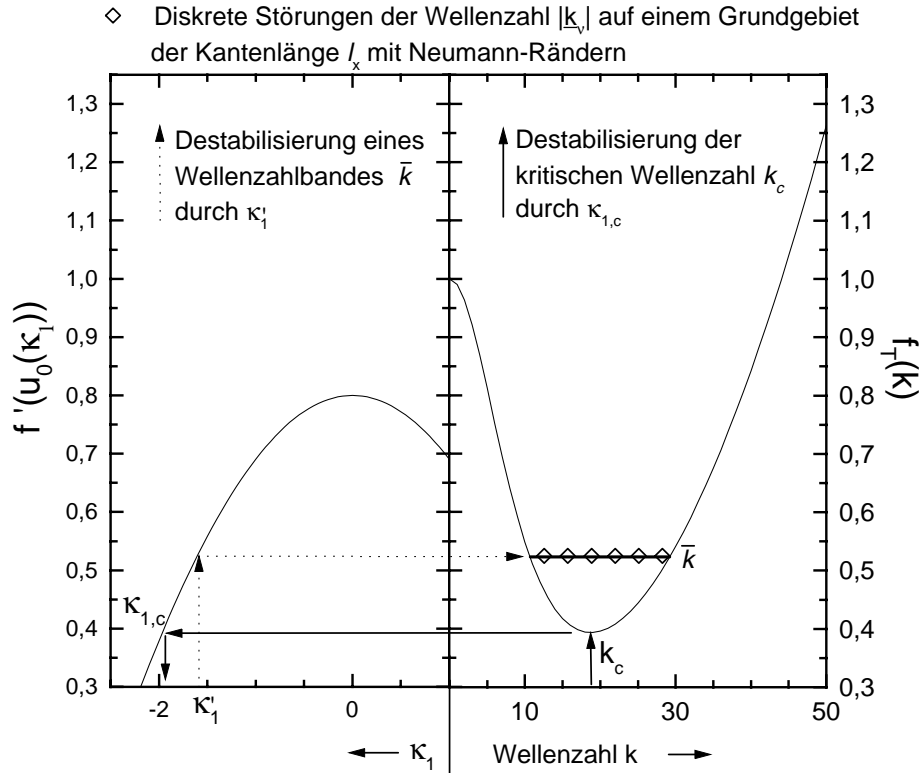


Abbildung 5.1: Anregung verschiedener Störungswellenzahlen  $k$  durch Turing-Destabilisierung in Abhängigkeit von  $\kappa_1$ . In der linken Hälfte dieses Diagramms wird die Kennliniensteigung  $f'(u_0(\kappa_1))$  des homogenen Systems im Fixpunkt  $u_0(\kappa_1)$  in Abhängigkeit von  $\kappa_1$  dargestellt. Die rechte Hälfte des Diagramms zeigt anhand der Funktion  $f_T(k)$  die Störungswellenzahlen  $k$ , die nach (5.6) für bestimmte  $f'(u_0(\kappa_1))$  angeregt werden. Dabei wird deutlich, dass die kritische Störung  $k_c$  erst bei dem Bifurkationspunkt  $\kappa_{1,c}$  angeregt wird. Für  $\kappa_1^l > \kappa_{1,c}$  wird hingegen ein ganzes Wellenband  $\bar{k}$  angeregt. Von diesen Störungen können sich auf einem Grundgebiet der Kantenlänge  $l_x$  mit Neumann-Rändern allerdings nur die diskreten Störungen  $|\underline{k}_v|$  (5.7) ausbilden. Dieses Diagramm wurde mit den Parametern  $D_u = 6 \cdot 10^{-5}$ ,  $D_v = 6 \cdot 10^{-4}$ ,  $\kappa_2 = 5,0$ ,  $\lambda = 0,8$  und  $l_x = 1,0$  erstellt.

## 5.3 Die Erzeugung von Filamenten auf zweidimensionalen Grundgebieten

### 5.3.1 Die Darstellung zweidimensionaler Simulationen

Die Destabilisierung zweidimensionaler Grundgebiete wird in diesem Kapitel anhand der Simulationen in den Abbildungen 5.2 und 5.3 diskutiert. Beide Abbildungen folgen einem einheitlichen Schema, wobei jeweils fünf charakteristische Momentaufnahmen einer Simulation herausgegriffen werden. Jede Momentaufnahme besteht dabei aus vier Diagrammen, die sich jeweils in einer Reihe befinden, wobei die Systemzeit von der obersten Reihe zur untersten Reihe verläuft. In den vier Spalten einer Abbildung werden folgende Details der jeweiligen Momentaufnahmen dargestellt:

- 1. Spalte:** Das erste Diagramm eines Zeitpunktes zeigt jeweils die Zeitreihe des normierten Aktivatorintegrals für die gesamte Simulation. Da der Zeitpunkt der jeweiligen Momentaufnahme innerhalb der Zeitreihendarstellung durch eine Raute markiert wird, kann die jeweilige Momentaufnahme in den Gesamtzusammenhang der Simulation eingeordnet werden.
- 2. Spalte:** Die zweite Abbildung zeigt ein Graustufenbild der zweidimensionalen Aktivatorverteilung, wobei helle Grauwerte große Aktivatorwerte und dunkle Grauwerte niedrige Aktivatorwerte repräsentieren.
- 3. Spalte:** Das dritte Diagramm einer Momentaufnahme stellt die Graustufenskala dar, die eine Zuordnung der Helligkeitswerte des Aktivatorbildes (2. Spalte) zu den eigentlichen Aktivatorwerten ermöglicht. Dazu ist jede Graustufenskala auf den minimalen und den maximalen Aktivatorwert einer Momentaufnahme normiert.
- 4. Spalte:** Die vierte Spalte zeigt einen charakteristischen Schnitt durch das Grundgebiet, wobei die y-Achse des Schnittdiagramms auf die linksstehende Graustufenskala normiert ist. Die Aktivatorverteilung  $u$  längs des Schnitts wird durch eine durchgezogene Linie, die Inhibitorverteilung  $v$  durch eine gepunktete Linie dargestellt.

### 5.3.2 Die Destabilisierung eines homogenen zweidimensionalen Systems

In diesem Abschnitt wird die Destabilisierung eines homogenen zweidimensionalen Systems anhand der Simulation in Abbildung 5.2 diskutiert.

Die Darstellung dieser Simulation erfolgt dabei nach dem in Abschnitt 5.3.1 vorgestellten System, wobei das Schnittdiagramm des Grundgebiets von dem Punkt  $(0, 0.45)$  zu dem Punkt  $(0.6, 1.0)$  verläuft. Dies entspricht der Geraden

$$g(\mu) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0.45 \end{pmatrix} + \mu \begin{pmatrix} 0.6 \\ 0.55 \end{pmatrix} \subset \mathbb{G} \quad \text{mit } \mu \in [0; 1]. \quad (5.9)$$

Als Anfangsbedingung dieser Simulation wurde ein homogenes Grundgebiet gewählt und  $\kappa_1$  über den Bifurkationspunkt  $\kappa_{1,c}$  (Abb. 5.1) erhöht.

1. **Reihe** ( $t = 1175$ ): Das Aktivatorbild zeigt ein destabilisiertes Grundgebiet auf dem sich bereits ein kleinamplitudiges unregelmäßiges Störungsmuster ausgebildet hat, dessen größte Amplitude ungefähr  $5 \cdot 10^{-7}$  entspricht. Die Unregelmäßigkeit der Störungen ist darauf zurückzuführen, dass der Parameter  $\kappa_1 = 1.575$  dieses Systems über dem kritischen  $\kappa_{1,c}$  der Turing-Bifurkation liegt und somit innerhalb eines kontinuierlichen Wellenzahlbandes  $\bar{k}$  diskrete Störungen  $|k|$  in unterschiedlichen Raumrichtungen anwachsen (Vgl. Abb. 5.1).
2. **Reihe** ( $t = 4775$ ): Das normierte Aktivatorintegral liegt deutlich über dem Wert, den es für ein homogenes Grundgebiet betragen würde. Aus dem Aktivatorbild wird ersichtlich, dass sich an dem Punkt  $(0.35, 0.7)$  ein Quasiteilchen ausgebildet hat. Ein weiteres hat sich unterhalb davon  $(0.2, 0.65)$  zur Hälfte ausgebildet. Da der Schnitt  $g(\mu)$  des Grundgebiets durch diese beiden Quasiteilchen verläuft, wird ebenfalls deutlich, dass sich die Aktivatoramplitude auf 1.181 erhöht hat.
3. **Reihe** ( $t = 4960$ ): Es haben sich jetzt bereits ca. 30 Filamente ausgebildet, so dass über ein Viertel des Grundgebiets von ihnen bedeckt wird. Dabei haben sie sich in einem hexagonalen Muster angeordnet. An der Graustufenskala kann man ablesen, dass das Aktivatorminimum im Vergleich zur vorherigen Momentaufnahme von  $-0.477$  auf  $-0.557$  abgesunken ist. Dies hängt mit der hohen Filamentanzahldichte auf dem Grundgebiet zusammen. Dementsprechend kann die weit diffundierende Inhibitor Komponente  $v$  zwischen den Filamenten nicht auf den homogenen Zustand  $v_0$  absinken. Dieses höhere Inhibitorniveau führt zu einem starken Aktivatorabbau an den Filamentflanken. Die Aktivatorminima sind daher kleiner, als es bei einem einzelnen Filament der Fall wäre. Diese tieferen Aktivatorminima wirken sich auch auf das normierte Aktivatorintegral aus, so dass dieses nicht mehr als Maß für die Anzahl der Filamente auf dem Grundgebiet angewendet werden kann.

Abbildung 5.2: *Turing-Destabilisierung des homogenen Zustands eines zweidimensionalen Systems (folgende Seite). Dargestellt sind in fünf Reihen jeweils Momentaufnahmen der Destabilisierung des homogenen Zustands eines zweidimensionalen Systems, wobei die Zeit von der obersten Reihe zur untersten Reihe verläuft. Jede Momentaufnahme besteht aus vier Diagrammen. Die erste Spalte zeigt die Zeitreihe des normierten Aktivatorintegrals der gesamten Simulation mit einer Raute als Zeitindex, die den Zeitpunkt der jeweiligen Momentaufnahme markiert. Die zweite Spalte zeigt ein Graustufenbild des Aktivators  $u$  auf dem Grundgebiet, dessen Helligkeitswerte in der Graustufenskala der dritten Spalte den eigentlichen Aktivatorwerten zugeordnet werden. Die vierte Spalte zeigt einen Schnitt des Aktivators  $u$  (durchgezogen) und des Inhibitors  $v$  (gepunktet) längst der Geraden  $g(\mu)$  (5.9). Dieser Simulation liegen dieselben Parameter wie in Abbildung 5.1, sowie Diskretisierung= $100 \times 100 \times 1$ ,  $\tau = 1.0$  und  $\kappa_1 = -1.575$  und Neumann-Randbedingung zugrunde. Die dargestellte Simulation zeigt folgenden Destabilisierungsmechanismus: Aus einem unregelmäßigen Störungsmuster (1. Reihe), bildet sich lokal ein einzelnes Filament aus (2. Reihe), in dessen Nähe sich weitere Filamente in hexagonaler Anordnung bilden (3. Reihe). Einhergehend mit der Ausbildung weiterer Filamente (4. Reihe), nimmt auch der Abstand zwischen den Filamenten zu (Reihen 4 und 5), so dass die Schnittgerade in der letzten Momentaufnahme (Reihe 5) genau zwischen zwei Filamentreihen verläuft.*

**4. Reihe ( $t = 5145$ ):** Da sich vier weitere Filamente ausgebildet haben, ist das normierte Aktivatorintegral weiter angestiegen. Desweiteren sind die Aktivatoramplituden des Schnittdiagramms abgesunken, obwohl die Graustufenskala zeigt, dass sich das Aktivatormaximum nur unwesentlich geändert hat. Folglich werden die Filamente nicht mehr in der Nähe des Aktivatormaximums, sondern seitlicher geschnitten. Daraus folgt, dass sich die Filamente verschoben haben müssen. Das Filamentmuster dehnt sich also in Richtung der rechten unteren Grundgebietsecke  $(1,0)$  aus, wobei der Abstand zwischen den Quasiteilchen anwächst.

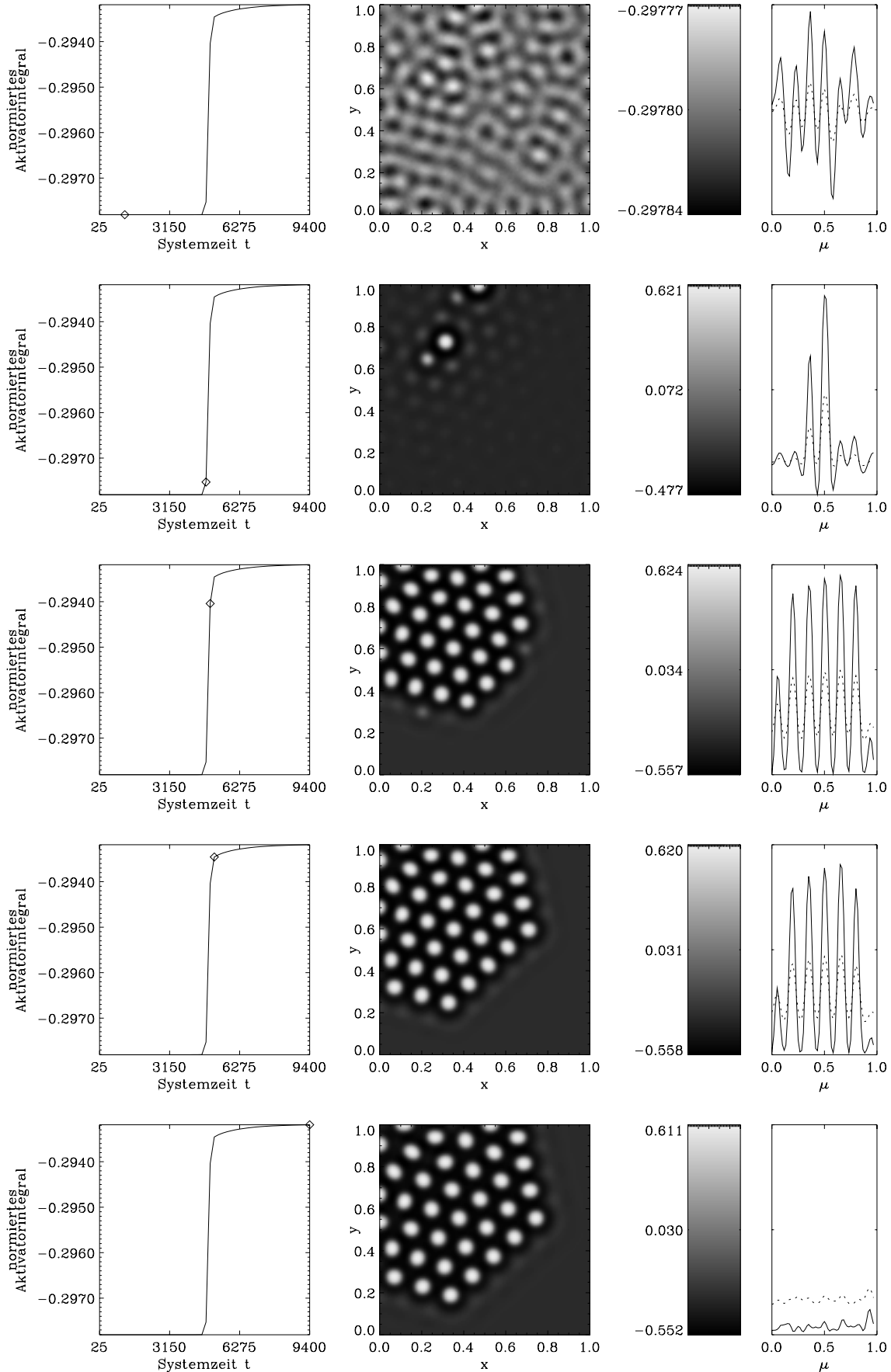


Abb. 5.2: Turing-Destabilisierung eines homogenen zweidimensionalen Systems. Bildunterschrift auf vorheriger Seite.

- 5. Reihe** ( $t = 9400$ ): Das normierte Aktivatorintegral nähert sich einem konstanten Wert an, was zumindest in Bezug auf die Entstehung von Filamenten auf eine ausrelaxierte Verteilung hinweist. Sowohl das Aktivatorbild, als auch das Schnittdiagramm zeigen deutlich, dass sich das Filamentmuster durch die Zunahme der Filamentabstände ausgebreitet hat. Die Schnittgerade  $g(\mu)$  verläuft jetzt direkt zwischen zwei Filamentreihen, so dass das tiefliegende Aktivatorniveau und das darüberliegende Inhibitorniveau zwischen zwei Filamentreihen im Schnittdiagramm sichtbar wird.

### 5.3.3 Destabilisierung eines Filaments in der Nähe der Turing-Bifurkation

Die Destabilisierung eines einzelnen Filaments in der Nähe der Turing-Bifurkation wird in diesem Kapitel anhand einer Simulation diskutiert, die in Abbildung 5.3 dargestellt ist. Dabei wird der in Abschnitt 5.3.1 vorgestellte Abbildungsformalismus angewendet, wobei das Schnittdiagramm in der vierten Spalte der Abbildung 5.3 die Komponenten  $u$  und  $v$  parallel zur x-Achse bei  $y = 0.53$  zeigt.

Als Anfangsbedingung der Simulation wurde ein ausrelaxiertes stabiles Filament ausgewählt und  $\kappa_1$  über den Bifurkationspunkt  $\kappa'_{1,c}$  erhöht.

- 1. Reihe** ( $t = 25$ ): In der Mitte des Aktivatorbildes befindet sich ein ausrelaxiertes Filament (heller Spot), das von einem dunklen und einem hellen Ring umgeben wird. Diese gehören ebenfalls - wie auch der helle Spot - zum Filament. Im Schnittdiagramm können die beiden Ringe als oszillierende Ausläufer des Filaments identifiziert werden.
- 2. Reihe** ( $t = 187$ ): Da sich das System in einem instabilen Parameterbereich bezüglich Turing-Destabilisierung befindet, bilden sich auf dem hellen Ring des Filaments großamplitudige Störungen aus. Die Größte dieser Störungen befindet sich unterhalb links des destabilisierten Filaments, zwei weitere bisher kleinere Störungen oberhalb links und unterhalb rechts davon.
- 3. Reihe** ( $t = 212$ ): Die großamplitudigen Störungen der letzten Momentaufnahme haben sich zu vollständigen Filamenten ausgebildet, die sowohl aus einem hellen Spot, als auch aus ringförmigen oszillierenden Ausläufern bestehen. Diese neu entstandenen Filamente sind im Schnittdiagramm dieser Momentaufnahme nicht direkt sichtbar. Allerdings

Abbildung 5.3: *Destabilisierung eines Filaments in der Nähe der Turing-Bifurkation. Dargestellt sind in fünf Reihen jeweils Momentaufnahmen der Destabilisierung des homogenen Zustands eines zweidimensionalen Systems, wobei die Zeit von der obersten Reihe zur untersten Reihe verläuft. Jede Momentaufnahme besteht aus vier Diagrammen. Die erste Spalte zeigt die Zeitreihe des normierten Aktivatorintegrals der gesamten Simulation mit einer Raute als Zeitindex, die den Zeitpunkt der jeweiligen Momentaufnahme markiert. Die zweite Spalte zeigt ein Graustufenbild des Aktivators  $u$  auf dem Grundgebiet, dessen Helligkeitswerte in der Graustufenskala der dritten Spalte den eigentlichen Aktivatorwerten zugeordnet werden. Die vierte Spalte zeigt einen Schnitt des Aktivators  $u$  (durchgezogen) und des Inhibitors  $v$  (gepunktet) längs der Geraden  $g(\mu)$  (5.9). Die Parameter dieser Simulation stimmen mit Abb. 5.2 überein, jedoch  $\kappa_1 = -14.4$  und  $\kappa_2 = 45.0$ . Als Anfangsbedingung dieser Simulation wurde ein ausrelaxiertes Filament mit oszillierenden Ausläufern gewählt und  $\kappa_1$  über den Turing-Bifurkationspunkt hinaus erhöht (Reihe 1). Folglich wachsen auf den oszillierenden Ausläufern des Filaments Störungen an (Reihe 2), die sich zu neuen Filamenten ausbilden (Reihe 3). Dabei überlagern sich die oszillierenden Ausläufer der neu gebildeten Filamente und des Ausgangsfilaments, so dass sich an diesen Stellen weitere Filamente ausbilden (Reihe 4). Die letzte Momentaufnahme zeigt eine stationäre Struktur, bei der sich die Filamente in einem hexagonalen Muster angeordnet haben und insgesamt ein großes Hexagon bilden, dessen Kanten von jeweils drei Filamenten geformt werden.*

sind die Überlagerungen der oszillierenden Ausläufer der neu entstandenen Filamente neben dem Ausgangsfilament zu erkennen (Schnittdiagramm). Da die Überlagerung einzelner Filamentausläufer großen Störungen entsprechen, bilden sich an diesen Stellen neue Filamente aus. Die Zunahme der Aktivatormenge durch neu entstehende Filamente führt auch zu einem Anwachsen der Menge an Inhibitor  $v$ , der seine Wirkung aufgrund seiner relativ großen Diffusion  $D_v > D_u$  vor Allem zwischen den Filamenten entfaltet, wo die Aktivatormenge erheblich reduziert wird. Dies wird insbesondere dann deutlich, wenn man das Minimum der Graustufenskala der dritten Momentaufnahme mit dem Minimum der Graustufenskala der ersten und zweiten Momentaufnahme vergleicht.

- 4. Reihe** ( $t = 287$ ) : Mittlerweile haben sich neben dem Ausgangsfilament acht weitere Filamente ausgebildet. Alle Filamente haben sich rauteförmig angeordnet, wobei jeweils drei Filamente die Kante einer Raute bilden. Da das mittlere Filament zu seinen nächsten sechs Nachbarfilamenten unterschiedliche Abstände aufweist, liegt kein hexagonales Muster vor.



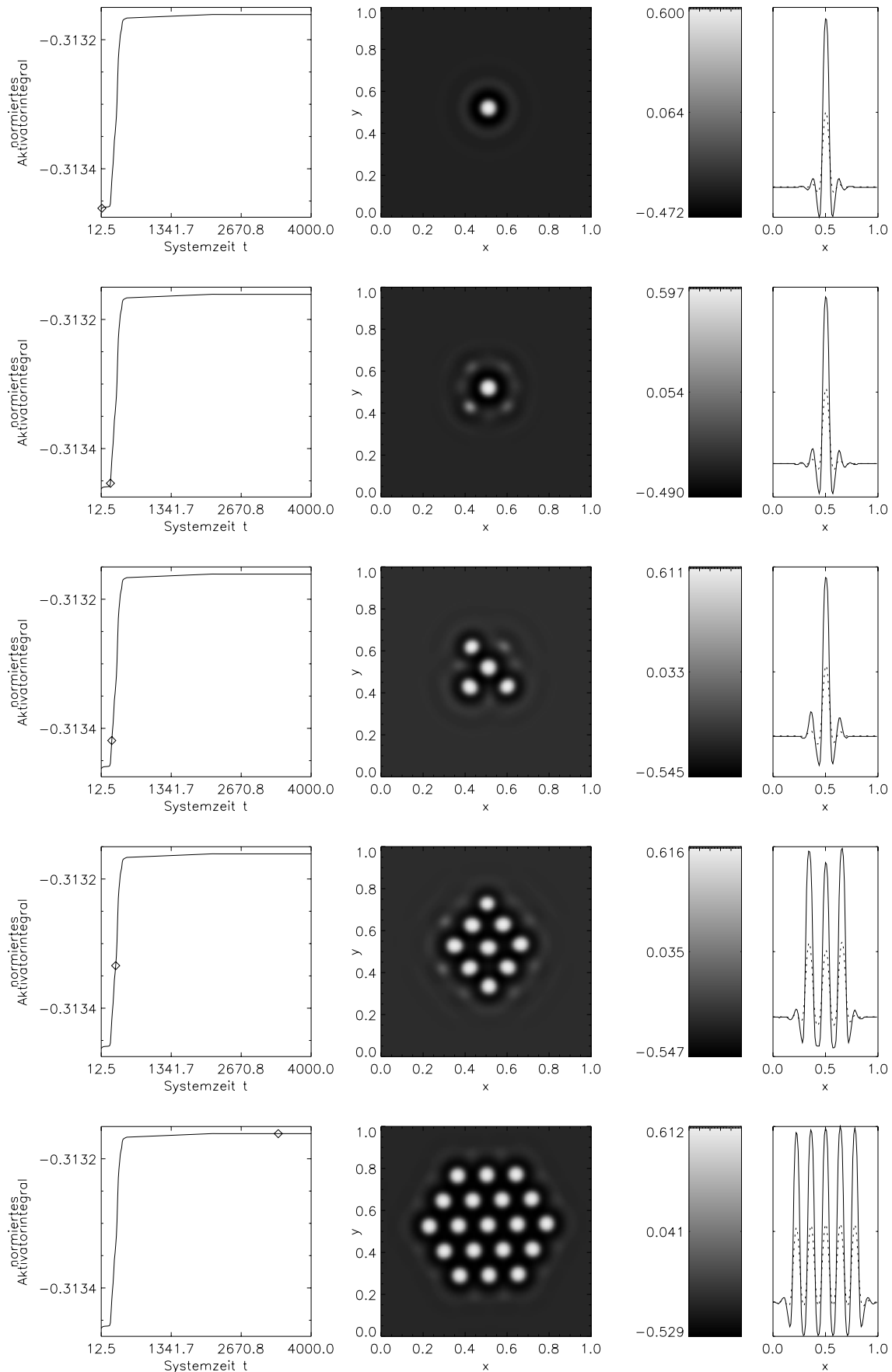


Abb. 5.2: Destabilisierung eines Filaments in der Nähe der Turing-Bifurkation. Bildunterschrift auf vorheriger Seite.

**5. Reihe** ( $t = 3375$ ): Die letzte Momentaufnahme dieser Simulation zeigt eine stationäre Struktur, da die Zeitreihe des normierten Aktivatorintegrals einen annähernd konstanten Verlauf aufweist und da sich die Anordnung der Filamente zueinander nicht weiter ändert. Die Aktivatormenge ist so weit angestiegen, dass das  $\kappa_{eff}$  unter den Bifurkationspunkt  $\kappa_{eff,c}$  gesunken ist, und somit eine stabile Struktur vorliegt. Im Vergleich zur vorherigen Momentaufnahme haben sich links und rechts der rautenförmigen Anordnung jeweils sechs neue Filamente gebildet. Desweiteren haben sich alle Filamente in einem hexagonalen Muster angeordnet, so dass die Filamente, die sich im Inneren der Struktur befinden, jeweils von sechs gleich weit entfernten Nachbarfilamenten umgeben werden. Darüberhinaus haben sich alle Filamente zu einem großen Hexagon angeordnet, wobei jede Kante des Hexagons von drei Filamenten gebildet wird.

#### 5.3.4 Die Wechselwirkung zwischen globaler Rückkopplung und der Entstehung neuer Quasiteilchen

Bei der Turing-Destabilisierung eines Filaments wurde bereits darauf hingewiesen, dass das normierte Aktivatorintegral bezüglich Turing-Strukturen nicht als Maß für die Anzahl der Filamente auf dem Grundgebiet angewendet werden kann (Vgl. Abschnitt 5.3.3, Reihe 3). Dies ist darauf zurückzuführen, dass die Filamente einer Turing-Struktur sehr dicht beieinanderliegen, so dass sich die weit diffundierenden Inhibitorkomponenten der Filamente überlagern und das Aktivatorniveau zwischen den Filamenten absinkt. Insofern tragen die dicht angeordneten Filamente nicht so viel zum normierten Aktivatorintegral bei, wie es dieselbe Anzahl weit auseinanderstehender Filamente tun würde.

Der Zusammenhang zwischen der Anzahl der Filamente auf einem Grundgebiet und dem normierten Aktivatorintegral im Fall einer Turing-Struktur verdeutlicht Abbildung 5.4b. Dieser exponentielle Zusammenhang beider Größen zeigt, inwiefern kleine Filamentanzahlen wenig zum normierten Aktivatorintegral beitragen. Je weiter man allerdings ein homogenes System mittels  $\kappa_1$  über den Bifurkationspunkt  $\kappa_{1,c}$  anregt, desto proportional mehr Aktivator muss entstehen, um das System wieder in einen stabilen Zustand zurückzuregeln (Abb. 5.4a).

Da  $\kappa_1$  und das normierte Aktivatorintegral also linear voneinander abhängen, das normierte Aktivatorintegral aber exponentiell mit der Filamentanzahl gekoppelt ist, ändert sich die Filamentanzahl wurzelförmig mit  $\kappa_1$  (Abb. 5.4c). Durch eine kleine Erhöhung von  $\kappa_1$  in der Nähe des Bifurkationspunktes

entsteht dementsprechend eine überproportionale Anzahl von Filamenten. Um gezielt eine kleine Anzahl von Filamenten zu erzeugen, dürfte  $\kappa_1$  nur knapp über den Bifurkationspunkt  $\kappa_{1,c}$  erhöht werden. Da die Dynamik in der Nähe des Bifurkationspunktes allerdings sehr langsam ist (Bottle Neck), würde es eine entsprechend lange Zeit dauern, bis eine großamplitudige Störung angewachsen wäre. Diese Parameterbereiche sind also simulationstechnisch schwer zugänglich.

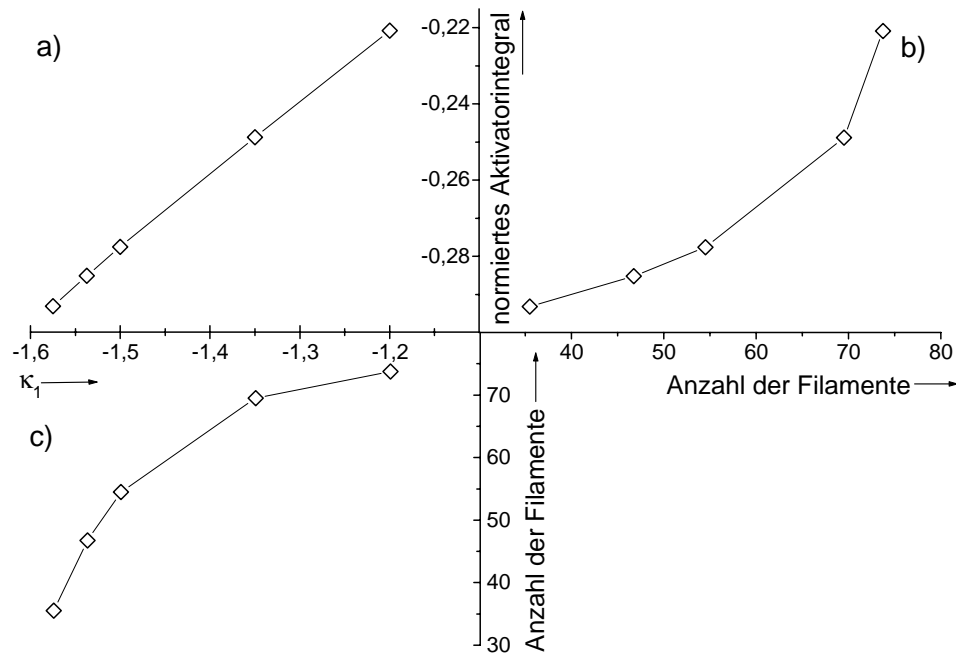


Abbildung 5.4: Die Wechselwirkung zwischen globaler Rückkopplung und der Entstehung von Filamenten. Bei der vorliegenden Simulationsreihe wurde jeweils ein homogener Zustand durch verschiedene  $\kappa_1 > \kappa_{1,c} = -1.94$  (Abb. 5.1) gegen die Turing-Instabilität destabilisiert, ansonsten entsprechen die Parameter dieser Simulationsreihe den in Abb. 5.2 dokumentierten Parametern. Das Diagramm a) zeigt den linearen Zusammenhang zwischen  $\kappa_1$  und der Aktivatormenge, die entstehen muss um das System durch die globale Rückkopplung zu stabilisieren. Da sich die Filamente einer Turing-Struktur dicht beieinander anordnen, sinkt das Aktivatorniveau zwischen den Filamenten durch die sich überlagernden Inhibitorverteilungen der Filamente (Vgl. Abb 5.3: Schnittdiagramme der Reihen 2 und 3). Infolgedessen bewirken kleine Filamentanzahlen auch nur kleine Zunahmen des normierten Aktivatorintegrals b). Umgekehrt bedeutet dies für die Filamentanzahl in Abhängigkeit von  $\kappa_1$ , dass kleine  $\kappa_1$ -Änderungen in der Nähe des Bifurkationspunktes überproportional hohe Zunahmen der Filamentanzahl zur Folge haben c).

## 5.4 Destabilisierung dreidimensionaler Systeme in der Nähe der Turing-Bifurkation

### 5.4.1 Destabilisierung eines Quasiteilchens in der Nähe der Turing-Bifurkation

In diesem Abschnitt wird das Szenario untersucht, dass bei der Destabilisierung eines Quasiteilchens in der Nähe der Turing-Bifurkation in Erscheinung tritt. Dazu wird die in Abbildung 5.5 dokumentierte Simulation diskutiert. Da es sich hierbei um die Simulation eines dreidimensionalen Reaktions-Diffusions-Systems handelt, erfolgt die Darstellung nach dem in Abschnitt 4.3.2 festgelegtem Prinzip, wobei die Schnittdiagramme der Abbildung 5.5 die Komponenten  $u$  und  $v$  parallel zur  $z$ -Achse bei  $x = 0.5$  und  $y = 0.5$  zeigen. Als Isoflächen werden lediglich die Aktivatorisoflächen dargestellt, da die Inhibitorisoflächen die dreidimensionalen Grundgebietsdarstellungen nur unnötig kompliziert erscheinen lassen würden.

Als Anfangsbedingung dieser Simulation wurde ein einzelnes stationäres aus-relaxiertes Quasiteilchen gewählt, wobei  $\kappa_1$  über den Turing-Bifurkationspunkt  $\kappa'_{1,c}$  hinaus erhöht wurde.

1. **Reihe** ( $t = 30$ ): Die erste Momentaufnahme zeigt ein Quasiteilchen mit kugelförmiger Aktivatorisofläche in der Mitte eines dreidimensionalen Grundgebiets. Die oszillierenden Ausläufer des Quasiteilchens sind in dem Schnittdiagramm zu erkennen.
2. **Reihe** ( $t = 210$ ): Aus der Isoflächendarstellung und dem Schnittdiagramm wird ersichtlich, dass sich das Quasiteilchen parallel zur  $z$ -Achse in die Länge zieht und sich die oszillierenden Ausläufer gleichzeitig weiter ausprägen.
3. **Reihe** ( $t = 240$ ): Während sich das Quasiteilchen immer noch parallel zur  $z$ -Achse ausdehnt, haben sich in der  $x \times y$ -Ebene des Quasiteilchens acht großamplitudige Störungen ausgebildet. Aus dem Schatten der Isoflächen wird deutlich, dass diese Störungen kreisförmig um das Ausgangsquasiteilchen angeordnet sind. Die Störungen wachsen also ebenso wie im zweidimensionalen Fall (Abb. 5.3, Reihe 2) auf den oszillierenden Ausläufern des Quasiteilchens an. In diesem Fall wird jedoch die  $x \times y$ -Ebene bevorzugt, was insofern etwas besonderes ist, da die oszillierenden Ausläufer das Quasiteilchen in allen Raumrichtungen umgeben. Desweiteren zeigt die Isoflächendarstellung, dass bereits vier der acht anwachsenden Störungen damit begonnen haben, sich parallel zur  $z$ -Achse auszudehnen.

Abbildung 5.5: Destabilisierung eines Quasiteilchens in der Nähe der Turing-Bifurkation (folgende Seite). Dargestellt sind in fünf Reihen jeweils Momentaufnahmen der Turing-Destabilisierung eines Quasiteilchens, wobei die Zeit von oben nach unten verläuft. Jede Momentaufnahme besteht aus drei Diagrammen. Die linke Spalte zeigt das normierte Aktivatorintegral des gesamten Stoßprozesses mit einer Raute als Zeitindex, der den Zeitpunkt der jeweiligen Momentaufnahme markiert. Die mittlere Spalte zeigt Isoflächendarstellungen des Aktivators  $u$  (rot) für  $u(x,y,z)=-0.5$ . In der rechten Spalte wird ein Schnitt durch den Aktivator  $u$  (rot) und den Inhibitor  $v$  (grün) gezeigt. Der Schnitt verläuft parallel zur  $z$ -Achse bei  $x=0.5$  und  $y=0.5$ . Die Parameter dieser Simulation entsprechen Abb. 5.3, jedoch mit Diskretisierung  $= 100 \times 100 \times 100$  und  $\kappa_1 = -14.0$ . Die erste Momentaufnahme zeigt die kugelförmige Aktivatorisofläche eines Quasiteilchens, dessen oszillierende Ausläufer in dem Schnittdiagramm zu erkennen sind. In der zweiten Momentaufnahme haben sich die oszillierende Ausläufer weiter ausgeprägt und das Quasiteilchen hat begonnen sich parallel zur  $z$ -Achse auszudehnen. Die Isoflächendarstellung der dritten Momentaufnahme zeigt, dass in der  $x \times y$ -Ebene der oszillierenden Ausläufer des Quasiteilchens großamplitudige Störungen anwachsen. Diese entwickeln sich im Folgenden (4. Momentaufnahme) zu Quasiteilchen, deren oszillierenden Ausläufer sich gegenseitig überlagern, so dass sich an diesen Stellen neue Quasiteilchen ausbilden. Desweiteren haben auch die neu entstandenen Quasiteilchen damit begonnen sich wurmförmlich auseinanderzuziehen. In der 5. Momentaufnahme haben sich die Quasiteilchen mittlerweile bis an die Grundgebietsränder ausgedehnt. Dennoch ist die Ausbildung neuer Quasiteilchen noch nicht abgeschlossen, wie aus der Zeitreihe des normierten Aktivatorintegrals ersichtlich wird. Der Entstehungsprozess wird sich solange fortsetzen, bis das gesamte Grundgebiet durch neu entstehende und sich wurmförmlich ausdehnende Quasiteilchen angefüllt ist. Ein Film, der die Destabilisierung dieser Simulation in hoher Zeitauflösung dokumentiert, befindet sich auf der beigelegten CD-ROM (Vgl. Anhang D).

**4. Reihe** ( $t = 300$ ): Mittlerweile haben sich auch die in Momentaufnahme 3 noch recht kleinen Störungen so weit entwickelt, dass in den Überlagerungen ihrer oszillierenden Ausläufern weitere Störungen anwachsen. Diese entstehen allerdings nicht mehr ausschließlich in der  $x \times y$ -Ebene, sondern an beliebigen Raumpunkten. Parallel zu dem Ausbilden neuer Störungen, dehnen sich die bereits entstandenen Störungen wurmförmlich aus.

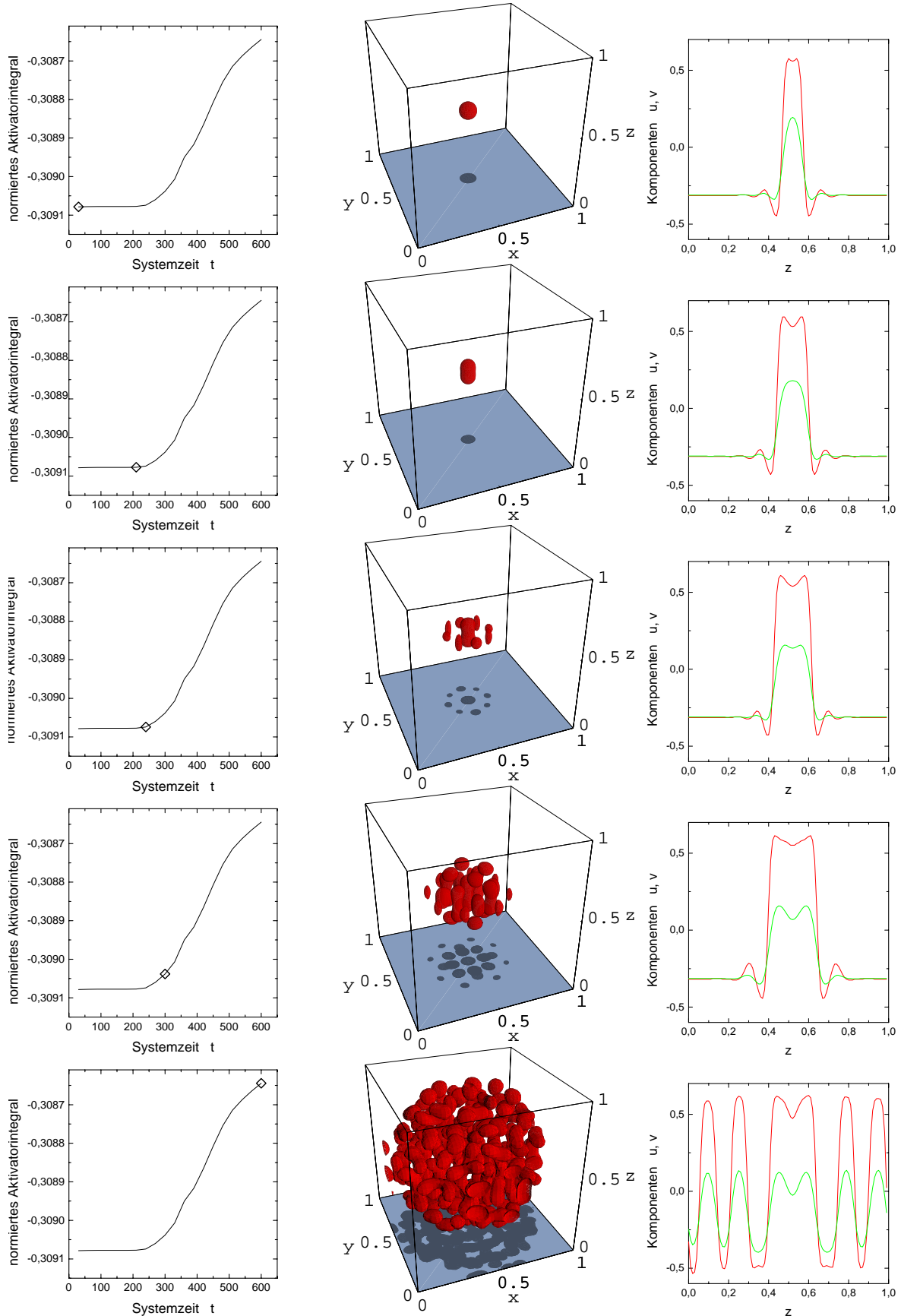


Abb. 5.5: Destabilisierung eines Quasiteilchens in der Nähe einer Turing-Bifurkation. Bildunterschrift auf vorheriger Seite.

**5. Reihe** ( $t = 480$ ): Die großamplitudigen Strukturen haben sich mittlerweile so weit ausgebreitet, dass sie an die Ränder des Grundgebiets stoßen. Wie die Zeitreihe des normierten Aktivatorintegrals zeigt, hat dieser Prozeß sein Ende noch nicht erreicht und es werden weiterhin neue Quasiteilchen entstehen, bis das Grundgebiet vollständig angefüllt sein wird. Insgesamt bilden die Quasiteilchen einen chaotisch anmutenden Haufen, wobei sie sich anscheinend so lange wurmförmig ausdehnen, bis sie vollkommen von anderen Quasiteilchen umgeben sind. So zeigt das Schnittdiagramm im Intervall  $z \in [0.4; 0.65]$  den Schnitt des wurmförmig ausgedehnten Ausgangsquasiteilchens, dass sich im Vergleich zur 4. Momentaufnahme nicht wesentlich ausgedehnt hat, weil sich bei  $z < 0.4$  und  $z > 0.65$  weitere Quasiteilchen gebildet haben. Im Schnittdiagramm wird ebenfalls deutlich, dass die Aktivatorminima zwischen den Quasiteilchen erheblich niedriger sind, als bei den oszillierenden Ausläufern eines einzelnen Quasiteilchens (Vgl. Schnittdiagramm der 1. Reihe). Insofern kann das normierte Aktivatorintegral in diesem Fall nicht gemäß Gleichung (4.5) als Maß für die Anzahl der Quasiteilchen auf dem Grundgebiet verwendet werden.

### 5.4.2 Die Turing-Destabilisierung eines homogenen dreidimensionalen Systems

In diesem Abschnitt wird die Turing-Destabilisierung eines homogenen dreidimensionalen Systems diskutiert, wobei insbesondere die Erkenntnisse aus der zweidimensionalen Simulation (Abschnitt 5.3.2) und aus der Turing Destabilisierung eines Quasiteilchens des vorherigen Abschnitts einbezogen werden.

Als Grundlage dieser Untersuchung dient wiederum eine Simulation, dessen Ergebnis in Abbildung 5.6 dargestellt ist. Als Anfangsbedingung wurde ein homogenes dreidimensionales Grundgebiet ausgewählt, welches durch die Wahl  $\kappa_1 > \kappa_{1,c}$  instabil gegen Turing-Destabilisierung ist.

Die Isoflächendarstellung der Aktivators in Abbildung 5.6b zeigt ein Grundgebiet, das mit Quasiteilchen komplett angefüllt ist. Im Hinblick auf die in Abschnitt 5.3.2 besprochene zweidimensionale Turing-Kaskade entspricht dieses Simulationsergebnis genau den Erwartungen an eine dreidimensionale Turing-Kaskade. Allerdings muss mit Bezug auf die Turing-Destabilisierung eines Quasiteilchens (Abschnitt 5.4.1) darauf hingewiesen werden, dass die besprochene Simulation auf einem kleinen Grundgebiet mit  $l_x = 0.3$  gerechnet wurde. Deshalb konnten sich alle kleinamplitudigen Störungen des Grundgebiets (Vgl. auch Abb. 5.2, Reihe 1) nahezu gleichzeitig zu großampli-

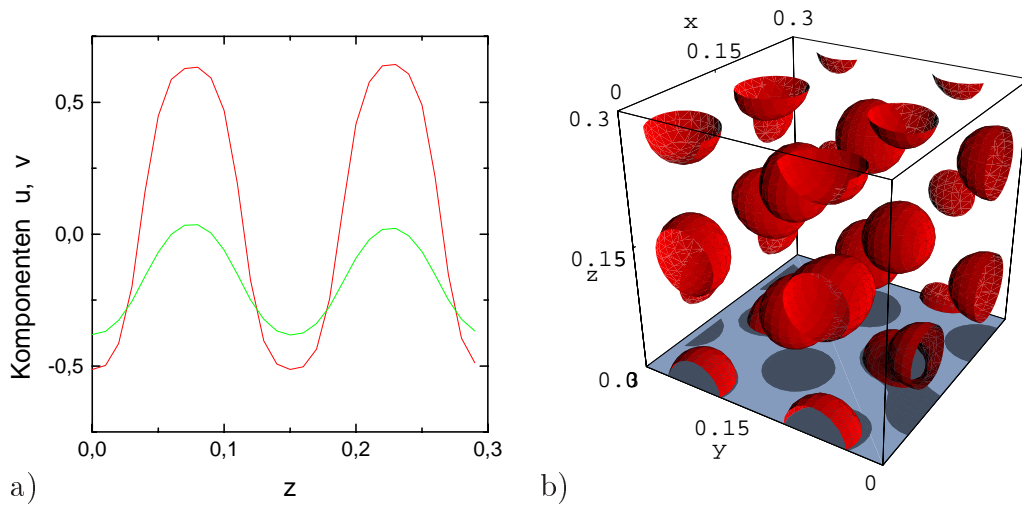


Abbildung 5.6: *Dreidimensionale Turing-Kaskade. Schnitt a) und Aktivatorisoflächen b) einer dreidimensionalen Turing-Kaskade bei  $t=1120$ . Die Parameter dieser Simulation entsprechen Abb. 5.3 jedoch mit  $l_x = 0.3$  und  $\kappa_1 = -13.3512$ . Der Schnitt a) zeigt die Komponenten  $u$  (rot) und  $v$  (grün) in Laufrichtung parallel zur  $z$ -Achse bei  $y=0.33$  und  $x=0.5$ . Da bei dieser Turing-Kaskade die Destabilisierung eines relativ kleinen homogenen Grundgebiets  $l_x = 0.3$  simuliert wurde, konnten sich alle kleinamplitudigen Störungen (Vgl. auch Abb. 5.2, Reihe 1) nahezu gleichzeitig zu Quasiteilchen ausbilden und das Grundgebiet vollständig füllen. Deshalb blieb den entstandenen Quasiteilchen kein Platz um sich wurmförmig auszudehnen (Vgl. Abb. 5.5).*

tudigen Störungen ausbilden, woraufhin kein Platz mehr zum wurmförmigen Ausdehnen des einzelnen Quasiteilchens übrig blieb. Bei dem Ergebnis der vorgestellten Simulation handelt es sich also um eine randbestimmte Struktur, die auf einem größeren Grundgebiet eine andere Form annehmen könnte.



# Diskussion und Ausblick

Nachdem in der vorliegenden Diplomarbeit dissipative Quasiteilchen als Lösung von Reaktions-Diffusions-Systemen vorgestellt wurden, werden die vorliegenden Ergebnisse im Folgenden kurz zusammengefasst, diskutiert und in einem weiterführenden Zusammenhang betrachtet.

Die in Kapitel 5 diskutierte Erzeugung von dissipativen Quasiteilchen zeigt für zweidimensionale Reaktions-Diffusions-Systeme zwar erstaunliche Ähnlichkeit mit den Beobachtungen in Gleichspannungs-Gasentladungs-Systemen [Astrov, Logvin 1997], jedoch gibt es einen elementaren Unterschied: Während das Gasentladungs-System im Experiment bei jedem neu entstandenen Filament erneut durch Erhöhung der Versorgungsspannung destabilisiert werden muss, reicht in der Simulation des zweikomponentigen Reaktions-Diffusions-Systems eine einzige Destabilisierung aus, um eine Filamentkaskade zu initialisieren. Um auch in den Simulationen ein sukzessives Ausbilden von Filamenten zu beobachten, könnte die Nichtlinearität im Reaktionsterm des Aktivators (5.2) an die Kennlinie eines Gasentladungs-Systems angepasst werden.

Die Untersuchung der Bifurkation vom stationären zum laufenden Quasiteilchen in Kapitel 3 liefert erstaunliche Ergebnisse: Während die analytisch bestimmbaren Bifurkationspunkte annähernd exakt mit den aus Simulationen gewonnenen Bifurkationspunkten übereinstimmen, weichen die simulierten Quasiteilchengeschwindigkeiten erheblich von den analytisch bestimmten Quasiteilchengeschwindigkeiten ab. Da dieser Effekt vermutlich auf die Diskretisierung des Grundgebiets zurückzuführen ist, müssten Quasiteilchengeschwindigkeiten erneut mit wesentlich höheren Grundgebietsauflösungen simuliert werden. Diese Simulationen sind bisher noch nicht durchgeführt worden, da der Rechenaufwand hierfür sehr groß wäre.

Zurückzuführen ist dies darauf, dass die vorgestellten numerischen Methoden zur Lösung der dreidimensionalen Reaktions-Diffusions-Systeme das Grundgebiet mit einem regelmäßigen Gitter von Diskretisierungspunkten auflösen. Sinnvoller wäre es jedoch, lediglich die Flanken der großamplitudigen Strukturen mit hoher Auflösung zu diskretisieren. Diese Möglichkeit wird von so ge-

nannten Finite-Elemente-Verfahren geboten, die zwar einen erheblich höheren Programmieraufwand als das Finite-Differenzen-Verfahren erfordern, dafür jedoch auch Simulationen mit hohen Grundgebietsaufösungen in vertretbarer Zeit rechnen.

Somit würde der Rechenzeitaufwand für die Simulation von Quasiteilchenphänomenen erheblich durch das Finite-Elemente-Verfahren reduziert, so dass die noch offenen Fragestellungen bezüglich dissipativer Quasiteilchen effektiver und intensiver mittels numerische Simulationen untersucht werden könnten.

Die in Kapitel 4 untersuchten Stoßszenarien laufender Quasiteilchen zeigen den ausgeprägten Teilchencharakter dieser großamplitudigen Strukturen, der sowohl bei dem elastischen Stoß, als auch bei der Quasiteilchenvernichtung und der kurzzeitigen Quasiteilchenverschmelzung deutlich wird. Dabei weist der analytische Zugang bezüglich des elastischen Stoßes zweier Quasiteilchen eine hohe Übereinstimmung mit der Simulation auf.

Darüberhinaus stellen sich bisher nicht geklärte Fragen aus der Verschmelzung zweier Quasiteilchen. Hier könnte eine Modenanalyse des Verschmelzungszustandes (Compound-State) klären, unter welchen Voraussetzungen ein Verschmelzungszustand verlöscht, bzw. in einen Aktivator torus übergeht. Ungeklärt ist desweiteren, ob ein Aktivator torus auch in mehr als zwei Quasiteilchen aufbrechen kann.

Abschließend lässt sich feststellen, dass dissipative Quasiteilchen bisher unbekannte Eigenschaften dreidimensionaler Reaktions-Diffusions-Systeme zeigen, die bei Weitem noch nicht erschöpfend erforscht sind und somit ausgedehnte Untersuchungen erfordern.

# Anhang A

## Die Steuerung des Programms 3k3d über die BTC-Dateien

Die Lösung des dreikomponentigen Reaktions-Diffusions-Systems mittels des Programms 3k3d wird mit BTC-Dateien gesteuert, die sich einer einfachen Struktur bedienen. Dabei wird einer Variablen ein Wert nach folgendem Muster zugewiesen:

*Variablenname Wert*

Der Variablenname muss bei dieser Zuweisung korrekt unter Berücksichtigung von Groß- und Kleinschreibung angegeben werden, so dass der Variablen ein Zahlenwert oder eine Buchstabenfolge übergeben werden kann. Die Variablen lassen sich allgemein in vier funktionelle Gruppen zuordnen:

- Simulationssteuerung
- Simulationsauswertung
- Numerik-Parameter
- Reaktions-Diffusions-Parameter (1.6)

Hierbei läßt sich die Gruppe der Simulationsauswertung in zwei Untergruppen gliedern, die sich auf die Dokumentation verschiedener Zeitreihen beziehen. Dies sind die zeitliche Entwicklung der Lösungen des dreikomponentigen Reaktions-Diffusions-Systems in Form von binären EXF-Dateien (Vgl. Anhang B) und die zeitliche Entwicklung des normierten Aktivatorintegrals (4.2) in Form von ASCII-Dateien. Desweiteren ist es zum Start der Simulation zwingend erforderlich, den Variablen der Simulationssteuerung (also `START_FILE`, `STOP_FILE` und `END_COUNTER`) Werte zuzuweisen.

Einen Überblick über die Variablen, die in den Steuerungsdateien zwingend oder wahlweise gesetzt werden müssen, mitsamt einer Erläuterung ihrer Bedeutung, liefert die nachfolgende Tabelle.

<b>Simulationssteuerung</b>	
(Variablen müssen zwingend in der BTC-Datei gesetzt werden.)	
Variablenname	Bedeutung
START_FILE	Name der binären VBI-Datei, aus der die Numerik- und Reaktions-Diffusions-Parameter, sowie die Startverteilung der Komponenten $u$ , $v$ und $w$ gelesen werden.
END_FILE	Name der binären VBI-Datei, in dem die Numerik- und Reaktions-Diffusions-Parameter, sowie die Endverteilung der Komponenten $u$ , $v$ und $w$ zum Zeitpunkt (END_COUNTER $\delta_t$ ) gespeichert werden.
END_COUNTER	Anzahl der Zeitschritte in Einheiten von $\delta_t$ , über die die zeitliche Entwicklung der Komponenten $u$ , $v$ und $w$ berechnet werden.

<b>Numerik-Parameter</b>	
(Das Setzen dieser Variablen überschreibt die Numerik-Parameter des START_FILES.)	
Variablenname	Bedeutung
Randbedingung	0: Neumann-Randbedingung 2: Zyklische Randbedingung 3: Ring-Randbedingung (Vgl. Abschnitt 2.2.2)
rausch	Amplitude eines zufälligen Werts, um den die Komponenten $u$ , $v$ und $w$ nach jedem Zeitschritt verauscht werden.
ingenau_soll	Konvergenzkriteriums $K_k$ (2.25), bei dessen Unterschreitung das Successive Overrelaxation Lösungsverfahren die Iteration als konvergiert erkennt und den nächsten Zeitschritt berechnet (Abschnitt 2.3)
ZYLINDER_KOORDINATEN	Dieser Variablen muss kein Wert zugewiesen werden, jedoch bewirkt diese Buchstabenfolge die Aktivierung des $\frac{1}{x}$ -Terms im Diffusions-Operator durch Setzen von $K_S = 1$ (2.15)
ht	Zeitschrittweite $\delta_t$ (2.5)
omega	Parameter $\omega$ des Successive Overrelaxation Lösungsverfahrens (2.24)

lx	Kantenlänge $l_x$ des Grundgebiets $\mathbb{G}$ parallel zur x-Achse, die Kantenlängen $l_y$ und $l_z$ berechnen sich nach (2.3)
auf1_x	Anzahl $a_x$ der Diskretisierungspunkte des Grundgebiets $\mathbb{G}$ parallel zur x-Achse (2.2)
auf1_y	Anzahl $a_y$ der Diskretisierungspunkte des Grundgebiets $\mathbb{G}$ parallel zur y-Achse (2.2)
auf1_z	Anzahl $a_z$ der Diskretisierungspunkte des Grundgebiets $\mathbb{G}$ parallel zur z-Achse (2.2)

<b>Simulationsauswertung:</b> Zeitliche Entwicklung der Lösungen wird in EXF-Dateien gespeichert, wenn alle Variablen gesetzt sind.	
Variablenname	Bedeutung
FILM_FILE	Name der EXF-Datei, ohne Dateierdung
FILM_INTERVALL	Zahlenwert, der den zeitlichen Abstand der Filmaufnahmen in Einheiten von $\delta_t$ angibt

<b>Simulationsauswertung:</b> Zeitreihe des normierten Aktivatorintegrals (4.2) wird angelegt, wenn alle Variablen gesetzt sind.	
Variablenname	Bedeutung
ZEIT_FILE	Name der ASCII-Datei, in der die Zeitreihe des normierten Aktivatorintegrals gespeichert wird.
zeitjump	Zahlenwert, der den zeitlichen Abstand der Zeitreihenaufnahmen in Einheiten der Zeitschrittweite $\delta_t$ angibt.

<b>Reaktions-Diffusions-Parameter (1.6)</b> (Das Setzen dieser Variablen überschreibt die Parameter des START_FILES.)	
Variablenname <sup>1</sup>	Bedeutung
delta	Zeitskalenparameter $\tau$ des langsamen Inhibitors $v$
delta_2	Zeitskalenparameter $\theta$ des schnellen Inhibitors $w$
dv	Diffusionskonstante $D_u$ des Aktivators $u$
dw	Diffusionskonstante $D_v$ des langsamen Inhibitors $v$
du	Diffusionskonstante $D_w$ des schnellen Inhibitors $w$
lambda	Parameter $\lambda$ der kubischen Nichtlinearität (1.3)
kappa_1	Parameter $\kappa_1$ im Reaktionsterm des Aktivators $u$

<sup>1</sup>Die Variablenamen weichen zum Teil erheblich von den Parameternamen des Reaktions-Diffusions-Systems (1.6) ab, da das Programm 3k3d einer älteren arbeitsgruppeninternen Nomenklatur folgt, während sich diese Arbeit an der Notation der Fachliteratur orientiert.

kappa_2	Parameter $\kappa_2$ der globalen Rückkopplung im Reaktionsterm des Aktivators $u$ beim zweikomponentigen Reaktions-Diffusions-System (5.2)
kappa_3	Rückkopplungsparameter $\kappa_3$ des schnellen Inhibitors $w$ im Reaktionsterm des Aktivators $u$

# Anhang B

## Die Dateiformate der binären Ergebnisdateien des Programms 3k3d

### B.1 Die Fileheader der binären Ergebnisdateien

Das Programm 3k3d erzeugt zwei Arten von binären Ergebnisdateien. Diese tragen die Dateierendungen `VBI` und `EXF` und unterscheiden sich dadurch, dass in `VBI`-Dateien jeweils nur eine Momentaufnahme der Lösung  $(u', v', w')$  des dreikomponentigen Reaktions-Diffusions-Systems mit 64 Bit Genauigkeit im `G_floating` Format [Sites 1992, S. I2-5] gesichert wird, während in `EXF`-Dateien Zeitreihen der Lösungen  $(u', v', w')$  mit 8 Bit Genauigkeit (Byte) gespeichert werden.

In beiden Dateitypen werden zusätzlich zu den Momentaufnahmen die Simulationsparameter (Anhang A) in sogenannten Fileheadern abgelegt, deren Aufbau in der Datei `3k3d.h` auf der beigelegten CD-ROM im Verzeichnis `..\3k3d\` dokumentiert ist. Desweiteren erhält jede Momentaufnahme der `EXF`-Dateien einen Kontroll-Datensatz namens `ERGEBNIS`, der Informationen über die Zeitreihenaufnahme enthält. Dieser Datensatz wird ebenfalls in der Datei `3k3d.h` definiert.

### B.2 Die VBI-Datei

Die Double-Variablen der `VBI`-Dateien werden im `G_floating` Format [Sites 1992, S. I2-5] gespeichert. Desweiteren muss beachtet werden, dass es zwei verschie-

dene VBI-Dateien gibt, die durch die ersten beiden Bytes der Datei - die Datei-ID - unterschieden werden können.

Tabelle B.1: Die Struktur der binären VBI-Dateien

Datei-ID (2 Bytes)	4 und 0	7 und 0
Fileheader (Vgl. 3k3d.h)	fileheader2	fileheader3
Aktivator $u$	jeweils Double-Array mit	
langsamer Inhibitor $v$	auf1_x * auf1_y * auf1_z	
schneller Inhibitor $w$ , falls $\kappa_3 \neq 0$	Elementen (Vgl. S. 78)	

### B.3 Die EXF-Datei

Die Variablen des ERGEBNIS-Datensatzes, der zu jeder Zeitreihenaufnahme abgespeichert wird, haben folgende Definition:

Tabelle B.2: Die Variablen des ERGEBNIS-Datensatzes

Variablenname <sup>1</sup>	Bedeutung
integral	normiertes Aktivatorintegral (4.2)
v_max, v_min	$\max(u(\underline{x}, t')), \min(u(\underline{x}, t'))$ für alle $\underline{x} \in \mathbb{G}$ zum Zeitpunkt $t = t'$ der Momentaufnahme
w_max, w_min	$\max(v(\underline{x}, t')), \min(v(\underline{x}, t'))$ für alle $\underline{x} \in \mathbb{G}$ zum Zeitpunkt $t = t'$ der Momentaufnahme
u_max, u_min	$\max(w(\underline{x}, t')), \min(w(\underline{x}, t'))$ für alle $\underline{x} \in \mathbb{G}$ zum Zeitpunkt $t = t'$ der Momentaufnahme
summe_v_h2	$\Sigma u(\underline{x}, t)^2 \quad \forall \underline{x} \in \mathbb{G}$
summe_w_h2	$\Sigma v(\underline{x}, t)^2 \quad \forall \underline{x} \in \mathbb{G}$
summe_u_h2	$\Sigma w(\underline{x}, t)^2 \quad \forall \underline{x} \in \mathbb{G}$
system_time	Systemzeit $t'$ der Momentaufnahme
iter	Zeitschritt $k$ (2.5)

Während die Double-Variablen der Fileheader und des Kontroll-Datensatzes im G\_floating Format gespeichert werden [Sites 1992, S. I2-3], liegen die eigentlichen Momentaufnahmen der Lösungen des dreikomponentigen Reaktions-Diffusions-Systems (1.6) als Byte-Arrays ( $u_B(\underline{x}), v_B(\underline{x}), w_B(\underline{x})$ ) vor, wo-

<sup>1</sup>Die Variablenamen weichen zum Teil erheblich von den Parameternamen des Reaktions-Diffusions-Systems (1.6) ab, da das Programm 3k3d einer älteren arbeitsgruppeninternen Nomenklatur folgt, während sich diese Arbeit an der Notation der Fachliteratur orientiert.



bei jeder Wert im Intervall

$$u_B, v_B, w_B \in [16; 255] \subset \mathbb{N} \tag{B.1}$$

liegt.

Dabei entsprechen die größten und kleinsten Byte-Werte den Maxima und Minima der Komponenten  $u$ ,  $v$  und  $w$ , so dass diese über

$$u(\underline{x}) = \frac{1}{238} (u_B(\underline{x}) - 16) (\max(u) - \min(u)) + \min(u) \tag{B.2}$$

in das Intervall  $[\min(u); \max(u)] \subset \mathbb{R}$  zurückskaliert werden können. Entsprechendes gilt für  $v$  und  $w$ .

Desweiteren muss beachtet werden, dass es auch bei den EXF-Dateien verschiedene Versionen gibt, die durch das erste Byte der Datei - die Datei-ID - unterschieden werden können.

Tabelle B.4: Die Struktur der binären EXF-Dateien

Datei-ID (1 Byte)		44	45
Für jede Momentaufnahme der Zeitreihe	Fileheader (Vgl. 3k3d.h)	fileheader2	fileheader3
	Kontroll-Datensatz (Vgl. 3k3d.h)	ERGEBNIS	
	Aktivator $u$	jeweils Byte-Array mit	
	langsamer Inhibitor $v$	aufl_x * aufl_y * aufl_z	
	schneller Inhibitor $w$ , falls $\kappa_3 \neq 0$	Elementen (Vgl. S. 78)	

# Anhang C

## Das Programm `exf2a3k` zur Berechnung von Aktivatorschwerpunkten aus EXF-Dateien

### C.1 Die Funktionsweise des Programms `exf2a3k`

Das Programm `exf2a3k` wurde in der Programmiersprache C im Rahmen dieser Diplomarbeit geschrieben und berechnet die Aktivatorschwerpunkte  $\underline{x}_u$  von Quasiteilchen auf ein-, zwei- und dreidimensionalen Grundgebieten gemäß (3.6). Der Sourcecode des Programms liegt zur Einsicht auf der beigelegten CD-ROM im Verzeichnis `.. \exf2a3k\` vor.

Das Programm `exf2a3k` läuft unter dem Betriebssystem VMS auf Alpha-Workstations und wird mit der Kommandozeile

```
exf2a3k [-ASW Schwellwert] Dateiname
```

aufgerufen, wobei `exf2a3k` auf den compilierten Sourcecode des Programms verweist und `Dateiname` den Namen einer EXF-Datei bezeichnet. Der in Klammern eingefasste Teil der Kommandozeile legt den *Schwellwert*  $u_S$  fest, der für die Berechnung der Aktivatorschwerpunkte  $\underline{x}_u$  nach (3.6) benötigt wird. Ohne Angabe dieser Option wird der Aktivatorschwerpunkt mit  $u_S = -0.5$  berechnet.

Das Programm `exf2a3k` lädt jeweils einzelne Momentaufnahmen der EXF-Datei `Dateiname` in den Arbeitsspeicher und sucht das Grundgebiet nach einem Punkt

$$\underline{x}_1 \in \mathbb{G}_1 \subset \mathbb{G} : u(\underline{x}_1) \geq u_S \quad (\text{C.1})$$

ab, so dass mit  $\mathbb{G}_1 \subset \mathbb{G}$  eine abgeschlossene zusammenhängende Teilmenge  $\mathbb{G}_1$  des Grundgebiets  $\mathbb{G}$  vorliegt, auf der sich ein Quasiteilchen befindet. Ausgehend von dem Punkt  $\underline{x}_1$  werden alle Punkte  $\underline{x}'_1 \subset \mathbb{G}_1$  mit  $u(\underline{x}'_1) \geq u_S$  mittels eines rekursiven Algorithmus' gesucht und in die Berechnung des Aktivatorschwerpunktes  $\underline{x}_u^1$  miteinbezogen. Sind alle Punkte eines Quasiteilchens gefunden, wird das Grundgebiet nach weiteren Quasiteilchen auf Teilmengen  $\mathbb{G}_i$  abgesucht und deren Aktivatorschwerpunkte  $\underline{x}_u^i$  berechnet. Die Aktivatorschwerpunkte  $\underline{x}_u^i$  jedes gefundenen Quasiteilchens werden für jede Momentaufnahme in eine ASCII-Datei *Dateiname.a3k* als vierreihiger Vektor  $\underline{x}_S^i = (x_{S,1}^i, x_{S,2}^i, x_{S,3}^i, x_{S,4}^i)$  geschrieben, wobei die Komponente  $x_{S,4}^i$  die Aktivatormasse

$$x_{S,4}^i = \Sigma u(\underline{x}) \quad \forall \underline{x} \in \mathbb{G}_i : u(\underline{x}) \geq u_S \tag{C.2}$$

bezeichnet.

## C.2 Das Format der a3k-Dateien

Die a3k-Dateien werden im ASCII-Format gespeichert und haben folgende allgemeine Struktur:

Tabelle C.1: Die allgemeine Struktur der a3k-Dateien

Datei-ID		
Schwellwert $u_S$		
Vektor $\underline{x}_S^1$ des 1. gefundenen Quasiteilchens		der 1. Momentaufnahme
Vektor $\underline{x}_S^2$ des 2. gefundenen Quasiteilchens		
⋮		
Vektor $\underline{x}_S^n$ des $n$ . gefundenen Quasiteilchens		
Vektor $\underline{x}_S^1$ des 1. gefundenen Quasiteilchens		der 2. Momentaufnahme
⋮		⋮
Vektor $\underline{x}_S^{n'}$ des $n'$ . gefundenen Quasiteilchens		der $m$ . Momentaufnahme

Die verschiedenen Versionen der a3k-Dateien unterscheiden sich anhand ihrer Datei-ID wie folgt:

Tabelle C.2: Die verschiedenen Versionen der a3k-Dateien

Datei-ID	
0	$x_{S,1}$ : z-Koordinate des Aktivatorschwerpunkts $\underline{x}_u$ $x_{S,2}$ : y-Koordinate $\vdots$ $x_{S,3}$ : x-Koordinate $\vdots$ $x_{S,4}$ : Aktivatormasse des Quasiteilchens (C.2) Wenn ein Quasiteilchen bei zyklischen Rändern über diese hinausragt, liefert das Programm zwei Schwerpunkte.
1	$x_{S,1}$ : z-Koordinate des Aktivatorschwerpunkts $\underline{x}_u$ $x_{S,2}$ : y-Koordinate $\vdots$ $x_{S,3}$ : x-Koordinate $\vdots$ $x_{S,4}$ : Aktivatormasse des Quasiteilchens (C.2)
2	$x_{S,1}$ : x-Koordinate des Aktivatorschwerpunkts $\underline{x}_u$ $x_{S,2}$ : y-Koordinate $\vdots$ $x_{S,3}$ : z-Koordinate $\vdots$ $x_{S,4}$ : Aktivatormasse des Quasiteilchens (C.2)

# Anhang D

## Die Filme ausgewählter Simulationen

Da die in dieser Diplomarbeit diskutierten Simulationen nur anhand weniger Momentaufnahmen diskutiert werden können, liegen Filme dieser Simulationen mit hohen Zeitauflösungen auf der beigelegten CD-ROM zur Einsicht bei. Dabei werden die Simulationen mittels Isoflächendarstellungen des Aktivators  $u$  (rot) und gegebenenfalls des langsamen Inhibitors  $v$  (grün) gezeigt. Die Filme befinden sich im Verzeichnis `..\Filme\` der CD-ROM und werden über die Abbildungen der Diplomarbeit zugeordnet.

Tabelle D.1: *Verzeichnis der Filme*

Abbildung	Name der Filmdatei
4.2	sqt250199a4_elastischerStoß.AVI sqt250199a4_elastischerStoß.MOV sqt250199a4_elastischerStoß.MPG
4.4	sqt270798b9_Quasiteilchenvernichtung.AVI sqt270798b9_Quasiteilchenvernichtung.MOV sqt270798b9_Quasiteilchenvernichtung.MPG
4.5	sqt120898a9_kurzzeitigeVerschmelzung.AVI sqt120898a9_kurzzeitigeVerschmelzung.MOV sqt120898a9_kurzzeitigeVerschmelzung.MPG
4.6	sqt120898a10_Aktivatorortorus.AVI sqt120898a10_Aktivatorortorus.MOV sqt120898a10_Aktivatorortorus.MPG
5.5	kaskade311298a_3DDestabilisierung.AVI kaskade311298a_3DDestabilisierung.MOV kaskade311298a_3DDestabilisierung.MPG

# Anhang E

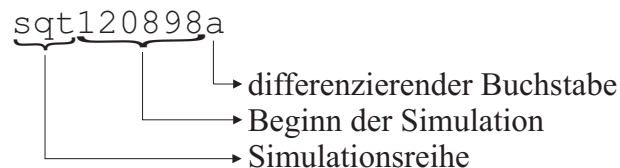
## Der Zugriff auf die Rohdaten

Gelegentlich wird es erwünscht, die Rohdaten einer Simulation unter neuen Gesichtspunkten ein weiteres Mal auszuwerten, wobei als Rohdaten diejenigen Daten verstanden werden, die als Ergebnis des Programms 3k3d geliefert werden und Lösungen der Reaktions-Diffusions-Systeme enthalten.

Als Zugriff auf die Simulationsdaten, die dieser Diplomarbeit zugrundeliegen, bieten sich dabei die Abbildungen dieser Arbeit an. Deshalb wird in der nachfolgenden Tabelle jeder Abbildung ein Simulationsname zugeordnet, der einer einheitlichen Nomenklatur folgt. Der Name einer Simulation setzt sich im Wesentlichen aus drei Elementen zusammen:

- Der Name der Simulationsreihe, dies sind `prlp`, `sqt` und `kaskade`
- Das Datum des Tages, an dem die Simulation gestartet wurde
- Einem Buchstaben, der die Simulationen eines Tages differenziert

Ein typischer Simulationsname hat also folgende Form



Alle von den Rohdaten einer Simulation abgeleiteten Daten (also Auswertungen) tragen den Simulationsnamen und gegebenenfalls Versionsnummer der Auswertung oder weitere Erläuterungen.

Tabelle E.1: *Verzeichnis der verwendeten Simulationen*

Abbildung	Simulation oder deren Auswertung
Titelbild	sqt120898a11
1.4	prlp030399a
1.5	prlp020399c
1.6	prlp020399c
1.7	prlp020399b
1.8	sqt210199a
3.1	prlp150499a
	prlp150499b
	prlp150499c
	prlp150499d
	prlp150499e
	prlp150499f
	prlp150499g
	prlp150499h
	prlp150499i
	prlp150499j
	prlp300499a
4.2	sqt250199a
4.3	sqt270798b9
4.4	sqt270798b9
4.6	sqt120898a7
4.5	sqt120898a9
5.1	kaskade161198b
5.2	kaskade161198b2
5.3	kaskade181298d
	kaskade211298b
5.4	kaskade091198a
	kaskade121198a
	kaskade121198b
	kaskade161198a
	kaskade161198b
5.5	kaskade311298a
5.6	kaskade050599a
	kaskade141298c

Die in der obigen Tabelle aufgeführten Rohdaten liegen auf der CD-ROM im Verzeichnis `..\Rohdaten\` als ZIP-Dateien vor.

# Anhang F

## Die beigelegte CD-ROM

Im Folgenden werden die Verzeichnisse der beigelegten CD-ROM und ihr Inhalt zusammengefasst:

- **3k3d:** Sourcecode und Makefiles des Programms 3k3d
- **Diplomarbeit:**
  - Die Diplomarbeit als Postscript und Adobe Acrobat Dokument
  - **Bilder:** Die Origin-Projekte, Mathematica-Notebooks, Pv-Wave-Prozeduren, L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X 2<sub>ε</sub>-Skripte und CorelDRAW-Bilder, die bei der Erstellung der Abbildungen dieser Diplomarbeit verwendet wurden
  - **TeX:** Die L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X 2<sub>ε</sub>-Dateien und EPS-Bilder dieser Diplomarbeit
- **exf2a3k:** Sourcecode und Makefiles des Programms exf2a3k
- **Filme:** Videos im AVI, Quick-Time und MPG Format, die den zeitlichen Verlauf einiger Simulationen verdeutlichen
- **Literatur:** Adobe Acrobat und Postscript Dokumente mit weiterführender Literatur
- **Rohdaten:** Die Rohdaten der Simulationsreihen sqt, prlp und kaskade als ZIP-Dateien



# Abbildungsverzeichnis

Titelbild: Kurzzeitige Verschmelzung zweier Quasiteilchen . . . . .	i
1 Die Fellzeichnungen der Hauskatze Joschi ( <i>felis catus</i> ) als Beispiel für Strukturbildung in der belebten Natur . . . . .	1
1.1 Das Aktivator Inhibitor Prinzip . . . . .	5
1.2 Der Phasenraum und die Phasenraumdynamik eines monostabilen Systems . . . . .	7
1.3 Der Phasenraum und die Phasenraumdynamik eines bistabilen Systems . . . . .	10
1.4 Schnitt und globale Zustandsraumkurve einer stationären Front	13
1.5 Globale Zustandsraumkurve eines stationären Quasiteilchens .	14
1.6 Schnitt und Isoflächen eines stationären dreidimensionalen Quasiteilchens . . . . .	15
1.7 Schnitt und Isoflächendarstellung eines laufenden Quasiteilchens	17
1.8 Globale Zustandsraumkurve eines laufenden dreidimensionalen Quasiteilchens . . . . .	18
2.1 Diskretisiertes Grundgebiet mit Ring-Randbedingung . . . . .	22
2.2 Der diskrete dreidimensionale Diffusions-Operator . . . . .	24
2.3 Flussdiagramm des Programms 3k3d . . . . .	29
2.4 Randpunkte eines aufgeteilten Grundgebiets als Maß für den Kommunikationsaufwand der Parallelisierung . . . . .	30
2.5 Vergleich der Laufzeiten einer Simulation auf dem <i>Intel Paragon</i> und der Cray T3E/512 . . . . .	34
2.6 Parallelitätsgewinn $S_p(N)$ und Effizienz $S_E(N)$ des Paragons in Abhängigkeit von der Prozessoranzahl $N$ . . . . .	35
2.7 Skalierungsgewinn $S_k(N)$ des Paragons in Abhängigkeit der Prozessoranzahl $N$ . . . . .	36
2.8 Parallelitätsgewinn $S_p(N)$ und Effizienz $S_E(N)$ der Cray T3E/512 in Abhängigkeit von der Prozessoranzahl $N$ . . . . .	37
2.9 Skalierungsgewinn $S_k(N)$ der Cray T3E/512 in Abhängigkeit der Prozessoranzahl $N$ . . . . .	38

3.1	Vergleich des analytisch bestimmbaren Bifurkationspunktes vom stationären zum laufenden Quasiteilchen und der analytisch bestimmbaren Quasiteilchengeschwindigkeit in der Nähe des Bifurkationspunktes mit Simulationsergebnissen . . . . .	42
4.1	Stoßprozesse laufender Quasiteilchen . . . . .	45
4.2	Elastischer Stoß zweier Quasiteilchen . . . . .	47
4.3	Das normierte Aktivatorintegral $m_A$ als Maß für die Quasiteilchenanzahl bei einer Quasiteilchenvernichtung . . . . .	48
4.4	Quasiteilchenvernichtung . . . . .	50
4.5	Kurzzeitige Quasiteilchenverschmelzung unter Ausbildung eines transienten Aktivatorortorus . . . . .	53
4.6	Transienter Aktivatorortorus . . . . .	55
5.1	Anregung verschiedener Störungswellenzahlen $k$ durch Turing-Destabilisierung in Abhängigkeit von $\kappa_1$ . . . . .	59
5.2	Turing-Destabilisierung des homogenen Zustands eines zweidimensionalen Systems . . . . .	62
5.3	Destabilisierung eines Filaments in der Nähe der Turing-Bifurkation . . . . .	65
5.4	Die Wechselwirkung zwischen globaler Rückkopplung und der Entstehung von Filamenten . . . . .	68
5.5	Destabilisierung eines Quasiteilchens in der Nähe der Turing-Bifurkation . . . . .	70
5.6	Dreidimensionale Turing-Kaskade . . . . .	73

# Tabellenverzeichnis

3.1	Vergleich der aus Analyse und Simulation bestimmten Bifurkationspunkte . . . . .	42
3.2	Vergleich der aus Analyse und Simulation bestimmten Geschwindigkeitsquadrate der Quasiteilchen . . . . .	43
B.1	Die Struktur der binären VBI-Dateien . . . . .	81
B.2	Die Variablen des ERGEBNIS-Datensatzes . . . . .	81
B.4	Die Struktur der binären EXF-Dateien . . . . .	82
C.1	Die allgemeine Struktur der a3k-Dateien . . . . .	84
C.2	Die verschiedenen Versionen der a3k-Dateien . . . . .	85
D.1	Verzeichnis der Filme . . . . .	86
E.1	Verzeichnis der verwendeten Simulationen . . . . .	88

# Literaturverzeichnis

- [Ammelt et al. 1998] AMMELT, E.; ASTROV, YU. A. und PURWINS, H.-G.: *Hexagon structures in a two-dimensional dc-driven gas discharge system*. In: Physical Review E **58** (6). 1998. S. 7109-7117
- [Astrov, Logvin 1997] ASTROV, YU. A. und LOGVIN, Yu. A.: *Formation of Clusters of Localized States in a Gas Discharge System via a Self-Completion Scenario*. In: Physical Review Letters. **79** (16). 1997. S. 2983-2986
- [Astrov 1999] ASTROV, YU. A.: *Die Beobachtung bewegter Filamente in Gleichspannungs-Gasentladungs-Systemen*. Persönliche Mitteilung. Münster, 1999
- [Bode 1992] BODE, Mathias: *Beschreibung strukturbildender Prozesse in eindimensionalen Reaktions-Diffusions-Systemen durch Reduktion auf Amplitudengleichungen und Elementarstrukturen*. Münster, Universität, Fachbereich 16, Dissertation, 1992
- [Bräunl 1993] BRÄUNL, Thomas: *Parallele Programmierung. Eine Einführung*. Braunschweig/Wiesbaden, 1993
- [Bronštejn 1989] BRONŠTEJN, Ilja N.: *Taschenbuch der Mathematik*. 24. Auflage. Frankfurt a.M., 1989
- [Burkhart 1997] BURKHART, H.: Parallele Programmierung. In: RECHENBERG, Peter und POMBERGER, Gustav (Hrsg.): *Informatik-Handbuch*. München, 1997
- [De Kepper et al. 1994] DE KEPPEP, P.; PERRAUD, J.-J. und DULOS, E.: *Experimental study of stationary Turing Patterns and their interaction with traveling waves in a chemical system*. In: International Journal of Bifurcation and Chaos. **4** (5). 1994. S. 1215-1231

- [Gerthsen, Vogel 1993] GERTSEN, Christian und VOGEL, Helmut: *Physik. Ein Lehrbuch zum Gebrauch neben Vorlesungen*. 17. verbesserte und erweiterte Auflage. Heidelberg: Springer, 1993
- [Gustafson 1988] GUSTAFSON, John L.: Reevaluating Amdahl's Law. In: *Communication of the ACM. Association for Computing Machinery*. **31** (5), 1988, S. 532 f.
- [HLRS 1999a] HÖCHSTLEISTUNGSRECHENZENTRUM STUTTGART (HLRS): MPI-Release, Documentation and known Bugs. In: HÖCHSTLEISTUNGSRECHENZENTRUM STUTTGART (HLRS): *MPI auf der Cray T3E/512*. Zitiert am 5.4.1999. Erhältlich im WWW [http://www.hlrs.de/structure/support/parallel\\_computing/models/mpi/mpi\\_t3e.html#doku](http://www.hlrs.de/structure/support/parallel_computing/models/mpi/mpi_t3e.html#doku)
- [HLRS 1999b] HÖCHSTLEISTUNGSRECHENZENTRUM STUTTGART (HLRS): *Die Cray T3E/512*. Zitiert 8.4.1999. Erhältlich im WWW <http://www.hlrs.de/hpc/platforms/crayt3e>
- [Huntington 1991] HUNTINGTON, H.B.: Diffusion. In: LERNER, Rita G. und TRIGG, George L. (Hrsg.): *Encyclopedia of Physics*. 2. Auflage. VCH, 1991. S.255 ff.
- [Jetschke 1989] JETSCHKE G.: *Mathematik der Selbstorganisation. Qualitative Theorie deterministischer und stochastischer dynamischer Systeme*. Berlin, 1989.
- [Koga, Kuramoto 1989] KOGA, S. und KURAMOTO, Y.: *Localized Patterns in Reaction-Diffusion-Systems* In: Progr. Theor. Phys. **63** (1), 1985, S. 106-121
- [Kopetsch 1989] KOPETSCH, H.: Finite Differenz Verfahren für partielle Differentialgleichungen. In: KERNFORSCHUNGSANLAGE JÜLICH (Veranst.): *Computersimulation in der Physik*. Vorlesungsmanuskript des 20. IFF. Ferienkurs in der Kernforschungsanlage Jülich. Jülich 1989
- [Murray 1988] MURRAY, James. D.: *Wie der Leopard zu seinen Flecken kommt*. In: Spektrum der Wissenschaft. 1988. S. 88ff.
- [Oed 1996] OED, Willfried: *Technische Dokumentation. Cray Research. Massiv-paralleles Prozessorsystem CRAY T3E*. Adobe Acrobat Document. Version vom 11.11.1996. Erhältlich im WWW [http://www.hlrs.de/hpc/platforms/crayt3e/t3e\\_oed.pdf](http://www.hlrs.de/hpc/platforms/crayt3e/t3e_oed.pdf) und auf der beigelegten CD-ROM [../Literatur/t3e\\_oed.pdf](http://www.hlrs.de/Literatur/t3e_oed.pdf)

- [Ölker 1995] ÖLKER, Bernd: *Numerische Untersuchungen an einem Modell zur Beschreibung ein- und zweidimensionaler Stromdichteverteilungen in pnpn-Dioden*. Münster, Fachbereich 16, Diplomarbeit, 1995
- [Or-Guil et al. 1995] OR-GUIL, M.; AMMELT, E.; NIEDERNOSTHEIDE, F.-J. und PURWINS, H.-G.: Pattern formation in activator-inhibitor systems. In: DOELMAN, A. und VAN HARTEN, A. (Hrsg.): *Pitman Research Notes in Mathematics Series*. **335**. Longman, 1995. S. 223-237
- [Or-Guil 1997] OR-GUIL, M.: *Elementare Anregungen und ihre Wechselwirkungen – Untersuchungen von Reaktions-Diffusions-Modellen im Vergleich mit elektrischen Durchbruchexperimenten*. Münster, Fachbereich 16, Diplomarbeit, 1997
- [Or-Guil et al. 1998] OR-GUIL, M.; BODE, M.; SCHENK, C. P. und PURWINS, H.-G.: *Spot Bifurcation in three-component reaction-diffusion systems: The onset of propagation* In: *Physical Review E*. **57** (6), 1998. S. 6432
- [Press 1996] PRESS, William H. et. al.: *Numerical Recipes in C. The Art of Scientific Computing*. 2. Auflage. Cambridge. 1996
- [Purwins, Radehaus 1988] PURWINS, H.-G. und RADEHAUS, Ch.: Pattern Formation on Analogue Parallel Networks. In: HAKEN, H. (Hrsg.): *Neural and Synergetic Computers*. Springer Series in Synergetic. **42**. 1988. S. 137-154
- [Reuter 1992] REUTER, Andreas: *Grenzen der Parallelität*. In: *Informationstechnik* it. **34** (5). 1992, S. 62-74
- [Schenk 1995] SCHENK, Christian Peter: *Wechselwirkung solitärer Strukturen in Reaktions-Diffusions-Systemen*. Münster. Universität, Fachbereich 16, Diplomarbeit, 1995.
- [Schenk 1997] SCHENK, C. P.; OR-GUIL, M.; BODE, M. und PURWINS, H.-G.: *Pulses in Three-Component Reaction-Diffusion Systems on Two-Dimensional Domains*. In: *Physical Review Letters*. **78** (19). S. 3781-3784
- [Schenk 1999] SCHENK, Christian Peter. Münster. Universität, Fachbereich 16, Dissertation, voraussichtlich Sommer 1999.

- [Schilke 1992] SCHILKE, M.: *Entwicklung eines Programmpaketes zur Lösung eines Reaktions-Diffusions-Systems auf einem zweidimensionalen Grundgebiet und Vergleich einiger Lösungen auf eindimensionalem Grundgebiet mit einem speziellen physikalischem System*. Münster. Universität, Fachbereich 16, Diplomarbeit, 1992.
- [Schütz 1995] SCHÜTZ, Peter: *Strukturen mit großen Amplituden in Reaktions-Diffusions-Systemen vom Aktivator-Inhibitor-Typ*. Münster. Universität. Fachbereich 16. Dissertation. 1995.
- [Sites 1992] SIDES, Richard L. (Hrsg.): *Alpha Architecture Reference Manual*. 1992. ISBN 1-55558-098-X
- [Strogatz 1996] STROGATZ, Steven H.: *Nonlinear Dynamics and Chaos. With Applications to Physics, Biology, Chemistry and Engineering*. 5. Auflage. Reading: Addison-Wesley, 1996
- [Turing 1952] TURING, A. M.: *The chemical basis of morphogenesis*. In: *Phil.Trans.Roy. Soc.* **B 327**. 1952. S. 37-72

Meinen Dank möchte ich zuallererst Herrn Prof. Dr. H.-G. Purwins aussprechen, der die Arbeit an diesem interessanten Gebiet der Reaktions-Diffusions-Systeme ermöglicht hat und sich stets für klärende Gespräche und Unterstützung bereit zeigte.

Desweiteren möchte ich mich bei meinem Betreuer Herrn Dipl. Phys. C. P. Schenk bedanken, der sich für die Fragen und Diskussionen dieser Diplomarbeit stets viel Zeit genommen hat.

Für die Programmierung der C-Bibliothek `util3d` und die gute Zusammenarbeit beim Einbinden in das Programm `3k3d` möchte ich mich bei Herrn Dr. J. Berkemeier bedanken.

Darüberhinaus danke ich Herrn Priv. Doz. Dr. M. Bode für die anregenden Gespräche.

Die Simulationen dieser Diplomarbeit wurden durch die umfangreiche Gewährung von Rechenzeit auf den Parallelrechnern Intel Paragon und Cray T3E/512 der Höchstleistungsrechenzentren Jülich und Stuttgart ermöglicht.

Hiermit erkläre ich an Eides Statt, daß ich die vorliegende Diplomarbeit ohne fremde Hilfe angefertigt und nur die angegebenen Hilfsmittel verwendet habe.

Münster, 17.05.1999