

Christian Peter Schenk

Numerische und analytische
Untersuchung solitärer Strukturen
in zwei- und dreikomponentigen
Reaktions-Diffusions-Systemen

1999

Experimentelle Physik

Numerische und analytische Untersuchung
solitärer Strukturen
in zwei- und dreikomponentigen
Reaktions-Diffusions-Systemen

Inaugural-Dissertation
zur Erlangung des Doktorgrades
der Naturwissenschaften im Fachbereich Physik
der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Westfälischen Wilhelms-Universität Münster

vorgelegt von
Christian Peter Schenk
aus Bamberg

- 1999 -

Dekan:

Prof. Dr. N. Schmitz

Erster Gutachter:

Prof. Dr. H.-G. Purwins

Zweiter Gutachter:

Tag der mündlichen Prüfung:

Tag der Promotion:

Zusammenfassung

Diese Arbeit beschäftigt sich mit Strukturbildungsphänomenen in zwei- und dreidimensional ausgedehnten Reaktions-Diffusions-Systemen. Im Mittelpunkt stehen dabei räumlich lokalisierte, teilchenartige Strukturen, wie sie bereits aus verschiedenen Experimenten und Modellsystemen bekannt sind. Der Teilchencharakter äußert sich dabei unter anderem in der Stabilität dieser Lösungen gegenüber Störungen durch Inhomogenitäten oder Ausläufer anderer Lösungen. Der Existenzbereich und die Stabilitätseigenschaften solcher Filamente werden für ein zweikomponentiges Reaktions-Diffusions-Modell numerisch detailliert untersucht. Aufbauend auf diesen Grundbausteinen können komplexe Strukturen erzeugt werden, bei denen die Einzelobjekte wie Atome in einem Molekül, Gas oder einem Kristallgitter miteinander wechselwirken. Im Fall dreikomponentiger Gleichungssysteme kann den Quasiteilchen neben einer Position auch eine Geschwindigkeit zugeordnet werden, wobei der Betrag der Geschwindigkeit auf eine durch die Parameter festgelegte Geschwindigkeit relaxiert. Für diese Objekte ist es nun möglich Bewegungsgleichungen und Wechselwirkungsgesetze anzugeben, die eine Beschreibung der Dynamik erlauben. Es werden Vergleiche mit numerischen Simulationen durchgeführt, die die Gültigkeit dieser Näherungen, aber auch die Grenzen des Teilchenbildes zeigen. So findet man etwa bei verschiedenen Parametern auch Vernichtungs-, Verschmelzungs- oder Generationsprozesse. Darüber hinaus werden die Dynamik asymmetrischer Teilchen und die Wechselwirkungsprozesse zwischen Strukturen unterschiedlicher Größe untersucht und mit Hilfe der Bewegungsgleichungen Viel-Teilchen-Prozesse analysiert.

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
1 Vom Einfachen zum Komplexen	4
1.1 Begriffsbestimmung	4
1.2 Einkomponentige Systeme	5
1.2.1 Der stationäre homogene Zustand	5
1.2.2 Großamplitudige Lösungen	6
1.3 Zweikomponentige Systeme	7
1.3.1 Der stationäre homogene Zustand	8
1.3.2 Großamplitudige Lösungen	10
1.4 Dreikomponentige Systeme	12
1.4.1 Der stationäre homogene Zustand	13
1.4.2 Kleinamplitudige Lösungen	14
1.4.3 Großamplitudige Lösungen	20
1.5 Systeme mit globaler Rückkopplung	20
1.5.1 Der stationäre homogene Zustand	21
1.5.2 Großamplitudige Lösungen	21
1.6 Zusammenfassung	23
2 Stabilitätsuntersuchungen an stationären solitären Strukturen	25
2.1 Formulierung des Problems	25
2.1.1 Stationäre Lösungen	26
2.1.2 Stabilitätsuntersuchungen	26
2.1.3 Adaptive Diskretisierung	28
2.2 Ein zweikomponentiges Reaktions-Diffusions-System	31
2.2.1 Reduktion des Parameterraums	31
2.2.2 Numerische Vorgehensweise	32
2.2.2.1 Berechnung der stationären Lösungen	32
2.2.2.2 Analyse der Stabilität	33
2.2.2.3 Einschränkungen	33
2.2.3 Ergebnisse der Stabilitätsanalyse	34

2.2.3.1	Stationäre Lösungen im zweidimensionalen Fall für $\sigma=0.08$	34
2.2.3.2	Stabilität der Lösungen im Fall $\sigma=0.08$	37
2.2.3.3	Dynamische Instabilitäten bei verlangsamter Inhibitorreaktion	40
2.2.3.4	Stationäre Lösungen bei Variation von σ	43
2.2.3.5	Stationäre Lösungen im ein- und dreidimensionalen Fall	45
2.2.3.6	Diskussion der Ergebnisse	46
2.3	Ein dreikomponentiges Reaktions-Diffusions-System	47
2.3.1	Stabilitätsanalyse des dreikomponentigen Modells	48
2.3.2	Stabilitätsanalyse im Spezialfall $Dv=0$ und $\theta=0$	50
2.4	Ein zweikomponentiges Modell einer Vierschichtdiode	53
2.4.1	Behandlung des Stabilitätsproblems	55
2.4.2	Untersuchung oszillierender Stromdichtefilamente	55
3	Analytisches Modell zur Beschreibung von Wechselwirkungsprozessen	59
3.1	Die Herleitung von Bewegungsgleichungen	59
3.1.1	Motivation des Lösungsansatzes	61
3.1.2	Analytischer Ansatz	62
3.1.3	Lösung des Gleichungssystems	63
3.2	Erweiterungen für verschiedene Spezialfälle	66
3.2.1	Der dreidimensionale Fall	66
3.2.2	Die Dynamik einzelner Teilchen	67
3.2.3	Analytische Behandlung asymmetrischer Lösungen	68
3.2.4	Inhomogenitäten	69
3.2.5	Die Wechselwirkung von mehr als zwei Teilchen	70
3.2.6	Die Wechselwirkung unterschiedlicher stationärer Verteilungen	70
4	Numerische Untersuchungen der Dynamik bewegter Quasiteilchen	72
4.1	Einzelne Filamente	73
4.1.1	Der analytische Zugang	73
4.1.2	Eine phänomenologische Beschreibung von Einzelspots	76
4.2	Wechselwirkungsprozesse	80
4.2.1	Ein Zwei-Teilchen-Stoßprozess	80
4.2.2	Stoßende Quasiteilchen in drei Dimensionen	82
4.2.3	Die Dynamik von gekoppelten Teilchen	84
4.2.3.1	Die Wechselwirkung am Systemrand	84
4.2.3.2	Frei bewegte Doppelfilamente	90
4.2.3.3	Die Bildungswahrscheinlichkeit für gekoppelte Filamente	94
4.2.4	Teilchenverschmelzung und Vernichtung	96
4.2.5	Teilchenverschmelzung in dreidimensionalen Systemen	99

4.3	Inhomogenitäten	101
4.3.1	Teilchenstreuung an Inhomogenitäten	101
4.3.2	Teilungsprozesse in einer Inhomogenität	105
4.3.3	Behandlung des Diskretisierungsfehlers als Inhomogenität	106
4.4	Viel-Teilchen-Systeme	110
4.4.1	Kreisförmige Grundgebiete	110
4.4.2	Quadratische Grundgebiete	111
4.4.2.1	Repulsive Wechselwirkung	111
4.4.2.2	Oszillierende Wechselwirkung	113
4.5	Beispiele für komplexe Strukturen	115
4.5.1	Zielscheiben-Strukturen	115
4.5.2	Ring-Strukturen	119
4.6	Koexistenz stehender und bewegter Filamente	122
	Zusammenfassung und Ausblick	127
	Anhang	130
A.1	Greensche Funktion des Diffusionsproblems	130
A.2	Herleitung von Amplitudengleichungen	131
A.3	Behandlung der Nichtlinearität in der Störungsrechnung	134
A.4	Numerische Lösungsmethoden	135
A.4.1	Behandlung von stationären Gleichungen	136
A.5	Bestimmung der Geschwindigkeit bewegter Lösungen	137
A.6	Richtungsänderung in einer periodischen Inhomogenität	138
	Literaturverzeichnis	141

Einleitung

Jeder Blick in unsere natürliche oder auch künstliche Umgebung fördert eine Vielzahl komplizierter Muster und Strukturen zu Tage. Wachstumsprozesse von Blättern führen zu filigranen Verästelungen, Wanderdünen oder Wolken können im Laufe der Zeit charakteristische Formen annehmen und unser eigener Körper ist wohl eines der komplexesten Beispiele für eine selbstorganisierte Struktur, das man sich vorstellen kann. Die Beschäftigung mit Strukturbildungsphänomenen kann daher als der Versuch betrachtet werden, die Komplexität unserer eigenen Umgebung zu verstehen. Gerade die Biologie bietet hier eine große Zahl von Phänomenen, etwa die Fellzeichnungen von Tieren oder die Farbverläufe auf Muscheln [54, 53]. Allerdings ist besonders bei diesen Beispielen aufgrund der hohen Komplexität der Systeme bereits die Modellierung ein fast unüberwindliches Problem. Die Beschreibung bleibt daher größtenteils phänomenologisch. Etliche physikalische Systeme dagegen bieten den Vorteil, dass die physikalische und damit mathematische Beschreibung weitgehend bekannt ist. Zu diesen gehören eine große Zahl von hydrodynamischen Systemen, deren theoretische Beschreibung mit Hilfe der Navier-Stokes-Gleichungen gelingt. Beispiele sind die Taylor-Couette-Strömung [78, 1] oder die Rayleigh-Bénard-Konvektion [9, 43]. Auch optische Systeme sind mikroskopisch genau beschreibbar und zeigen sehr reiche Strukturbildungsszenarien [47].

Da die mathematische Modellierung von Strukturbildungsproblemen zwangsläufig auf nichtlineare Gleichungssysteme führt, sind geschlossene analytische Lösungen nur in den seltensten Fällen möglich. Als Ausweg bieten sich verschiedene Näherungsverfahren und Methoden der Störungsrechnung an. So lassen sich zumindest Destabilisierungsmechanismen häufig in linearer Näherung betrachten oder die Analyse von kleinamplitudigen Strukturen kann mit Reihenentwicklungen durchgeführt werden [16]. Auch großamplitudige Strukturen, wie Fronten oder Pulse, lassen sich in bestimmten Parameterbereichen durch Störungsansätze beschreiben [46, 63, 31, 21, 20]. Insbesondere kann die Überlagerung von lokalisierten großamplitudigen Lösungen, wie sie beispielsweise in periodisch getriebenen Flüssigkeiten [50, 25], granularen Medien [81, 82] oder verschiedenen Gasentladungssystemen [4, 51, 7] auftreten, im Fall großer Abstände als Störung aufgefasst und der Einfluss auf die Dynamik der Lösungen untersucht werden. Allerdings sind die Gültigkeitsbereiche solcher Näherungen häufig begrenzt, so dass letztlich nur Experimente oder numerische Simulationen (seit der Verfügbarkeit leistungsfähiger Rechner) Aufschluss über

die tatsächliche Dynamik geben können.

Viele Probleme aus dem Bereich der Selbstorganisation können durch Reaktions-Diffusions-Gleichungen beschrieben werden. Diese wurden erstmals 1952 von Turing [79] als Modell zur Beschreibung der Morphogenese von Organismen untersucht. Die Turing-Bifurkation beschreibt die Destabilisierung eines homogenen Systems gegenüber periodischen – also räumlich inhomogenen – Störungen. In chemischen Systemen wurden diese Strukturen erst fast 40 Jahre später in verschiedenen Gel-Reaktoren gefunden [15, 67, 83]. Aber auch andere Systeme zeigen den von Turing untersuchten Mechanismus, z. B. verschiedene Gasentladungssysteme [85, 6, 3] oder elektrische Netzwerke [34]. Unter ähnlichen Bedingungen wie im Fall der Turing-Bifurkation findet man in unterschiedlichen experimentellen Systemen räumlich lokalisierte, großamplitudige Anregungszustände, sogenannte Filamente oder Spots [39, 84, 59], die auch theoretisch beschreibbar sind [63, 42]. Auch erregbare Medien, wie sie z. B. von Hodgkin und Huxley als Modell für Signalübertragung auf Nervenfasern diskutiert wurden [35, 56], können als Reaktions-Diffusions-Gleichungen aufgefasst werden. Experimentelle Realisationen solcher erregbarer Medien sind zahlreich und umfassen beispielsweise die Belousov-Zhabotinsky-Reaktion [24, 92, 91], die CO-Oxidation an Platinoberflächen [23, 22], die Ausbreitung von Aktivitätswellen in ZnS [8, 45] und die Pulsausbreitung in unterschiedlichem Nervengewebe, wie in dreidimensionaler Form im Herzmuskel [36, 87, 28] oder auf einer Hühnerretina [17]. Einige wenige Systeme lassen in Abhängigkeit von äußeren Parametern sowohl Turing-Strukturen als auch Pulse oder Spiralen zu. Dazu gehört z. B. das oben bereits erwähnte Gleichspannungsgasentladungsexperiment [86, 13]. In den angeführten Systemen findet die Beschreibung der Strukturbildung vorwiegend auf der Basis zweikomponentiger Modellgleichungen statt, so dass die zugrunde liegenden chemischen, biologischen oder physikalischen Mechanismen jeweils auf zwei Variablen reduziert werden müssen. Die Punkte aufzuzeigen an denen die Modellierung von Reaktions-Diffusions-Systemen mit mehr als zwei Komponenten zum Verständnis der Strukturbildung notwendig wird, ist ein zentraler Punkt dieser Arbeit.

In Kapitel 1 werden zunächst einige grundlegende Eigenschaften von Reaktions-Diffusions-Systemen wie die Stabilität homogener Zustände und typische großamplitudige Lösungen anhand einfacher Modellgleichungen diskutiert. Dabei sollen zunächst ein-, dann zwei- und abschließend dreikomponentige Systeme besprochen werden. Die mögliche Komplexität der auftretenden Strukturen steigt dabei immer weiter an. Insbesondere soll, neben der Turing-Bifurkation in zweikomponentigen Systemen, die Wellen-Bifurkation ausführlich diskutiert werden. Diese kann erst in dreikomponentigen Systemen auftreten und steht in engem Zusammenhang mit der später untersuchten Bifurkation zu bewegten lokalisierten Strukturen, zu den sogenannten Quasiteilchen. Ein möglicher Zugang zur Dynamik solcher Quasiteilchen ist beispielsweise eine von stationären Filamenten ausgehende Konstruktion. Mit der numerischen Untersuchung stationärer Spots in verschiedenen Systemen in Kapitel 2 wird daher eine Ausgangsbasis für die weiteren Untersuchungen geschaffen. Für ein zweikomponentiges System werden eine Karte des Existenzbereichs von

Filamenten erzeugt und die Destabilisierungsmechanismen an den Stabilitätsgrenzen untersucht. Für ein spezielles dreikomponentiges System können diese stationären Lösungen in das neue System übertragen und auf Stabilität untersucht werden. Diese Untersuchung lässt den Mechanismus deutlich werden, der für den Übergang zu laufenden Strukturen verantwortlich ist. Abschließend wird mit den gleichen Methoden eine Stabilitätsanalyse an stationären Filamenten in einem Halbleitersystem mit komplexerer Reaktionskinetik durchgeführt.

In Kapitel 3 wird eine detaillierte analytische Untersuchung des Verhaltens einzelner und mehrerer wechselwirkender bewegter Filamente durchgeführt. Die verwendete Störungsrechnung lässt sich ohne prinzipielle Schwierigkeiten auf etliche unterschiedliche Fälle ausdehnen. So gelangt man zu Bewegungsgleichungen für Filamente in räumlich ein-, zwei- und dreidimensionalen Systemen. In verschiedenen Fällen kann die Stärke und Form der Zwei-Teilchen-Wechselwirkung bestimmt werden. Ebenso lässt sich die Wirkung von räumlichen Inhomogenitäten erfassen. Andere Spezialfälle sind Bewegungsgleichungen für asymmetrische Teilchen und die Untersuchung von Viel-Teilchen-Prozessen. Die analytischen Untersuchungen erlauben im Weiteren eine Vielzahl numerischer Ergebnisse zu diskutieren. Dieser Vergleich mit der Numerik wird in Kapitel 4 durchgeführt. In allen Fällen ergibt sich eine im Rahmen der Näherung ausreichend genaue Beschreibung der Phänomene. Über diese Vergleiche der numerischen mit den analytischen Ergebnissen hinaus werden andere Effekte, wie das Verlöschen oder die Verschmelzung von Spots in zwei- und dreidimensionalen Systemen, vorgestellt, die sich nicht analytisch beschreiben, wohl aber qualitativ verstehen lassen. Im letzten Abschnitt von Kapitel 4 werden noch einige Sonderfälle diskutiert. Dabei handelt es sich um Lösungen von komplexerer Gestalt als die vorher behandelten Filamente, nämlich Ringe bzw. Ringe mit Zentralfilament. Diese koexistieren in engen Parameterbereichen mit den filamentären Lösungen, so dass die Untersuchung von Wechselwirkungen zwischen unterschiedlichen Strukturen möglich wird. Abschließend wird ein modifiziertes Gleichungssystem vorgestellt, das koexistierende stationäre und bewegte Lösungen zeigt.

Kapitel 1

Vom Einfachen zum Komplexen

Reaktions-Diffusions-Gleichungen werden zur Beschreibung von Strukturbildungsphänomenen in einer Vielzahl biologischer, chemischer und physikalischer Systeme verwendet. In diesem Kapitel sollen grundlegende Eigenschaften solcher Gleichungssysteme diskutiert und einige typische Lösungsstrukturen vorgestellt werden. Es soll gezeigt werden, wie durch die schrittweise Einführung neuer Komponenten oder Kontrollfelder die Vielfalt möglicher Strukturen vergrößert werden kann. Die größere Komplexität tritt dabei sowohl bei der Analyse der Stabilität des homogenen Zustands als auch über die Zahl realisierbarer großamplitudiger Strukturen hervor. Die Existenz und Stabilität kleinamplitudiger Strukturen wird schließlich noch für ein spezielles dreikomponentiges System diskutiert.

1.1 Begriffsbestimmung

Reaktions-Diffusions-Gleichungen (R-D-Gleichungen) treten bei der Beschreibung einer Vielzahl von räumlich ausgedehnten experimentellen Systemen auf. Das einfach verständliche Beispiel eines chemischen Systems soll hier als Motivation dienen. Man stelle sich eine chemische Reaktion vor, an der N verschiedene Chemikalien beteiligt sind, deren Konzentration an verschiedenen Raumpunkten und zu verschiedenen Zeitpunkten mit $u_i(r, t)$ bezeichnet werden. Lokal kann die Dynamik der Komponenten in diesem Fall über die Massenwirkungsgesetze der auftretenden Reaktionen beschrieben werden. Falls Konzentrationsgradienten einzelner beteiligter Reagenzien vorliegen, werden diese über Diffusion ausgeglichen. Die Fälle, in denen Temperatur- oder Dichtegradienten zu Konvektion, also zu einem gerichteten Stofftransport, führen, seien dabei zunächst ausgeschlossen. Mathematisch betrachtet stellen sich solche Reaktions-Diffusions-Systeme als partielle Differentialgleichungssysteme parabolischen Typs dar. Die Struktur dieser Klasse von Systemen entspricht dem Muster

$$\dot{u} = \underbrace{D\Delta u}_{\text{Diffusion}} + \underbrace{F(u)}_{\text{Reaktion}} \quad \text{mit} \quad u = u(r, t), \quad (1.1)$$

wobei $u = (u_1, \dots, u_N)$ die lokalen Konzentrationen und Δ den Laplace-Operator auf dem betrachteten Gebiet bezeichnen. Die Matrix mit den Diffusionskonstanten D kann als diagonal angenommen werden. Die lokale zeitliche Änderung der Konzentrationen u wird in solchen Systemen durch zwei Terme gesteuert. Lokal wird die Kinetik durch den Reaktionsterm $F(u)$ bestimmt, während die Diffusion $D\Delta u$ eine räumliche Kopplung einführt.

Im Allgemeinen sind chemische Reaktionen komplex und die Zahl N der beteiligten Stoffe ist sehr groß. Meist sind allerdings nur wenige Komponenten für die Strukturbildungsprozesse relevant, so dass die Systeme erheblich vereinfacht werden können [48]. Je mehr Komponenten ein Reaktions-Diffusions-Modell besitzt, umso komplexer können die auftretenden Muster sein. Im Folgenden sollen einige grundlegende Eigenschaften von ein-, zwei- und dreikomponentigen Gleichungssystemen (1K-, 2K- und 3K-Systemen) vorgestellt werden. Dabei werden jeweils zwei Ansätze diskutiert. Zum einen kann als Ausgangspunkt die Untersuchung eines homogenen Zustands gewählt werden. Man erhält so den Zugang zu dessen Stabilität und zu kleinamplitudigen Lösungen des Systems. Alternativ können großamplitudige Lösungen diskutiert werden, die analytisch schwerer zugänglich sind, aber experimentell und numerisch überwiegend auftreten. Um die folgenden Betrachtungen zu vereinfachen, wird zunächst ein unendlich ausgedehntes Grundgebiet angenommen. Als erstes soll der Fall betrachtet werden, in dem es sich bei der Variablen u in (1.1) um eine skalare Größe handelt.

1.2 Einkomponentige Systeme

1.2.1 Der stationäre homogene Zustand

Homogene stationäre Lösungen $u(r, t) = u^{(f)}$ der Gleichung (1.1) sind im skalaren Fall die Nullstellen der Funktion $F(u)$. Die Stabilität homogener Lösungen $u^{(f)}$ gegenüber kleinen Störungen lässt sich mit dem Ansatz

$$u(r, t) = u^{(f)} + \int_K (A_k(t) \exp(ikr) + c.c.) dk \quad (1.2)$$

überprüfen, wobei *c.c.* für das komplex Konjugierte des ersten Summanden steht und die Integration über die Menge K aller erlaubten Wellenvektoren durchgeführt wird. Durch geeignete Wahl der Koeffizienten A_k kann mit diesem Ansatz jede Störung um die Lösung $u^{(f)}$ ausgedrückt werden. Dabei muss im Fall endlicher Grundgebiete berücksichtigt werden, dass die Störung auch den Randbedingungen des jeweiligen Systems genügt. Im Fall eines eindimensionalen Systems (1D-Systems) mit Neumann-Rändern $\partial_r u(0) = 0$ und $\partial_r u(L) = 0$ gilt beispielsweise

$$A_k \in \mathbf{R} \quad \text{und} \quad A_k = 0 \quad \text{für} \quad k \neq \frac{n\pi}{L}, \quad n \in \mathbf{N}_0^+. \quad (1.3)$$

Die Amplituden $A_k(t)$ dieser Störungen entsprechen den Fourier-Komponenten mit der Wellenzahl k . Nach Linearisierung von (1.1) um den stationären homogenen Zustand $u^{(f)}$

ergibt sich nach Einsetzen von (1.2) für die Amplituden A_k die Gleichung

$$\dot{A}_k = \underbrace{\left(-Dk^2 + F'(u^{(f)})\right)}_{\lambda_k} A_k. \quad (1.4)$$

Die Stabilität der Lösung $u^{(f)}$ lässt sich nun direkt an den Eigenwerten λ_k ablesen. Im Fall $\lambda_k < 0$ klingen alle Störungen asymptotisch ab, so dass der Zustand stabil ist. Als Stabilitätskriterium für den homogenen Zustand erhält man daher für den einkomponentigen Fall die Ungleichung $F'(u^{(f)}) < 0$ und die Destabilisierung erfolgt wegen $\lambda_0 > \lambda_k, \forall k \neq 0$ stets bei $k = 0$.

1.2.2 Großamplitudige Lösungen

Interessant sind nun besonders die Fälle, in denen die Nichtlinearität $F(u)$ von kubischer Gestalt ist, also beispielsweise durch ein Polynom dritten Grades angenähert werden kann und Multistabilität auftritt. Unter der Voraussetzung, dass zwei stabile homogene Lösungen u^+ und u^- existieren, lässt sich ein eindimensionales System so präparieren, dass es sich für $r \rightarrow -\infty$ im Zustand u^+ und für $r \rightarrow \infty$ im Zustand u^- befindet. An einer beliebigen Stelle müssen diese beiden Zustände nun ineinander übergehen. Es bildet sich eine Front, die zwei stabile Zustände miteinander verbindet. Ein solches Beispiel ist in Abb. 1.1 a) dargestellt. Die Breite dieser Struktur entspricht typischerweise der Größenordnung der Diffusionslänge bzw. in mehrkomponentigen Systemen der Größenordnung der größten Diffusionslänge. Im einfachen Fall einer kubischen Kennlinie der Form $F(u) = (\lambda - 1)u - u^3 + \kappa_1$ ist es möglich, eine analytische Lösung für die Frontform $\bar{u}(r)$ anzugeben [10, S. 59]. Die Geschwindigkeit der Front lässt sich mit einfachen Argumenten aus einem Potentialbild ableiten. Man gelangt zur sogenannten Flächenregel, die die Geschwindigkeit einer Frontlösung $\bar{u}(r)$ liefert [10, S. 61]:

$$c = \frac{\int_{u^-}^{u^+} F(u) du}{\int_{-\infty}^{\infty} \partial_r \bar{u}^2 dr}. \quad (1.5)$$

Der Formfaktor im Nenner dieses Ausdrucks ist stets positiv. Die Bewegungsrichtung einer Front wird daher ausschließlich durch das Vorzeichen des Zählers bestimmt. In dem Beispiel, das in Abb. 1.1 b) dargestellt ist, entspricht das Zählerintegral in (1.5) genau der Differenz der Flächen A und B. Daher ist der Zustand u^+ dominant, d. h. die Front in Abb. a) breitet sich nach rechts aus. Stationäre Fronten findet man lediglich im Spezialfall $|A| = |B|$.

Auch die Wechselwirkung von Fronten kann im Grenzfall eines großen Frontabstands behandelt werden [10]. Für den einkomponentigen Fall ergibt sich eine attraktive Wechselwirkung, so dass die Kollision zweier Ausschalt- oder Einschaltfronten zur Vernichtung des Frontpaares führt. Generell wird sich in diesen einfachen Systemen daher ein homogener Zustand bilden, sofern nicht durch die Randbedingungen inhomogene Strukturen

erzungen werden. Auf zwei- oder dreidimensionalen Grundgebieten können beliebig geformte Frontlinien bzw. -flächen Bereiche im Zustand u^+ und u^- voneinander trennen. Ebenso wie im eindimensionalen Fall ist allerdings die Bildung stationärer Domänen nicht möglich.

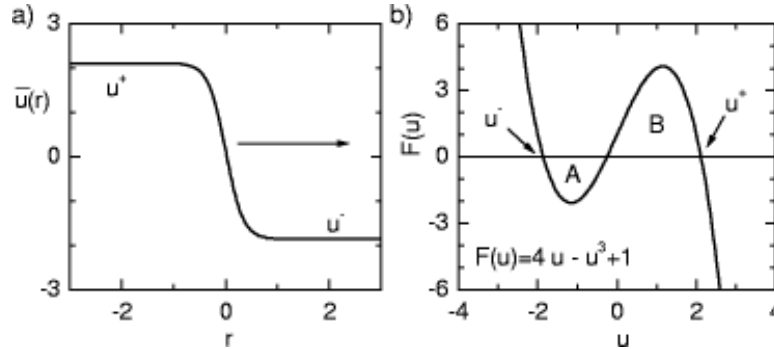


Abb. 1.1: Für kubische Nichtlinearitäten $F(u)$ kann die Frontform im einkomponentigen Fall analytisch angegeben werden. In Abb. a) ist der Verlauf von \bar{u} für den Reaktionsterm aus Abb. b) dargestellt. Die Geschwindigkeit der Lösung ergibt sich aus der Flächenregel. Aus $|B| > |A|$ folgt mit (1.5), dass die Front sich von links nach rechts bewegt.

1.3 Zweikomponentige Systeme

Einkomponentige Modelle besitzen eine relativ einfach zu verstehende Dynamik. Neben Ein- oder Ausschaltfronten vermögen sie allerdings nur wenige Strukturbildungsphänomene zu erklären. Insbesondere die Ausbildung stationärer, räumlich inhomogener Strukturen in einem räumlich homogenen System ist mit einkomponentigen Reaktions-Diffusions-Gleichungen nicht bzw. nur unter Einbeziehung einer globalen Rückkopplung möglich. Schon die ersten Reaktions-Diffusions-Modelle waren daher mindestens zweikomponentig. Zur Beschreibung der räumlichen Strukturierung wachsender Embryos schlug Turing 1952 ein zweikomponentiges Reaktions-Diffusions-System vor [79]. Auch die Ausbreitung von Aktionspotentialen im Nervengewebe kann mit einem solchen Modell formuliert werden [35, 56, 26].

Als einfaches Beispiel eines zweikomponentigen Modells sollen im Folgenden die Gleichungen

$$\dot{u} = D_u \Delta u + f(u) - v, \quad (1.6)$$

$$\tau \dot{v} = D_v \Delta v + u - v, \quad (1.7)$$

mit $f(u) = \lambda u - u^3 + \kappa_1$ diskutiert werden. Viele Modelle lassen sich entweder direkt auf dieses Gleichungssystem zurückführen oder stimmen wenigstens in der Phänomenologie mit ihm überein. Prinzipiell lassen sich die folgenden Überlegungen auch bei Systemen mit

anderen Reaktionstermen in analoger Weise durchführen. Im Folgenden werden die Komponenten u und v des Modells auch als Aktivator und Inhibitor bezeichnet. Diese Namen leiten sich aus den Eigenschaften der Reaktionskinetik eines Systems ab. Mathematisch betrachtet kann zunächst die Linearisierung der Reaktionsterme um einen Fixpunkt diese Begriffe motivieren. Für unseren Fall erhält man die Vorzeichenstruktur $\begin{pmatrix} + & - \\ + & - \end{pmatrix}$, so dass eine erhöhte Aktivatorkonzentration u zu einer Produktion des Inhibitors v führt. Umgekehrt hemmt der Inhibitor v sowohl sein eigenes Wachstum als auch das des Aktivators. Im Fall $f'(u^{(f)}) > 0$ liegt in der Linearisierung ein echtes Aktivator-Inhibitor-System vor, da der Aktivator autokatalytisch wirkt. Letztlich beschreibt diese Linearisierung allerdings nur eine kleine Umgebung des Fixpunktes. Ebenso wichtig für die qualitativen Eigenschaften des Systems sind großamplitudige Störungen, so dass auch in dem in Abb. 1.2 dargestellten Fall mit $f'(u^{(f)}) < 0$ die Bezeichnungen gerechtfertigt sind. Durch kleine Störungen aus dem Fixpunkt heraus ist es möglich in einen Bereich mit $\dot{u} > 0$ zu gelangen, so dass die Komponente u auch in diesem Fall als aktivierend bezeichnet werden kann. Bei komplexeren Reaktionstermen wird eine konsistente Klassifizierung entsprechend schwieriger.

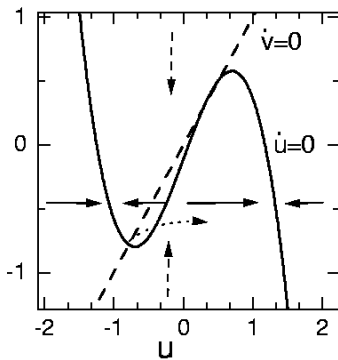


Abb. 1.2: Isoklinen $\dot{u} = 0$ und $\dot{v} = 0$ für das zweikomponentige System mit kubischer Kennlinie für $\lambda = 1.5$ und $\kappa_1 = -0.11$: Im Fixpunkt besitzt u keine autokatalytischen Eigenschaften. Kleine Störungen führen allerdings in einen Bereich mit Aktivatorproduktion, so dass die Bezeichnung Aktivator für die Komponente u auch in diesem Fall gerechtfertigt ist.

1.3.1 Der stationäre homogene Zustand

Wie im einkomponentigen Fall können stationäre homogene Lösungen $(u^{(f)}, v^{(f)})$ mit einem Störungsansatz auf ihre Stabilität untersucht werden. Der Ansatz lautet im zweikomponentigen Fall

$$u(r, t) = u^{(f)} + \int_K (A_k(t) \exp(ikr) + c.c.) dk, \quad (1.8)$$

$$v(r, t) = v^{(f)} + \int_K (B_k(t) \exp(ikr) + c.c.) dk. \quad (1.9)$$

Nach Einsetzen in die Linearisierung des Gleichungssystems um $(u^{(f)}, v^{(f)})$ ergibt sich für die zeitliche Entwicklung der Störungen A_k und B_k

$$\underbrace{\begin{pmatrix} \dot{A}_k \\ \dot{B}_k \end{pmatrix}}_L = \begin{pmatrix} -D_u k^2 + f'(u^{(f)}) & -1 \\ \frac{1}{\tau} & \frac{-D_v k^2 - 1}{\tau} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_k \\ B_k \end{pmatrix}. \quad (1.10)$$

Die Dynamik (1.10) ist stabil, wenn das Spur- und Determinantenkriterium erfüllt sind, d. h. falls die Ungleichungen $\text{Det}(L) > 0$ und $\text{Spur}(L) < 0$ gelten [37, 77]. Bei der Verletzung des Spurkriteriums ist die Destabilisierung mit einem komplexen Eigenwert, d. h. mit einer Hopf-Bifurkation, assoziiert, bei einer Verletzung des Determinantenkriteriums mit einem reellen Eigenwert. Stabilität liegt aufgrund dieser Kriterien bei

$$\text{Spur: } f'(u^{(f)}) < \frac{1}{\tau} + (D_u + \frac{D_v}{\tau})k^2 =: f'_{\text{Hopf}}(k), \quad (1.11)$$

$$\text{Det: } f'(u^{(f)}) < \frac{1}{1 + D_v k^2} + D_u k^2 =: f'_{\text{Tur}}(k), \quad (1.12)$$

vor. In Abb. 1.3 a) ist der Verlauf der beiden Neutralkurven $f'_{\text{Hopf}}(k)$ und $f'_{\text{Tur}}(k)$ für ein Beispiel skizziert. Das Spurkriterium wächst quadratisch mit k und wird daher stets zuerst für $k = 0$ verletzt. Eine solche Hopf-Bifurkation führt zu räumlich homogenen Oszillationen des Systems, falls nur die Mode mit $k = 0$ destabilisiert wird. In unendlich ausgedehnten Systemen wird allerdings stets ein ganzes Band von Wellenzahlen in der Nähe von $k = 0$ instabil. Die Berücksichtigung benachbarter Moden führt zu dem Konzept der Ginzburg-Landau-Gleichungen [16]. Die Hopf-Instabilität beruht auf dem Prinzip der zeitlich verzögerten Inhibition. Der Inhibitor v reagiert auf Schwankungen von u nur langsam, so dass Oszillationen entstehen können. Im Gegensatz zum Hopf-Fall hat die Neutralkurve $f'_{\text{Tur}}(k)$ für $\sigma_v = D_u/D_v < 1$ ein Minimum bei $k_c = \sqrt{\frac{1}{\sqrt{D_u D_v}} - \frac{1}{D_v}}$, so dass zunächst eine Mode mit der Wellenzahl k_c instabil wird. Diese Instabilität wird als Turing-Destabilisierung bezeichnet. Einsetzen von k_c in (1.12) führt auf die Stabilitätsbedingung

$$f'(u^{(f)}) < -\sigma_v + 2\sqrt{\sigma_v}. \quad (1.13)$$

Im Idealfall sollte die kritische Mode im gesamten Grundgebiet gleichzeitig anwachsen. Meist entsteht die Struktur allerdings an einer kleinen Störung. Ein solcher Zündmechanismus ist in Abb. 1.3 b) und c) skizziert. Ausgangspunkt ist ein homogenes, gegen eine Turing-Bifurkation instabiles System, d. h. mit $D_v > D_u$ und $f'(u^{(f)}) > f'_{\text{Tur}}(k_{\min}) > 0$, in dem lokal eine kleine Störung (1) der Aktivator-Verteilung $u(r)$ vorliegt. Diese Störung wächst zunächst an und führt zu einer inhomogenen Inhibitor-Verteilung. Ohne den Einfluss der Diffusion würde die Aktivator-Störung durch den Inhibitor wieder unterdrückt. Da dieser allerdings stärker diffundiert als der Aktivator, entsteht eine breite, aber flachere Inhibitor-Verteilung (2), die nun in der Umgebung der anfänglichen Störung den Aktivator durch laterale Inhibition unterdrückt (3). Der Aktivator wird dabei unter den homogenen Zustand abgesenkt und erzeugt nun ein ebenso nach unten abgesenktes Inhibitorfeld, so dass sich der Prozess der lateralen Inhibition mit umgekehrtem Vorzeichen fortsetzt. Die Störung breitet sich frontartig aus und es entsteht eine periodische Struktur.

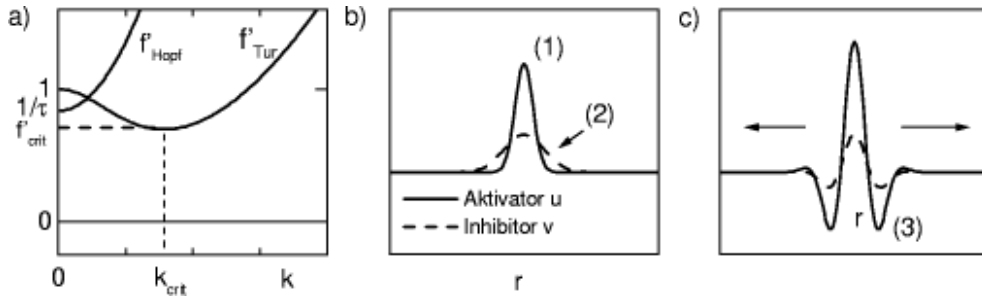


Abb. 1.3: a) Schematische Skizze der beiden Neutralkurven $f'_{Hopf}(k)$ und $f'_{Tur}(k)$: In dem dargestellten Fall gelangt man im Fall $f'(u^{(f)}) > f'_{crit}$ zu einer Turing-Bifurkation. Abb. b) und c) zeigen schematisch die Entwicklung einer Turing-Struktur aus einer kleinen Störung heraus.

Da die Destabilisierungsgrenze für Turing-Strukturen nur durch den Betrag des Wellenvektors $|k|$ festgelegt ist, wird in zwei- oder dreidimensionalen Systemen eine ganze Schar von Störungen mit unterschiedlicher räumlicher Orientierung kritisch. Zudem führt das Überschreiten des kritischen Punktes in unendlich ausgedehnten Systemen stets zur Destabilisierung eines ganzen Bandes von Wellenvektoren mit leicht unterschiedlichem Betrag. Um zu entscheiden welche Kombination von Wellenvektoren anwächst, genügt eine lineare Stabilitätsanalyse bzw. die Berücksichtigung einzelner Moden nicht mehr. Vielmehr muss nun die Kopplung unterschiedlicher Moden über die nichtlinearen Terme berücksichtigt werden. Solche Ansätze führen für kleinamplitudige Lösungen zum Formalismus der Ginzburg-Landau-Gleichungen [16], mit dem Amplitudengleichungen für die raum-zeitliche Entwicklung von Turing- oder Hopf-Strukturen in der Nähe des Bifurkationspunktes hergeleitet werden können. Auch die Untersuchung der Wechselwirkung von Hopf- und Turing-Strukturen in der Nähe des Kodimension-2-Punktes, an dem beide Stabilitätskriterien gleichzeitig verletzt werden, kann auf dieser Grundlage durchgeführt werden [64, 65]. Während in eindimensionalen Systemen die superkritische Turing-Bifurkation zu stabilen kleinamplitudigen Strukturen führt, kann im zweidimensionalen Fall gezeigt werden, dass diese generisch instabil sind, falls nicht alle nichtlinearen Terme zweiter Ordnung in der Entwicklung um den Fixpunkt verschwinden [27, 75]. Dieses Ergebnis wird in Abschnitt 1.4.2 bei der Untersuchung kleinamplitudiger Lösungen in dreikomponentigen Systemen ausführlich diskutiert.

1.3.2 Großamplitudige Lösungen

Wie in einkomponentigen Systemen existieren auch in zweikomponentigen Systemen Fronten, also Übergänge zwischen zwei stabilen homogenen Zuständen. Sowohl die Konstruktion der Frontform als auch die Bestimmung der Geschwindigkeit einer Front sind allerdings wesentlich schwieriger und können nicht mehr so allgemein und einfach formuliert werden wie im einkomponentigen Fall. So ist beispielsweise die Geschwindigkeit einer Front nicht mehr eindeutig. Bei geeigneten Parametern führt eine Verlangsamung der Inhibitorreaktion dazu, dass sich eine Front bei festen Parametern sowohl vorwärts als auch rückwärts

bewegen kann [11, 30, 32]. Auch die Wechselwirkung bewegter Fronten miteinander wird wesentlich komplexer. Während sich Fronten im einkomponentigen Fall stets anziehen, findet man im zweikomponentigen Fall ein repulsives oder ein räumlich oszillierendes Wechselwirkungsverhalten [10]. Auf der Grundlage mehrerer gekoppelter Fronten lassen sich daher neue Strukturen konstruieren. Eine Einschaltfront gefolgt von einer Ausschaltfront kann einen stabilen Puls bilden. Eine solche Situation ist in Abb. 1.4 dargestellt. Bei gleichen Parametern existiert sowohl eine Einschaltfront a) als auch eine Ausschaltfront b). Das unterschiedliche dynamische Verhalten resultiert aus der lokalen Inhibitorkonzentration am Ort der Aktivatorfront. Die Parameter sind so gewählt, dass die Ausschaltfront sich schneller bewegt. Es ergibt sich ein laufender Puls, als Kombination von Ein- und Ausschaltfront. Inwieweit die beiden Fronten noch als einzelne Strukturen betrachtet werden können hängt von den Parametern ab. In einem analytisch gangbaren Grenzfall werden solche Strukturen beispielsweise von Hagberg [30] untersucht. Betrachtet man die Pulse als Einzelobjekte, so kann auch hier die Wechselwirkung zwischen benachbarten Pulsen betrachtet werden [21, 20]. Während Pulse in eindimensionalen Systemen räumlich lokalisierte Strukturen darstellen, bilden sich bei den gleichen Parametern in zweidimensionalen Systemen Spiralen [31] bzw. in dreidimensionalen Systemen sogenannte Scroll-Waves [87]. Diese Strukturen auf höherdimensionalen Grundgebieten sind nicht mehr räumlich begrenzt, sondern breiten sich im Verlauf ihrer Propagation über das gesamte Grundgebiet aus. Die Rolle des Inhibitors bei der Pulsausbreitung kann anhand von Abb. 1.4 c) nochmals verdeutlicht werden. Über Diffusion breitet sich die Aktivatorfront nach rechts aus. Zeitlich verzögert, wegen $\tau \gg 1$, setzt dann die Inhibitorproduktion ein, und führt nach einiger Zeit wieder zum Rückschalten in den Ausgangszustand.

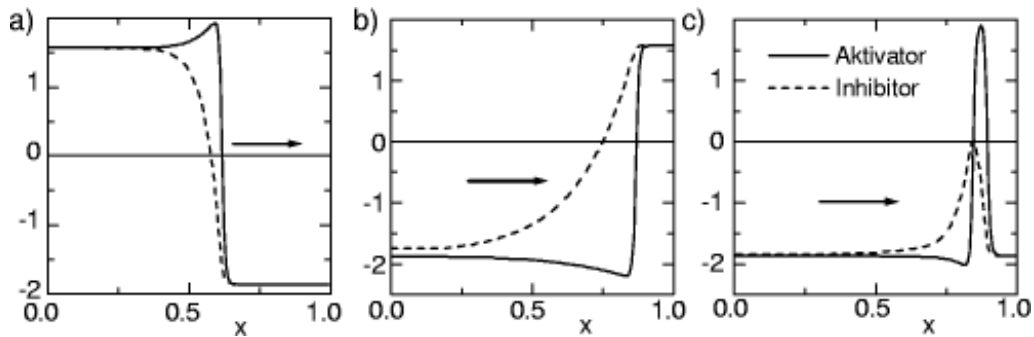


Abb. 1.4: Bildung eines Pulses aus einer Einschalt- und einer Ausschaltfront: In a) und b) sind die Einzelfronten dargestellt, in c) der resultierende Puls. Die Parameter waren $D_u = 5.5 \times 10^{-5}$, $D_v = 0$, $\lambda = 6$, $\kappa_1 = -0.85$, $\tau = 10$ und $L = 1$.

Auch die Bildung von Filamenten oder Spots, also von lokalisierten stationären Lösungen, aus zwei Ausschaltfronten ist möglich. In Abb. 1.5 ist dieser Prozess anhand eines Beispiels gezeigt. Als Anfangsbedingung wurden zwei Ausschaltfronten verwendet, die sich aufeinander zubewegen. Anders als im Fall der Pulspropagation ist der Inhibitor in die-

sem Fall schnell und diffundiert stark. An den Aktivator- und Inhibitorverteilungen lässt sich gut erkennen, dass der Inhibitor der Front nicht mehr nur folgt, sondern sich auch in Bewegungsrichtung ausbreitet. Der Einfluss des Inhibitors führt daher zu einer repulsiven Wechselwirkung zwischen den beiden Ausschaltfronten, so dass sich ein stationäres Filament bilden kann. Die entscheidende Bedeutung der lateral inhibierenden Wirkung der Komponente v wird in diesem Beispiel deutlich. Solche lokalisierten Strukturen können in ähnlicher Weise auch in zwei- und dreidimensionalen Systemen konstruiert werden.

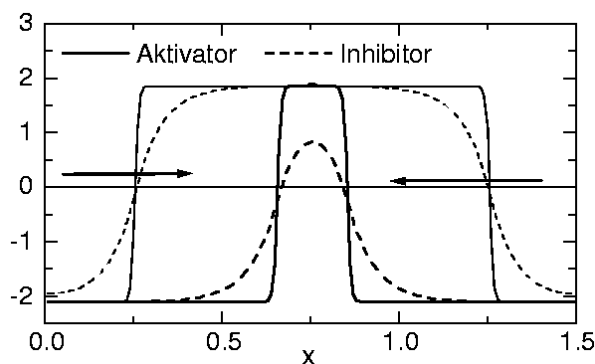


Abb. 1.5: Die repulsive Wechselwirkung zwischen zwei Ausschaltfronten führt zur Bildung eines stationären stabilen Filaments. Die Parameter entsprechen Abb. 1.4, bis auf $\tau = 0$, $D_v = 1.1 \times 10^{-4}$ und $L = 1.5$.

Die Beschreibung großamplitudiger dissipativer Strukturen auf der Basis von gekoppelten Fronten ermöglicht in den besprochenen Fällen eine sehr weitreichende Analyse von Destabilisierungsmechanismen. Eine große Zahl von theoretischen Arbeiten basiert auf der Vorstellung gekoppelter Fronten als Grundbausteine für komplexere Muster [63, 42, 19, 33, 88, 10]. Voraussetzung für solche Ansätze ist jeweils die Existenz von zwei stabilen Fixpunkten. Es muss allerdings betont werden, dass sowohl laufende Pulse als auch Filamente ebenso in Parameterbereichen existieren können, in denen die lokale Kinetik nur einen stabilen Fixpunkt besitzt. Die Stabilisierung der Strukturen erfolgt in diesen Fällen allein über den Einfluss des Inhibitors: im Fall von Pulsen über die verzögerte Inhibition, im Fall von Filamenten über die laterale Inhibition.

1.4 Dreikomponentige Systeme

Es wurde gezeigt, dass zweikomponentige Modelle wie (1.6)-(1.7) eine große Zahl von Strukturbildungsphänomenen erklären können. Eine entscheidende Rolle spielt dabei die Rückwirkung des Inhibitors auf den Aktivator. Es konnten zwei grundlegende Wirkungsweisen unterschieden werden: die laterale und die zeitlich verzögerte Inhibition. Dreikomponentige Systeme erlauben es nun zwei Inhibitoren einzusetzen, von denen jeder jeweils eine dieser Funktionen ausübt. Es stellt sich die Frage, ob solche Systeme prinzipiell neue Eigenschaften, verglichen mit zweikomponentigen Systemen aufweisen. Im Folgenden wird daher das dreikomponentige Aktivator-2-Inhibitor-Modell

$$\dot{u} = D_u \Delta u + \lambda u - u^3 - \kappa_3 v - \kappa_4 w + \kappa_1, \quad (1.14)$$

$$\tau \dot{v} = D_v \Delta v + u - v, \quad (1.15)$$

$$\theta \dot{w} = D_w \Delta w + u - w \quad (1.16)$$

diskutiert.

1.4.1 Der stationäre homogene Zustand

Eine Erweiterung der linearen Stabilitätsanalyse (1.8)-(1.9) auf drei Komponenten soll nun durchgeführt werden. In der Linearisierung ergibt sich für die Amplituden der Störmoden ein Gleichungssystem mit drei Unbekannten. Die Eigenwertbestimmung bzw. die Auswertung der Stabilitätskriterien wird dadurch wesentlich komplizierter und führt nur in Grenzfällen zu interpretierbaren Resultaten [75]. Es soll daher der betrachtete Parameterbereich der Gleichungen (1.14)-(1.16) eingeschränkt werden um eine einfachere Stabilitätsanalyse zu ermöglichen.

Zunächst können durch eine Umskalierung von Ort, Zeit und Amplituden die Parameter κ_4 und D_w auf eins normiert werden. In Anlehnung an die Bezeichnungen aus dem vorherigen Abschnitt wird außerdem $\sigma := D_u/D_w = D_u$ (wegen $D_w = 1$) definiert. Als erste maßgebliche Einschränkung kann nun $\theta = 0$ gesetzt werden. Aufgrund dieser Annahmen kann w mit Hilfe der greenschen Funktion (vgl. Anhang A.1) direkt durch u ausgedrückt werden. Man gelangt im eindimensionalen Fall zu der Integral-Differential-Gleichung

$$\dot{u} = \sigma \Delta u + \lambda u - u^3 - \kappa_3 v - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2} e^{-|x-x'|} u(x') dx' + \kappa_1, \quad (1.17)$$

$$\tau \dot{v} = D_v \Delta v + u - v, \quad (1.18)$$

die auch als Reaktions-Diffusions-Modell mit nichtlokaler Kopplung aufgefasst werden kann. Der Ansatz (1.8)-(1.9) kann nun direkt angewandt werden. Nach der Linearisierung um $f'(u^{(f)})$ ergibt sich für die Amplituden der Moden A_k und B_k das Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} \dot{A}_k \\ \dot{B}_k \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} -\sigma k^2 + f'(u^{(f)}) - (k^2 + 1)^{-1} & -\kappa_3 \\ \frac{1}{\tau} & -\frac{1}{\tau}(D_v k^2 + 1) \end{pmatrix}}_L \begin{pmatrix} A_k \\ B_k \end{pmatrix}. \quad (1.19)$$

Die Stabilität gegenüber Störungen kann wiederum mit Hilfe des Spur- bzw. Determinantenkriteriums ausgewertet werden. Als Stabilitätsbedingungen ergeben sich die beiden Ungleichungen

$$\text{Spur: } f'(u^{(f)}) < \frac{1}{\tau}(D_v k^2 + 1) + \sigma k^2 + \frac{1}{k^2 + 1} =: f'_{\text{Hopf}}(k), \quad (1.20)$$

$$\text{Det: } f'(u^{(f)}) < \sigma k^2 + \frac{1}{k^2 + 1} + \frac{\kappa_3}{D_v k^2 + 1} =: f'_{\text{Tur}}(k). \quad (1.21)$$

Bei der Turing-Neutralkurve ergeben sich keine qualitativen Änderungen im Vergleich zum zweikomponentigen Fall. Unabhängig von den Parametern ergibt sich genau ein Minimum der Neutralkurve, dass bei $|k| = 0$ oder $|k| > 0$ liegen kann. Die Hopf-Neutralkurve

dagegen kann unter der Bedingung $\tau > \frac{D_v}{1-\sigma}$ ebenfalls ein Minimum bei $k \neq 0$ besitzen, so dass eine primäre Bifurkation zu periodischen, oszillierenden Mustern bzw. zu laufenden Wellen möglich ist. Diese Bifurkation wird im Folgenden als Wellen-Instabilität (bzw. Wave Instability) bezeichnet [79, 90, 41]. Eine Auswertung des Spurkriteriums ergibt für die kritische Wellenzahl

$$k_c^2 = \sqrt{\frac{\tau}{D_v + \sigma\tau}} - 1. \quad (1.22)$$

Die kritische Steigung, bei der die Instabilität auftritt, liegt bei

$$f'(u^{(f)}) > f'_{\text{Wel}} := -\left(\frac{D_v}{\tau} + \sigma\right) + 2\sqrt{\frac{D_v}{\tau} + \sigma} + \frac{1}{\tau}. \quad (1.23)$$

1.4.2 Kleinamplitudige Lösungen

Im vorherigen Abschnitt wurde gezeigt, dass durch die Einführung einer dritten Komponente die Destabilisierung des homogenen Zustands nicht nur durch stationäre periodische Muster, sondern auch durch laufende Wellen ermöglicht wird. Es sollen nun die Amplitude und Stabilität der in diesem Fall abzweigenden Strukturen untersucht werden. Der Übersichtlichkeit wegen wird das Gleichungssystem (1.17)-(1.18) im Grenzfall $D_v = 0$ untersucht, in dem nach wie vor sowohl Turing- als auch Wellen-Bifurkationen auftreten können. Die kritische Wellenlänge ist für $D_v = 0$ in beiden Fällen $k_c^2 = \frac{1}{\sqrt{\sigma}} - 1$, und die Destabilisierungen liegen bei

$$f'(u^{(f)}) > f'_{\text{Tur}} = -\sigma + 2\sqrt{\sigma} + \kappa_3 \quad \text{bzw.} \quad (1.24)$$

$$f'(u^{(f)}) > f'_{\text{Wel}} = -\sigma + 2\sqrt{\sigma} + \frac{1}{\tau}, \quad (1.25)$$

so dass in Abhängigkeit der Parameter τ und κ_3 primär eine Turing- oder Wellen-Bifurkation auftritt. Es sollen nun mit der Methode der zentralen Mannigfaltigkeit (vgl. z. B. [37, 29]) Amplitudengleichungen für die Amplituden der kritischen Turing- bzw. Wellenmoden auf einem zweidimensionalen Grundgebiet hergeleitet werden. Im Fall der Turing-Bifurkation gelangt man zu den Ergebnissen von Schütz [75], der diese Methode bereits auf das Gleichungssystem (1.6)-(1.7) auf zweidimensionalem Grundgebiet angewendet hat.

Zunächst muss die Zahl der betroffenen kritischen Wellenzahlen durch geeignete Wahl des Grundgebiets und der Randbedingungen begrenzt werden. Auf unendlich großem Grundgebiet betrifft die Destabilisierung stets ein ganzes Band von Wellenzahlen k auf dem Kreis $|k|^2 = |k_c|^2$. Um die Methode der zentralen Mannigfaltigkeit dennoch anwenden zu können muss man sich auf eine endliche Zahl von Wellenvektoren beschränken. Numerische und experimentelle Ergebnisse zeigen, dass in vielen Fällen Hexagone und Streifen entstehen. Um die relative Konkurrenz dieser beiden Strukturen untersuchen zu können, wird daher als Grundgebiet ein über die Ränder zyklisch geschlossenes Parallelogramm mit den Basiskanten $e_1 = (L, 0)$ und $e_2 = (L/2, L\sqrt{3}/2)$ verwendet. Auf einem solchen Gebiet führt die Destabilisierung stets zu genau sechs kritischen Wellenvektoren

$$k_1 = k_c(1, 0), k_2 = k_c\left(\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}\right), k_3 = k_c\left(-\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}\right), \quad (1.26)$$

$$k_4 = k_c(-1, 0), k_5 = k_c\left(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}\right), k_6 = k_c\left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}\right). \quad (1.27)$$

Durch die Superposition von ebenen Wellen mit diesen Wellenvektoren lassen sich sowohl Streifen als auch hexagonale Strukturen darstellen.

Zur Vereinfachung wird im Folgenden für eine laufende ebene Welle mit definiertem Wellenvektor k , Frequenz ω und Amplitude A die Schreibweise

$$E(A, \omega, k) := \frac{1}{2} (A \exp(i\omega t + ikr) + A^* \exp(-i\omega t - ikr)) \quad (1.28)$$

verwendet. Betrag und Phase der komplexen Größe A beschreiben Amplitude und Phasenlage der Welle, während k Richtung und Wellenzahl vorgibt. Die Geschwindigkeit in Richtung k einer solchen Welle beträgt mit dieser Definition $c = -\omega/|k|$. Offensichtlich gilt das Additionstheorem

$$E(A, \omega_1, k_1)E(B, \omega_2, k_2) = \frac{1}{2} (E(AB, \omega_1 + \omega_2, k_1 + k_2) + E(AB^*, \omega_1 - \omega_2, k_1 - k_2)). \quad (1.29)$$

Im Fall einer Turing-Bifurkation gilt $\omega_c = 0$, so dass der zentrale Eigenraum des homogenen Zustands mit der obigen Notation von den Moden

$$\begin{pmatrix} u_i \\ v_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} E(A_i(t), 0, k_i) \quad \text{mit } i \in 1, 3, 5 \quad (1.30)$$

mit den im Allgemeinen komplexen Koeffizienten $A_i(t)$ aufgespannt wird. Wegen $\omega_c = 0$ gilt $E(A_i(t), 0, k_i) = E(A_i^*(t), 0, -k_i)$, so dass die Amplituden A_i mit $i \in 2, 4, 6$ nicht berücksichtigt werden müssen. Für die Dynamik der Amplituden A_i dieser Basis-Funktionen kann nun mittels der Methode der zentralen Mannigfaltigkeit ein Gleichungssystem hergeleitet werden. Als Ergebnis erhält man die folgende Amplitudengleichung

$$\dot{A}_1 = \varepsilon A_1 + \frac{f''}{2} A_3^* A_5^* + \alpha_T |A_1|^2 A_1 + \beta_T (|A_3|^2 + |A_5|^2) A_1 \quad (1.31)$$

für A_1 . Die Gleichungen für A_3 und A_5 ergeben sich durch Indexverschiebung. Die Koeffizienten α_T und β_T sind reell und im Anhang in (A.88)-(A.89) angegeben. Der Bifurkationsparameter ist definiert als $\varepsilon := f'(u^{(f)}) - f'_{\text{Tur}}$ und entspricht im Wesentlichen der Steigung im Fixpunkt. Das Ergebnis ist identisch mit dem Fall $\delta = 0$ bei Schütz [75] und daher auch dem zweikomponentigen Turing-Fall. Aus dieser Gleichung kann nun das Verhalten der abzweigenden Lösungen berechnet werden. Falls drei Fixpunkte der lokalen Kinetik existieren, kann die Turing-Destabilisierung wegen $f'_{\text{Tur}} > 0$ nur auf dem mittleren Fixpunkt stattfinden. Daher sollen an dieser Stelle die Ergebnisse für den typischeren Fall $\lambda - \kappa_3 < 1$ dargestellt werden. Es ergibt sich $\alpha_T < 0$ und $\alpha_T + 2\beta_T < 0$ und daher das in Abb. 1.6 a) schematisch dargestellte Bifurkationsdiagramm. Streifen zweigen am Bifurkationspunkt in einer superkritischen Pitchfork-Bifurkation ab, sind aber zunächst instabil. Bei genügend großem ε ist eine Stabilisierung möglich. Hexagonale Strukturen zweigen transkritisch ab, aber sowohl der super- als auch der subkritische Ast sind instabil. Der

subkritische Ast kann allerdings in diesem Fall umkehren und erlaubt so stabile Hexagone. Bei geeigneten Parametern kann auch dieser Ast für genügend große ε destabilisiert werden, so dass ein Übergang zu dem Ast mit stabilen Streifen beobachtet wird. Dieses Szenario führt beim Überschreiten des Bifurkationspunktes zunächst zu großamplitudigen Hexagonen und dann zu Streifen und wird experimentell wie numerisch häufig beobachtet. Allgemeine Stabilitätskriterien für die verschiedenen konkurrierenden Strukturen in diesem Gleichungssystem findet man beispielsweise in [76].

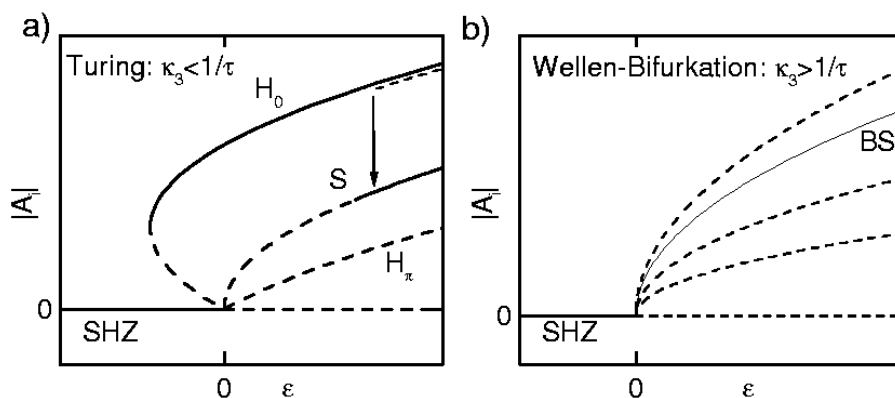


Abb. 1.6: a) Bifurkations-Diagramm für den Turing-Fall im Spezialfall $\alpha_T < 0$ und $\alpha_T + 2\beta_T < 0$: SHZ bezeichnet den stationären homogenen Zustand, H_0 und H_π sind positive und negative Hexagone und S Streifen. Sämtliche kleinamplitudigen Lösungen sind am Bifurkationspunkt instabil. b) Schematisches Bifurkations-Diagramm im Fall der Wellen-Bifurkation für die Parameter aus (1.35)-(1.36), also insbesondere $\alpha_i < 0$: Verschiedene Überlagerungen der kritischen Moden zweigen in einer superkritischen Pitchfork-Bifurkation aus dem homogenen Zustand ab. Numerisch zeigt sich, dass lediglich die bewegten Streifen BS stabil sind, die einer einzelnen kritischen Mode entsprechen.

Die kritischen Moden im Fall der Wellen-Bifurkation sind durch

$$\begin{pmatrix} u_i \\ v_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{1}{1+i\omega_c\tau} \end{pmatrix} E(A_i(t), \omega_c, k_i) \quad \text{mit } i \in 1, \dots, 6 \quad (1.32)$$

und $\omega_c = \frac{\sqrt{\kappa_3\tau-1}}{\tau}$ gegeben. In diesem Fall ist nun keine transkritische Bifurkation zu hexagonalen Strukturen mehr möglich, da eine quadratische Kopplung zwischen zwei kritischen Moden in keinem Fall in den kritischen Eigenraum zurückführt. Das Produkt zweier kritischer Moden führt wegen (1.29) unabhängig von den Wellenzahlen auf eine Welle mit $\omega = 0$ oder $|\omega| = |2\omega_c|$, die daher nicht in der zentralen Mannigfaltigkeit liegen kann. Die explizite Berechnung der Dynamik in der zentralen Mannigfaltigkeit wurde im Anhang A.2 durchgeführt. Für die Amplitude der Mode A_1 ergibt sich die Gleichung

$$\begin{aligned} \dot{A}_1 = & \varepsilon A_1 + A_1 \left(\alpha_1 |A_1|^2 + \alpha_2 (|A_2|^2 + |A_6|^2) + \alpha_3 (|A_3|^2 + |A_5|^2) + \alpha_4 |A_4|^2 \right) \\ & + \beta (A_4^* (A_2 A_5 + A_3 A_6)) \end{aligned} \quad (1.33)$$

mit komplexen Koeffizienten α_i und β wie in (A.82)-(A.86) angegeben und dem Bifurkationsparameter $\varepsilon := f'(u^{(f)}) - f'_{\text{Wel}}$. Die Dynamik der anderen kritischen Moden ergibt sich durch eine zyklische Vertauschung der Indizes. Im Gegensatz zu der Amplitudengleichung für die Turing-Bifurkation findet man in diesem Fall keine quadratischen Terme. Eine transkritische Bifurkation zu hexagonalen Strukturen ist daher nicht möglich. Lösungen dieses Gleichungssystems findet man mit dem Ansatz $A_i = B_i \exp(i\Omega_i t)$ mit reellen B_i und Ω_i . Der Fall $B_j = 0$ für alle $j \neq i$ führt auf Lösungen, die in Richtung $-k_i$ laufenden Streifen entsprechen. In diesem Fall ergibt sich

$$|B_i|^2 = -\varepsilon \frac{1}{\text{Re}(\alpha_1)}, \quad \Omega_j = \varepsilon \frac{\text{Im}(\alpha_1)}{\text{Re}(\alpha_1)}, \quad (1.34)$$

also im Fall $\text{Re}(\alpha_1) < 0$, eine superkritische Pitchfork-Bifurkation. Allerdings besteht auch die Möglichkeit, dass mehrere Amplituden anwachsen, so dass sich eine Überlagerung mehrerer ebener Wellen ergibt. Auch diese Kopplung mehrerer Moden führt zu stationären Lösungen, die in einer Pitchfork-Bifurkation, allerdings mit anderer Amplitude, abzweigen. Die Situation für den Fall $\text{Re}(\alpha_i) < 0$ ist in Abb. 1.6 b) schematisch dargestellt. Für die Stabilität der abzweigenden Lösungen lässt sich kein einfaches analytisches Kriterium angeben. Exemplarisch wurde daher der Fall

$$D_u = 0.1, D_v = 0, D_w = 1, \kappa_1 = -0.03, \kappa_3 = 1, \quad (1.35)$$

$$\lambda \approx 1.46, \tau = 1.1, \theta = 0, L = 19 \quad (1.36)$$

mit zyklisch geschlossenen Rändern und der Diskretisierung $\Delta x = 0.3$ und $\Delta t = 1$ analysiert. Wegen $1/\tau < \kappa_3$ bifurkiert der homogene Zustand bei einer Variation der Steigung durch den Parameter λ in diesem Beispiel in einer Wellen-Bifurkation. Mit diesen Parametern können zunächst die Amplitudengleichungen untersucht und die Lösungen auf Stabilität geprüft werden. Es ergibt sich die in Abb. 1.6 b) schematisch dargestellte Situation. Es setzt sich jeweils genau eine der beteiligten kritischen Moden durch, so dass sich ein bewegtes Streifenmuster (BS) bildet. Andere Kombinationsmöglichkeiten sind instabil. Bei der numerischen Überprüfung durch die Simulation der vollen Gleichungen beobachtet man nach einigen transienten Prozessen jeweils eine bewegte Welle konstanter Amplitude und Geschwindigkeit. Da die Grundgebietslänge in dem untersuchten Fall nicht exakt zu der kritischen Wellenlänge $k_c = \sqrt{1/\sqrt{\sigma} - 1} \approx 1.47$ passte, ordnete sich die Welle leicht schräg auf dem Grundgebiet an. In Abb. 1.7 sind die Amplitude (a) und die Frequenz (b) aus der numerischen Simulation als Funktion des Bifurkationsparameters ε eingezeichnet. Der dargestellte Bereich von ε entspricht einer Variation von λ zwischen 1.4475 und 1.47. Der numerisch bestimmte Bifurkationspunkt ist zu $\varepsilon = -0.0047$ verschoben, und die Steigungen von Amplitude und Frequenz weichen um 25 bzw. 30 Prozent von der theoretischen Vorhersage ab. Diese Effekte können allerdings auf die grobe Diskretisierung zurückgeführt werden, die notwendig ist, um nahe am Bifurkationspunkt noch in akzeptabler Zeit zu Ergebnissen zu gelangen.

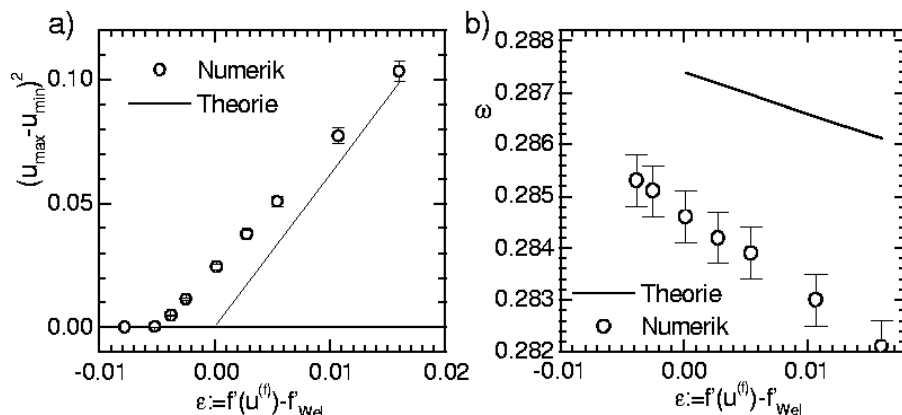


Abb. 1.7: a) Quadrat der Peak-to-Peak-Amplitude der Wellen als Funktion des Bifurkationsparameters ε b) Lokale Oszillationsfrequenz ω als Funktion von ε : Die Bifurkation tritt numerisch bereits bei $\varepsilon = -0.0047$ auf. Bei den Steigungen der Amplitude und der Frequenz beträgt der Fehler ca. 25 bzw. 30 Prozent.

In Abb. 1.8 wird der Fall der Turing- und der Wellen-Bifurkation in einem Bifurkationsdiagramm dargestellt. Der Punkt K stellt den Kodimension-2-Punkt bei $\tau = 1/\kappa_3$ dar. Unter den gleichen Einschränkungen an die Koeffizienten wie in Abb. 1.6 a) und b) findet man für $\tau < 1/\kappa_3$ eine subkritische Turing-Bifurkation zu Hexagonen und für $\tau > 1/\kappa_3$ eine superkritische Bifurkation zu laufenden Wellen. Qualitativ ähnliche Bifurkationsdiagramme wurden in einem Gleichspannungs-Gasentladungssystem aufgenommen, dass bisher im Rahmen von zweikomponentigen Modellgleichungen diskutiert wurde [2]. In diesem System treten ebenfalls subkritisch Hexagone und superkritisch Streifen auf, die häufig, allerdings nicht immer, eine langsame Driftgeschwindigkeit besitzen. Im Vergleich mit dem in Abb. 1.8 dargestellten Bifurkationsdiagramm liegt nun die Vermutung nahe, dass die Beschreibung mit einem zweikomponentigen Modell nicht ausreicht. Diese Vermutung wird durch das Auftreten lokalisierter, bewegter Strukturen in diesem System [5] gestützt. Welche physikalische Größe die Rolle der dritten Komponente in diesem Beispiel übernehmen könnte, konnte allerdings bisher nicht geklärt werden.

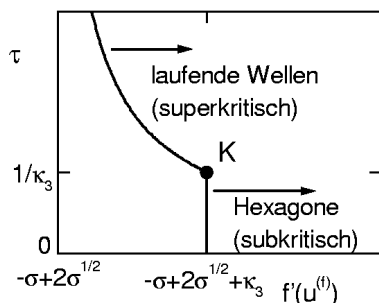


Abb. 1.8: Schematisches Bifurkationsdiagramm in Abhängigkeit der Steigung $f'(u^{(f)})$ und der Zeitkonstanten τ als Zusammenfassung von Abb. 1.6 a) und b): Der Kodimension-2-Punkt K trennt die Turing- von der Wellen-Bifurkation. Für große τ findet eine superkritische Verzweigung zu laufenden Wellen statt, für kleine τ eine subkritische Verzweigung zu Hexagonen.

Zur Beurteilung der Relevanz dieser Ergebnisse für experimentelle Systeme muss vor allem die Frage geklärt werden, ob sich ohne die künstlichen periodischen Randbedingungen bewegte Wellen ausbilden können oder ob stehende Wellen, als Überlagerung zweier gegenläufiger Wellen, zu erwarten sind. Betrachtet man beispielsweise ein quadratisches Grundgebiet mit Neumann-Rändern, dann wird die zentrale Mannigfaltigkeit von lediglich zwei Moden aufgespannt: den stehenden Wellen, die jeweils parallel zu den Kanten liegen und sich aus zwei laufenden Wellen zusammensetzen lassen. In numerischen Simulationen mit den Parametern aus (1.35)-(1.36) ergibt sich allerdings, dass der Einfluss der Randbedingungen mit der Größe des Grundgebiets abnimmt. Nur bei sehr kleinen Grundgebieten mit wenigen Wellenzügen bilden sich, in Übereinstimmung mit den Amplitudengleichungen für Neumann-Ränder, stehende Wellen. Bei größeren Grundgebieten ergeben sich Domänen laufender Wellen, die auch über lange Zeit (ca. 500 Perioden) stabil sind. Diese Situation ist in Abb. 1.9 dargestellt. Die Grenzen dieser Domänen oszillieren in diesem Beispiel periodisch, verschieben sich allerdings nicht.

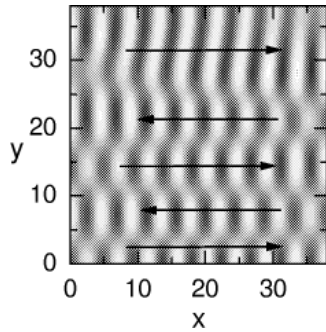


Abb. 1.9: Auf großen Grundgebieten sind auch bei Neumann-Randbedingungen laufende Wellen gegenüber stehenden Wellen bevorzugt. Es bilden sich Domänen laufender Wellen. Die Bewegungsrichtung ist in der Abbildung angedeutet. Die Parameter entsprechen (1.35)-(1.36) mit $\lambda = 1.46$ und $L = 38$.

In Abb. 1.10 sind die Ergebnisse einer Simulation dargestellt, die auf einem Grundgebiet mit einer gaußförmigen Inhomogenität durchgeführt wurde. Die Parameter wurden so gewählt, dass nur im Inneren des Gebiets die Turing-Grenze überschritten ist. Durch diese Wahl kann der Spiegel-Effekt der Neumann-Ränder ausgeblendet werden. Gleichzeitig gelangt man sehr nahe an die experimentellen Bedingungen in dem oben erwähnten Gleichspannungs-Gasentladungssystem. Dort wurden Bifurkationen zu Streifen, sowie ähnlich inhomogene Intensitätsprofile beobachtet[3]. Die Parameter und die Diskretisierung waren

$$\begin{aligned} D_u &= 0.1, D_v = 0, D_w = 1, \\ \lambda &= 1.46, \kappa_3 = 1, L = 86.4 \\ \tau &= 1.1, \theta = 0, \Delta t = 1, \Delta x = 0.32, \end{aligned} \tag{1.37}$$

wobei der Parameter κ_1 durch die Funktion

$$\kappa_1 = -0.06 + 0.04 \exp(-4.51 \times 10^{-6}(r - r_M)^2) \tag{1.38}$$

definiert wurde und r_M das Zentrum des Grundgebiets bezeichnet. Es wurden Neumann-Ränder verwendet. Aus dem homogenen Zustand heraus hat sich in diesem Beispiel eine

leicht gekrümmte, laufende Welle gebildet. Im Profil durch $x = 43.2$ in Abb. 1.10 b) spiegelt sich der superkritische Charakter der Wellen-Bifurkation wieder. Die Amplitude der Welle variiert stetig mit dem lokalen Wert von κ_1 . Die Neumann-Ränder haben nur einen vernachlässigbaren Effekt auf die Dynamik, da die Amplitude im Randbereich bereits fast auf den homogenen Wert zurückgegangen ist.

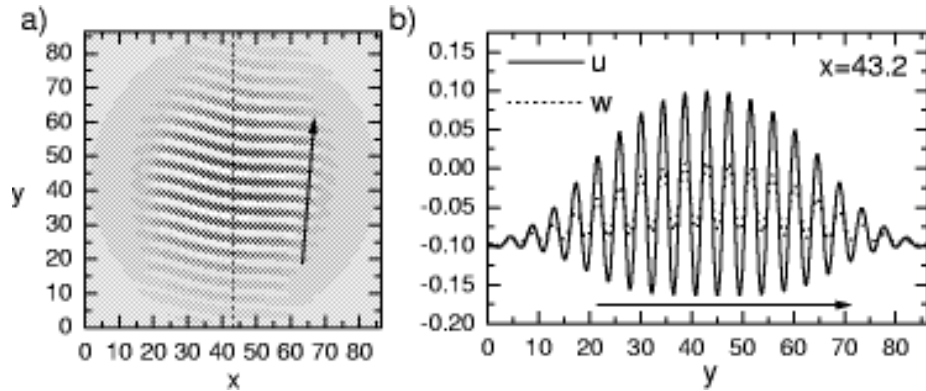


Abb. 1.10: a) Graustufenbild des Aktivators: Die Parameter sind inhomogen, so dass im Inneren des Grundgebiets durch eine Wellen-Bifurkation eine laufende Welle entstehen kann, ohne dass die Systemränder störend wirken. b) Profil des Aktivators u und des schnellen Inhibitors w : Das Profil des langsamen Inhibitors v entspricht bis auf eine sehr kleine Phasenverschiebung dem des Aktivators und wurde nicht dargestellt. Parameter und Diskretisierung sind in (1.37) und (1.38) angegeben.

1.4.3 Großamplitudige Lösungen

Bereits die Analyse des homogenen Zustands von dreikomponentigen Systemen zeigt qualitativ neue Phänomene, die in zweikomponentigen Systemen nicht auftreten können. Es stellt sich nun die Frage, ob die beobachteten Mechanismen auch bei großamplitudigen Strukturen und insbesondere bei lokalisierten Mustern (wie Fronten oder Filamenten) die Vielfalt der Strukturbildung erhöhen können. Tatsächlich findet man als neuartige Struktur unter anderem lokalisierte bewegte Quasiteilchen in zwei- und höherdimensionalen Systemen, für deren Auftreten ein langsamer und ein schneller, diffundierender Inhibitor gefordert werden müssen. Die Voraussetzungen für die Existenz solcher Lösungen sind daher eng verknüpft mit denen, die für die Wellen-Bifurkation verantwortlich sind. Die Eigenschaften dieser Lösungen und ihre Wechselwirkung miteinander werden in den Kapiteln 3 und 4 detailliert untersucht.

1.5 Systeme mit globaler Rückkopplung

In verschiedenen experimentellen Systemen findet man globale Rückkopplungsterme, also z. B. einen Vorwiderstand in elektrischen Durchbruchsexperimenten [3, 6, 85]. Formal ge-

langt man beispielsweise ausgehend von Gleichung (1.14)-(1.16) im Grenzfall $\theta = 0$ und $D_w \rightarrow \infty$ zu einem solchen System, so dass ein Integralterm auch als Spezialfall eines schnellen Inhibitors angesehen werden kann. Das Grundgebiet G darf in diesem Fall allerdings nicht mehr als unendlich ausgedehnt betrachtet werden, da sonst der Integralterm divergieren kann. Es ergibt sich

$$\dot{u} = D_u \Delta u + \lambda u - u^3 - \kappa_3 v + \underbrace{\kappa_1 - \kappa_4 \langle u \rangle}_{=: \kappa_{\text{eff}}}, \quad (1.39)$$

$$\tau \dot{v} = D_v \Delta v + u - v. \quad (1.40)$$

1.5.1 Der stationäre homogene Zustand

Die Linearisierung und Stabilitätsanalyse führt im Fall mit globaler Rückkopplung auf die Stabilitätsbedingungen

$$\text{Spur: } f'(u^{(f)}) < \frac{1}{\tau}(D_v k^2 + 1) + D_u k^2 + \frac{\kappa_4}{|G|} \delta_{k,0} =: f'_{\text{Hopf}}(k), \quad (1.41)$$

$$\text{Det: } f'(u^{(f)}) < D_u k^2 + \frac{\kappa_4}{|G|} \delta_{k,0} + \frac{\kappa_3}{D_v k^2 + 1} =: f'_{\text{Tur}}(k). \quad (1.42)$$

Der Term $\frac{\kappa_4}{|G|} \delta_{k,0}$ verhindert in diesen Gleichungen die Destabilisierung von Eigenmoden mit einem nichtverschwindenden Gleichanteil, also $k = 0$. Mit diesen Stabilitätsbedingungen kann es ebenso wie im dreikomponentigen Fall zu einer Wellen-Bifurkation kommen. Die kritische Wellenzahl liegt allerdings bei k_{min} , also der kleinsten Wellenzahl die in dem betrachteten System aufgrund der Randbedingungen und der Größe des Grundgebiets erlaubt ist. Die Turing-Bifurkation erfolgt nach wie vor bei der durch die Diffusionskonstanten definierten Wellenlänge. Dies ändert sich, wenn man mit $D_v = 0$ und $\tau \rightarrow 0$ zu einem einkomponentigen System mit globaler Rückkopplung übergeht. In diesem Fall ist keine Hopf- oder Wellen-Destabilisierung mehr möglich und die Turing-Bifurkation tritt ebenfalls bei k_{min} auf.

1.5.2 Großamplitudige Lösungen

Eine Diskussion des Einflusses der globalen Rückkopplung auf großamplitudige Lösungen gelingt am besten anhand der Isoklinen. Zunächst soll der einkomponentige Fall mit Rückkopplung ($D_v = 0$, $\tau = 0$) diskutiert werden. Die Ausbreitung einer Ausschaltfront führt zu einer Verkleinerung des Integralterms $\langle u \rangle$, damit zu einer Vergrößerung von κ_{eff} und der Verschiebung der $\dot{u} = 0$ -Isokline nach oben wie in Abb. 1.11 a) dargestellt. Die Frontpropagation verlangsamt sich, bis es zur Bildung einer stationären Lösung kommt. Tatsächlich ist es mit diesem Mechanismus möglich, stabile Fronten bzw. ein stabiles Filament auch in einem einkomponentigen System zu realisieren. Im Gegensatz zur Situation in zweikomponentigen Systemen mit schnellem Inhibitor ist es in diesem Fall allerdings nicht möglich, beliebig viele stationäre Filamente gleichzeitig zu realisieren. Die folgende Überlegung zeigt den Grund: Man betrachtet die Situation $\kappa_4 = 0$, ein genügend großes

Grundgebiet und zwei stationäre, instabile Lösungen, die räumlich getrennt sind. Dann existieren zwei instabile Eigenmoden d_1 und d_2 der linearisierten Dynamik L mit $Ld_i = \lambda d_i$ und $\text{Re } \lambda > 0$, die jeweils einem der beiden Objekte zugeordnet sind. Aktiviert man den Integralterm durch Variation von κ_1 und κ_4 unter Beibehaltung von κ_{eff} , so bleibt die Form der Lösung bestehen und man gelangt zu der Linearisierung des neuen Systems $L'u = Lu - \frac{\kappa_4}{|G|} \langle u \rangle$. Für den Vektor $v = d_1 - d_2$ gilt

$$L'(d_1 - d_2) = L(d_1 - d_2) = \lambda(d_1 - d_2), \quad (1.43)$$

d. h. die antisymmetrische Kombination der instabilen Eigenmoden d_i ist wieder eine Eigenmode und ihr Eigenwert wird durch den Integralterm nicht beeinflusst. Die Instabilität kann demnach bei zwei und mehr Teilchen nicht unterdrückt werden. Dieses Argument ist unabhängig von der Dimension und der Zahl der Komponenten des betrachteten Systems.

Außer für die Stabilisierung von Strukturen kann ein Integralterm auch eingesetzt werden, um die Größe des Aktivatorintegrals $\langle u \rangle$ zu kontrollieren. Im zweikomponentigen Fall liegt die in Abb. 1.11 b) dargestellte Situation vor. Der Arbeitspunkt ist so gewählt, dass stabile, lokalisierte Strukturen existieren. Eine Verschiebung des Arbeitspunktes durch Variation von κ_1 führt entweder zum Verlassen des Existenzbereichs von Filamenten oder in einen Bereich, in dem die Filamente instabil sind, sich z. B. teilen oder in ihren Ausläufern neue Filamente generieren können. Falls $\kappa_4 > 0$ gewählt wurde wird der Arbeitspunkt durch die sprunghafte Änderung des Aktivatorintegrals infolge der Vernichtungs- oder Generationsprozesse wieder in den stabilen Bereich zurückgeschoben. Der Parameter κ_1 kann daher verändert werden, ohne dass der Bereich stabiler Filamente verlassen wird. Lediglich die Filamentzahl ändert sich in diesem Fall (vgl. [49]).

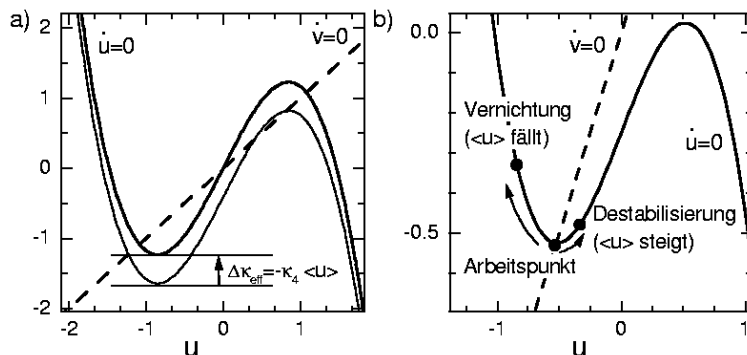


Abb. 1.11: a) Bei einer Änderung des Aktivatorintegrals verschiebt die globale Rückkopplung die Isoklinen $\dot{u} = 0$ und $\dot{v} = 0$. b) Durch eine globale Rückkopplung im Wechselspiel mit Filamentvernichtung und -generation wird der Arbeitspunkt im stabilen Bereich der Kennlinien festgehalten.

1.6 Zusammenfassung

Es soll nun versucht werden die in diesem Kapitel vorgestellten Ergebnisse in den folgenden Tabellen zusammenzufassen. Ausgehend von einem einkomponentigen System wird jeweils die Erweiterung durch einen langsamen bzw. einen schnellen Inhibitor oder Integralterm diskutiert. Zunächst sollen die Eigenwerte bei der Destabilisierung der stationären homogenen Zustände betrachtet werden. Der Realteil eines Eigenwerts λ_k einer Störung mit Wellenzahl k wechselt dabei das Vorzeichen. Je nach Art der Destabilisierung ist dieser Eigenwert reell oder komplex und die Wellenzahl k unterschiedlich. Die Tabelle 1.12 gibt einen Überblick über die möglichen Fälle. Um eine dynamische Destabilisierung über einen komplexen Eigenwert zu finden ist ein langsamer Inhibitor zwingend erforderlich. Für eine räumlich inhomogene Störung benötigt man dagegen einen schnellen Inhibitor. Der Fall mit globaler Rückkopplung ist qualitativ dem mit einem schnellen Inhibitor ähnlich. Die Wellenlänge der Destabilisierung k_{\min} ist allerdings jeweils die kleinste Wellenlänge ungleich null, die mit den Randbedingungen und dem Grundgebiet konform ist, im Gegensatz zur Wellenlänge k_{crit} im Fall des schnellen Inhibitors, die durch die Parameter des Systems selektiert wird.

Aktivator und ...	–	globale Rückkopplung	schneller Inhibitor
–	$\lambda_k \in \mathbf{R}, k = 0$	$\lambda_k \in \mathbf{R}, k = k_{\min}$	Turing: $\lambda_k \in \mathbf{R}, k = k_{\text{crit}}$
langsamer Inhibitor	Hopf: $\lambda_k \in \mathbf{C}, k = 0$	$\lambda_k \in \mathbf{C}, k = k_{\min}$	Wellen: $\lambda_k \in \mathbf{C}, k = k_{\text{crit}}$

Abb. 1.12: Übersicht über mögliche Eigenwerte bei der Destabilisierung des homogenen Zustands

Der Fall großamplitudiger Strukturen ist in der Tabelle 1.13 dargestellt. Ohne Inhibitorfelder sind zunächst Fronten zwischen den beiden Zuständen denkbar, sofern die lokale Reaktionskinetik zwei stabile Fixpunkte besitzt. Ein langsamer Inhibitor ermöglicht zusätzlich eine erregbare Dynamik, also Pulse in einer Raumdimension, Spiralen oder Scroll-Waves in zwei- bzw. drei Dimensionen. Ein schneller Inhibitor führt zu lokalisierten stationären Strukturen und nur die Kombination von langsamem und schnellem Inhibitor ermöglicht auch bewegte Quasiteilchen in zwei oder mehr Raumdimensionen. Der Spezialfall der globalen Rückkopplung begrenzt hingegen die Zahl der stationären bzw. bewegten Quasiteilchen jeweils auf eins.

Aktivator und ...	–	globale Rückkopplung	schneller Inhibitor
–	Fronten	ein Filament	mehrere Filamente
langsamer Inhibitor	Pulse, Spiralen, Scroll-Waves	ein bewegtes Quasiteil- chen (2D, 3D)	mehrere bewegte Qua- siteilchen (2D, 3D)

Abb. 1.13: Übersicht über typische großamplitudige Strukturen für unterschiedliche Systeme

Kapitel 2

Stabilitätsuntersuchungen an stationären solitären Strukturen

Die Analyse stationärer solitärer Lösungen stellt einen wichtigen Ausgangspunkt für das Verständnis komplexer dynamischer Strukturen dar. In diesem Kapitel sollen daher zunächst lokalisierte, rotationssymmetrische stationäre Lösungen untersucht werden. Die Behandlung solcher Lösungen kann unter der Ausnutzung der Rotationssymmetrie mit räumlich eindimensionaler Numerik durchgeführt werden. Dennoch erhält man über die Analyse von Destabilisierungsmechanismen einen Ansatzpunkt zum Verständnis abzweigender Strukturen. Im Folgenden wird für ein spezielles zweikomponentiges Reaktions-Diffusions-Modell numerisch der Parameterbereich bestimmt, in dem Einzelspots existieren und in dem sie stabil sind. Es werden verschiedene Wege der Destabilisierung dieser Strukturen diskutiert. Für ein dreikomponentiges System wird die Entwicklung dynamischer Instabilitäten im Hinblick auf die spätere Untersuchung bewegter lokalisierter Lösungen analysiert. Das Beispiel eines Halbleitersystems demonstriert anschließend die Anwendbarkeit der vorgestellten Methode auf Systeme mit wesentlich komplizierterer Reaktionskinetik.

2.1 Formulierung des Problems

Als Grundlage für die folgenden Ausführungen soll zunächst das Problem der Bestimmung von stationären Lösungen und der Analyse ihrer Stabilität in allgemeiner Form dargestellt werden. Es soll daher zunächst die Klasse der Reaktions-Diffusions-Systeme der Form

$$\dot{u} = D\Delta u + F(u, \langle u \rangle) \tag{2.1}$$

betrachtet werden, wobei $u(x, t) : G \subset \mathbf{R}^d \times \mathbf{R} \rightarrow \mathbf{R}^k$ eine k -komponentige Verteilung auf einem d -dimensionalen Grundgebiet darstellt. Δ bezeichnet den Laplace-Operator im \mathbf{R}^d , D ist eine diagonale $k \times k$ -Matrix und $F(u, \langle u \rangle)$ eine Funktion $F : \mathbf{R}^{2k} \rightarrow \mathbf{R}^k$, da der Einfluss einer globalen Kopplung $\langle u \rangle := \int_G u \, dg$ in den Reaktionstermen explizit

betrachtet werden soll. In dieser Darstellung ist zu beachten, dass es sich bei $\langle u \rangle$ um einen k -komponentigen Vektor handelt. Die stationären homogenen Lösungen $u^{(f)}$ dieses Gleichungssystems sind über $F(u, \langle u \rangle) = 0$ definiert. Im Folgenden werden stets Systeme betrachtet, die über mindestens eine solche Lösung $u^{(f)}$ verfügen.

2.1.1 Stationäre Lösungen

Stationäre Lösungen der Gleichung (2.1) werden bestimmt über

$$0 = D\Delta u + F(u, \langle u \rangle). \quad (2.2)$$

Durch den Übergang zu Polar- bzw. zu Kugelkoordinaten und der Einschränkung auf rotationssymmetrische Grundgebiete und Lösungen $u = u(r)$ vereinfacht sich diese elliptische, partielle Differentialgleichung auf das gewöhnliche Differentialgleichungssystem

$$0 = D \underbrace{(\partial_{rr} + \frac{d-1}{r}\partial_r)}_{\Delta^R} u + F(u, \langle u \rangle), \quad (2.3)$$

das auf \mathbf{R}^+ definiert ist, und die Randbedingung $\partial_r u(0) = 0$ erfüllen muss. Die Gleichung (2.3) lässt sich unabhängig von der Dimension d des Problems mit geringem numerischen Aufwand lösen. Zur Lösung hat sich das Newton-Verfahren als sehr geeignet erwiesen. Bei diesem iterativen Verfahren startet man mit einer Verteilung $u_0 = u_0(r)$. Man sucht nun nach einer Verbesserung $u'_0 = u'_0(r)$ dieser Lösung, so dass gilt:

$$\begin{aligned} D\Delta^R(u_0 + u'_0) + F(u_0 + u'_0, \langle u_0 + u'_0 \rangle) &= \\ \underbrace{(D\Delta^R u_0 + F(u_0, \langle u_0 \rangle))}_{=: N(u_0)} + (D\Delta^R + \nabla F(u_0, \langle u_0 \rangle))u'_0 &= \\ N(u_0) + \nabla N(u_0)u'_0 &= 0 \quad (2.4) \\ \text{oder} \quad u'_0 &= -(\nabla N(u_0))^{-1}N(u_0). \quad (2.5) \end{aligned}$$

Man erhält somit eine Gleichung für u'_0 und damit eine verbesserte Lösung $u_1 = u_0 + u'_0$. Die Gleichung (2.5) ist im Allgemeinen nicht analytisch lösbar, da es sich bei $\nabla N(u_0)$ um einen Differential-Integral-Operator handelt, der invertiert werden muss. Zur numerischen Behandlung wird man daher auf eine geeignete Diskretisierung des Gleichungssystems (2.5) zurückgreifen, so dass sich der Operator $\nabla N(u_0)$ als Matrix darstellen lässt und numerisch invertiert werden kann.

2.1.2 Stabilitätsuntersuchungen

Bei der Analyse der Stabilität einer stationären Lösung $\bar{u} = \bar{u}(r)$ können wieder die Symmetrieeigenschaften der Lösung benutzt werden. Man betrachtet die zeitliche Entwicklung kleinamplitudiger Störungen in der Form $u(x, t) = \bar{u}(|x|) + \tilde{u}(x, t)$. Durch Einsetzen in (2.1) ergibt sich das lineare Gleichungssystem

$$\dot{\tilde{u}} = D\Delta\tilde{u} + \nabla F(\bar{u}, \langle \bar{u} \rangle)\tilde{u} \quad (2.6)$$

für die zeitliche Entwicklung der Störung \tilde{u} bzw. das äquivalente Eigenwertproblem

$$\lambda \tilde{u} = D \Delta \tilde{u} + \nabla F(\bar{u}, \langle \bar{u} \rangle) \tilde{u}. \quad (2.7)$$

Lineare Stabilität der Lösung \bar{u} liegt vor, falls die Realteile aller Eigenwerte λ kleiner als null sind.

Bei der numerischen Lösung von (2.7) wird man wieder auf eine Diskretisierung des Grundgebiets zurückgreifen und das diskrete Eigenwertproblem lösen. Da die bei der Linearisierung auftretenden Matrizen keine Symmetrie oder besondere Struktur besitzen, muss man ein sehr allgemeines Verfahren, die QR-Zerlegung, verwenden. Während der numerische Aufwand für diese Vorgehensweise bei eindimensionalen Problemen nicht zu aufwendig ist, steigt die Komplexität allerdings in zwei oder gar drei Raumdimensionen stark an. Um den numerischen Aufwand gering zu halten, soll eine geeignete Zerlegung zwei- und dreidimensionaler Störungen gefunden werden. Eine Aufteilung von \tilde{u} in Winkelanteil und Radialanteil erscheint hier erfolgversprechend:

$$\tilde{u}(r, \phi, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \tilde{u}_n(r, t) \cos(n\phi + \phi_n(t)) \quad (\text{d}=2), \quad (2.8)$$

$$\tilde{u}(r, \theta, \phi, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{|m| \leq n} \tilde{u}_{n,m}(r, t) Y_{nm}(\theta, \phi) \quad (\text{d}=3). \quad (2.9)$$

Da die Störung \tilde{u} als stetig und differenzierbar angenommen wird, müssen die Funktionen $\tilde{u}_{n(m)}$ die zusätzlichen Randbedingungen

$$\frac{\partial}{\partial r} \tilde{u}_{0(,0)}(0, t) = 0 \quad \text{und} \quad \tilde{u}_{1,2,\dots,(m)}(0, t) = 0$$

erfüllen. Mit diesen Ansätzen ergibt sich aus (2.7) ein eindimensionales Eigenwertproblem

$$\lambda_n \tilde{u}_n = \left(D \left(\partial_{rr} + \frac{d-1}{r} \partial_r - \frac{n^2}{r^2} \right) + F_u(\bar{u}, \langle \bar{u} \rangle) \right) \tilde{u}_n + \delta_{n0} F_{\langle u \rangle}(\bar{u}, \langle \bar{u} \rangle) \langle \tilde{u}_n \rangle \quad (2.10)$$

für \tilde{u}_n bzw. $\tilde{u}_{n,m}$. Da die Eigenwerte weder von $\phi_n(t)$ noch von m abhängen, genügt es die Modenamplituden und Eigenwerte mit dem Index n zu bezeichnen. Die Größe $\phi_n(t)$ im 2D-Fall bzw. die Anteile der Störung in verschiedenen Moden m im 3D-Fall beeinflussen lediglich die Orientierung der Störungen im Raum, jedoch nicht die Stabilität selber. Eine besondere Rolle bei der Behandlung des Stabilitätsproblems spielt der Integralterm, weil er nur für die Eigenwerte der Moden mit $n = 0$ von Bedeutung ist. Diese Eigenschaft reduziert den numerischen Aufwand bei der Berechnung der Stabilitätseigenschaften erheblich und wird in den folgenden Abschnitten mehrfach ausgenutzt. Der Vorteil der obigen Formulierung des Eigenwertproblems besteht darin, dass große n den räumlich stark modulierten Eigenmoden mit deutlich negativen Realteilen der Eigenwerte entsprechen und dass die numerische Untersuchung bereits bei kleinen n abgebrochen werden kann. Bei der Beschreibung praktisch relevanter Fälle trat eine Destabilisierung für Moden $n > 8$ nicht

auf. Darüber hinaus ist die Interpretation der mit einer Mode n korrelierten Destabilisierung durch die Zerlegung in Winkelanteile sehr anschaulich und fördert das Verständnis der Prozesse. In Abb. 2.1 ist schematisch der Einfluss des Anwachsens der Störmoden $n = 0, \dots, 3$ dargestellt. Die Atmungs-Mode $n = 0$ führt zu einer Größenänderung des Spots, $n = 1$ zu einer Verschiebung der Lösung und $n \geq 2$ zu Deformationen. In dieser Darstellung wird deutlich, wieso der Integralterm lediglich auf die $n = 0$ -Mode einen Einfluss hat: die Gesamtgröße des aktiven Bereichs wird von den anderen Moden nicht beeinflusst. Der dreidimensionale Fall kann analog interpretiert werden. Lediglich die geometrische Darstellung der Kugelflächenfunktionen wird komplexer.

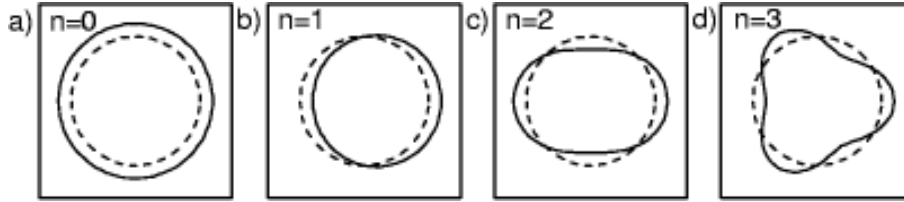


Abb. 2.1: Einfluss einer Störmode mit $n = 0, \dots, 3$ auf ein rotationssymmetrisches Objekt

2.1.3 Adaptive Diskretisierung

Zur numerischen Berechnung der stationären Lösungen bzw. zur Durchführung der Stabilitätsuntersuchung muss die um eine Verteilung linearisierte Systemmatrix $\nabla N(\bar{u})$ im Raum diskretisiert werden. Den einfachsten Weg stellt hier die äquidistante Raumdiskretisierung dar. Allerdings ist der Aufwand für die hier betrachteten eindimensionalen Probleme zur Implementierung adaptiver Gitter relativ gering. Ihre Vorteile sind jedoch insbesondere bei der Eigenwertberechnung spürbar, da die Rechenzeit hier mit der Zahl der Diskretisierungspunkte N wie N^3 skaliert und eine Einsparung von Stützpunkten sehr große Leistungsgewinne bringt. Im Folgenden werden die Positionen der Stützpunkte mit $\{x_i\}_{i=1, \dots, N}$ und die Diskretisierung der betrachteten Verteilung $u(x)$ an diesen Punkten mit $\{u_i\}_{i=1, \dots, N}$ bezeichnet. Abb. 2.2 zeigt die Situation. Man erhält die diskrete Form der ersten und zweiten Ableitung von $u(x)$ im Punkt x_i in einer Drei-Punkt-Form durch die Entwicklung der Funktion um den Punkt x_i

$$u_j = u_i + u'(x_i)(x_j - x_i) + \frac{u''(x_i)}{2}(x_j - x_i)^2 + O((x_j - x_i)^3).$$

Mit $j = i + 1$ und $j = i - 1$ ergeben sich zwei Gleichungssysteme, die nach den Ableitungen $u'(x_i)$ und $u''(x_i)$ gelöst werden können. Es ergeben sich, bis auf Fehler in den Ordnungen $O(x_{i+1} - x_i)$ und $O(x_{i-1} - x_i)$, die Ausdrücke

$$u'(x_i) = \frac{(u_{i-1} - u_i)(x_i - x_{i+1})^2 - (u_{i+1} - u_i)(x_{i-1} - x_i)^2}{(x_{i-1} - x_i)(x_{i-1} - x_{i+1})(x_i - x_{i+1})}, \quad (2.11)$$

$$u''(x_i) = \frac{2(u_{i+1}(x_{i-1} - x_i) + u_{i-1}(x_i - x_{i+1}) + u_i(x_{i+1} - x_{i-1}))}{(x_{i-1} - x_i)(x_{i-1} - x_{i+1})(x_i - x_{i+1})}. \quad (2.12)$$

Im Fall äquidistanter Stützpunktverteilung x_i gehen diese Terme in die bekannten 3-Punkte-Formeln für die erste und zweite Ableitung über.

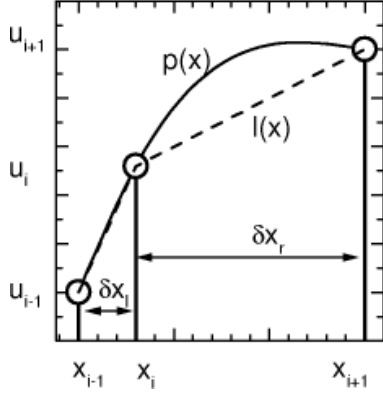


Abb. 2.2: Bezeichnungen für die Gitterpunkte und Funktionswerte einer Verteilung: Der Graph $l(x)$ ist eine lineare Interpolation, $p(x)$ die Parabel durch die drei Punkte. Die mittlere Differenz zwischen diesen Linien kann als Maß für den Diskretisierungsfehler verwendet werden.

Um die Stützpunkte $\{x_i\}$ in geeigneter Form wählen zu können, wird außerdem ein geeignetes Maß für den Diskretisierungsfehler benötigt. Eine mögliche Wahl stellt die mittlere Differenz zwischen einer linearen und einer quadratischen Interpolation durch jeweils drei Stützpunkte dar. Mit den Bezeichnungen aus Abb. 2.2 errechnet sich diese Abweichung zu

$$\eta(x_i) := \frac{\left| \int_{x_i - \frac{\delta x_l}{2}}^{x_i + \frac{\delta x_r}{2}} (l(x) - p(x)) dx \right|}{\frac{1}{2}(x_{i+1} - x_{i-1})} \quad (2.13)$$

$$= \frac{(\delta x_l^2 - \delta x_l \delta x_r + \delta x_r^2) |\delta x_r u_{i-1} - (\delta x_l + \delta x_r) u_i + \delta x_l u_{i+1}|}{6 \delta x_l \delta x_r (\delta x_l + \delta x_r)}. \quad (2.14)$$

Auf der Basis von $\tilde{\eta}(x_i) := \eta(x_i) / (\max_j(u_j) - \min_j(u_j))$ ist es nun möglich, eine lokale Gitterverfeinerung oder -vergrößerung durchzuführen. Falls mehrere Verteilungen betrachtet werden, muss das Maximum des Fehlers als Basis angesetzt werden. Bei der Verfeinerung wird der Punkt x_i durch zwei neue Punkte ersetzt, die äquidistant zwischen x_{i-1} und x_{i+1} liegen, falls $\tilde{\eta}(x_i) > \eta_{\text{fein}}$. Bei der Vergrößerung wird x_i entfernt, sobald $\tilde{\eta}(x_i) < \eta_{\text{grob}}$. Für die konstanten Schranken η_{fein} und η_{grob} muss $\eta_{\text{fein}}/\eta_{\text{grob}} > 5 \dots 10$ gelten, weil das Verfahren sonst zwischen zwei Stützpunktverteilungen alternieren kann, indem es abwechselnd einen Punkt entfernt und wieder hinzufügt. Diese sehr einfache Strategie zur Gitterverfeinerung führt nicht immer zu identischen Ergebnissen für das generierte adaptive Gitter, hat sich allerdings in der Praxis als sehr robust erwiesen.

Die Vorteile der adaptiven Diskretisierung zeigen sich insbesondere bei sehr steilen Verteilungen bzw. bei (bezogen auf den Filamentdurchmesser) großen Grundgebieten. In Abb. 2.3 sind die Ergebnisse eines Vergleichs zwischen dem adaptiven und normalen Verfahren dargestellt. Als Beispiel wurde das Gleichungssystem (2.18) mit den in der Abbildung angegebenen Parametern verwendet. In Abb. 2.3 a) ist ein exemplarischer Vergleich für die Verteilung $u(x)$ eines Filaments für $N = 63$ Stützpunkte dargestellt. Man erkennt deutlich die schlechte Diskretisierung im Frontbereich bei der mit äquidistanten Stützpunkten

gerechneten Verteilung. Die adaptiv generierte Verteilung zeigt jedoch in Bereichen mit starker Krümmung ein besonders dichtes Netz, während die Außenbereiche kaum Punkte enthalten. Tatsächlich pinnt die Front im äquidistanten Fall bereits an den Stützpunkten und der Filamentradius stimmt daher nicht mit den korrekten Ergebnissen überein. In Abb. 2.3 b) wurde die Abweichung $\Delta u_N := \int_G |u_N - \bar{u}| dg$ zwischen der exakten Lösung¹ \bar{u} und der jeweiligen diskreten Form u_N für unterschiedliche effektive Diskretisierungslängen $\delta x_{\text{eff}} := R/N$ dargestellt. Deutlich ist zu erkennen, dass die adaptive Methode im Schnitt einen etwa um den Faktor fünf geringeren Fehler bei gleicher Zahl von Stützpunkten erzielt. Für sehr wenige Stützpunkte ($N = 2 \dots 10$, $\delta x_{\text{eff}} = 2 \dots 10$) sind beide Verfahren gleich schlecht. Dieser Grenzfall ist allerdings in der Praxis uninteressant. Die breite Streuung der Punkte im adaptiven Fall spiegelt die unterschiedlichen Realisierungen des Endgitters wieder, die aufgrund der dynamischen Gittererzeugung bei gleichen Parametern entstehen können. Beim nicht-adaptiven Verfahren ist die Streuung zwar geringer, allerdings existieren dort systematische Schwankungen bei bestimmten effektiven Diskretisierungslängen, die zufällig zu besonders gut bzw. schlecht gewählten Stützpunkten führen.

In den im Folgenden numerisch untersuchten Fällen bot das adaptive Verfahren große Vorteile, insbesondere aufgrund des Zeitgewinns bei der Eigenwertberechnung. Einige Parameterbereiche konnten nur durch diese Methode in angemessener Zeit untersucht werden.

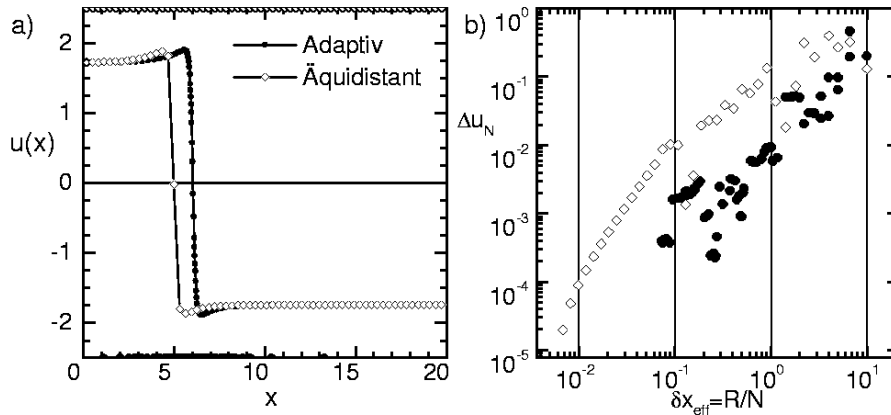


Abb. 2.3: a) Beispiel einer stationären Verteilung $u(x)$ mit $N = 63$ mit adaptivem bzw. äquidistantem Gitter: Man erkennt deutlich die hohe Stützpunktdichte im Frontbereich der Verteilung bei der adaptiv gerechneten Verteilung. Die Lage der Stützpunkte wurde auf der oberen und unteren x -Achse markiert. b) Fehler Δu_N als Funktion der effektiven Diskretisierungslänge $\delta x_{\text{eff}} := R/N$: Die Fehler im äquidistanten Fall sind durch die offenen Symbole gekennzeichnet. Im Beispiel wurde ein Filament im System (2.18) mit den Parametern $\sigma = 0.05$, $\lambda = 4$, $\kappa_{\text{eff}} = -0.08$, $d = 2$ auf einer Scheibe mit Radius $R = 20$ untersucht.

¹Als Referenz wurde eine Lösung mit 3500 äquidistanten Stützpunkten verwendet.

2.2 Ein zweikomponentiges Reaktions-Diffusions-System

Um einen systematischen Zugang zum Verständnis lokalisierter, stationärer Lösungen zu gewinnen, soll zunächst ein einfaches Reaktions-Diffusions-Modell untersucht werden. Ein-komponentige Systeme ($k = 1$) sind als Ausgangspunkt nicht geeignet, da man in diesem Fall im Allgemeinen eine globale Rückkopplung zur Stabilisierung eines Filaments benötigt (vgl. 1.5.2 oder [10]). Ein einfaches zweikomponentiges System, in dem stationäre Filamente auftreten, wird durch die Gleichungen

$$\dot{u} = D_u \Delta u + f(u) - v + \kappa_1 - \frac{\kappa_2}{|G|} \langle u \rangle, \quad (2.15)$$

$$\tau \dot{v} = D_v \Delta v + u - v \quad (2.16)$$

beschrieben. Die einzige intrinsische Nichtlinearität in diesem System ist die Funktion $f(u)$. Im Folgenden wird, wenn nicht anders erwähnt, immer eine kubische Funktion $f(u) = \lambda u - u^3$ vorausgesetzt. Dies stellt den einfachsten nichtlinearen Fall dar. Rein quadratische Nichtlinearitäten sind wegen möglicher Divergenzprobleme schwerer zu handhaben, können aber prinzipiell ebenso solitäre filamentäre Lösungen zeigen. Im Fall einer kubischen Nichtlinearität besitzt das System maximal drei Fixpunkte als Lösung der Gleichung

$$(\lambda - 1)u^{(f)} - (u^{(f)})^3 + (\kappa_1 - \kappa_2) = 0. \quad (2.17)$$

Die Fixpunkte werden im Folgenden als v^- , v^0 und v^+ bezeichnet. Für einzelne Parametersätze wurde dieses Gleichungssystem schon untersucht, und charakteristische Destabilisierungsmechanismen klassifiziert [71, 73]. Der numerische Aufwand für diese Untersuchungen war relativ gering. Es wurde daher angestrebt den gesamten Bereich mit filamentären Lösungen des Systems (2.15)-(2.16) im Parameterraum systematisch zu erfassen und darzustellen.

2.2.1 Reduktion des Parameterraums

Auf den ersten Blick erscheint der Versuch filamentäre Lösungen der Gleichungen (2.15)-(2.16) für sämtliche Parameter zu untersuchen wenig erfolgversprechend, da der Parameterraum von den Größen D_u , D_v , λ , κ_1 , κ_2 und τ aufgespannt wird, also sechs-dimensional erscheint. Bei näherer Betrachtung gelingt es allerdings das Problem deutlich zu vereinfachen. Zunächst ist es möglich durch eine geeignete Ortsskalierung den Parameter D_v auf 1 zu normieren. Das Verhältnis der Diffusionskonstanten D_u/D_v wird im Folgenden als σ bezeichnet. Eine weitere Vereinfachung besteht darin zunächst nur den Fall $\kappa_2 = 0$ und $\tau = 1$ zu betrachten. Der Parameterraum reduziert sich so auf den \mathbf{R}^3 . Man setzt daher mit der Untersuchung des Gleichungssystems

$$\dot{u} = \sigma \Delta u + \lambda u - u^3 - v + \kappa_{\text{eff}}, \quad (2.18)$$

$$\tau \dot{v} = \Delta v + u - v$$

an. Für dieses System wurden zunächst sämtliche stationäre Lösungen berechnet. Da sich diese für alle Kombinationen von κ_1 und κ_2 mit

$$\kappa_{\text{eff}} = \kappa_1 - \frac{\kappa_2}{|G|} \langle u \rangle \quad (2.19)$$

und in Abhängigkeit der Zeitkonstanten τ nicht ändern, ist es außerdem möglich für ein fest gewähltes κ_{eff} alle Kombinationen von κ_2 und τ auf ihre Stabilität zu untersuchen, ohne dass die stationäre Lösung neu berechnet werden muss.

2.2.2 Numerische Vorgehensweise

Es wurde ein Algorithmus entwickelt der in der Lage ist den gesamten Parameterraum des Gleichungssystems (2.15)-(2.16) systematisch zu untersuchen. Der Algorithmus besteht im Kern aus zwei Elementen: der Bestimmung der Radialkomponente ($\bar{u}(r), \bar{v}(r)$) der stationären Lösungen und der Analyse ihrer Stabilität. Bevor allerdings eine Untersuchung des Parameterraums gestartet werden kann, muss zunächst ein Kriterium angegeben werden, das den Begriff „filamentäre, stationäre Verteilung“ definiert. Ein Solches wird anhand der Aktivatorverteilung $\bar{u}(r)$ einer berechneten stationären, räumlich inhomogenen Verteilung eingeführt. Man gibt einen Schwellwert $u_{SW} := \frac{1}{3}(\max(\bar{u}) + 2 \min(\bar{u}))$ vor und fordert, dass es nur einen Schnittpunkt ($r_{(S)}, \bar{u}(r_{(S)})$) zwischen der Verteilung $u(r)$ und $u = u_{SW}$ geben darf und dass dieser die Eigenschaft $\partial_r u(r_{(S)}) < 0$ besitzt. Auf diese Weise können Verteilungen mit nicht-filamentärem Charakter erkannt und von der weiteren Untersuchung ausgeschlossen werden.

2.2.2.1 Berechnung der stationären Lösungen

Als Ausgangspunkt werden dem Algorithmus die Grenzen des Bereichs im Parameter-raum vorgegeben, der untersucht werden soll. Dieser wird mit einer in jeder Richtung wählbaren Feinheit diskretisiert. Allerdings wird keine äquidistante Diskretisierung verwendet, sondern eine logarithmische. Dieser Einteilung liegt die Annahme zugrunde, dass stationäre Lösungen über Größenordnungen von Parameteränderungen existieren können, so dass der Versuch den gesamten Parameterraum mit einer linearen Skala erfassen zu wollen, wenig erfolgversprechend ist. Die zu untersuchenden Parametersätze werden im Folgenden mit $((\kappa_{\text{eff}})_i, \lambda_j, \sigma_k, \tau_l, (\kappa_2)_m)$ bezeichnet.

Das Problem besteht nun darin, für jeden gegebenen Parametertripel $((\kappa_{\text{eff}})_i, \lambda_j, \sigma_k)$ die Radialkomponente der stationären Lösung $\bar{u}(r)$ zu berechnen. Im Prinzip wäre es möglich eine geeignete Startverteilung (z. B. eine Rampe) für das Newton-Verfahren vorzugeben und daraus jeweils die passende Lösung zu berechnen. Dieser Ansatz scheitert jedoch an zwei Punkten. Zunächst benötigt man eine geeignete Startverteilung. Dazu bietet sich z. B. eine Stufe von hoher zu niedriger Aktivatorkonzentration an. Aber auch wenn die Parameter für diese Stufe geeignet gewählt werden, ist nicht sichergestellt, dass das Newton-Verfahren immer gegen eine stationäre, filamentäre Lösung konvergiert. Selbst

wenn das Verfahren gegen eine Lösung konvergiert, besteht immer noch die Gefahr, dass es sich dabei um die instabile Separatrix zwischen dem homogenen Zustand und dem stabilen Filament handelt.

Aus diesen Gründen wurde ein anderes Verfahren implementiert, das darauf beruht, dass man von einer bereits berechneten Lösung durch eine schrittweise, quasistatische Parametervariation zu einer Nachbarlösung übergehen kann. Für jedes erzeugte Filament werden dann einige wenige Kenngrößen, wie Halbwertsbreite, Amplitude und Flankensteilheit, gespeichert, die später zur sicheren Rekonstruktion einer Lösung verwendet werden. Der Algorithmus wird mit der vorgegebenen Anfangslösung an einer beliebigen Stelle im Parameterraum gestartet. Zunächst wird die Stabilität der Lösung für alle betrachteten $(\kappa_2)_l$ und τ_m berechnet. Falls Nachbarpunkte im Parameterraum noch nicht bearbeitet wurden, wird der Algorithmus rekursiv für diese Nachbarn aufgerufen. Dieses Verfahren hat den Vorteil, dass nur die Punkte bearbeitet werden die innerhalb des Bereichs liegen, der stationäre Lösungen aufweist. Man muss sich allerdings darüber im Klaren sein, dass zwei getrennte Gebiete stationärer Lösungen auf diese Weise nicht erfasst werden können, wohl aber beliebig geformte, zusammenhängende Gebiete.

2.2.2.2 Analyse der Stabilität

Die Berechnung der Stabilität erfolgt über die Berechnung der Eigenwerte der Linearisierung der diskretisierten Gleichungen (2.15)-(2.16) um die stationäre Lösung (\bar{u}, \bar{v}) . Dabei wird für eine gegebene Lösung direkt die Berechnung für sämtliche $(\kappa_2)_l$ und τ_m durchgeführt. Im Vergleich zur Berechnung der stationären Lösungen ist die Eigenwertberechnung numerisch relativ aufwendig. Es ist daher wichtig eine Diskretisierung zu finden, die mit einer geringen Zahl von Stützpunkten auskommt. Eine äquidistante Diskretisierung wird dieser Forderung nicht gerecht. Es wurde daher die oben beschriebene adaptive Diskretisierung verwendet, die in Bereichen großer Steigung und Krümmung der Verteilungen \bar{u} und \bar{v} dichtere Stützpunkte setzt.

2.2.2.3 Einschränkungen

Der in den vorangegangenen Abschnitten beschriebene Algorithmus ist in der Lage, weite Bereiche des Parameterraums systematisch und selbständig zu untersuchen und die Stabilität von filamentären Lösungen zu bestimmen. Dennoch gibt es Einschränkungen. Ein Problem stellt der Grenzfall $\kappa_{\text{eff}} \rightarrow 0$ dar. In dieser Situation liegen nahezu symmetrische Reaktionsterme vor, so dass der Radius der Filamente in diesem Fall divergieren kann. Selbst mit adaptiven Gittern ist diese Situation numerisch schwer zu handhaben, weil sich die Konvergenz des Newton-Algorithmus stark verschlechtert. Im gleichen Parameterbereich werden auch die Eigenwerte betragsmäßig sehr klein. Die Genauigkeit bei

der Bestimmung der Bifurkationspunkte ist in diesen Bereichen deutlich schlechter als die Diskretisierung des Parameterraums. Man gelangt daher numerisch nicht beliebig nahe an den Fall $\kappa_{\text{eff}} = 0$ heran.

2.2.3 Ergebnisse der Stabilitätsanalyse

Es sollen nun die Ergebnisse der numerischen Stabilitätsanalyse diskutiert werden. Detaillierte Untersuchungen des gesamten Parameterraums mit Vergleichen zu numerischen Simulationen wurden für den zweidimensionalen Fall durchgeführt. Die Untersuchung des gesamten Parameterraums in diesem Fall benötigte insgesamt etwa eine Woche Rechenzeit auf einer 400 MHz Alpha-Workstation. Die Ergebnisse im dreidimensionalen Fall sind den zweidimensionalen Ergebnissen qualitativ ähnlich, wurden allerdings mit wesentlich geringerer Genauigkeit durchgeführt. Soweit nicht anders erwähnt wird im Folgenden immer ein Grundgebiet mit dem Radius $L = 20$ verwendet². Die Ergebnisse der Stabilitätsanalyse für $\kappa_2 = 0$ sind von der Größe des Grundgebiets unabhängig, da die Radien der Filamente wesentlich kleiner als der halbe Systemradius waren. Für $\kappa_2 \neq 0$ muss berücksichtigt werden, dass die Grundgebietsgröße den Einfluss des Integralterms ändert. Bei der Darstellung werden explizite Fehlerbalken nur in den Fällen eingezeichnet, in denen die Fehler größer als die Rasterung des Parameterraums waren. Dies war vorwiegend bei den Moden $n = 2, 3, \dots$ der Fall.

2.2.3.1 Stationäre Lösungen im zweidimensionalen Fall für $\sigma=0.08$

Als Ausgangspunkt für die Untersuchung zweidimensionaler Filamente bei $\sigma = 0.08$ wurde der folgende Bereich im Parameterraum gewählt:

Parameter	von	bis	Fehler (min)	Fehler (max)	Punkte
λ	0.4	18	± 0.0125	± 0.6	60
κ_{eff}	-0.09	-0.5	± 0.0015	± 0.0125	60

(2.20)

Aufgrund der logarithmischen Skalen steigt der Fehler bei betragsmäßig großen Parametern an. Es wurde $\kappa_{\text{eff}} < 0$ gewählt, so dass die Filamente eine positive Amplitude besitzen. Die entsprechenden Diagramme für Filamente mit negativer Amplitude für $\kappa_{\text{eff}} > 0$ ergeben sich nach Spiegelung an $\kappa_{\text{eff}} = 0$. Der linke, untere Ausschnitt der Karte wurde mit verbesserter Auflösung gerechnet, da in diesem Bereich die Strukturierung des Parameterraums feiner ist. Hier wurde das folgende Raster gewählt:

Parameter	von	bis	Fehler (min)	Fehler (max)	Punkte
λ	0.4	2.3	± 0.01	± 0.05	60
κ_{eff}	-0.08	-0.25	± 0.0012	± 0.004	60

(2.21)

Als Ergebnis aller im Folgenden beschriebenen Stabilitätsuntersuchungen erhält man eine

²Im Fall $d = 1$ hat der Radius die Bedeutung der halben Systemlänge.

diskrete Stabilitätskarte des Parameterraums mit den oben angegebenen Genauigkeiten. Zur besseren Darstellung wurden die Destabilisierungs- bzw. Existenzgrenzen vektorisiert. In der mittleren Abbildung der oberen Reihe von Abb. 2.4 ist die numerisch bestimmte Existenzgrenze für Filamente eingezeichnet. Um eine Vorstellung von der Form der berechneten Filamente zu vermitteln wurden fünf Verteilungen aus verschiedenen Parameterbereichen exemplarisch herausgegriffen und dargestellt. Anhand der Abbildung wird deutlich wie unterschiedlich die Form der Filamente in den verschiedenen Parameterbereichen sein kann. Sowohl die Amplitude als auch die Steilheit der Übergänge variiert in weiten Bereichen.

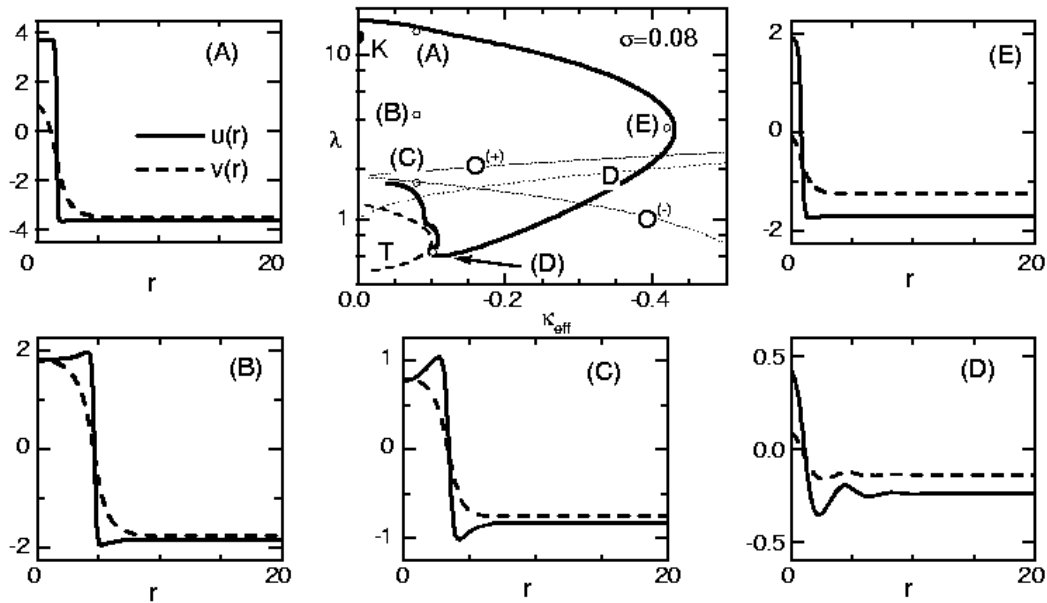


Abb. 2.4: In der Mitte oben ist der Existenzbereich stationärer Lösungen für $\sigma = 0.08$ eingezeichnet. (A)-(E) sind Beispiele für stationäre Verteilungen an den markierten Stellen des Parameterraums. Die gestrichelt gezeichneten Linien werden im Text erklärt.

Bei der Interpretation dieser Verteilungen ist es nützlich die Steigung der Kennlinie in den Fixpunkten zu untersuchen. Die folgenden drei Fälle sind interessant:

$f'(u^{(f)}) > -\sigma + 2\sqrt{\sigma}$	Die homogene Lösung $u^{(f)}$ ist gegenüber einer Turing-Bifurkation instabil.
$f'(u^{(f)}) > -\sigma - 2\sqrt{\sigma}$	Die stationären Lösungen des um den Fixpunkt linearisierten Systems besitzen oszillatorischen Charakter.
$f'(u^{(f)}) = 1$	Am Übergangspunkt zwischen den Bereichen mit einem und mit drei Fixpunkten der lokalen Kinetik tangieren sich die beiden Isoklinen.

Die jeweiligen Kurven im Parameterraum, auf denen eine vorgegebene, kritische Steigung f'_c angenommen wird können aus der Gleichung für die Fixpunkte bzw. deren Ableitung bestimmt werden:

$$|\kappa_{\text{eff}}| = 3^{-3/2}(2\lambda + f'_c - 3)\sqrt{(\lambda - f'_c)}. \quad (2.22)$$

Die drei Grenzlinien wurden in Abb. 2.4 eingezeichnet. Oberhalb der Linie D existieren drei Fixpunkte in der lokalen Kinetik. In diesem Bereich sind Beschreibungen der Filamente als gebundenes Frontpaar möglich. Innerhalb des mit T gekennzeichneten Bereichs ist der homogene Zustand instabil gegenüber einer Turing-Destabilisierung, so dass dort keine Filamente im Sinne von solitären Objekten existieren können. Unterhalb der mit $O^{(-)}$ bzw. $O^{(+)}$ gekennzeichneten Linie klingen die Filamente oszillatorisch zum Fixpunkt u^- bzw. u^+ ab. Das oszillatorische Abklingverhalten gegen den Fixpunkt u^- kann sehr gut bei der Verteilung (D) beobachtet werden. Das oszillatorische Verhalten am Fixpunkt u^+ kann nur ansatzweise bei der Verteilung (C) beobachtet werden und führt dort zu einem deutlichen Unterschwinger unter den Fixpunkt u^+ bei $r = 0$. Dieser Unterschwinger begrenzt den Existenzbereich der stationären Lösungen in diesem Bereich. Er prägt sich bei der Annäherung an die Existenzgrenze weiter aus und führt schließlich zu einem Rücksprung auf den Fixpunkt u^- . Die folgende Stabilitätsanalyse wird allerdings zeigen, dass die Filamente in diesem Parametergebiet bereits instabil gegenüber Störungen mit $n > 1$ sind.

In Abb. 2.5 ist der Bereich, in dem stationäre, lokalisierte Verteilungen existieren, nochmals eingezeichnet. Als Radius r_f eines Filaments wird im Folgenden die Größe r_f mit $u(r_f) = \frac{1}{2}(u(0) + u(L))$ bezeichnet. Der Radius der Filamente ist in der Abbildung durch Höhenlinien dargestellt. Für $\sigma = 0.08$ ergab sich ein minimaler Radius von 0.72 und die entsprechende Höhenlinie begrenzt gleichzeitig das Gebiet filamentärer Verteilungen. Besondere numerische Schwierigkeiten ergeben sich für den Fall $\kappa_{\text{eff}} \rightarrow 0$. Der Grund liegt in der in diesem Fall vorliegenden Symmetrie der Reaktionsterme und der damit verbundenen schwachen Dynamik großer Filamente. Eine Verringerung von κ_{eff} setzt die Anregbarkeit des Mediums herab und führt prinzipiell zu einer Verkleinerung der Filamente.

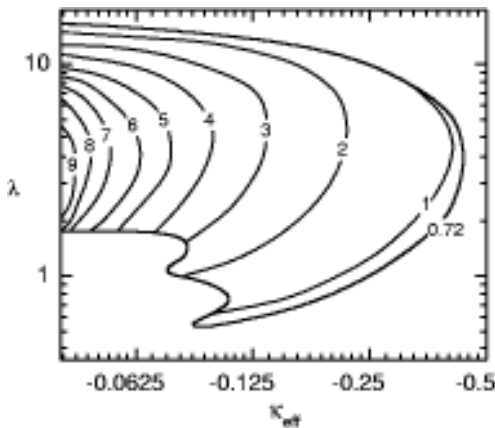


Abb. 2.5: Radien der stationären Verteilungen für $\sigma = 0.08$ als Funktion von κ_{eff} und λ : Aufgrund der nahezu symmetrischen Reaktionsterme kann es im Grenzfall $\kappa_{\text{eff}} \rightarrow 0$ zur Divergenz der Filamentradien kommen.

Es stellt sich daher die Frage, welche Mechanismen im Fall $\kappa_{\text{eff}} \rightarrow 0$ die Dynamik bestimmen und ob sich die Lösungen, soweit sie existieren, in diesem Fall noch genauer charakterisieren lassen. Da die Radien der Filamente in diesem Fall groß werden, bietet sich ein Zugang über die Interpretation der Filamente als gestörte Frontlösung eines eindimensionalen Systems an. Man verwendet daher als Ansatz für das Filament mit dem Radius p die ungestörte Ausschaltfront $(\bar{u}(x-p), \bar{v}(x-p))$ aus der Lösung des eindimensionalen Falls auf unbegrenztem Grundgebiet mit $\lambda > 1$ und $\kappa_{\text{eff}} = 0$. Drei Faktoren können im Rahmen einer Störungsrechnung berücksichtigt werden und führen zu einer Eigenbewegung $\dot{p}(t)$ der vorher stationären Front: Krümmung [68], Wechselwirkung mit der an $x = 0$ gespiegelten Front bei $-p$ und Eigenbewegung der Front für $|\kappa_{\text{eff}}| \ll 1$ [14]. Bei der Berechnung des Wechselwirkungseinflusses wurde die Annahme $f'(u^+) < -\sigma - 2\sqrt{\sigma}$ gemacht, die zu einem monotonen Abklingverhalten führt. Man erhält die folgenden Ausdrücke für die Geschwindigkeitsanteile in Folge der Krümmung \dot{p}_{kr} , der Wechselwirkung \dot{p}_{ww} und Eigendynamik \dot{p}_{ei} :

$$\dot{p}_{\text{kr}} = \frac{\langle \bar{v}_x^2 \rangle - \sigma \langle \bar{u}_x^2 \rangle}{\langle \bar{u}_x^2 \rangle - \tau \langle \bar{v}_x^2 \rangle} \frac{1}{p} = \frac{C_{\text{kr}}}{p}, \quad (2.23)$$

$$\dot{p}_{\text{ww}} = C_{\text{ww}} e^{-\lambda p} + C_{\text{ww}_2} e^{-\lambda_2 p} \quad \text{mit } C_{\text{ww}} > 0, C_{\text{ww}_2} < 0, \lambda_2 > \lambda, \quad (2.24)$$

$$\dot{p}_{\text{ei}} = \frac{2\sqrt{\lambda-1}}{\langle \bar{u}_x^2 \rangle - \tau \langle \bar{v}_x^2 \rangle} \kappa_{\text{eff}} = C_{\text{ei}} \kappa_{\text{eff}}. \quad (2.25)$$

Der Wechselwirkungseinfluss ist dabei stets repulsiv, d. h. $\dot{p}_{\text{ww}} > 0$, da der Term $\exp(-\lambda_2 p)$ schnell gegenüber $\exp(-\lambda p)$ abklingt und $C_{\text{ww}} > 0$ gilt. Stationäre Filamente ergeben sich in diesem Bild unter der Bedingung

$$\dot{p}_{\text{kr}} + \dot{p}_{\text{ww}} + \dot{p}_{\text{ei}} = 0. \quad (2.26)$$

Im Fall $\kappa_{\text{eff}} = 0$ gilt $\dot{p}_{\text{ei}} = 0$, so dass sich nur für $C_{\text{kr}} < 0$ stationäre Lösungen ergeben können. Die Bestimmung der Koeffizienten für den Fall $\sigma = 0.08$ führt auf $C_{\text{kr}} < 0$ für $\lambda_c > 12.7 \pm 0.05$. Der Punkt an dem C_{kr} das Vorzeichen wechselt ist in Abb. 2.4 mit K bezeichnet. Eine numerische Untersuchung zeigte, dass der Filamentradius bei der Annäherung an λ_c von $\lambda > \lambda_c$ und $\kappa_{\text{eff}} = 0$ aus divergiert. Solange κ_{eff} ungleich null gilt, existieren allerdings auch für $C_{\text{kr}} > 0$ stationäre Lösungen. Für $\kappa_{\text{eff}} \rightarrow 0$ ergeben sich in diesem Fall ebenfalls Filamente mit divergierendem Radius. Unter Vernachlässigung des exponentiell abfallenden Wechselwirkungsanteils ergibt sich für den Filamentradius r_f

$$r_f = -\frac{C_{\text{kr}}}{C_{\text{ei}} \kappa_{\text{eff}}}. \quad (2.27)$$

Eine numerische Auswertung für den Fall $\lambda = 11$ bestätigte die Gültigkeit dieser Beziehung für den Grenzfall $\kappa_{\text{eff}} \rightarrow 0$.

2.2.3.2 Stabilität der Lösungen im Fall $\sigma=0.08$

In Abb. 2.6 sind die Stabilitätsverhältnisse für den Fall $\sigma = 0.08$, $\tau = 0$ und $\kappa_2 = 0$ dargestellt. In diesem Fall sind nur reelle Eigenwerte und damit statische Destabilisie-

rungen zu erwarten. Der Bereich, in dem stationäre Lösungen gefunden werden konnten, ist mit der dicken Linie markiert. Außerhalb dieses Bereichs existieren keine filamentären Lösungen. Die verschiedenen Destabilisierungsgrenzen sind mit T, M2, M3 und M4 bezeichnet. Beim Überschreiten der Destabilisierungslinie T, die sehr eng an der Existenzgrenze stationärer Lösungen liegt, findet man einen Übergang zu Multi-Filamenten und zu Turing-Strukturen. Der Grund liegt in der Nachbarschaft dieser Parameter zur Turing-Destabilisierung, die in Abb. 2.6 als gestrichelte Linie eingezeichnet ist. Bei der Annäherung an T bilden sich in den Randbereichen des Filaments Überschwinger aus, die sich immer weiter ausprägen (vgl. Abb. 2.4 (D)). Kurz bevor der stationäre Zustand verschwindet wird das Filament instabil gegenüber Störungen in den Moden $n = 5, 6$ oder 7 . Eine Untersuchung der zugehörigen Eigenvektoren zeigte eine starke Lokalisierung im Bereich der Überschwinger. Man kann diese Bifurkation somit als Turing-artige Destabilisierung in den Überschwingern ansehen. Es bilden sich in der Folge neue Filamente mit einer entsprechenden Symmetrie. Weitere Zündprozesse in deren Ausläufern führen schließlich zu einem hexagonalen Muster.

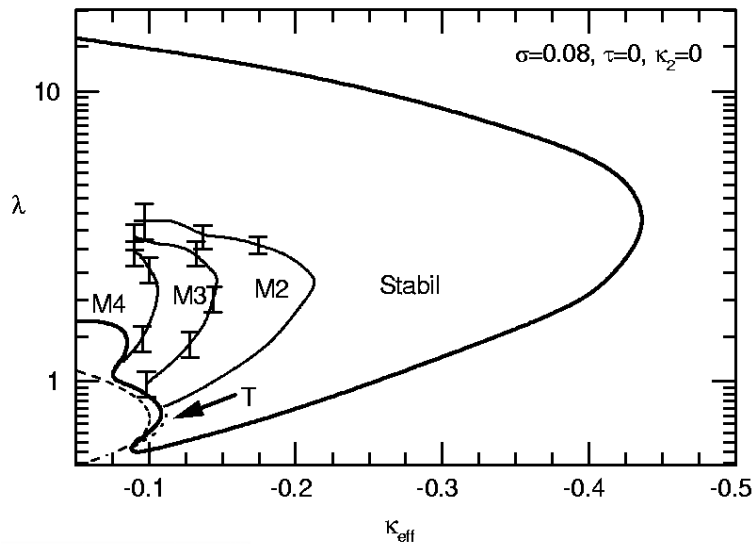


Abb. 2.6: Stabilitätsdiagramm für den zweidimensionalen Fall bei $\sigma = 0.08$, $\tau = 0$ und $\kappa_2 = 0$: Außerhalb der dicken Linie existieren keine stationären Lösungen mehr. Die Linien T, M2, M3 und M4 stellen Destabilisierungsgrenzen dar und werden im Text erläutert. Gestrichelt wurde die Grenze zur Turing-Bifurkation eingezeichnet.

Ein dieser Situation entsprechendes Szenario für $\sigma = 0.0546$ ist in Abb. 2.7 anhand der Aktivatorverteilungen dokumentiert. Die Parameter der numerischen Simulation sind in der Abbildung angegeben. Als Anfangsbedingung wurde ein stationäres, instabiles Filament verwendet. Bei $T = 0$ ist zunächst nur der Ring erhöhter Aktivatorkonzentration um das Zentralfilament zu erkennen. Als Erstes wächst eine Störung der Mode $n = 7$ an. Man erkennt bei $T = 30$ die Ausprägung von sieben Extrema auf dem Ring. In der Folge

zünden zunächst zwei Filamente rechts vom Zentralfilament und später noch vier weitere Filamente. Der Abstand dieser Filamente voneinander entspricht nun nicht mehr der Wellenlänge der instabilen Mode. Da das Zentralfilament und die neu gezündeten Nachbarobjekte gleichberechtigt sind, sollten sie sich in gleichseitigen Dreiecken anordnen. Dies führt zu einer Abstoßung und zur Unterdrückung der siebten Störung, weil kein Raum mehr zur Ausbildung eines weiteren Filaments vorhanden ist. Bei $T = 300$ hat sich eine stabile, stationäre Verteilung in der Form eines hexagonalen Gitters mit Fehlern gebildet. Um zu einem störungsfreien hexagonalen Muster zu gelangen, müssen die Parameter so gewählt werden, dass die Mode $n = 6$ destabilisiert wird, so dass sofort die richtige Geometrie entsteht.

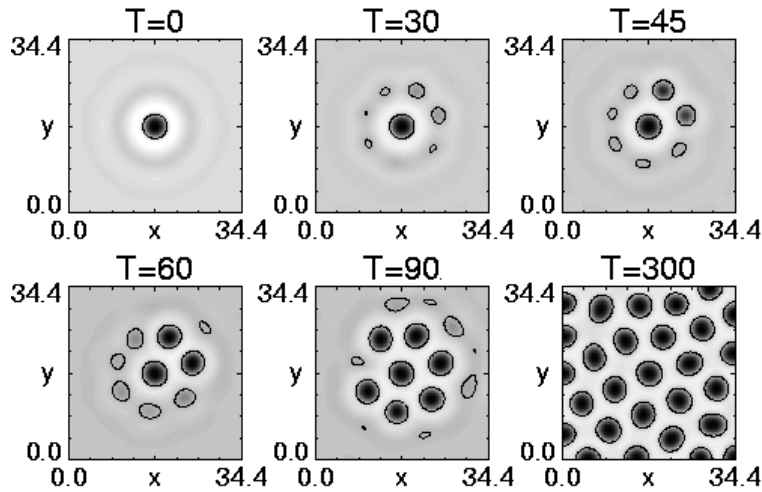


Abb. 2.7: Zündung von Satellitenfilamenten aus den Überschwingern eines Einzelfilaments nach Überschreiten der Destabilisierungsgrenze T aus Abb. 2.6: Dargestellt sind Graustufenbilder der Aktivatorverteilungen zu verschiedenen Zeiten. Die Skala reicht von -0.45 bis 0.6 . Um den Zündprozess zu unterstreichen wurde jeweils die Höhenlinie $u(r) = -0.25$ eingezeichnet. Parameter: $\sigma = 0.0546$, $\lambda = 0.65$, $\kappa_{\text{eff}} = -0.13$, $\kappa_2 = 0$, $\tau = 1$, $L = 34.4$ Diskretisierung: $\Delta x = 0.153$ und $\Delta t = 0.08$

Der Bereich stabiler Lösungen in Abb. 2.6 wird weiter eingeschränkt durch die Instabilitäten gegenüber Deformationen, also gegen Störungen in den Moden $n = 2, 3, \dots$ mit reellen Eigenwerten. Diese Stabilitätsgrenzen sind in der Abbildung mit M2, M3 und M4 gekennzeichnet. Die Fehler übersteigen den durch die Rasterung des Parameterraums vorhandenen Fehler bei weitem. Die Eigenwerte sind in diesem Bereich betragsmäßig sehr klein, so dass die numerische Eigenwertbestimmung stark fehlerbehaftet ist. Numerische Ergebnisse von Simulationen einer Instabilität der Mode $n = 2$ findet man in [71, Abschnitt 2.3.4] oder [55]. Für $\kappa_{\text{eff}} \rightarrow 0$ kann die primäre Destabilisierung zu den Moden mit höherer Winkelordnung übergehen, d. h. man erhält eine führende Instabilität bezüglich der Moden $n = 3, 4, \dots$. Eine solche Situation konnte mit sehr hoher Auflösung für einen Spezialfall nachgewiesen werden.

2.2.3.3 Dynamische Instabilitäten bei verlangsamer Inhibitorreaktion

Die im Abschnitt 2.2.3.2 beschriebenen Instabilitäten waren wegen $\tau = 0$ durchgehend mit reellen Eigenwerten assoziiert und traten nicht in der Mode $n = 0$ auf. Daher führt eine Variation der Zeitkonstanten τ oder von κ_2 bei konstantem κ_{eff} nicht zu einer Verschiebung der Destabilisierungsgrenzen. Bei der Verlangsamung der Inhibitorreaktion, d. h. bei Erhöhung des Parameters τ , treten auch dynamische Instabilitäten, also komplexe Eigenwerte auf. Abb. 2.8 stellt die Verschiebung der Stabilitätsgrenzen bei Erhöhung von τ dar. Es gilt wie im vorherigen Abschnitt $\sigma = 0.08$ und die Rasterung des Parameter-raums wurde analog zu Tab. (2.20) und (2.21) durchgeführt. Zur besseren Übersicht ist in den Stabilitätsdiagrammen jeweils die Grenze des Bereichs stationärer Lösungen und die M2-Grenze (ohne Fehlerbalken) eingezeichnet.

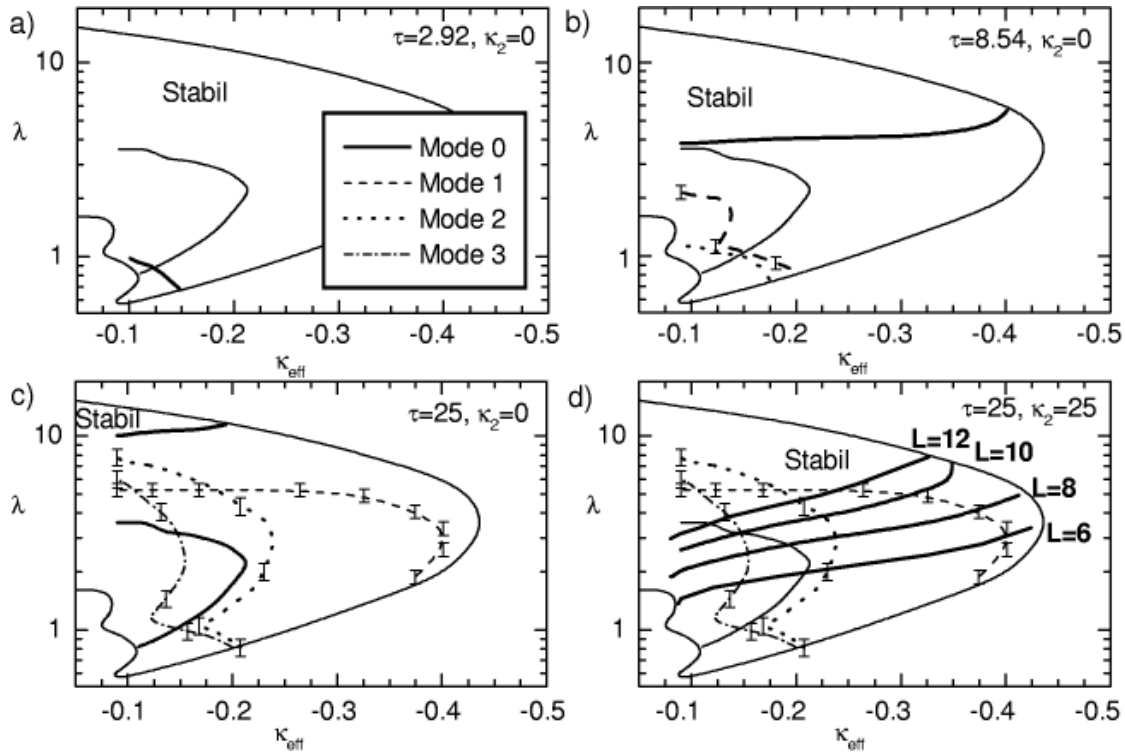


Abb. 2.8: Destabilisierungsgrenzen für $\sigma = 0.08$ bei Erhöhung von τ bzw. κ_2 : Für $\kappa_2 = 0$ findet die primäre Instabilität in der Mode $n = 0$ statt. a)-c) Bei Verlangsamung der Inhibitorreaktion τ weitet sich der instabile Bereich auf alle Lösungen aus. In Abb. d) ist der Einfluß der Grundgebietsgröße auf die Lage der $n = 0$ Destabilisierung im Fall globaler Rückkopplung bei $\tau = 25$ dargestellt. In diesem Fall existiert ein kleiner Bereich, in dem eine primäre Destabilisierung der Mode $n = 1$ stattfindet.

In Abb. 2.8 a) erkennt man bei $\tau = 2.92$ eine neue Destabilisierungsgrenze der Mode $n = 0$, die im Folgenden als Atmungs-Mode bezeichnet wird. Es handelt sich dabei um einen komplexen Eigenwert, der in der Linearisierung zu Oszillationen der Filamentflan-

ke und -höhe führt. Numerische Simulationen zu diesem Fall findet man in [71, Abschnitt 2.3.5]. Es zeigte sich, dass diese Situation in allen beobachteten Fällen zu einem Verlöschen der Struktur führt. Denkbar wäre allerdings auch die Bildung einer Domäne im Zustand u^+ . In den Diagrammen 2.8 b) und c) wurde τ auf 8.54 und auf 25 erhöht. Die Destabilisierungsgrenze verschiebt sich dabei immer weiter zu höheren λ . Neben der Mode $n = 0$ treten jetzt aber auch weitere komplexe Eigenwerte mit positivem Realteil auf, nämlich in den Moden $n = 1, 2$ und 3 . Die Destabilisierungsgrenzen liegen allerdings in Bereichen, in denen die Mode $n = 0$ bereits instabil geworden ist. Ein direkter Übergang zu bewegten Strukturen in der Folge einer $n = 1$ -Destabilisierung ist daher nicht möglich. Allerdings fand Schütz [75] im numerisch unzugänglichen Grenzfall sehr schmaler Filamente bei extremer Ortsskalentrennung eine primäre Mode $n = 1$ -Destabilisierung.

In Abb. 2.8 d) ist der Einfluss einer globalen Rückkopplung über $\kappa_2 = 25$ berücksichtigt. In der Linearisierung hat dieser Term lediglich auf die Eigenschaften der Moden mit $n = 0$ einen Einfluss, da die anderen Moden keinen Beitrag bei der Integration liefern. Im Vergleich zur Abb. 2.8 c) bleiben deren Bifurkationslinien dementsprechend unverändert. Man erkennt allerdings, dass die Atmungs-Mode durch die Rückkopplung zurückgedrängt wird. Bei einem Grundgebietsradius von $L = 10$ gelingt es die Destabilisierung der Mode $n = 0$ in einem Teilbereich des Parameterraums hinter die der Mode $n = 1$ zurückzudrängen. In diesem Parameterbereich erhält man somit eine primäre Bifurkation von stationären zu laufenden Strukturen. Ein dieser Situation entsprechendes Szenario für $\sigma = 0.071$ ist in Abbildung 2.9 dargestellt. In Abb. 2.9 a) ist anhand der $u(x, y) = 0$ -Isolinien die Verschiebung und Deformation des Filaments infolge der Destabilisierung zu erkennen. Es bildet sich ein stabiles bewegtes Filament mit einem, im Vergleich zur Ausgangsverteilung, größeren Integralterm, also niedrigerem κ_{eff} . Die Inhibitorverteilung des bewegten Spots, die als Graustufenbild hinterlegt ist, ist gegen die Bewegungsrichtung versetzt. In Abb. 2.9 b) wurde der Integralterm $\langle u \rangle$ als Funktion der Zeit dargestellt. Man erkennt die leichten Oszillationen vor dem Übergang zum bewegten Spot, die das Anwachsen der Instabilität begleiten. Es liegt nun nahe diese Objekte als Basisbauelemente anzusehen, mit denen komplexe Phänomene wie Zwei- und Viel-Teilchen-Stoßprozesse oder kollektive Moden aus vielen Einzelspots untersucht werden können. Tatsächlich stellt sich allerdings heraus, dass diese Spots für $\kappa_2 = 0$ im Allgemeinen instabil sind und aus diesem Grund jeweils nur ein Einzelnes dieser Teilchen mit Rückkopplung stabil existieren kann (vgl. Abschnitt 1.5.2). Dennoch ist es möglich Zwei-Teilchen-Wechselwirkungen zu untersuchen, indem man jeweils ein Teilchen mit seinem Spiegelbild an einem Neumann-Rand stoßen lässt. Da die Inhibitorverteilung der Aktivatorverteilung nachläuft, kommt es dabei zur Verschmelzung der beiden Stoßpartner. In Abhängigkeit der Parameter und des

Stoßwinkels beobachtet man im weiteren Verlauf die Auslöschung der Struktur oder die Entstehung eines oder zweier neuer Teilchen, die sich in unterschiedliche Richtungen entfernen [44, 38, 74]. Auch in anderen zweikomponentigen Reaktions-Diffusions-Systemen mit sehr komplexer Reaktionskinetik lässt sich der gleiche Effekt beobachten [60], was darauf schließen lässt, dass die zugrunde liegenden Mechanismen sehr robust sind.

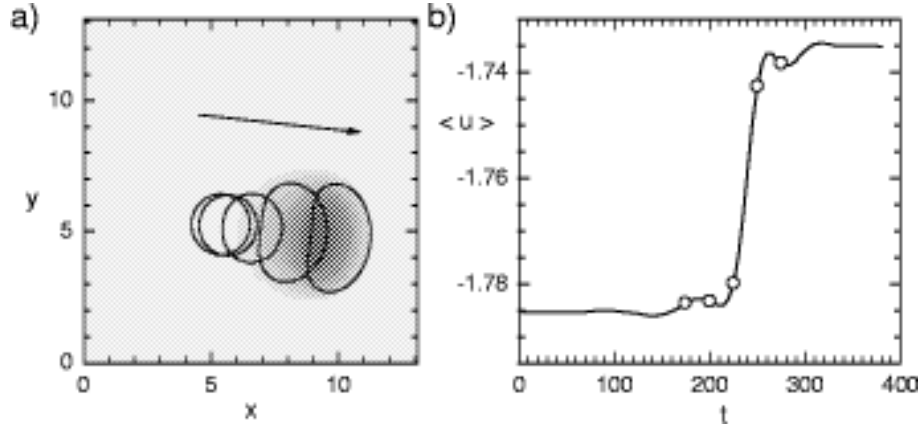


Abb. 2.9: Destabilisierung der Mode $n = 1$ eines Filaments: Abb. a) zeigt die $u(x, y) = 0$ -Isolinien der Aktivatorverteilung zu verschiedenen Zeiten. Das Graustufenbild zeigt die Inhibitorverteilung v , die zur letzten Aktivator-Isolinie gehört. In Abb. b) ist das Aktivatorintegral $\langle u \rangle$ als Funktion der Zeit dargestellt. Die markierten Zeitpunkte entsprechen den Niveaulinien in Abb. a). Die Parameter waren $\sigma = 0.071$, $\lambda = 4.3$, $\kappa_1 = -12.54$, $\kappa_2 = 7$ und $\tau = 30$ auf einem quadratischen 13.1×13.1 -Grundgebiet mit $\Delta x = 0.1$ und $\Delta t = 0.015$.

Die Beobachtung, dass eine inhibierende Rückkopplung über den Parameter κ_2 in einigen Bereichen des Parameterraums zu einer Stabilisierung der Atmungs-Mode führt, könnte dahingehend gedeutet werden, dass man diese Instabilität für $\kappa_2 \rightarrow \infty$ im gesamten Parameterraum unterdrücken kann. Tatsächlich ergibt sich allerdings bei einer weiteren Erhöhung von κ_2 , dass sich die Stabilitätsgrenze der Atmungs-Mode nur begrenzt verschieben lässt. Um den Einfluss der globalen Rückkopplung genauer zu untersuchen, wurden in Abb. 2.8 d) neben der Destabilisierungsgrenze für Filamente auf einem kreisförmigen Grundgebiet mit Radius $L = 10$ auch die Grenzen für die Radien $L = 6, 8$ und 12 eingezeichnet. Man erkennt, dass bei kleineren Grundgebieten die stabilisierende Wirkung der globalen Rückkopplung wesentlich stärker greift. In Abb. 2.10 a) ist die Form der Eigenmode (u_{EV}, v_{EV}) zu $n = 0$ für den Eigenwert $\lambda = 0.0368 \pm 0.126i$ für die Parameter $\sigma = 0.08$, $\lambda = 1.3$, $\kappa_{\text{eff}} = -0.3$, $\tau = 8$ und $\kappa_2 = 0$ dargestellt. Für $r \rightarrow \infty$ fällt die Mode gegen 0 ab, so dass sie als lokalisiert am Ort des Filaments betrachtet werden kann. Eine Änderung der Größe des Grundgebiets ändert in diesem Fall die Eigenwerte erst ab $L < 4$ signifikant, d. h. um mehr als ein Prozent.

Die Situation ändert sich falls $\kappa_2 > 0$ bzw. wie in diesem Beispiel $\kappa_2 = 1000$ gewählt wird. In Abb. 2.10 b) ist die Form des Realteils des Aktivatoranteils der Eigenmode für

unterschiedliche Grundgebietsradien L eingezeichnet. Deutlich ist zu erkennen, dass die Moden für $r \rightarrow \infty$ nicht mehr gegen null sondern gegen einen Wert $u_{EV}(L) < 0$ abfallen. Dieser Abfall ist notwendig, weil der Integralterm eine Erhaltung des Aktivatorintegrals erzwingt, d. h. $\langle u_{EV} \rangle = 0$. Entsprechend müssen die Ausläufer der Eigenmode bei einer weiteren Verkleinerung des Grundgebiets immer weiter absinken. In Tab. (2.28) ist der Betrag der Eigenmode bei $r = 10$ für die verschiedenen Parameter aufgeführt. Die Mode fällt bei kleineren Gebieten immer weniger gegen null ab und gleichzeitig verringert sich der Realteil des instabilen Eigenwerts, so dass das Filament bei $L = 5$ stabilisiert wird. Das Grundgebiet ist in diesem Fall zu klein, als dass Oszillationen in den Randbereichen den Integralterm konstant halten könnten.

κ_2	L	$ u_{EV}(L) $	λ
0	10	$3.8 \cdot 10^{-8}$	$0.0367 \pm 0.126i$
10^3	10	$5.4 \cdot 10^{-3}$	$0.0226 \pm 0.147i$
10^3	7.5	0.01	$0.0113 \pm 0.160i$
10^3	5	0.026	$-0.0252 \pm 0.195i$

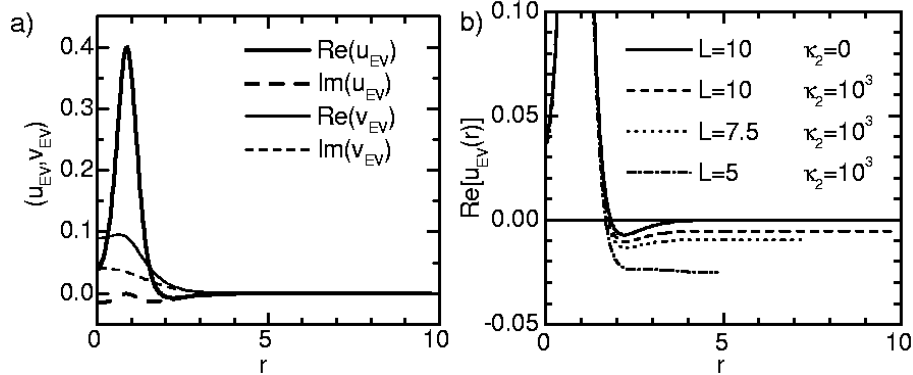
(2.28)


Abb. 2.10: a) Dargestellt ist die Form der destabilisierten Eigenmode (u_{EV}, v_{EV}) für die Parameter $\sigma = 0.08$, $\lambda = 1.3$, $\kappa_{\text{eff}} = -0.3$, $\kappa_2 = 0$ und $\tau = 8$. In Abb. b) ist die Änderung des Aktivator-Realteils der führenden Eigenmode für $\kappa_2 = 1000$ für unterschiedliche Grundgebietslängen skizziert. Man erkennt, dass die Eigenmode nicht mehr gegen null abfällt.

2.2.3.4 Stationäre Lösungen bei Variation von sigma

Die bisher dargestellten Ergebnisse beschränkten sich auf den Fall $\sigma = 0.08$. Im Folgenden soll der Einfluss der Änderung von σ besprochen werden. Die Bereiche mit stationären, filamentären Lösungen sind für diesen Fall in Abb. 2.11 eingezeichnet. Die Grundstruktur der Karte für $\sigma = 0.08$ aus Abb. 2.6 bleibt bei Variation von σ erhalten. Zum Vergleich sind zu den Existenzgrenzen die jeweiligen Turing-Bifurkationslinien eingezeichnet. Eine

Untersuchung der Stabilitätsverhältnisse zeigte auch, dass prinzipiell dieselben Typen von Instabilitäten auftreten wie sie in den vorherigen Abschnitten beschrieben wurden. Für kleinere σ vergrößert sich der Existenzbereich stationärer Lösungen. Für $\sigma < 0.04$ konnten keine Karten mehr erzeugt werden, da die Konvergenz des Newton-Verfahrens nicht mehr schnell genug ablief. Untersuchungen einzelner Punkte zeigten allerdings, dass sich die Vergrößerung des Existenzbereichs fortsetzt. Im Grenzbereich $\sigma \rightarrow 0$ gelangt man zum Fall der Orts-Skalentrennung, der für dieses System beispielsweise bei Schütz [75] oder Schebesch [70] behandelt wurde. Bei zunehmenden Werten von σ erkennt man in Abb. 2.11 eine deutliche Einschnürung des Existenzbereichs stationärer Lösungen. Die Grenze dieser Einschnürung ist bei $\sigma = 1$ erreicht. Für diesen Wert ist es nicht mehr möglich filamentäre Lösungen zu finden, da der Mechanismus der lateralen Inhibition hier zusammenbricht.

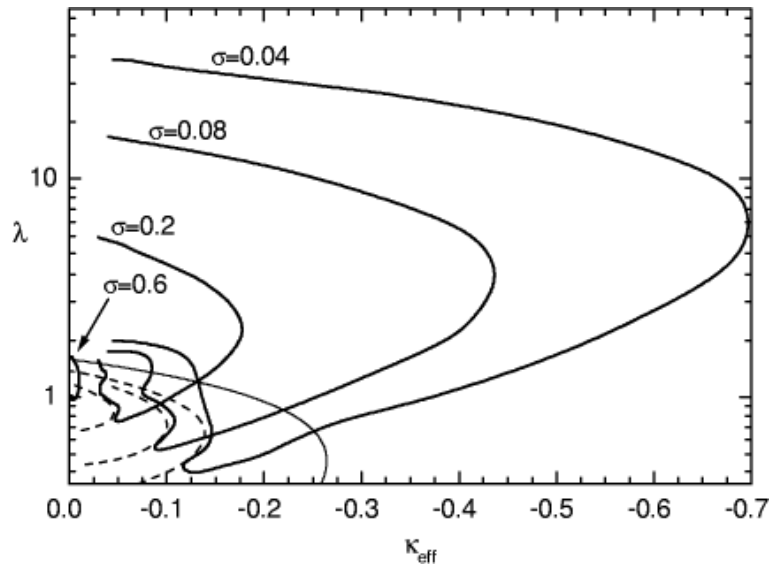


Abb. 2.11: Existenzgrenze für Filamente im zweidimensionalen Fall für $\sigma = 0.04, 0.08, 0.2$ und 0.6 : Die gestrichelten Linien kennzeichnen die Lage der Turing-Bifurkation für die jeweiligen Werte von σ . Mit wachsendem σ zieht sich der Existenzbereich zusammen.

Abb. 2.12 zeigt ein Filament bei der Annäherung an den Grenzpunkt $\sigma = 1$ mit den Parametern $\sigma = 0.9975$, $\kappa_{\text{eff}} = 0$ und $\lambda = 1.000009$. Die Verteilungen haben eine geringe Amplitude, der Radius der Struktur ist groß und Aktivator- und Inhibitorverteilungen sind fast identisch. Erst die Darstellung der Differenz $u(r) - v(r)$ in Abb. 2.12 zeigt, dass der prinzipielle Mechanismus zur Stabilisierung einer lokalisierten Verteilung erhalten geblieben ist: Aufgrund der stärkeren Inhibitor diffusion ist die Komponente v im Zentrum des Filaments gegenüber dem Aktivator etwas abgesenkt und in den Randbereichen leicht erhöht. Eine kleine Störung der Größe der Aktivatorverteilung wird so stabilisiert.

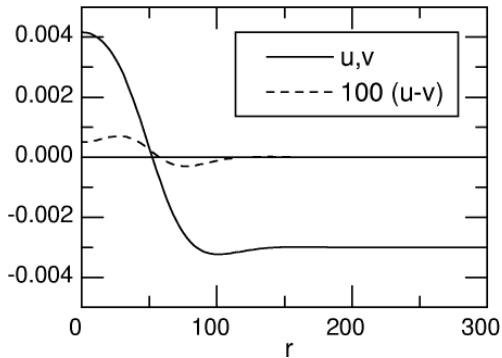


Abb. 2.12: Aktivatorverteilung und Differenz von Aktivator- und Inhibitorverteilung für ein Filament bei den Parametern $\sigma = 0.9975$, $\kappa_{\text{eff}} = 0$ und $\lambda = 1.000009$

2.2.3.5 Stationäre Lösungen im ein- und dreidimensionalen Fall

Nachdem die Stabilitätsverhältnisse im zweidimensionalen Fall untersucht worden sind, stellt sich die Frage nach den Unterschieden zum ein- oder dreidimensionalen Fall. Der beschriebene Algorithmus kann ohne Modifikationen eingesetzt werden. Die Existenzgrenzen für stationäre Lösungen für $\sigma = 0.08$ sind in Abb. 2.13 eingezeichnet. Ein gemeinsames Strukturmerkmal stellt in den drei Fällen die Begrenzung des Existenzbereichs durch die Turing-Bifurkation dar. Die Grenzlinie ist in der Abbildung eingezeichnet und von der Dimension des Problems unabhängig. Man erkennt, dass mit zunehmender Problemdimension die Größe des Bereichs mit filamentären Lösungen abnimmt. Im eindimensionalen Fall ist es für beliebige, feste κ_{eff} immer möglich ein λ zu finden, so dass eine stationäre Lösung existiert. In Abb. 2.13 wurde die Grenzkurve bis $\kappa_{\text{eff}} = -0.5$ dargestellt, der untersuchte Parameterraum erstreckte sich bis zu $\kappa_{\text{eff}} = -100$.

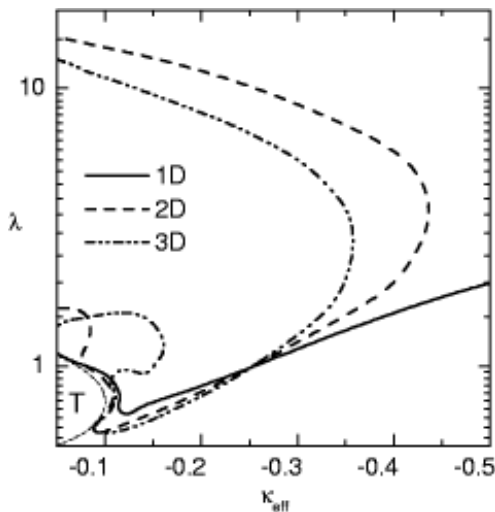


Abb. 2.13: Existenzbereich stationärer Lösungen für $\sigma = 0.08$ im ein-, zwei- und dreidimensionalen Fall

Im dreidimensionalen Fall wird der Existenzbereich gegenüber dem zweidimensionalen noch weiter eingeschränkt. Betrachtet man die Filamente wiederum in Analogie zu den Betrachtungen in Abschnitt 2.2.3.1 für $\kappa_{\text{eff}} \rightarrow 0$ als gebundenes Frontpaar, so findet

sich eine Erklärung für dieses Verhalten im Krümmungsterm p_{kr} , der im Vergleich zum zweidimensionalen Fall doppelt so groß ist. Eine Untersuchung der Stabilitätsverhältnisse im dreidimensionalen Fall zeigt ebenfalls große Ähnlichkeit zum zweidimensionalen Fall. Auch unter Variation von σ ergeben sich keine qualitativ neuen Ergebnisse im Vergleich zu Abb. 2.11. Für $\sigma \rightarrow 1$ zieht sich der Existenzbereich auf einen Punkt zusammen, für $\sigma \rightarrow 0$ dehnt er sich aus.

2.2.3.6 Diskussion der Ergebnisse

Mit dem vorgestellten Algorithmus war es möglich auf systematische Art und Weise einen großen Teil des Parameterraums auf die Existenz und Stabilität filamentärer Lösungen hin zu untersuchen. Die Vorgehensweise war dabei von der Problemdimension unabhängig. Aufgrund der Flexibilität des Programms, insbesondere durch den Einsatz einer adaptiven Stützpunktverteilung, konnten selbst problematische Grenzfälle behandelt werden, so dass zumindest für den zweidimensionalen Fall die Struktur des Parameterraums vollständig geklärt ist. Ein Problem bleibt allerdings, dass es ein zweites Gebiet im Parameterraum geben könnte, das mit dem untersuchten Bereich nicht zusammenhängt, und das daher von der Analyse systematisch ausgeschlossen wurde. Dieser Fall ist zwar unwahrscheinlich, kann aber durch einen Algorithmus der beschriebenen Art nicht prinzipiell ausgeschlossen werden.

2.3 Ein dreikomponentiges Reaktions-Diffusions-System

In dem zweikomponentigen System, das im Abschnitt 2.2 untersucht wurde, wurden Filamente bei einer Erhöhung der Inhibitor-Zeitkonstanten τ im Fall $\kappa_2 = 0$ gegenüber einer atmenden Mode destabilisiert. Diese führt meist zu einer Zerstörung der Struktur. Lediglich in einem schmalen Parameterbereich auf begrenztem Grundgebiet und unter dem Einfluss einer globalen Rückkopplung war es möglich, eine primäre Bifurkation zu laufenden Strukturen zu beobachten (vgl. Abschnitt 2.2.3.3). Zielt man auf die Untersuchung von Mehrteilcheneffekten und Teilchenstößen ab, so ist diese Situation allerdings unbefriedigend. Eine Vergrößerung des Grundgebiets, um etwa eine bestimmte Stoßkonfiguration vorzubereiten, ist so unter Umständen nicht möglich, weil sonst eine Destabilisierung der Einzelobjekte auftritt. Zur Untersuchung des Übergangs zu bewegten Strukturen ist das Gleichungssystem (2.15)-(2.16) daher nicht geeignet. In diesem Abschnitt soll das zweikomponentige Modellsystem um eine dritte Komponente erweitert werden. Das Gleichungssystem hat dann die Gestalt

$$\begin{aligned}\dot{u} &= D_u \Delta u + f(u) - \kappa_3 v - \kappa_4 w + \kappa_1, \\ \tau \dot{v} &= D_v \Delta v + u - v, \\ \theta \dot{w} &= D_w \Delta w + u - w.\end{aligned}\tag{2.29}$$

Die mathematische Verwandtschaft dieses Systems mit den Gleichungen (2.15)-(2.16) wird deutlich, wenn man den Grenzfall $\theta = 0$ und $D_w \rightarrow \infty$ betrachtet. Für $\theta = 0$ reduziert sich die dritte Gleichung zunächst auf

$$D_w \Delta w - w + u = 0.\tag{2.30}$$

$D_w \rightarrow \infty$ führt dann weiter auf $\Delta w = 0$. Unter Neumann-Randbedingungen ergibt sich daher $w \neq w(r)$. Die Integration über G von Gleichung (2.30) führt auf

$$w = \frac{1}{|G|} \int_G v \, dg.\tag{2.31}$$

In diesem Grenzfall ist die dritte Komponente einem Integralterm äquivalent und das System (2.29) entspricht formal dem zweikomponentigen System. Wird der Grenzübergang $D_w \rightarrow \infty$ nicht durchgeführt, so kann die Lösung der zweiten Inhibitorgleichung im Fall eines unendlich ausgedehnten Grundgebiets im \mathbf{R}^d mittels der greenschen Funktion $g_d(r)$ des Problems (vgl. Anhang A.1) berechnet werden. Es ergibt sich

$$w(r) = \int_{\mathbf{R}^d} g_d(r - r') v(r') \, dr'.\tag{2.32}$$

Durch geeignete Wahl der Diffusionskonstanten D_w kann dieser Ausdruck so angepasst werden, dass er den Integralterm auf begrenztem Grundgebiet ersetzt und so eine primäre Destabilisierung zu laufenden Strukturen ermöglicht.

2.3.1 Stabilitätsanalyse des dreikomponentigen Modells

Eine umfassende Stabilitätsanalyse des dreikomponentigen Modells, wie sie für das 2K-System durchgeführt wurde, ist aufgrund der hohen Zahl von Parametern nicht mehr möglich. Da das zweikomponentige System in verschiedenen Grenzfällen aus dem 3K-Modell hervorgeht, ist es allerdings möglich einige Ergebnisse über Form und Stabilität stationärer Lösungen als Grundlage für neue Untersuchungen zu übernehmen. Im Folgenden stehen die dynamischen Instabilitäten im Mittelpunkt, die bei einer Variation der beiden Zeitkonstanten τ und θ auftreten können.

Der erste Fall der hier betrachtet werden soll ist durch $\tau = \theta$, $\kappa_3 = \kappa_4 = 1/2$ und $D_v = D_w$ charakterisiert. Die beiden Inhibitoren v und w sind formal identisch und eine der Gleichungen kann eliminiert werden, so dass man direkt die Gleichung (2.15)-(2.16) im Fall $\kappa_2 = 0$ erhält. Die stationäre Lösung in diesem Spezialfall ist dann $(\bar{u}, \bar{v}, \bar{v})$, wenn (\bar{u}, \bar{v}) die Lösung des 2K-Systems war. Da eine Änderung der Zeitkonstanten τ und θ die Form der Lösung nicht beeinflusst, kann man relativ einfach ein Bifurkations-Diagramm in der (τ, θ) -Ebene berechnen. Das Ergebnis für den Parametersatz

$$D_u = 0.08, D_v = D_w = 1, \lambda = 2, \kappa_1 = -0.33, \kappa_3 = \kappa_4 = \frac{1}{2} \quad (2.33)$$

auf einem zweidimensionalen Grundgebiet ist in Abb. 2.14 a) dargestellt. Das betrachtete Filament ist bei diesen Parametern für $\tau = 0$ und $\theta = 0$ stabil. Aufgrund der identischen Diffusionskonstanten besteht eine Symmetrie bezüglich der Winkelhalbierenden. Eine Destabilisierung findet man nur in den Moden mit $n = 0$ (atmen) und $n = 1$ (laufen). Die Reihenfolge der Bifurkation, wie sie auch aus der Analyse des 2K-Systems für $\kappa_2 = 0$ bekannt ist, kann durch die Zeitkonstanten nicht geändert werden.

Eine andere Möglichkeit bekannte stationäre Lösungen des 2K-Systems zu übernehmen, besteht darin die Diffusion und Zeitkonstante eines Inhibitors auf null zu setzen. Im Fall $D_v = 0$, $\tau = 0$ gilt $u = v$ und für $\kappa_4 = 1$ geht das 3K-System über in

$$\begin{aligned} \dot{u} &= D_u \Delta u + (\lambda - \kappa_3)u - u^3 - w + \kappa_1, \\ \theta \dot{w} &= D_w \Delta w + u - w. \end{aligned} \quad (2.34)$$

Eine Lösung des 2K-Systems ist daher nach einer entsprechenden Anpassung von λ auch eine Lösung der neuen Gleichungen. Für den Parametersatz

$$D_u = 0.08, D_v = 0, D_w = 1, \lambda = 3, \kappa_1 = -0.33, \kappa_3 = 1, \kappa_4 = 1 \quad (2.35)$$

ergibt sich daher die stationäre Lösung $(\bar{u}, \bar{u}, \bar{w})$, wobei die Verteilungen \bar{u} und \bar{w} identisch mit denen aus der Lösung mit den Parametern (2.33) sind. In Abb. 2.14 b) sind die Destabilisierungsgrenzen für unterschiedliche n im Raum der Zeitkonstanten (τ, θ) eingezeichnet. Für kleine θ ist die Reihenfolge der Bifurkationen vertauscht und die Destabilisierung der Mode $n = 1$ erfolgt vor der der Mode $n = 0$. Dies entspricht somit einer primären Bifurkation zu laufenden Strukturen. Im Gegensatz zum Fall $D_v = D_w$ ist es hier für große τ auch möglich, sekundäre Destabilisierungen der Moden $n = 2, 3$ und 4 zu erzielen.

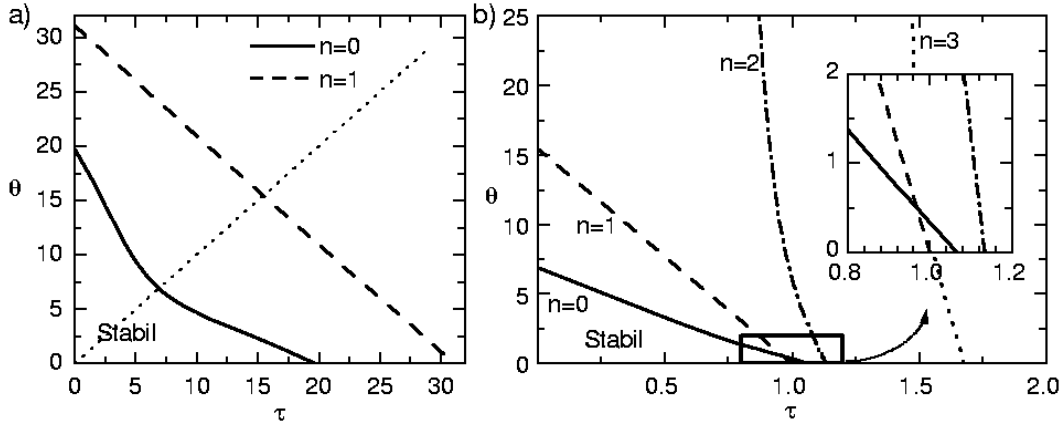


Abb. 2.14: Stabilitätsdiagramme im (τ, θ) -Raum: Dargestellt sind die Destabilisierungsgrenzen der Moden $n = 0$ und $n = 1$. a) Die Inhibitoren haben die gleichen Diffusions-Konstanten, d. h. $D_v = D_w$. Die Parameter entsprechen (2.33). b) Stabilitätsdiagramm im (τ, θ) -Raum für den Fall, dass ein Inhibitor nicht diffundiert: In der Ausschnittsvergrößerung ist deutlich die Verschiebung der Bifurkationsreihenfolge der Moden $n = 1$ und $n = 0$ zu erkennen. Die Parameter sind in (2.35) angegeben.

Auch wenn die analytische Behandlung bei $D_v = 0$ wesentlich einfacher ist, ist weder $D_v < D_u$ noch $D_v < D_w$ zwingend erforderlich um eine Vertauschung der führenden Bifurkationen zu beobachten. Als Beispiel wurde ein Fall mit $D_v \gg D_u, D_w$ untersucht, bei dem es ebenfalls möglich ist, eine primäre Destabilisierung in der Mode $n = 1$ zu beobachten. Als Parameter für diesen Fall wurde

$$D_u = 0.08, D_v = 10, D_w = 1, \lambda = 2.025, \kappa_1 = -1.18, \kappa_3 = \kappa_4 = 1 \quad (2.36)$$

gewählt. Die stationäre Verteilung musste in diesem Fall als Lösung der dreikomponentigen Gleichungen berechnet werden, da eine direkte Abbildung auf den 2K-Fall nicht möglich ist. Das Bifurkationsdiagramm ist in Abb. 2.15 gezeigt. Eine Destabilisierung der Moden $n > 2$ wurde nicht gefunden. Aber auch in diesem Fall gelingt für $\theta = 0$ bei sehr großen τ eine primäre Destabilisierung der $n = 1$ -Mode, während bei Erhöhung von θ im Fall $\tau = 0$ die aus dem 2K-System bekannte Reihenfolge besteht. Die verschiedenen Beispiele zeigen, dass eine primäre Destabilisierung der Mode $n = 1$ vor der Atmungs-Mode $n = 0$ bei unterschiedlichen Diffusionslängen der beiden Inhibitoren v und w gefunden werden kann. Als zwingende Voraussetzung für den Mechanismus ist demnach lediglich die Existenz eines langsamen und eines schnellen Inhibitors anzusehen. Der langsame Inhibitor ist notwendig, um über die verzögerte Inhibition die Destabilisierung zum Laufen zu erzielen, der schnelle Inhibitor unterdrückt durch laterale Inhibition die Atmungs-Instabilität, da er auf Größenänderungen der Aktivatorverteilung reagieren kann. Im Hinblick auf das bereits in Abschnitt 1.4.2 angesprochene Gleichspannungs-Gasentladungsexperiment [2] weist bei-

spielsweise die lokale Temperaturverteilung geeignete Voraussetzungen (große Diffusion und langsame Dynamik, vgl. Abb. 2.15) für eine dritte Komponente auf. Der genaue Einfluss der Temperatur auf den Entladungsprozess konnte allerdings bisher nicht bestimmt werden.

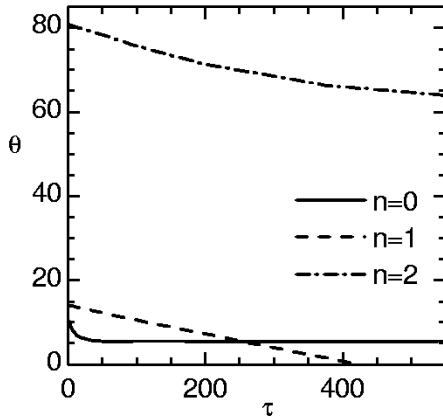


Abb. 2.15: Stabilitätsdiagramm im (τ, θ) -Raum für den Fall $D_v \gg D_u, D_w$: Die Destabilisierung findet erst bei sehr großen τ statt. Die Parameter sind in (2.36) angegeben.

2.3.2 Stabilitätsanalyse im Spezialfall $D_v=0$ und $\theta=0$

Die numerischen Ergebnisse des vorangegangenen Abschnitts haben gezeigt, dass es durch eine Erweiterung des zweikomponentigen Gleichungssystems (2.15)-(2.16) um einen langsamen Inhibitor möglich ist, eine primäre Bifurkation in der Mode $n = 1$ zu erhalten. Or-Guil [66] zeigte, dass im Spezialfall $D_v = 0$ und $\theta = 0$ auch eine analytische Berechnung der Eigenwerte möglich ist, sofern die Eigenwerte aus der Stabilitätsanalyse des zweikomponentigen Systems als bekannt vorausgesetzt werden. Um die Schreibweise zu vereinfachen wird das dreikomponentige Gleichungssystem (2.29) umformuliert. Die Inhibitorgleichung für w im Fall $\theta = 0$ (2.30) kann formal mit Hilfe der Greenschen Funktion aufgelöst werden. Für w ergibt sich

$$w(r) = \int_G g(r - r') u(r') dr'. \quad (2.37)$$

Die Greenschen Funktionen für diese Gleichung für die verschiedenen Raumdimensionen sind in Anhang A.1 tabelliert. Das dreikomponentige System (2.29) kann durch diese Umformung verkürzt geschrieben werden als

$$\dot{u} = Lu - \kappa_3 v + (f(u) - f'(\bar{u})u + \kappa_1), \quad (2.38)$$

$$\tau \dot{v} = u - v, \quad (2.39)$$

wobei der lineare Operator L durch die Gleichung

$$Lu := D_u \Delta u + f'(\bar{u})u - \kappa_4 \int_G g(r - r') u(r') dr' \quad (2.40)$$

definiert wird. Um den Einfluss der Komponente v auf die Eigenschaften einer Lösung zu untersuchen betrachtet man zunächst stabile Lösungen des Systems (2.38)-(2.39) im Fall

$\tau = 0$. Es gilt $\bar{u} = \bar{v}$ und aus der Linearisierung ergibt sich die Eigenwertgleichung

$$\tilde{\lambda}_i \tilde{\mu}_i = (L - \kappa_3) \tilde{\mu}_i. \quad (2.41)$$

Da $L - \kappa_3$ selbstadjungiert ist sind sämtliche Eigenwerte dieser Gleichung reell. Betrachtet man stabile Lösungen so existiert ein Eigenwert $\tilde{\lambda}_1 = 0$, der dem Goldstone-Mode $\tilde{\mu}_1 = \bar{u}_x$, also einer infinitesimalen Translation der Lösung, zuzuordnen ist. Alle anderen Eigenwerte sind wegen der Forderung nach Stabilität echt kleiner null. Für $\tau \neq 0$ lautet die Eigenwertgleichung

$$\lambda_i \mu_i = L \mu_i - \kappa_3 \eta_i, \quad (2.42)$$

$$\lambda_i \eta_i = \frac{1}{\tau} \mu_i - \frac{1}{\tau} \eta_i. \quad (2.43)$$

Mit der Annahme $\mu_i = \tilde{\mu}_i$ ergeben sich aus diesen Gleichungen sowohl die neuen Eigenvektoren (μ_i, η_i) als auch die neuen Eigenwerte λ_i zu

$$\eta_{i_1, i_2} = \frac{\tilde{\mu}_i}{1 + \tau \lambda_{i_1, i_2}}, \quad (2.44)$$

$$\lambda_{i_1, i_2} = \frac{1}{2\tau} \left(\kappa_3 \tau + \tilde{\lambda}_i \tau - 1 \pm \sqrt{4\tilde{\lambda}_i \tau + (1 - \kappa_3 \tau - \tilde{\lambda}_i \tau)^2} \right). \quad (2.45)$$

Für jeden Eigenwert des Ausgangssystems ergibt sich somit ein Paar von Eigenwerten. Insbesondere führt der Eigenwert $\tilde{\lambda}_1 = 0$ auf die neuen Werte $\lambda_{i_2} = 0$ mit dem Goldstone-Mode $g = (\bar{u}_x, \bar{u}_x)$ als Eigenvektor und $\lambda_{i_1} = \kappa_3 - \frac{1}{\tau}$. Für den Fall $\kappa_3 \tau = 1$ existiert ein doppelter Eigenwert null und als generalisierten Eigenvektor p mit $Lp = g$ ergibt sich $p = (0, -\bar{u}_x/\kappa_3)$. Dieser Eigenvektor kann auch als eine Verschiebung der Komponenten u und v gegeneinander interpretiert werden. Der von diesen beiden Vektoren g und p aufgespannte zentrale Eigenraum der Linearisierung hat die Gestalt

$$\begin{pmatrix} \dot{g} \\ \dot{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g \\ p \end{pmatrix}. \quad (2.46)$$

Im Rahmen der linearisierten Dynamik kann diese Gleichung so interpretiert werden: Die Mode p verhält sich neutral, d. h. sie wird weder angeregt noch abgebaut. Ihre Anwesenheit führt allerdings zur Anregung der Mode g und damit zu einer stetigen Verschiebung der gesamten Struktur. Die Mode p kann als „Gaspedal“ der Dynamik interpretiert werden. Ihr Anteil in der Störung bestimmt die Geschwindigkeit der Struktur. Der Bifurkationspunkt $\tau_{\text{crit}} = 1/\kappa_3$ ist zwangsläufig identisch mit dem Übergangspunkt von der Turing-Bifurkation zu einer Wellen-Bifurkation, der in Abschnitt 1.4.2 für das gleiche System berechnet wurde. Betrachtet man eine kleinamplitudige stationäre Streifenstruktur knapp oberhalb der Turing-Schwelle, so können die Ausführungen dieses Abschnitt, mit Ausnahme der Forderung nach Stabilität der Struktur, in gleicher Weise angewandt werden, so dass sich für $\tau_{\text{crit}} > 1/\kappa_3$ ein Übergang zu laufenden Streifen, also die Wellen-Bifurkation ergibt.

Ein Vorteil der analytischen Behandlung in diesem Grenzfall besteht darin, dass die Realteile der Eigenwerte λ_i , die sich aus einem Eigenwert $\tilde{\lambda}_i < 0$ ergeben, erst bei $\tau_{\text{crit},i} = \frac{1}{\kappa_3 + \lambda_i} > \frac{1}{\kappa_3}$ das Vorzeichen wechseln. Die Destabilisierung zu laufenden Strukturen findet daher bei stabilen Strukturen stets vor allen anderen Bifurkationen statt. Weiter ergibt sich, dass der Ausdruck unter der Wurzel von Gleichung (2.45) am Bifurkationspunkt negativ ist. Es handelt sich daher um Hopf-Bifurkationen.

2.4 Ein zweikomponentiges Modell einer Vierschichtdiode

Der vorgestellte Ansatz zur Stabilitätsanalyse lokalisierter Strukturen kann auch auf Systeme mit wesentlich komplexeren Reaktionstermen angewandt werden. Ein Beispiel stellt das folgende Modell zur Beschreibung von Stromdichtestrukturen in einem Halbleiter dar [59, 58, 57]. Bei dem betrachteten System handelt es sich um den in Abb. 2.16 schematisch dargestellten vierschichtigen $p^+n^+pn^-$ -Siliziumhalbleiter, der transversal zur Stromflussrichtung y zweidimensional ausgedehnt ist und in dem Stromdichtestrukturen auftreten können, die nicht mehr zwingend als homogen in den Koordinaten x und z angenommen werden können. Der Halbleiter hatte in dem dargestellten Beispiel die Abmessungen $5 \times 5 \text{ mm}^2$ parallel und ca. 0.6 mm senkrecht zu den Elektroden. Ein Gleichungssystem, das dieses Experiment beschreibt, wurde bereits hergeleitet [59] und mit Erfolg auf ein quasi-eindimensionales Experiment angewendet [57]. Die experimentellen Ergebnisse für zweidimensionale Systeme lassen bisher noch keine genaue Analyse der Dynamik zu. Es wurden allerdings umfangreiche numerische Simulationen durchgeführt, die die experimentell beobachteten Probenstromoszillationen erklären [40, 60].

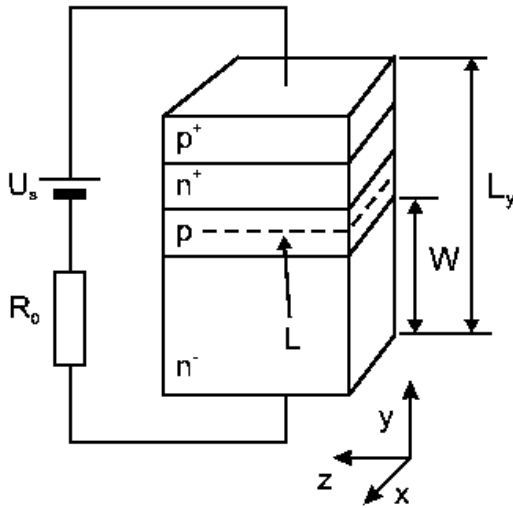


Abb. 2.16: Schematische Darstellung einer Vierschicht-Diode: Das Bauelement hat eine transversale Ausdehnung von $5 \text{ mm} \times 5 \text{ mm}$. Die Höhe L_y beträgt zwischen 400 und 1000 μm .

Das Bauelement wird durch das zweikomponentige Reaktions-Diffusions-System

$$\begin{aligned}\dot{U}_e &= D_e \Delta U_e - q(U_e, p), \\ \dot{p} &= D_p \Delta p + Q(U_e, p),\end{aligned}\tag{2.47}$$

modelliert. Die Größe $U_e = U_e(x, z, t)$ beschreibt in dieser Gleichung den Spannungsabfall über der p^+n^+ -Grenzschicht, während $p = p(x, z, t)$ der mittleren Löcherdichte in der n^- -Schicht entspricht. Die Reaktionsterme ergeben sich aus den Transportprozessen im Halbleiter zu

$$q(U_e, p) = \frac{1}{C_e} [(j_e(U_e) - j_c(U_e, p))],\tag{2.48}$$

$$Q(U_e, p) = \frac{j_c(U_e, p)}{eW} - \frac{p - p_{n0}}{\tau}. \quad (2.49)$$

In diesen Gleichungen wurden die folgenden Abkürzungen verwendet:

$$j_e = j_s(e^{U_e/U_T} - 1) + j_r(e^{\frac{1}{2}U_e/U_T} - 1), \quad (2.50)$$

$$j_c = Mj_{sc} + \beta Mj_s(e^{U_e/U_T} - 1) + \frac{U_i - U_e}{\rho_L}, \quad (2.51)$$

$$M = \left[1 - \left(\frac{U_i - U_e}{U_b} \right)^m \right]^{-1}, \quad (2.52)$$

$$U_i = \underbrace{U_s - R_0 \int_G j_c dg}_{=: U_0} - U_T \ln(p/p_{n0}). \quad (2.53)$$

Die Größe U_0 ist mit der Definition in (2.53) die effektiv am Halbleiter anliegende Spannung. Eine detaillierte Herleitung dieses Gleichungssystems findet man z. B. in [59]. Die meisten Konstanten in den vorangegangenen Gleichungen sind experimentelle Parameter, die durch das Material und die Präparation vorgegeben werden. In denen in diesem Abschnitt behandelten Fällen wurden die folgenden Standardparameter verwendet:

$D_e = 0.003 \Omega^{-1}$	$D_p = 10 \text{ cm}^2/\text{s}$	(2.54)
$j_r = 3 \times 10^{-7} \text{ A/cm}^2$	$j_s = 1.5 \times 10^{-7} \text{ A/cm}^2$	
$j_{sc} = 2 \times 10^{-8} \text{ A/cm}^2$	$m = 3$	
$p_{n0} = 10^{-7} \text{ cm}^{-3}$	$U_b = 42 \text{ V}$	
$U_T = 0.02584 \text{ V}$	$C_e = 10^{-5} \text{ F/cm}^2$	
$W = 0.06 \text{ cm}$	$\tau = 10^{-5} \text{ sec}$	
$\beta = 0.6$	$\rho_L = 4 \times 10^4 \Omega \text{ cm}^2$	

Der globale Vorwiderstand R_0 , das Grundgebiet G und die Versorgungsspannung U_s werden variiert. Der zentrale Bifurkationsparameter ist im Folgenden die Versorgungsspannung U_s .

Vom theoretischen Standpunkt aus betrachtet entspricht dieses System dem Grundtyp eines Reaktions-Diffusions-Modells. Numerisch bietet es allerdings eine Reihe von Schwierigkeiten. Zunächst enthalten die Reaktionsterme einige exponentielle Terme, die dazu führen, dass die beteiligten Variablen über Größenordnungen variieren können. Die Löcherdichte p , die in diesem Modell die Rolle des Inhibitors einnimmt, kann beispielsweise zwischen 10^{-12} und $10^{-19} \frac{1}{\text{cm}^3}$ schwanken und führt daher zu Konvergenzproblemen bei der numerischen Behandlung. Darüber hinaus sind die Terme (2.50)-(2.53) voneinander abhängig, d. h. es handelt sich um ein implizit gestelltes Problem zur Berechnung der entsprechenden Größen. Die numerischen Untersuchungen des zweidimensionalen Systems waren daher entsprechend zeitaufwendig und mussten teilweise auf Parallelrechnern durchgeführt werden. Die Stabilitätsanalyse von rotationssymmetrischen stationären Strukturen kann hier mit sehr viel geringerem numerischen Aufwand einige der beobachteten Effekte erklären.

2.4.1 Behandlung des Stabilitätsproblems

Zur Berechnung stationärer Lösungen wird zunächst $R_0 = 0$ vorausgesetzt. Der Ausdruck für die Stromdichte j_c ist in diesem Fall nicht mehr implizit definiert und die Lösungen (\bar{U}_e, \bar{p}_e) lassen sich mit dem Newton-Verfahren für ein festes $U_s = U_0$ berechnen. Für eine gegebene Verteilung können dann analog zur Vorgehensweise in Abschnitt 2.2.1 für beliebige Widerstände R_0 die Stabilitätsuntersuchungen durchgeführt werden, da sich die stationären Lösungen und der Gesamtstrom nicht ändern, solange $U_0 = U_s - R_0 I$ (vgl. $\kappa_{\text{eff}} = \kappa_1 - \kappa_2 \langle \bar{u} \rangle$) nicht geändert wird. Die Jakobi-Matrix der Reaktionsterme (2.48)-(2.49) des Gleichungssystems (2.47) hat die Gestalt

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{C_e} \left(\frac{\partial j_c}{\partial U_e} - \frac{\partial j_e}{\partial U_e} \right) & \frac{1}{C_e} \frac{\partial j_c}{\partial p} \\ \frac{1}{eW} \frac{\partial j_c}{\partial U_e} & \frac{1}{eW} \frac{\partial j_c}{\partial p} - \frac{1}{\tau} \end{pmatrix}. \quad (2.55)$$

Eine explizite Abhängigkeit der Reaktionsterme vom Integralterm besteht nicht, allerdings fließt dieser bei der Berechnung der partiellen Ableitungen von j_c nach U_e bzw. p mit ein. Betrachtet man $j_c = J_c(U_e, p, U_0)$ explizit auch als Funktion der Bauelementspannung U_0 , so ergibt sich zunächst für die Ableitungen nach U_e

$$\frac{\partial j_c}{\partial U_e} = \frac{dJ_c}{dU_e} = \frac{\partial J_c}{\partial U_e} + \frac{\partial J_c}{\partial U_0} \frac{\partial U_0}{\partial U_e}. \quad (2.56)$$

In diesem Ausdruck muss insbesondere die Ableitung von

$$U_0 = U_s - R_0 \int_G J_c(U_e, p, \underbrace{U_0}_{!!}) dg,$$

nach U_e berechnet werden. Dabei handelt es sich um einen linearen Operator, die fréchetische Ableitung von U_0 nach U_e . Sie ist für eine gegebene Störung $\tilde{U} = \tilde{U}(x, z)$ definiert über die Gleichung

$$\frac{\partial U_0}{\partial U_e} \tilde{U} = -R_0 \int_G \frac{\partial J_c}{\partial U_e} \tilde{U} + \frac{\partial J_c}{\partial U_0} \left(\frac{\partial U_0}{\partial U_e} \tilde{U} \right) dg, \quad (2.57)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial U_0}{\partial U_e} \tilde{U} = \frac{-R_0 \int_G \frac{\partial J_c}{\partial U_e} \tilde{U} dg}{1 + R_0 \int_G \frac{\partial J_c}{\partial U_0} dg}. \quad (2.58)$$

Für die entsprechende Ableitung nach p ist lediglich U_e durch p zu ersetzen. Durch diese Gleichungen sind alle Voraussetzungen geschaffen um die Linearisierung von 2.47 durchzuführen und mit dem Verfahren aus Abschnitt 2.1.1 und 2.1.2 sowohl die stationären Lösungen als auch ihre Stabilität zu berechnen.

2.4.2 Untersuchung oszillierender Stromdichtefilamente

Zur numerischen Untersuchung des zweidimensionalen Halbleitermodells (2.47) wurde von Oelker [61] ein Programm geschrieben, das in der Lage ist, die Zeitintegration durchzuführen. Der numerische Aufwand bei der Behandlung dieses Systems erforderte allerdings die Portierung auf einen Parallelrechner. Ergebnisse dieser Simulationen findet man

z. B. bei Oelker [61] bzw. bei Kleinkes [40]. Im Folgenden sollen nun einige der Ergebnisse von Kleinkes mit den Methoden der Reduktion auf rotationssymmetrische Filamente und der Stabilitätsanalyse verglichen werden.

Das von Kleinkes intensiv untersuchte Bifurkations-Szenario verwendete die Standardparameter (2.54), ein quadratisches Grundgebiet $G_r = L_x \times L_z = 0.5 \times 0.5 \text{ cm}^2$ und einen Vorwiderstand von 1000Ω . Als Randbedingungen wurden Neumann-Ränder gewählt. Die Anfangsbedingungen bildeten ein Viertel-Filament in einer der Ecken des Grundgebiets und eine Versorgungsspannung von $U_s = 1200 \text{ V}$. Im Laufe der verschiedenen Simulationen wurde nun die Versorgungsspannung U_s schrittweise erhöht. Es zeigte sich, dass das Filament bei einer Spannung $U_s > 1600 \text{ V}$ zu oszillieren beginnt. Die Oszillationen schnüren das Filament dabei abwechselnd in der x - und z -Richtung hantelartig ein. Eine weitere Erhöhung der Versorgungsspannung führt zunächst zu einer Vergrößerung der Oszillationsamplitude und zu einer Verringerung der Oszillationsfrequenz und nachfolgend zu einer Ablösung des Filaments vom Rand. Es kommt zu einem ständigen Pendeln des Filaments zwischen zwei Rändern des Grundgebiets.

Zur Erklärung der Instabilität des stationären Filaments bietet es sich nun an eine Stabilitätsuntersuchung durchzuführen. Allerdings ist in diesem speziellen Fall zu berücksichtigen, dass das Grundgebiet, verglichen mit der Ausdehnung der Filamente, noch nicht als unendlich ausgedehnt betrachtet werden kann. Die Abbildung 2.17 zeigt die unterschiedliche Geometrie für die beiden Verfahren: Bei den zweidimensionalen Rechnungen wurden Viertel-Filamente auf einem rechteckigen Grundgebiet (G_r) mit Neumann-Rändern untersucht, während bei der Berechnung rotationssymmetrischer Lösungen kreisförmige Grundgebiete (G_k) und Voll-Filamente verwendet werden. Um trotz dieser Unterschiede die Ergebnisse vergleichen zu können müssen einige Anpassungen vorgenommen werden. Zunächst ist der Gesamtstrom bei der 2D-Numerik um ein Viertel geringer, da man nur Viertel-Filamente betrachtet. Der Vorwiderstand R_0 bei den Simulationen des vereinfachten Systems muss daher entsprechend kleiner gewählt werden, nämlich zu $R_0 = 250 \Omega$. Eine vorgegebene Versorgungsspannung U_s führt dann zu einem identischen Spannungsabfall am Vorwiderstand und somit zur gleichen Bauelementspannung U_0 . Außerdem muss der Radius des Grundgebiets bei der Berechnung rotationssymmetrischer Lösungen so gewählt werden, dass der Einfluss der globalen Rückkopplung auf das Filament von gleicher Größenordnung wie im Fall rechteckiger Gebiete ist. Als Berechnungsgrundlage für den Radius kann also beispielsweise die Bedingung $G_r/4 = G_k$ dienen, die in diesem Fall auf $R_0 \approx 0.56 \text{ cm}$ führt. Eine bessere Wahl stellt allerdings die Kalibrierung anhand des Gesamtstroms I mittels des stationären Filaments dar. Für die folgenden Rechnungen wurde auf Basis der Daten eines stationären Filaments bei $U_s = 1500 \text{ V}$ ein Radius von $R_0 = 0.678$ verwendet.

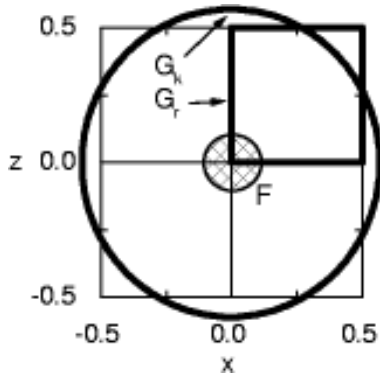


Abb. 2.17: Geometrie bei den numerischen Simulationen des Halbleitersystems: Während die zweidimensionalen Ergebnisse mit rechteckigen Grundgebieten G_r erzeugt wurden, können die Stabilitätsuntersuchungen nur auf kreisförmigen Grundgebieten G_k durchgeführt werden.

In Abb. 2.18 sind die sechs größten Realteile der Eigenwerte aus der Stabilitätsanalyse für die Standardparameter (2.54) und $R_0 = 250 \Omega$ eingezeichnet. Die Bauelementspannung U_0 sinkt mit steigender Versorgungsspannung ab. Die erste Destabilisierung findet in der Mode $n = 1$ statt. Der assoziierte Eigenwert ist reell. Diese Mode entspricht somit dem Übergang zu einem bewegten Filament. Sie wird in den Simulationen des Viertel-Filaments nicht beobachtet, weil die Randbedingungen Störungen mit $n = 1$ nicht zulassen.

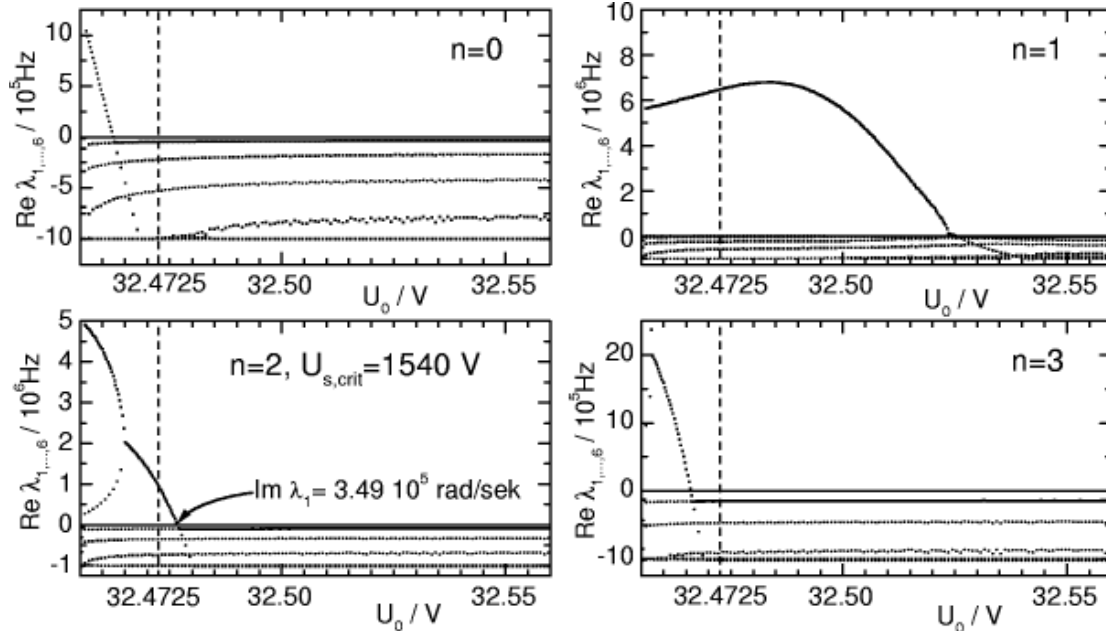


Abb. 2.18: Dargestellt sind die Realteile der führenden sechs Eigenwerte $\lambda_{1,\dots,6}$ aus der Stabilitätsanalyse als Funktion der Bauelementspannung U_0 für die Standardparameter (2.54) und $R_0 = 250 \Omega$. Man findet Destabilisierungen in allen beteiligten Moden. Die gestrichelte Linie bei $U_0 = 32.4725$ markiert den numerisch von Kleinkes bestimmten Übergang zu einer oszillierenden Struktur.

Die nächste Bifurkation ist eine Hopf-Bifurkation in $n = 2$ bei $U_0 = 32.4765$ V und entspricht somit einer Oszillation, die zu elliptisch deformierten Filamenten führt. Die

Ergebnisse von Kleinkes zeigen, dass es sich dabei um eine superkritische Bifurkation handelt. Er bestimmte für $U_{0,\text{crit}} = 32.4725$ V die Frequenz der Oszillationen als Funktion der Versorgungsspannung. Eine lineare Interpolation dieser Ergebnisse auf den berechneten Bifurkationspunkt von $U_{s,\text{crit}} = 1.54$ kV führt auf $f_1 = 111$ kHz. Da eine Periode dieses Signals nur die Deformation in einer Raumrichtung wiedergibt, ist die tatsächliche Oszillationsfrequenz der Mode nur $f_2 = 55.5$ kHz. Dies entspricht im Rahmen der Genauigkeit der Frequenz, die sich aus dem Imaginärteil des abzweigenden Eigenwerts $\text{Im}(\lambda_1) = 3.49 \times 10^5$ der Mode $n = 2$ bestimmen lässt. Bei einer weiteren Vergrößerung der Versorgungsspannung löst sich das Filament vom Rand ab und es bildet sich ein laufendes Filament, da die Mode $n = 1$ bereits instabil ist. Die Aufspaltung des instabilen Eigenwerts der Moden $n = 2$ und $n = 3$ in zwei Äste bei weiter sinkender Bauelementspannung spiegelt den Übergang eines komplexen Eigenwertpaares zu zwei reellen Eigenwerten wieder.

Der Einfluss des globalen Vorwiderstands auf das oben beschriebene Bifurkations-Szenario ist in Abb. 2.19 dargestellt. Die Stabilitätsgrenzen der Moden $n = 0, \dots, 5$ wurden hier für verschiedene Vorwiderstände R_0 ausgewertet. Lediglich die Eigenwerte der Mode $n = 0$ ändern sich. Nach diesem Bild erwartet man bei der Variation von R_0 ein grundsätzlich ähnliches Verhalten. Für $R_0 < 0.0044 \Omega$ existieren jedoch keine stabilen Filamente mehr, weil die Mode $n = 2$ generell instabil ist. Für $R_0 < 0.0032 \Omega$ ist die Mode $n = 0$ unabhängig von der Bauelementspannung instabil.

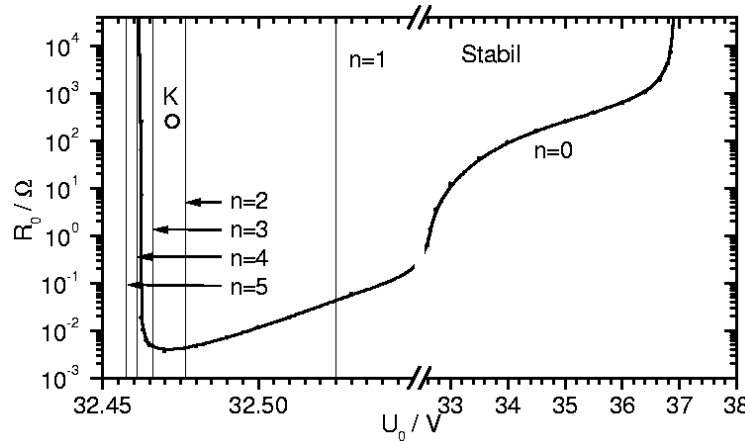


Abb. 2.19: Stabilitätsdiagramm im (U_0, R_0) -Raum für Filamente im Halbleitersystem bei den Standardparametern (2.54): Dargestellt sind die Stabilitätsgrenzen der Moden $n = 0, \dots, 5$. Lediglich die Mode $n = 0$ wird vom Vorwiderstand beeinflusst. Die Skala ist links der U_0 -Achse um den Faktor 20 gestreckt. Der mit K bezeichnete Punkt entspricht dem oszillierenden Filament aus den numerischen Ergebnissen von Kleinkes.

Kapitel 3

Analytisches Modell zur Beschreibung von Wechselwirkungsprozessen

Nachdem im vorangegangenen Kapitel die Stabilität und die Eigenschaften einzelner Quasiteilchen in verschiedenen Reaktions-Diffusions-Systemen untersucht wurden, sollen diese Teilchen oder Filamente nun als stabile Ausgangsbausteine für die weitere Betrachtung vorausgesetzt werden, die nur unter „starken“ Störungen zerstört werden können. Naturgemäß schränkt dieser Zugang die Sichtweise auf das Bekannte, nämlich die Position und die Geschwindigkeit von Spots, ein. Dennoch ist es in vielen Fällen möglich, durch die Einbeziehung anderer Effekte, wie Inhomogenitäten, Randeffekte oder weitere innere Freiheitsgrade, sehr komplexe Lösungen der betrachteten Systeme zu beschreiben.

3.1 Die Herleitung von Bewegungsgleichungen

Gegenstand der analytischen Untersuchungen in diesem Abschnitt ist zunächst das dreikomponentige Gleichungssystem (2.29). Die Reaktionsterme dieses Systems sollen mindestens einen homogenen, stabilen Zustand $u^{(f)}$ besitzen. Zur Vereinfachung der Ausführungen wird das System (2.29) daher zunächst so transformiert, dass dieser Zustand auf $u_{\text{neu}}^{(f)} = 0$ abgebildet wird. Unter der Transformation

$$(u_{\text{neu}}, v_{\text{neu}}, w_{\text{neu}}) = (u, v, w) - (u^{(f)}, u^{(f)}, u^{(f)})$$

gelangt man zu dem Gleichungssystem

$$\begin{aligned}
\dot{u} &= D_u \Delta u - \kappa_3 v - \kappa_4 w + f(u + u^{(f)}) - f(u^{(f)}), \\
\tau \dot{v} &= D_v \Delta u + u - v, \\
\theta \dot{w} &= D_w \Delta w + u - w.
\end{aligned} \tag{3.1}$$

Aus Gründen der kürzeren Schreibweise werden die Indizes „neu“ an u, v und w in diesem Kapitel weggelassen.

In Abschnitt 2.3.2 wurde bereits gezeigt, dass sich die Stabilitätsanalyse stationärer Strukturen im Grenzfall $\theta = 0$ und $D_v = 0$ beträchtlich vereinfacht. Auch die Analyse von Teilchenwechselwirkungen stellt sich in diesem Grenzfall einfacher da. Der schnelle Inhibitor w lässt sich zunächst, analog zur Vorgehensweise in Abschnitt 2.3.2, durch die greensche Funktion ausdrücken. Man gelangt damit zu der folgenden, sehr kompakten Darstellung des Gleichungssystems:

$$\dot{u} = Lu - \kappa_3 v + N(u), \tag{3.2}$$

$$\tau \dot{v} = u - v. \tag{3.3}$$

Der lineare, selbstadjungierte Operator L ist dabei definiert durch

$$Lu(r) = D_u \Delta u(r) - \kappa_4 \int_G g(r - r') u(r') dr' + f'(u^{(f)}) u(r). \tag{3.4}$$

$N(u) : \mathbf{R} \rightarrow \mathbf{R}$ ist die nichtlineare Funktion

$$N(u) = f(u + u^{(f)}) - f'(u^{(f)})u - f(u^{(f)}) \tag{3.5}$$

und enthält per Definition keine konstanten und keine linearen Terme in u . Im Spezialfall der kubischen Kennlinie $f(u) = \lambda u - u^3$ gilt

$$N(u) = -3u^{(f)}u^2 - u^3. \tag{3.6}$$

Die folgende Analyse baut auf dem Gleichungssystem (3.2)-(3.3) auf, das in dieser Form aus dem dreikomponentigen System (2.29) abgeleitet wurde. Zunächst wird eine Linearisierung des Gleichungssystems (3.2)-(3.3) um eine als bekannt vorausgesetzte, stationäre Lösung \bar{u} durchgeführt. Diese ergibt sich zu

$$\begin{pmatrix} \dot{u} \\ \dot{v} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L - N'(\bar{u}) & -\kappa_3 \\ \frac{1}{\tau} & -\frac{1}{\tau} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = L_{\bar{u}} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}. \tag{3.7}$$

Die Goldstone-Mode $G_{(x)}$ in Richtung x einer stationären Lösung \bar{u} ist definiert als

$$G_{(x)} := \begin{pmatrix} \bar{u}_x \\ \bar{u}_x \end{pmatrix} \tag{3.8}$$

und es gilt $L_{\bar{u}} G_{(x)} = 0$ bzw. die analoge Gleichung für alle anderen Richtungsableitungen. Die Goldstone-Mode ist die Richtungsableitung der Struktur, so dass eine Addition zu

einer Translation der Struktur in die jeweilige Richtung führt. In Abschnitt (2.3.2) wurde bereits gezeigt, dass stationäre Lösungen des Systems (3.2)-(3.3) bei $\tau_c = 1/\kappa_3$ instabil gegenüber einer $n = 1$ -Störung werden, die als Erzeuger einer Bewegung der Struktur gedeutet werden kann. Diese wird im Folgenden als Propagator-Mode $P_{(x)}$ in Richtung x bezeichnet. Mit

$$P_{(x)} := \begin{pmatrix} 0 \\ -\frac{\bar{u}_x}{\kappa_3} \end{pmatrix} \quad (3.9)$$

und den entsprechenden Definitionen für die anderen Raumrichtungen gilt daher am Bifurkationspunkt $G_{(x)} = L_{\bar{u}} P_{(x)}$, d. h. die Propagator-Mode erzeugt die Goldstone-Mode. Diese Gleichungen bzw. deren Äquivalente für die jeweiligen adjungierten Moden P^\dagger und G^\dagger des Operators $L_{\bar{u}}^\dagger = L_{\bar{u}}^T$ werden später bei der Auswertung der Störungsreihen benötigt. Die Behandlung des Gleichungssystems wird im Grenzfall $\theta = 0$ und $D_v = 0$ durchgeführt, weil sich die Propagator-Mode dort analytisch in der einfachen Form (3.9) darstellen lässt und sich die Auswertung der Störungsrechnung stark vereinfacht. Prinzipiell wäre die Ausdehnung der folgenden Methodik auch auf den Fall $\theta > 0$ und $D_v > 0$ möglich. Die Propagator-Mode müsste allerdings numerisch bestimmt und die Auswertung der auftretenden Projektionen müssten numerisch durchgeführt werden.

3.1.1 Motivation des Lösungsansatzes

Für ein einzelnes Quasiteilchen kann in der Nähe des Bifurkationspunktes zu bewegten Strukturen angenommen werden, dass die Struktur sich zwar verschiebt und die Propagator-Mode angeregt wird, aber sonst keine wesentliche Deformation der Lösung auftritt. Ein solcher Lösungsansatz führt auf die Dynamik einer Einzellösung in Abhängigkeit des Bifurkationsparameters τ . Im Folgenden soll allerdings auch die Wechselwirkung von zunächst zwei Einzellösungen untersucht werden. Im zweidimensionalen Fall stellt sich die Situation wie in Abb. 3.1 dar.

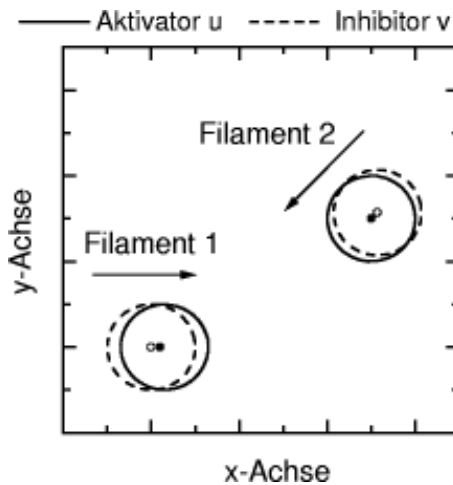


Abb. 3.1: Skizze der Geometrie bei der analytischen Untersuchung des Wechselwirkungsverhaltens zweier Quasiteilchen im zweidimensionalen Fall: Dargestellt sind die Isolinien des Aktivators u und Inhibitors v für ein Lösung mit zwei Quasiteilchen. Im Fall $\tau > 1/\kappa_3$ bewegen sich die Strukturen. Die Bewegungsrichtung wird durch den Versatz von Aktivator und Inhibitor zueinander definiert.

Es wird zunächst die Existenz einer einzelnen, stationären Lösung des dreikomponentigen Systems bei $\tau < 1/\kappa_3$ vorausgesetzt. Superponiert man zwei verschobene Lösungen so gelangt man zu der in Abb. 3.1 dargestellten Situation. Die Halbwerts-Isolinien der Komponente $u(x, y)$ sind durch die durchgezogenen Kreislinien dargestellt. Bei $\tau > 1/\kappa_3$ kann die $n = 1$ -Mode instabil werden. In diesem Fall können sich die entsprechenden Isolinien der Komponente $v(x, y)$ leicht verschieben. Die Richtung dieser Verschiebung entspricht dem negativen Geschwindigkeitsvektor der jeweiligen Einzellösung. In der Näherung sehr großer Abstände zwischen den Einzellösungen beeinflussen sich diese nicht gegenseitig, da die Lösungen für $r \rightarrow \infty$ exponentiell gegen den homogenen Zustand, also $(0, 0)$ in normierten Koordinaten, abklingen. Dieses asymptotische Verhalten der stationären Lösungen kann analog zur Vorgehensweise im zweikomponentigen Fall bestimmt werden [71, Abschnitt 1.3ff.][73].

3.1.2 Analytischer Ansatz

Das Problem bei der analytischen Betrachtung besteht darin zwei unterschiedliche Störungsmechanismen korrekt zu beschreiben: den Einfluss der Eigenbewegung, die durch den Parameter τ gesteuert wird, und den der Wechselwirkung mit einer zweiten Lösung, die exponentiell vom Abstand der beiden Lösungen abhängt. Die Größenordnungen dieser Störungen werden mit ε bzw. mit ε^2 skaliert. Für den Bifurkationsparameter τ wird

$$\tau = \tau_{\text{crit}} + \varepsilon^2 \hat{\tau} \quad \text{und} \quad \tau_{\text{crit}} = \frac{1}{\kappa_3} \quad (3.10)$$

angenommen, wobei τ_{crit} der $n = 1$ -Bifurkationspunkt ist. Für die Behandlung der Wechselwirkungsanteile in der Störungsrechnung ist das Skalierungsverhalten der Terme entscheidend, die aus Produkten von zwei stationären Lösungen \bar{u}_1 und \bar{u}_2 im Abstand d resultieren. Vereinfacht kann angesetzt werden, dass die Filamente für $r \rightarrow \infty$ exponentiell gegen null abfallen. Mit der Annahme, dass \bar{u} im Abstand d von $O(\varepsilon^2)$ ist, gilt

$$\bar{u}_1 \bar{u}_2 = O(\varepsilon^2) \quad \text{für alle } x \in G. \quad (3.11)$$

Durch die Form der Skalierung mit ε bzw. ε^2 werden indirekt die Ordnungen in der Störungsrechnung festgelegt, in denen die verschiedenen Terme später auftreten. Es wird nun eine Beschreibung der Dynamik des Systems bis zur Ordnung ε^3 angestrebt. Durch die unterschiedlichen Größenordnungen in ε tritt eine Hierarchie von Zeitskalen T_i mit

$$T_i := \varepsilon^i t \quad \text{für } i = 0, 1, 2, \dots \quad (3.12)$$

auf. Bewegungen auf der Zeitskala T_0 sind unter den gegebenen Umständen nicht zu erwarten, da im Grenzfall $\varepsilon \rightarrow 0$ der stationäre Fall vorliegt. Als Lösungsansatz wurde die folgende Superposition zweier Lösungen \bar{u}_1 und \bar{u}_2

$$u(T_i, x, y) = \bar{u}_1 + \bar{u}_2 + \varepsilon^2 r_u + \varepsilon^3 R_u, \quad (3.13)$$

$$v(T_i, x, y) = \bar{u}_1 + \bar{u}_2 + \varepsilon \alpha_1 \nabla \bar{u}_1 + \varepsilon \alpha_2 \nabla \bar{u}_2 + \varepsilon^2 r_v + \varepsilon^3 R_v \quad (3.14)$$

gewählt. In diesem Ansatz bezeichnen

$$\bar{u}_i = \bar{u}(x - p_{(i,x)}, y - p_{(i,y)}) \quad \text{für } i = 1, 2 \quad (3.15)$$

zwei an die Positionen

$$p_i = (p_{(i,x)}(T_1, T_2, T_3), p_{(i,y)}(T_1, T_2, T_3)), \quad i = 1, 2 \quad (3.16)$$

verschobene, stationäre Lösungen. Die Bewegung dieser Lösungen kann nur auf Zeitskalen T_i , $i > 0$ erfolgen. Die Indizes (i,x) bzw. (i,y) wurden hier geklammert, um anzudeuten, dass nicht die partiellen Ableitungen, sondern nur die Komponenten des zweikomponentigen Vektors p_i gemeint sind. Die Instabilität in der $n = 1$ -Mode wird durch die Terme $\alpha_i \nabla \bar{u}_i$ berücksichtigt, wobei

$$\nabla \bar{u}_i = \begin{pmatrix} \bar{u}_{i,x} \\ \bar{u}_{i,y} \end{pmatrix} \quad (3.17)$$

die Richtungsableitung in die x - und y -Richtung der jeweiligen Lösung bezeichnet und somit

$$\alpha_i = \left(\alpha_{(i,x)}(T_1, T_2, T_3), \alpha_{(i,y)}(T_1, T_2, T_3) \right) \quad (3.18)$$

proportional zur Amplitude der Propagator-Mode ist, die ebenfalls nur auf den langsamen Zeitskalen T_i , $i > 0$ variieren kann. Störungen, die nicht durch die Überlagerung der Lösungen und der instabilen Eigenmoden abgedeckt werden können, werden durch die Restterme

$$r_u = r_u(x, y, T_1, T_2), \quad R_u = r_u(x, y, T_1), \quad (3.19)$$

$$r_v = r_v(x, y, T_1, T_2), \quad R_v = R_v(x, y, T_2) \quad (3.20)$$

berücksichtigt, die keine Anteile der Goldstone- und Propagator-Moden enthalten dürfen, um die Zerlegung im Ansatz (3.13)-(3.14) eindeutig zu machen. Prinzipiell müsste auch die Abhängigkeit von langsameren Zeitskalen in die Restterme eingehen. Allerdings würden diese bei den folgenden Rechnungen erst in Ordnung ε^4 in Erscheinung treten und können daher vernachlässigt werden.

3.1.3 Lösung des Gleichungssystems

Für $t = 0$ legen die Anfangsbedingungen die Variablen p_i und α_i aus dem Ansatz (3.13)-(3.14) fest. Die Aufgabe der Störungsrechnung besteht nun darin deren Dynamik zu bestimmen. Zu diesem Zweck wird der Ansatz in das Gleichungssystem in der Form (3.2)-(3.3) eingesetzt. Ziel ist es nun die Terme nach Ordnungen von ε zu sortieren, um nach der Projektion auf die adjungierten Goldstone-Moden bzw. die adjungierten Propagator-Moden der Lösung \bar{u}_1 und der Anwendung der Fredholm-Alternative zu einer Hierarchie von Bestimmungsgleichungen für p_1 und α_1 zu gelangen. Zunächst sollen die Gleichungen für das Teilchen \bar{u}_1 hergeleitet werden. Die Herleitung für Teilchen \bar{u}_2 kann analog durchgeführt werden.

Kritisch bei der Bestimmung der Ordnungen in ε ist insbesondere die Behandlung der Nichtlinearität $N(u)$. Mit dem Ansatz (3.13) ergibt sich der Ausdruck

$$N(\bar{u}_1 + \bar{u}_2 + \varepsilon^2 r_u + \varepsilon^3 R_u) = N(\bar{u}_1) + N(\bar{u}_2) + N'(\bar{u}_1)(\bar{u}_2 + \varepsilon^2 r_u + \varepsilon^3 R_u) + O(\varepsilon^4). \quad (3.21)$$

Die Näherung in (3.21) wurde nicht aus einer Taylorentwicklung, sondern aus einer expliziten Auswertung der Nichtlinearität und einer Umordnung der Terme in Ordnungen von ε , wie sie nach der Projektion auf $\bar{u}_{1,x}$ auftreten, gewonnen. Bei der Berechnung der Dynamik für \bar{u}_2 müssen daher entsprechend die Indizes vertauscht werden. Die Umformungen sind in Anhang (A.3) ausführlich dargestellt. Wenn berücksichtigt wird, dass die spätere Projektion des Ausdrucks \bar{u}_2 auf $\bar{u}_{1,x}$ einen Faktor ε^2 ergibt, erhält man die folgenden Systeme von Gleichungen in den Ordnungen $O(\varepsilon^n)$ mit $n = 1, 2$ und 3 :

$O(\varepsilon^1)$:

$$0 = (\partial_{T_1} p_1 - \alpha_1 \kappa_3) \nabla \bar{u}_1 \quad (3.22)$$

$$0 = (\tau_{\text{crit}} \partial_{T_1} p_1 - \alpha_1) \nabla \bar{u}_1 \quad (3.23)$$

$O(\varepsilon^2)$:

$$0 = (L + N'(\bar{u}_1)) r_u - \kappa_3 r_v + N'(u_1) \bar{u}_2 + \partial_{T_2} p_1 \nabla \bar{u}_1 \quad (3.24)$$

$$0 = \frac{r_u - r_v}{\tau_{\text{crit}}} - \partial_{T_1} \alpha_1 \nabla \bar{u}_1 + \partial_{T_2} p_1 \nabla \bar{u}_1 + \alpha_1 (\nabla \nabla \bar{u}_1) \partial_{T_1} p_1 \quad (3.25)$$

$O(\varepsilon^3)$:

$$0 = (L + N'(\bar{u}_1)) R_u - \kappa_3 R_v - \kappa_3 \alpha_2 \nabla \bar{u}_2 + \partial_{T_3} p_1 \nabla \bar{u}_1 - \partial_{T_1} r_u + \partial_{T_1} p_2 \nabla \bar{u}_2 \quad (3.26)$$

$$0 = \frac{R_u - R_v}{\tau_{\text{crit}}} - \partial_{T_2} \alpha_1 \nabla \bar{u}_1 - \alpha_2 \nabla \bar{u}_2 + \partial_{T_3} p_1 \nabla \bar{u}_1 - \partial_{T_1} r_v + \alpha_1 (\nabla \nabla \bar{u}_1) \partial_{T_2} p_1 + \hat{\tau} \kappa_3 \partial_{T_1} p_1 \nabla \bar{u}_1 + \partial_{T_1} p_2 \nabla \bar{u}_2 \quad (3.27)$$

Bei der Interpretation dieser Gleichungen ist zu beachten, dass die Terme $\alpha_i \nabla \bar{u}_1$ jeweils als Skalarprodukt zwischen zwei zweikomponentigen Vektoren zu verstehen sind. Die Bezeichnung $\nabla \nabla \bar{u}_1$ steht für die Hesse-Matrix der Lösung bezogen auf die Variablen x und y . Die adjungierten Goldstone-Moden $G_{(x)}^\dagger, G_{(y)}^\dagger$ und die adjungierten Propagator-Moden $P_{(x)}^\dagger, P_{(y)}^\dagger$ für die Richtungen x und y haben die Gestalt

$$G_{(x)}^\dagger = (\bar{u}_{1,x}, -\bar{u}_{1,x}), \quad (3.28)$$

$$P_{(x)}^\dagger = (\bar{u}_{1,x}/\kappa_3, 0), \quad (3.29)$$

und analog für die y -Richtung. Mit diesen Definitionen gilt $G^\dagger L_{\bar{u}_1}^\dagger = 0$ bzw. $P^\dagger L_{\bar{u}_1}^\dagger = G^\dagger$, wobei $L_{\bar{u}_1}^\dagger$ die um die Lösung \bar{u}_1 linearisierten und transponierten Gleichungen aus (3.7) sind. Durch Projektion auf die adjungierten Goldstone- bzw. Propagator-Moden ergibt sich aus den Gleichungen der Ordnung $O(\varepsilon^1)$

$$\tau_{\text{crit}} = \frac{1}{\kappa_3}, \quad (3.30)$$

$$\partial_{T_1} p_1 = \kappa_3 \alpha_1. \quad (3.31)$$

Man erhält somit eine erste Bestimmungsgleichung für die Bewegung der Lösung \bar{u}_1 . Das analoge Ergebnis für die Lösung \bar{u}_2 lässt sich durch Projektion auf deren adjungierte Goldstone-Mode finden.

In der zweiten und dritten Ordnung der Störungsrechnung tauchen noch die Restterme $r = (r_u, r_v)$ bzw. $R = (R_u, R_v)$ auf. Diese lassen sich durch Anwendung der Fredholm-Alternative eliminieren. Es gilt

$$\langle G_{(x)} | L_{\bar{u}_1} r \rangle = \langle L_{\bar{u}_1}^\dagger G_{(x)} | r \rangle = 0, \quad (3.32)$$

$$\langle P_{(x)} | L_{\bar{u}_1} r \rangle = \langle L_{\bar{u}_1}^\dagger P_{(x)} | r \rangle = \langle G_{(x)} | r \rangle = 0, \quad (3.33)$$

wobei die zweite Gleichung aus der Voraussetzung folgt, dass r und R keine Anteile der Goldstone-Mode enthalten dürfen. Für R ergeben sich dieselben Gleichungen. Unter Berücksichtigung dieser Beziehungen und unter Ausnutzung der Symmetrie der Lösungen bezüglich einer Spiegelung an der x - und der y -Achse ergeben sich in der zweiten Ordnung die Gleichungen

$$\partial_{T_1} \alpha_1 = - \frac{\langle \nabla \bar{u}_1 | N'(\bar{u}_1) \bar{u}_2 \rangle}{\langle \bar{u}_{1,x}^2 \rangle}, \quad (3.34)$$

$$\partial_{T_2} p_1 = - \frac{\langle \nabla \bar{u}_1 | N'(\bar{u}_1) \bar{u}_2 \rangle}{\langle \bar{u}_{1,x}^2 \rangle}. \quad (3.35)$$

Bei der Auswertung der Terme dritter Ordnung stößt man auf das Problem, dass diese noch vom Restterm r zweiter Ordnung abhängen, der nicht explizit bestimmt wurde. Es ist dennoch möglich einen Ausdruck für $\partial_{T_2} \alpha_1$ abzuleiten. Dazu wird Gleichung (3.25) nach T_1 differenziert und nach $\partial_{T_1} r_v$ aufgelöst. Führt man nun die Projektion der dritten Ordnung durch und benutzt diese Gleichung, so gelangt man zu

$$\partial_{T_2} \alpha_{(1,x)} = \kappa_3^2 \hat{\tau} \alpha_{(1,x)} - \kappa_3 \alpha_{(1,x)} \frac{\langle \bar{u}_{i,xx} | \bar{u}_{i,xx} \rangle \alpha_{(1,x)}^2 + 3 \langle \bar{u}_{i,xx} | \bar{u}_{i,yy} \rangle \alpha_{(1,y)}^2}{\langle \bar{u}_{i,x}^2 \rangle} \quad (3.36)$$

für die x -Komponente der Propagator-Mode und zur analogen Gleichung mit vertauschten Indizes x, y für die y -Komponente. Vektoriell lässt sich diese Gleichung sehr kompakt in der Form

$$\partial_{T_2} \alpha_1 = \kappa_3^2 \hat{\tau} \alpha_1 + \frac{\kappa_3 \langle \nabla \bar{u}_1 | (\alpha_1 \cdot \nabla)^3 \bar{u}_1 \rangle}{\langle \bar{u}_{1,x}^2 \rangle} \quad (3.37)$$

schreiben. Um zu höheren Ableitungen der Koeffizienten α_i und p_i zu gelangen müssten die Restterme explizit ausgewertet werden. Die bisher berechneten Ableitungen bis zur Zeitskala T_2 sind allerdings bereits ausreichend. Nach Rückkehr zur alten Zeitskala t ergibt sich das Gleichungssystem

$$\partial_t p_1 = \kappa_3 \alpha_1 - \frac{\langle \nabla \bar{u}_1 | N'(\bar{u}_1) \bar{u}_2 \rangle}{\langle \bar{u}_{1,x}^2 \rangle}, \quad (3.38)$$

$$\partial_t \alpha_1 = \kappa_3^2 \left(\tau - \frac{1}{\kappa_3} \right) \alpha_1 + \frac{\kappa_3 \langle \nabla \bar{u}_1 | (\alpha_1 \cdot \nabla)^3 \bar{u}_1 \rangle}{\langle \bar{u}_{1,x}^2 \rangle} - \frac{\langle \nabla \bar{u}_1 | N'(\bar{u}_1) \bar{u}_2 \rangle}{\langle \bar{u}_{1,x}^2 \rangle}. \quad (3.39)$$

Die Geschwindigkeit eines Quasiteilchens setzt sich aus zwei Termen zusammen. Der erste Term in Gleichung (3.38) spiegelt die Rolle des instabilen Eigenvektors der Mode $n = 1$ als Propagator wieder. Die Struktur bewegt sich gleichförmig mit einer Geschwindigkeit, die proportional zur Amplitude der Propagator-Mode ist. Auch die Bewegungsrichtung wird durch die Verschiebung der Propagator-Mode definiert. Eine zusätzliche, schwache Beeinflussung der Struktur findet noch aufgrund des zweiten Terms, also aufgrund des Einflusses eines zweiten Teilchens statt. Die Richtung dieser Verschiebung liegt auf der Verbindungsachse der beiden Strukturen und kann als Zentralkraft interpretiert werden. Das Vorzeichen dieser Kraft hängt von der Form der stationären Lösungen ab. Dabei sind verschiedene Fälle möglich, die bei späteren Vergleichen mit numerischen Lösungen noch genauer diskutiert werden. Im einfachsten Fall ist die Kraft repulsiv.

Die Dynamik der Propagator-Mode α_1 setzt sich aus drei Termen zusammen. Der erste Term $\kappa_3^2(\tau - 1/\kappa_3)\alpha_1$ spiegelt die Stabilitätseigenschaften der Propagator-Mode wieder. Für $\tau > \tau_{\text{crit}}$ wächst die Mode an. Die Amplitude dieser Mode wird durch den zweiten Term begrenzt, der proportional zu $|\alpha_1|^3$ ist. Die Geschwindigkeit wächst daher nicht unbegrenzt an, sondern stellt sich auf einen Gleichgewichtswert ein. Die Wechselwirkung der Propagator-Mode mit dem zweiten Teilchen ergibt sich aus dem dritten Term der Gleichung (3.39). Auch die Propagator-Mode wird in Richtung der Verbindungslinie der beiden Quasiteilchen angeregt. Die Wechselwirkung kann also auch hier als Zentralkraft interpretiert werden. Ein Anwachsen des Propagators in diese Richtung führt daher auch zu einer Ablenkung von Teilchen \bar{u}_1 in Richtung von Teilchen \bar{u}_2 bzw. von Teilchen \bar{u}_2 weg.

Der Grenzfall $\tau \rightarrow 0$ wird von dem reduzierten Gleichungssystem nicht erfasst, da dieses aus einer Entwicklung um $\tau = 1/\kappa_3$ resultierte. Allerdings folgt für $\tau = 0$ $v = u$ und für die Amplitude der Propagator-Mode $\alpha_1 = 0$. Die Gleichungen gehen dann über in

$$\partial_t p_1 = -\frac{\langle \nabla \bar{u}_1 | N'(\bar{u}_1) \bar{u}_2 \rangle}{\langle \bar{u}_{1,x}^2 \rangle}. \quad (3.40)$$

Dies entspricht dem Ergebnis, das für den Fall wechselwirkender stationärer Strukturen in zweikomponentigen Reaktions-Diffusions-Systemen der Klasse (2.15)-(2.16) im Grenzfall $\tau \rightarrow 0$ hergeleitet werden kann [73, 71].

3.2 Erweiterungen für verschiedene Spezialfälle

3.2.1 Der dreidimensionale Fall

Während sich der eindimensionale Fall aus der zweidimensionalen Rechnung des vorherigen Abschnitts als Spezialfall ergibt, muss die Gültigkeit der Gleichungen (3.38)-(3.39) in drei Dimensionen nachgeprüft werden. Tatsächlich ergibt eine Analyse außer einer erhöhten Dimension in den Argumenten der Verteilungen, den verschiedenen Skalarprodukten und den Integrationen keinerlei Änderung, so dass die Gleichungen auch im dreidimensionalen Fall verwendet werden können.

3.2.2 Die Dynamik einzelner Teilchen

Betrachtet man ein einzelnes Teilchen, so entfallen die Wechselwirkungsterme in den Bewegungsgleichungen. In den meisten Fällen handelt es sich bei der stationären Lösung um eine rotationssymmetrische Lösung, so dass man sich ohne weitere Einschränkung auf die Betrachtung einer Bewegung in x -Richtung zurückziehen kann. Es ergibt sich das Gleichungssystem

$$\partial_t p_{(1,y)} = 0, \quad \partial_t \alpha_{(1,y)} = 0, \quad (3.41)$$

$$\partial_t p_{(1,x)} = \kappa_3 \alpha_{(1,x)}, \quad (3.42)$$

$$\partial_t \alpha_{(1,x)} = \kappa_3^2 \left(\tau - \frac{1}{\kappa_3} \right) \alpha_{(1,x)} - \kappa_3 \frac{\langle \bar{u}_{1,xx}^2 \rangle}{\langle \bar{u}_{1,x}^2 \rangle} \alpha_{(1,x)}^3. \quad (3.43)$$

Dieses einfache dynamische System besitzt im Fall $\tau \leq 1/\kappa_3$ einen stabilen, stationären Zustand bei $(p_{(1,x)}, \alpha_{(1,x)}) = (\text{const.}, 0)$, der allerdings bei $\tau > 1/\kappa_3$ instabil wird. In letzterem Fall bildet sich ein gleichförmig bewegter Zustand. Die Gleichgewichtsgeschwindigkeit bestimmt sich aus $\partial_t \alpha_{(1,x)} = 0$ zu

$$c_0 = \partial_t p_{(1,x)} = \kappa_3^{3/2} \sqrt{\frac{\tau - 1/\kappa_3}{Q}}, \quad (3.44)$$

wobei der Formfaktor Q definiert ist als

$$Q := \frac{\langle \bar{u}_{1,xx}^2 \rangle}{\langle \bar{u}_{1,x}^2 \rangle}. \quad (3.45)$$

Bei der Berechnung der Bewegungsgleichungen wurde für die verwendeten stationären Lösungen lediglich die Spiegelsymmetrie bezüglich der x - und y -Achsen gefordert. Es ist daher möglich asymmetrische stationäre Lösungen als Bausteine der Dynamik zu verwenden, sofern solche existieren und die Symmetriebedingungen erfüllen. Ohne die Rotationssymmetrie zeigt der kubische Term allerdings nicht mehr notwendigerweise in die gleiche Raumrichtung wie die Propagator-Mode. Es ist also eine Drehung der Bewegungsrichtung möglich. Die Drehgeschwindigkeit lässt sich aus den Bewegungsgleichungen bestimmen. Man schreibt das Gleichungssystem für die Dynamik der Propagatormode komponentenweise, mit den Konstanten Q_i abgekürzt in der Form

$$\dot{\alpha}_{(x)} = \kappa_3^2 \hat{\tau} \alpha_{(x)} - \kappa_3 \alpha_{(x)} (Q_1 \alpha_{(x)}^2 + 3Q_2 \alpha_{(y)}^2), \quad (3.46)$$

$$\dot{\alpha}_{(y)} = \kappa_3^2 \hat{\tau} \alpha_{(y)} - \kappa_3 \alpha_{(y)} (Q_3 \alpha_{(y)}^2 + 3Q_4 \alpha_{(x)}^2). \quad (3.47)$$

Im rotationssymmetrischen Fall gilt $Q = Q_1 = 3Q_2 = 3Q_4 = Q_3$, so dass die rechte Seite insgesamt kollinear zu α ist. Im asymmetrischen Fall lässt sich die Drehgeschwindigkeit der Bewegungsrichtung einfach bestimmen, indem man den Anteil von $\dot{\alpha}$ senkrecht zu α berechnet:

$$\dot{\phi} := \frac{\dot{\alpha}_\perp}{|\alpha|} = a^2 \kappa_3 \cos(\phi) \sin(\phi) ((Q_1 - 3Q_4) \cos^2(\phi) + (3Q_2 - Q_3) \sin^2(\phi)). \quad (3.48)$$

3.2.3 Analytische Behandlung asymmetrischer Lösungen

Im vorherigen Abschnitt wurde bereits gezeigt, dass das reduzierte Gleichungssystem für asymmetrische stationäre Verteilungen eine Drehung der Bewegungsrichtung eines Objekts erklären kann. Diese Form der Behandlung ist allerdings unvollständig, da neben der Verschiebung der betrachteten Lösung in x - und y -Richtung im asymmetrischen Fall noch eine weitere Null-Eigenmode existiert, die einer Drehung der stationären Lösung entspricht. Tatsächlich stellt sich bei Simulationen heraus, dass die Drehung der Orientierungsachse wesentlich schneller ablaufen kann als die Drehung der Bewegungsrichtung. Im Folgenden sollen daher die Modifikationen am Wechselwirkungsansatz besprochen werden, die notwendig sind, um auch die Dynamik asymmetrischer stationärer Lösungen beschreiben zu können. In Abb. 3.2 ist ein Beispiel für eine asymmetrische Verteilung \bar{u} gezeigt. Neben den translatorischen Freiheitsgraden existiert in diesem Fall auch eine Null-Eigenmode, die einer Drehung der Struktur um einen Winkel ϕ entspricht. Die Verteilung \bar{u} kann daher auch explizit als Funktion des Winkels ϕ , also z. B. in der Form

$$\bar{u} = \bar{u}(-\phi, x - p(x), y - p(y)), \quad (3.49)$$

geschrieben werden, wobei $\phi = \phi(T_1, T_2, T_3)$ sich auf den gleichen langsamen Zeitskalen ändert wie die Position der Struktur $p = p(T_1, T_2, T_3)$. Ebenso wie für die Verschiebung existiert für die Drehung eine Propagator-Mode. Diese muss im Ansatz wie die Moden der Translation berücksichtigt werden. Der neue Ansatz für ein einzelnes asymmetrisches Objekt lautet daher

$$u(T_i, x, y) = \bar{u} + \varepsilon^2 r_u + \varepsilon^3 R_u, \quad (3.50)$$

$$v(T_i, x, y) = \bar{u} + \varepsilon \alpha \nabla \bar{u} + \alpha_{\text{rot}} \bar{u}_\phi + \varepsilon^2 r_v + \varepsilon^3 R_v. \quad (3.51)$$

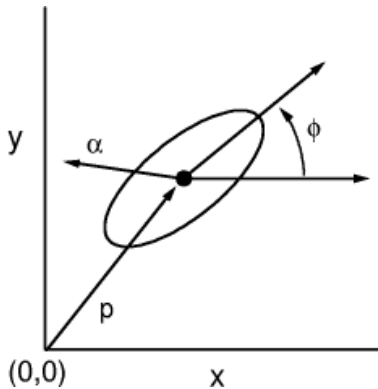


Abb. 3.2: Skizze der Geometrie bei der analytischen Untersuchung des dynamischen Verhaltens einer einzelnen asymmetrischen Lösung: Neben den Translationsfreiheitsgraden $p = (p(x), p(y))$ ist nun auch eine Drehung der Struktur um einen Winkel ϕ , sowie die Anregung der entsprechenden Propagator-Moden möglich.

Die weitere Störungsrechnung verläuft exakt analog zu der Behandlung in Abschnitt 3.1.3. Man gelangt so zu einer Störungsreihe bis zur Ordnung ε^3 . Um die bei der Projektion auftretenden Terme überschaubar zu halten, kann man sich auf den Fall $\phi = 0$ beschränken und für die Verteilung $\bar{u}(\phi = 0, x, y)$ Achsensymmetrie bezüglich der x - und y -Achsen

fordern. Man gelangt zu dem folgenden sechskomponentigen, gewöhnlichen Differentialgleichungssystem für die Dynamik des Objekts:

$$\dot{p}_{(x)} = \kappa_3 \alpha_{(x)}, \quad (3.52)$$

$$\dot{p}_{(y)} = \kappa_3 \alpha_{(y)}, \quad (3.53)$$

$$\dot{\phi} = \kappa_3 \alpha_{\text{rot}}, \quad (3.54)$$

$$\dot{\alpha}_{(x)} = \kappa_3 \alpha_{(x)} \left((\kappa_3 \tau - 1) + Q_{xx} \alpha_{(x)}^2 + Q_{xy} \alpha_{(y)}^2 + Q_{x\phi} \alpha_{\text{rot}}^2 \right) + P_x \alpha_{(y)} \alpha_{\text{rot}}, \quad (3.55)$$

$$\dot{\alpha}_{(y)} = \kappa_3 \alpha_{(y)} \left((\kappa_3 \tau - 1) + Q_{yx} \alpha_{(x)}^2 + Q_{yy} \alpha_{(y)}^2 + Q_{y\phi} \alpha_{\text{rot}}^2 \right) + P_y \alpha_{(x)} \alpha_{\text{rot}}, \quad (3.56)$$

$$\dot{\alpha}_{\text{rot}} = \kappa_3 \alpha_{\text{rot}} \left((\kappa_3 \tau - 1) + Q_{\phi x} \alpha_{(x)}^2 + Q_{\phi y} \alpha_{(y)}^2 + Q_{\phi\phi} \alpha_{\text{rot}}^2 \right) + P_\phi \alpha_{(y)} \alpha_{(x)}. \quad (3.57)$$

Die Koeffizienten Q_i und P_i ergeben sich aus der Störungsrechnung. Die explizite Form ist der folgenden Liste zu entnehmen, wobei sich die übrigen Koeffizienten durch zyklische Vertauschung der Indizes x , y und ϕ ergeben:

$$\begin{aligned} Q_{xx} &= \frac{\langle \bar{u}_x | \bar{u}_{xxx} \rangle}{\langle \bar{u}_x | \bar{u}_x \rangle}, \\ Q_{xy} &= \frac{3 \langle \bar{u}_x | \bar{u}_{xyy} \rangle \langle \bar{u}_\phi | \bar{u}_\phi \rangle - 2 \langle \bar{u}_\phi | \bar{u}_{xy} \rangle \langle \bar{u}_x | \bar{u}_{\phi y} \rangle}{\langle \bar{u}_x | \bar{u}_x \rangle \langle \bar{u}_\phi | \bar{u}_\phi \rangle}, \\ Q_{x\phi} &= \frac{3 \langle \bar{u}_x | \bar{u}_{x\phi\phi} \rangle \langle \bar{u}_y | \bar{u}_y \rangle - 2 \langle \bar{u}_y | \bar{u}_{\phi x} \rangle \langle \bar{u}_x | \bar{u}_{\phi y} \rangle}{\langle \bar{u}_x | \bar{u}_x \rangle \langle \bar{u}_y | \bar{u}_y \rangle}, \\ P_x &= 2\kappa_3 \frac{\langle \bar{u}_x | \bar{u}_{y\phi} \rangle}{\langle \bar{u}_x | \bar{u}_x \rangle}. \end{aligned}$$

Die Struktur dieses Gleichungssystems zeigt, dass alle Bewegungsmoden prinzipiell gleichberechtigt sind. Die Größenordnungen der Koeffizienten Q_i und P_i bestimmen die Stabilität der unterschiedlichen Bewegungsformen. Eine Stabilitätsanalyse der verschiedenen Bewegungsmodi wird in Abschnitt 4.2.3.2 anhand eines konkreten Beispiels durchgeführt.

3.2.4 Inhomogenitäten

Zur Erklärung experimenteller Beobachtungen ist es nützlich, den Einfluss von räumlichen Inhomogenitäten auf die Dynamik zu erfassen. Ein einfacher Zugang besteht darin einen Parameter als ortsabhängig anzunehmen. Für die Störungsrechnung skaliert man diese Ortsabhängigkeit mit ε^2 . Es ergibt sich das Gleichungssystem

$$\dot{u} = Lu - \kappa_3 v - N(u) + \varepsilon^2 \delta\kappa, \quad (3.58)$$

$$\tau \dot{v} = u - v, \quad (3.59)$$

wobei $\delta\kappa = \delta\kappa(x, y)$ einer räumlich inhomogenen Variation des Parameters κ_1 des Ausgangssystems (3.1) entspricht. Die Störungsrechnung aus Abschnitt 3.1.3 lässt sich in identischer Weise mit diesem zusätzlichen Term durchführen. Im Ergebnis verändert sich lediglich der Wechselwirkungsterm. Man erhält das System

$$\partial_t p_1 = \kappa_3 \alpha_1 - \frac{\langle \nabla \bar{u}_1 | \delta\kappa \rangle}{\langle \bar{u}_{1,x}^2 \rangle}, \quad (3.60)$$

$$\partial_t \alpha_1 = \kappa_3^2 \left(\tau - \frac{1}{\kappa_3} \right) \alpha_1 + \frac{\kappa_3 \langle \nabla \bar{u}_1 | (\alpha_1 \cdot \nabla)^3 \bar{u}_1 \rangle}{\langle \bar{u}_{1,x}^2 \rangle} - \frac{\langle \nabla \bar{u}_1 | \delta \kappa \rangle}{\langle \bar{u}_{1,x}^2 \rangle}. \quad (3.61)$$

Um einen anschaulicheren Zugang zu den Auswirkungen von Inhomogenitäten auf die Teilchendynamik zu gewinnen, kann man die Verteilung $\delta \kappa$ um die Spotposition p_1 bis zur ersten Ordnung entwickeln, d. h.

$$\delta \kappa(x, y) = \delta \kappa(p_1) + \left(x - p_{(1,x)}, y - p_{(1,y)} \right) \nabla \delta \kappa(p_1).$$

Der Wechselwirkungsterm kann dann formal ausgewertet werden. Man erhält

$$\langle \nabla \bar{u}_1 | \delta \kappa \rangle = \text{const.} \nabla \delta \kappa(p_1). \quad (3.62)$$

Der Einfluss der Inhomogenität ist also in niedrigster Ordnung proportional zu ihrer Steigung. Die Bewegungsrichtung des Spots wird daher in Richtung des stärksten Anstiegs der $\delta \kappa(x, y)$ -Verteilung abgelenkt. Diese Näherung ist allerdings nur sinnvoll, wenn die Inhomogenität sich auf größeren Längenskalen ändert als die Form der Aktivatorverteilung u . In derselben Art und Weise lässt sich auch der Einfluss eines Teilchens auf ein Zweites beschreiben. Auch hier gelangt man zu dem Ergebnis, dass der Einfluss auf die Bewegungsrichtung der Spots in Richtung des stärksten Anstiegs der Aktivatorverteilung erfolgt.

3.2.5 Die Wechselwirkung von mehr als zwei Teilchen

Bei der Untersuchung von Systemen mit mehreren Filamenten wird es im Allgemeinen nicht ausreichend sein nur den Einfluss eines Teilchens zu berücksichtigen. Es ist allerdings ebenso problemlos wie bei der Einführung einer Inhomogenität möglich, den Einfluss mehrerer Spots \bar{u}_i , $i = 2, \dots, n$ an verschiedenen Positionen p_i , $i = 2, \dots, n$ auf die Lösungen \bar{u}_1 zu berücksichtigen. Da in der Störungsrechnung der Einfluss aller Lösungen auf die Lösung \bar{u}_1 mit ε^2 skaliert wird, gilt diese Näherung allerdings streng genommen nur in dem Grenzfall, wenn alle Teilchen den gleichen Abstand von der betrachteten Lösung haben. Als Ergebnis der Störungsrechnung erhält man einen erweiterten Wechselwirkungsterm für die Bewegung des Teilchens \bar{u}_1 unter dem Einfluss von $N - 1$ anderen Teilchen in der Form

$$W = - \sum_{i=2}^N \frac{\langle \nabla \bar{u}_1 | N'(\bar{u}_1) \bar{u}_i \rangle}{\langle \bar{u}_{1,x}^2 \rangle}, \quad (3.63)$$

d. h. die Kraftgesetze der einzelnen Objekte werden linear superponiert. Obwohl diese lineare Superposition nur im Fall gleicher Abstände zwischen allen beteiligten Objekten streng gültig ist, liefern Vergleiche numerischer und analytischer Daten eine gute Übereinstimmung.

3.2.6 Die Wechselwirkung unterschiedlicher stationärer Verteilungen

In manchen Parameterbereichen koexistieren unterschiedliche Typen lokalisierter stationärer Verteilungen, beispielsweise zum Ring geschlossene Filamentstreifen (vgl. z. B. Abb.

4.41) mit Filamenten. Auch die Wechselwirkung von Streifen und Filamenten auf endlichem oder zyklisch geschlossenem Grundgebiet fällt in diese Kategorie. Da die Herleitung der Bewegungsgleichungen an keiner Stelle die Gleichheit der Verteilungen \bar{u}_1 und \bar{u}_2 benutzt, ist das Wechselwirkungsmodell auch in diesem Fall anwendbar. Da der Formfaktor $Q_i = \langle u_{i,xx}^2 \rangle / \langle u_{i,x}^2 \rangle$ im Allgemeinen für die beiden Verteilungen nicht gleich ist, unterscheiden sich die Geschwindigkeiten der beiden Strukturen.

Zur Untersuchung der Wechselwirkungsterme werden die folgenden Beziehungen für die stationären Lösungen \bar{u}_i benötigt, die wegen $\bar{u}_i = \bar{v}_i$ aus (3.2) folgen. Es gilt

$$(L - \kappa_3)\bar{u}_i = -N(\bar{u}_i), \quad (3.64)$$

$$(L - \kappa_3)\bar{u}_{i,x} = -N'(\bar{u}_i)\bar{u}_{i,x}. \quad (3.65)$$

Mit den Definitionen $\bar{L} := L - \kappa_3$ und $c_i := \frac{1}{\langle \bar{u}_{i,x}^2 \rangle}$ gilt daher für den Wechselwirkungseinfluss W_1 von Teilchen \bar{u}_2 auf Teilchen \bar{u}_1

$$W_1 = -c_1 \langle \bar{u}_{1,x} | N'(\bar{u}_1) \bar{u}_2 \rangle = -c_1 \langle N'(\bar{u}_1) \bar{u}_{1,x} | \bar{u}_2 \rangle \quad (3.66)$$

$$= c_1 \langle \bar{L} \bar{u}_{1,x} | \bar{u}_2 \rangle \quad (3.67)$$

$$= -c_1 (\langle \bar{L} \bar{u}_1 | \bar{u}_{2,x} \rangle - \underbrace{\langle \partial_x (\bar{L} \bar{u}_1 | \bar{u}_2) \rangle}_{=0}) \quad (3.68)$$

$$= -c_1 \langle \bar{u}_1 | \bar{L} \bar{u}_{2,x} \rangle = c_1 \langle \bar{u}_1 | N'(\bar{u}_2) \bar{u}_{2,x} \rangle \quad (3.69)$$

$$= -\frac{c_1}{c_2} W_2. \quad (3.70)$$

Der Einfluss unterschiedlicher Lösungen aufeinander unterscheidet sich daher nur um einen festen, aus den Verteilungen berechenbaren Faktor.

Kapitel 4

Numerische Untersuchungen der Dynamik bewegter Quasiteilchen

In den vorangegangenen Kapiteln wurden die Stabilitätseigenschaften stationärer filamentärer Lösungen ausführlich untersucht und ein analytisches Wechselwirkungsmodell für teilchenartige Lösungen angegeben. Mit diesen Vorüberlegungen ist es nun möglich numerische Simulationen durchzuführen und die Ergebnisse in diesem Rahmen einzuordnen. Dabei wird der Vergleich der analytischen und numerischen Ergebnisse im Vordergrund stehen, aber es werden auch verschiedene Mechanismen diskutiert, die über dieses einfache Modell hinausgehen. Darüber hinaus wird gezeigt, dass sich auch wesentlich komplexere Lösungen als die bisher diskutierten Filamente in diesem Kontext beschreiben lassen.

Um Aussagen über die Güte der Näherungen des analytischen Modells aus Kapitel 3 machen zu können wurden verschiedene Situationen untersucht. Um zu einem Vergleich zwischen Numerik und Analytik zu gelangen müssen die dreikomponentigen Reaktions-Diffusions-Gleichungen (2.29) im Grenzfall $\theta = 0$ oder zumindest bei $\theta \rightarrow 0$ betrachtet werden. Dieser Grenzfall bereitet allerdings numerische Probleme, weil die Diffusion des schnellen Inhibitors im Vergleich zu der der anderen Komponenten groß ist und die Zeitskalen der Inhibitoren stark getrennt sind. Es wurde daher ein Verfahren implementiert, das speziell auf diesen Fall zugeschnitten ist und die Gleichung mit der Zeitkonstante τ oder $\theta = 0$ mit einem linearen Mehrgitter-Verfahren löst. Soweit nicht anders erwähnt gilt im Folgenden immer, dass Rechnungen mit Zeitkonstante null mit diesem Verfahren durchgeführt wurden, während bei nichtverschwindenden Zeitkonstanten alle Gleichungen mittels eines Crank-Nicolson-Verfahrens gelöst wurden. Die beiden eingesetzten numerischen Lösungsverfahren werden in Anhang A.4 detailliert diskutiert. Die Dynamik der Strukturen wurde mit den in Anhang A.5 beschriebenen Verfahren ausgewertet.

4.1 Einzelne Filamente

Zunächst soll die Dynamik von Einzelspots also einzelnen Quasiteilchen diskutiert werden. Es bieten sich zwei unterschiedliche Zugänge zur Untersuchung der Einzelstrukturen an. Die analytische Vorgehensweise baut auf einer stationären Struktur auf, die aus Untersuchungen des zweikomponentigen Systems bekannt ist und führt eine dritte Komponente in Form eines langsamen Inhibitors ein, der zu einer bewegten Lösung führt. Der zweite Zugang ist phänomenologischer Natur und geht von bewegten, instabilen Spots aus, die durch einen Integralterm stabilisiert werden.

4.1.1 Der analytische Zugang

Aus dem Gleichungssystem (3.38)-(3.39) ergab sich in Abschnitt 3.2.2 für die Geschwindigkeit c_0 einer einzelnen Lösung \bar{u} als Funktion von τ die Gleichung

$$|c_0| = \kappa_3^{3/2} \sqrt{\frac{\langle \bar{u}_x^2 \rangle}{\langle \bar{u}_{xx}^2 \rangle}} \left(\tau - \frac{1}{\kappa_3} \right) \quad (4.1)$$

im Fall $\tau > \tau_{\text{crit}} = \frac{1}{\kappa_3}$. Diese Beziehung soll nun numerisch belegt werden. Da einige der folgenden Simulationen für $\theta = 0.01$ durchgeführt wurden, soll mit einer einfachen Überlegung das Bifurkationsverhalten für den Fall $\theta > 0, D_v > 0$ diskutiert werden. Die Linearisierung des dreikomponentigen Gleichungssystems (3.1) um eine stationäre Lösung $(\bar{u}, \bar{v}, \bar{w})$ liefert den Operator

$$L_{\bar{u}} = \begin{pmatrix} D_u \Delta + f'(\bar{u} + u^{(f)}) & -\kappa_3 & -\kappa_4 \\ 1/\tau & (D_v \Delta - 1)/\tau & 0 \\ 1/\theta & 0 & (D_w \Delta - 1)/\theta \end{pmatrix}. \quad (4.2)$$

Wie üblich gilt wegen der Translationsinvarianz des Systems für die Goldstone-Mode $g = (\bar{u}_x, \bar{v}_x, \bar{w}_x)$ die Beziehung $L_{\bar{u}} g = 0$. Die adjungierte Goldstone-Mode des Operators $L_{\bar{u}}^\dagger = L_{\bar{u}}^T$ mit der Eigenschaft $L_{\bar{u}}^T g^\dagger = 0$ ergibt sich zu

$$g^\dagger = (\bar{u}_x, -\kappa_3 \tau \bar{v}_x, -\kappa_4 \theta \bar{w}_x). \quad (4.3)$$

Im Fall bewegter Lösungen muss nun eine Propagator-Mode p existieren die die Goldstone-Mode g erzeugt, also mit der Eigenschaft $L_{\bar{u}} p = g$. Die Projektion dieser Gleichung auf die adjungierte Goldstone-Mode führt direkt auf

$$\langle g^\dagger | g \rangle = \langle g^\dagger | L_{\bar{u}} p \rangle = \langle L_{\bar{u}}^\dagger g^\dagger | p \rangle = 0 \quad (4.4)$$

$$\Rightarrow \tau \kappa_3 \langle \bar{v}_x^2 \rangle + \theta \kappa_4 \langle \bar{w}_x^2 \rangle - \langle \bar{u}_x^2 \rangle = 0. \quad (4.5)$$

Der Bifurkationspunkt ergibt sich daher zu

$$\tau_{\text{crit}} = \frac{\langle \bar{u}_x^2 \rangle - \kappa_4 \theta \langle \bar{w}_x^2 \rangle}{\kappa_3 \langle \bar{v}_x^2 \rangle}. \quad (4.6)$$

Im Fall $D_v = 0$ und $\theta > 0$ liegt er daher im Vergleich zu Ergebnis (4.1) um $\Delta\tau = -\frac{\kappa_4 \langle \bar{w}_x^2 \rangle}{\kappa_3 \langle \bar{v}_x^2 \rangle}$ verschoben, d. h. die Strukturen bewegen sich bereits bei kleineren Zeitkonstanten τ . Dieses Ergebnis ist plausibel, da $\theta > 0$ gleichbedeutend mit einer etwas verlangsamten Reaktion des schnellen Inhibitors ist.

Es wurden nun numerische Simulationen von bewegten Filamenten, d. h. von räumlich lokalisierten Strukturen in der Nähe des Bifurkationspunktes bei $D_v = 0$ und $\theta = 0.01$ durchgeführt und die theoretisch vorhergesagte Geschwindigkeit mit der numerisch bestimmten verglichen. Untersucht wurden ein-, zwei- und auch dreidimensionale Beispiele. In Abb. 4.1 sind die Aktivator- und Inhibitor-Verteilungen eines eindimensionalen Filaments eingezeichnet. Die Parameter sind in der Abbildung angegeben. Der Bifurkationspunkt liegt im vorliegenden Fall wegen $\kappa_3 = 1$ bei $\tau_{\text{crit}} = 1$. Die dargestellte Lösung bewegt sich von links nach rechts. Man erkennt deutlich die Verschiebung des langsamen Inhibitors gegenüber dem Aktivator. Der schnelle Inhibitor umgibt das Filament und stabilisiert seine Größe.

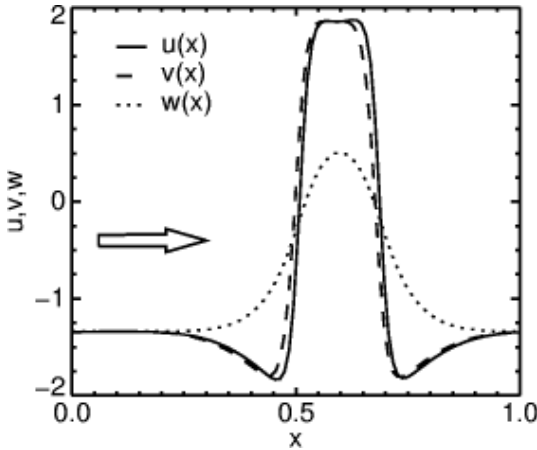


Abb. 4.1: Darstellung der Komponenten u , v und w im Fall $\tau = 1.05$ bei den Parametern, die für die Vergleiche im eindimensionalen Fall verwendet wurden: Deutlich erkennt man, dass die Verteilung v bis auf eine Verschiebung dem Aktivator u entspricht. Parameter und Diskretisierung: $D_u = 4.67 \times 10^{-3}$, $D_v = 0$, $D_w = 10^{-2}$, $\kappa_4 = 3.33$, $\kappa_3 = 1$, $\lambda = 5.67$, $\kappa_1 = -0.617$, $\theta = 0.01$, $\Delta x = 0.01$ und $\Delta t = 2 \times 10^{-3}$

In Abb. 4.2 a) ist für die Parameter aus Abb. 4.1 das Geschwindigkeitsquadrat c_0^2 als Funktion des Bifurkationsparameters τ dargestellt. Die theoretische Kurve entspricht dem Verlauf der Funktion aus Gleichung (4.1). Die numerischen Daten sind als Kreise dargestellt und wurden für $\tau > \tau_{\text{crit}}$ linear gefittet. Aus dem Fit bestimmt sich der Bifurkationspunkt zu $\tau_{\text{num}} = 0.9973$. Berücksichtigt man die Korrektur nach Gleichung (4.6) so ergibt sich als theoretischer Wert $\tau_{\text{th}} = 0.9969$. Die Abweichung der Steigungen zwischen den numerischen Ergebnissen und der Theorie beträgt etwa vier Prozent. Um auch die Steigung genauer analytisch vorhersagen zu können reichen die einfachen Korrekturmöglichkeiten nach Gleichung (4.6) nicht aus. Die gesamte Störungsrechnung müsste auf den Fall $\theta > 0$ ausgedehnt werden.

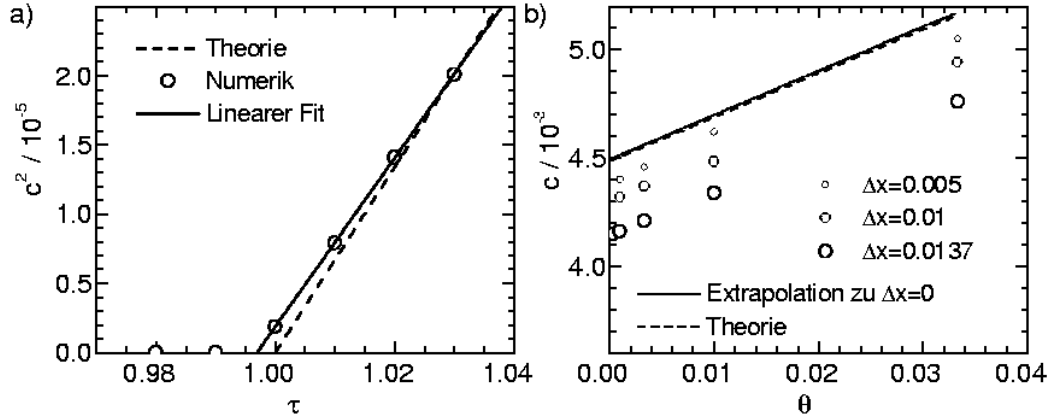


Abb. 4.2: a) Abhängigkeit des Quadrats der Geschwindigkeit von der Zeitkonstanten τ des langsamen Inhibitors v im eindimensionalen Fall b) Änderung der Geschwindigkeit im Fall $\tau = 1.03$ für unterschiedliche Diskretisierungslängen Δx und Zeitkonstanten θ : Die Parameter entsprechen denen aus Abb. 4.1

In Abb. 4.2b) wurde für den Fall $\tau = 1.03$ die Abhängigkeit der Geschwindigkeit von der Zeitkonstanten θ und der Ortsdiskretisierung untersucht um abzuschätzen, ob die Abweichungen aus Abb. 4.2 auf numerische Fehler zurückgeführt werden können. Beide Größen beeinflussen die Geschwindigkeitsbestimmung. Eine Extrapolation der Daten auf $\Delta x = 0$ und $\theta = 0$ zeigt eine sehr gute Übereinstimmung mit der theoretischen Vorhersage.

Im zweidimensionalen Fall wurde der Spot der in Abb. 4.3 abgebildet ist untersucht. Dargestellt sind in diesem Bild die $u(x, y) = 0$ - und $v(x, y) = 0$ -Isolinien, sowie ein Graustufenbild der schnellen Inhibitorverteilung w . Die Verschiebung zwischen dem Aktivator und dem langsamen Inhibitor ist wieder deutlich zu erkennen. Der schnelle Inhibitor umgibt die Aktivatorverteilung. Im Profil durch $y = 0.5$ ergeben sich qualitativ die gleichen Verteilungen wie in Abb. 4.1.

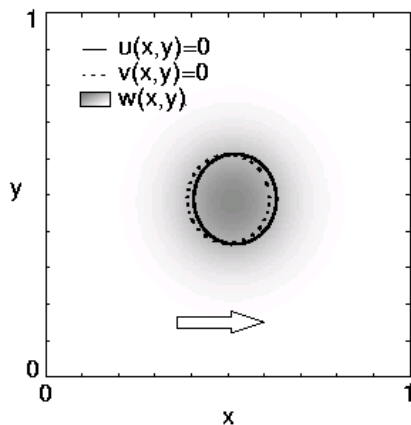


Abb. 4.3: Die $u(x, y) = 0$ - und $v(x, y) = 0$ -Isolinien eines zweidimensionalen Filaments: Die Verteilung des Inhibitors w ist als Graustufenbild hinterlegt. Der langsame Inhibitor v ist gegen den Aktivator u verschoben, der schnelle Inhibitor umgibt den Spot in allen Richtungen. Die Parameter sind $D_u = 4.67 \times 10^{-3}$, $D_v = 0$, $D_w = 10^{-2}$, $\kappa_4 = 3.33$, $\kappa_3 = 1$, $\lambda = 5.67$, $\kappa_1 = -1.126$, $\theta = 0.01$, $\tau = 1.11$, die Diskretisierung ist $\Delta x = 0.02$ und $\Delta t = 2 \times 10^{-3}$.

In Abb. 4.4 a) sind die Ergebnisse der Geschwindigkeitsbestimmung für das zweidimensionale Beispiel gezeigt. Aus den numerischen Daten ergibt sich als Bifurkationspunkt

$\tau_{\text{num}} = 0.9975$, aus der Theorie nach Gleichung (4.6) ein Wert von $\tau_{\text{th}} = 0.9979$. Die Steigungen unterscheiden sich in diesem Fall um etwa 10 Prozent. Allerdings ist die Steigung in diesem Fall zu groß, während sie im eindimensionalen Fall zu niedrig war. Der Grund für die Abweichungen kann im ein-, wie im zweidimensionalen Fall der Abweichung vom Grenzfall $\theta = 0$, wahrscheinlicher allerdings der relativ geringen Diskretisierung zugeschrieben werden.

Untersuchungen zur Dynamik dreidimensionaler Quasiteilchen wurden von Liehr [49] durchgeführt. Die theoretischen Vorhersagen bezüglich der Geschwindigkeit einzelner Strukturen konnten auch in diesem Fall bestätigt werden. Abb. 4.4 b) zeigt den entsprechenden Vergleich numerischer und theoretischer Daten. Da der Rechenaufwand bei dreidimensionalen Problemen stark ansteigt, wurden die Geschwindigkeiten in diesem Fall in einem um die Bewegungsachse rotationssymmetrischen System in Zylinder-Koordinaten bestimmt. Aus der Extrapolation der numerisch bestimmten Geschwindigkeiten ergibt sich in diesem Fall als Bifurkationspunkt $\tau_{\text{crit}} = 0.9945$. Dieser Wert stimmt mit dem berechneten Bifurkationspunkt $\tau_{\text{crit}} = 0.9959$ sehr gut überein. Die Steigungen unterscheiden sich um etwa 25 Prozent, was wiederum dem Diskretisierungseinfluss zugeschrieben werden muss.

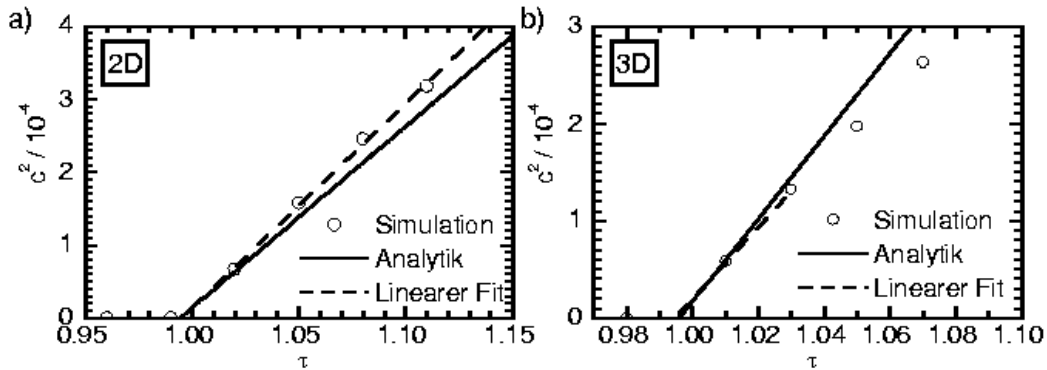


Abb. 4.4: Geschwindigkeitsvergleiche zwischen dem theoretischen Bewegungsmodell und den numerisch ermittelten Lösungen: Eingezeichnet ist jeweils das Quadrat der Geschwindigkeit als Funktion der Zeitkonstanten τ des langsamen Inhibitors v . a) zeigt die Ergebnisse für ein zweidimensionales Beispiel, b) für einen dreidimensionalen Fall. Die Parameter wurden, mit Ausnahme von τ und der Zeitdiskretisierung, in beiden Fällen gewählt wie in Abb. 4.3. Die Zeitdiskretisierung war in a) $\Delta t = 2 \times 10^{-3}$ und in b) $\Delta t = 10^{-3}$.

4.1.2 Eine phänomenologische Beschreibung von Einzelspots

Zur Untersuchung der Bewegung eines Spots wurden bisher die analytischen Ergebnisse aus dem Grenzfall $\theta = 0$ und $D_v = 0$ benutzt. Um eine phänomenologische Vorstellung von den Mechanismen der Propagation lokalisierter Strukturen zu vermitteln wird nun als Ausgangspunkt ein erregbares Medium mit globaler Rückkopplung in Form des folgenden

Gleichungssystems benutzt:

$$\dot{u} = D_u \Delta u + f(u) - v + \kappa_1 - \frac{\kappa_2}{|G|} \langle u \rangle, \quad (4.7)$$

$$\tau \dot{v} = D_v \Delta v + u - v. \quad (4.8)$$

Im Fall $\kappa_2 = 0$, mit geeigneten Reaktionstermen und bei genügend großem τ , können sich in solchen Systemen im zweidimensionalen Fall Spiralwellen bzw. im dreidimensionalen Fall Scroll-Waves, bilden. Diese Objekte sind räumlich nicht lokalisiert. Eine anfänglich räumlich begrenzte Lösung wird sich ausbreiten bis das Grundgebiet vollständig ausgefüllt ist. Um dieser Ausdehnung entgegenzuwirken kann die globale Kopplung eingesetzt werden, also $\kappa_2 > 0$. Ein Wachstum der Struktur geht mit einer Vergrößerung des Aktivatorintegrals $\langle u \rangle$ einher und senkt die Erregbarkeit des Mediums über die Rückkopplung so weit ab, dass die Größe des Objekts begrenzt bleibt. Das Ergebnis ist ein räumlich begrenzter Spiralansatz wie in Abb. 4.5 (links). Diese Struktur ist für die Parameter aus der Abbildung, aber mit $\kappa_2 = 5.33$ und $\kappa_1 = -7.3$ stabil. Rechnet man unter Beibehaltung von $\kappa_{\text{eff}} = \kappa_1 - \kappa_2 \frac{\langle u \rangle}{|G|}$ auf den Fall ohne globale Rückkopplung $\kappa_2 = 0$ zurück, so folgt $\kappa_1 = -0.775$ und der Spot wird instabil gegenüber einer Störung, die entweder zum homogenen Zustand führt (unten) oder zu einer Spirale (oben). Stabile bewegte Strukturen können in verschiedenen zweikomponentigen Modellsystemen mit erregbarer Dynamik gefunden werden, wenn eine globale Rückkopplung zur Stabilisierung eingesetzt wird [44, 74, 70]. Allerdings ist es auf diese Weise grundsätzlich nicht möglich mehr als eine Lösung zu stabilisieren, da antisymmetrische Kombinationen räumlich getrennter instabiler Eigenmoden durch den Integralterm nicht beeinflusst werden (vgl. 1.5.2). Neben der Stabilisierung über die globale Kopplung sind auch andere Mechanismen möglich. Bei der CO-Oxidation auf Platinoberflächen führt beispielsweise eine zustandsabhängige räumliche Anisotropie zur Ausbildung solcher bewegter Spiralansätze [28, 18]. Die Bewegungsrichtung ist in diesem Beispiel allerdings an den kristallographischen Achsen orientiert, so dass man nicht von einer freien zweidimensionalen Bewegung sprechen kann.

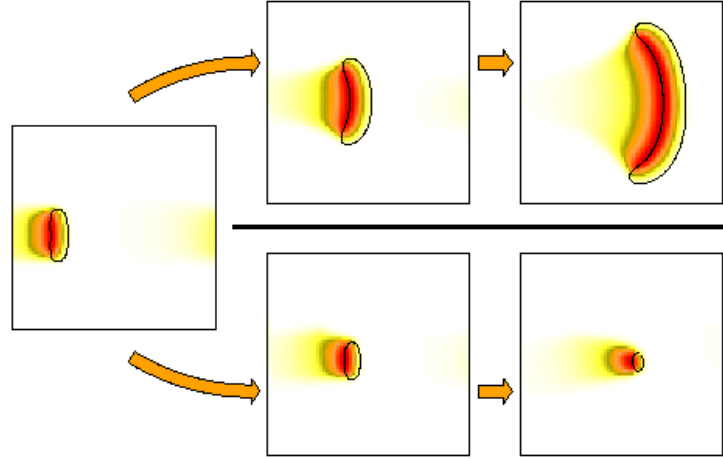


Abb. 4.5: Typische Destabilisierung einer stationären, bewegten Lösung ohne globale Rückkopplung in einem zweikomponentigen System: Dargestellt ist die $u(x, y) = 0$ -Isolinie und ein Grauwertbild von $v(x, y)$. Entweder die Lösung verschwindet (unten) oder sie vergrößert sich zu einer Spirale (oben). Die Parameter sind $D_u = 10^{-3}$, $D_v = 1.25 \times 10^{-3}$, $\kappa_1 = -0.775$, $\tau = 25$, $\lambda = 2$, $L = 2.3$, $\Delta x = 0.026$ und $\Delta t = 0.035$.

Eine Reihe numerischer Simulationen des zweikomponentigen Reaktions-Diffusions-Systems zeigte in allen beobachteten Fällen Destabilisierungen wie in Abb. 4.5. Auch in anderen zweikomponentigen Reaktions-Diffusions-Gleichungen ist die Existenz einer bewegten lokalisierten Lösung ohne globale Inhibition nicht beobachtet worden. Die Schwierigkeit liegt darin, dass einerseits ein langsamer Inhibitor benötigt wird, der zu einer Bewegung führen kann, und andererseits ein schneller Inhibitor notwendig ist, um die Struktur in ihrer lateralen Ausdehnung zu stabilisieren. Die naheliegende Lösung besteht in der Einführung einer weiteren inhibierenden Komponente w , so dass man zu dem dreikomponentigen Gleichungssystem

$$\dot{u} = D_u \Delta u + f(u) - \kappa_3 v - \kappa_4 w + \kappa_1, \quad (4.9)$$

$$\tau \dot{v} = D_v \Delta v + u - v, \quad (4.10)$$

$$\theta \dot{w} = D_w \Delta w + u - w \quad (4.11)$$

gelangt. Tatsächlich ist es in diesem System möglich bei geeigneter Wahl der Parameter zu bewegten lokalisierten Lösungen zu gelangen [72]. Entscheidend für die Existenz solcher Strukturen ist die unterschiedliche Wirkung der beiden Inhibitoren v und w . In Abb. 4.6 a) ist der langsame Inhibitor v einer solchen Lösung als Graustufenbild zusammen mit der $u(x, y) = 0$ -Isolinie des Aktivators dargestellt. Deutlich erkennt man, dass die Verteilung des Inhibitors gegenüber dem Aktivator gegen die Bewegungsrichtung verschoben ist. Der zweite Inhibitor ist in Abb. 4.6 b) dargestellt. Aufgrund seiner kleinen Zeitkonstanten und starken Diffusion umgibt er die Aktivatorverteilung in allen Richtungen gleichmäßig. In Abb. 4.6 c) ist ein Schnitt entlang der x-Achse bei $y = 0$ durch die drei Verteilungen dargestellt. Deutlich ist auch hier die unterschiedliche Form der beiden Inhibitoren zu erkennen.

Bei den bewegten Strukturen, die man aus dem analytischen Ansatz erhält, ist aufgrund der Konstruktion gesichert, dass im Fall $\tau \rightarrow 0$ ein stationäres und stabiles Filament existiert. Im allgemeinen Fall ist das allerdings nicht notwendigerweise der Fall. Für das vorliegende Beispiel aus Abb. 4.6 findet man im Grenzfall $\tau \rightarrow 0$ die Zerstörung der Struktur. Der langsame Inhibitor gelangt immer näher an das Aktivatorzentrum und führt dort zur Unterdrückung des Filaments. Diese Eigenschaft ist insbesondere bei der Diskussion der Wechselwirkungsprozesse interessant, bei denen während des Stoßprozesses ein Filament stark abgebremst wird und es mit diesem Mechanismus zu einer Teilchenvernichtung kommen kann.

Drei- und mehrkomponentige Modelle, wie die in (4.9)-(4.11), wurden auch schon von anderen Autoren untersucht, insbesondere weil z. B. in chemischen Systemen die Zahl der Reaktionsschritte sehr groß sein kann [48]. Zaikin [89] stellte ein dreikomponentiges Modell für ein chemisches System vor und untersuchte numerisch die Ausbreitung von lokalisierten dynamischen Strukturen ähnlich der aus Abb. 4.6. Allerdings wird von ihm keine Diskussion der Dynamik durchgeführt, die die relevanten Mechanismen eindeutig beschreibt. Ein anderes Modell, das ebenfalls zur Propagation lokalisierter Strukturen führt, wurde beispielsweise von Meinhardt [52] diskutiert. An die Stelle eines langsamen Inhibitors tritt in diesem Fall die Dynamik eines Gens, das durch eine stationäre lokalisierte Struktur aktiviert wird, und zu einer Bewegung führt. Anders als in dem oben genannten System findet allerdings keine Relaxation der Gen-Konzentration in den Ruhezustand statt, so dass es zur Bildung verästelter Strukturen kommt. Von räumlich lokalisierten Strukturen wie in dem diskutierten System kann daher nicht gesprochen werden.

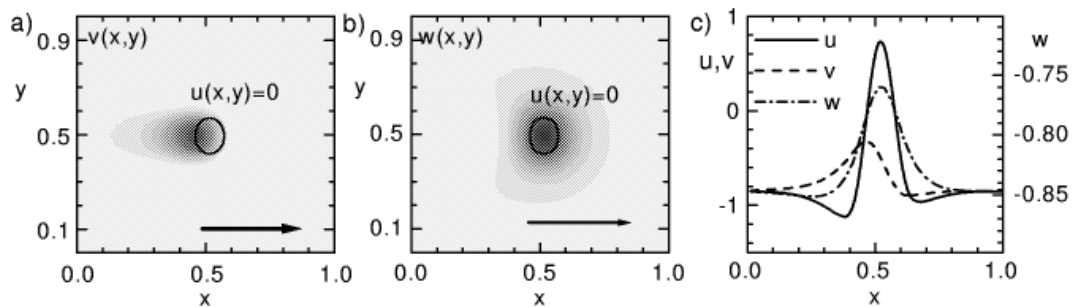


Abb. 4.6: Eine bewegte Lösung des dreikomponentigen Reaktions-Diffusions-Systems (4.9)-(4.11): In a) und b) sind die Inhibitoren v und w als Grauwertbilder zusammen mit der $u(x,y) = 0$ -Isolinie eingezeichnet. Bild c) zeigt einen Schnitt entlang $y = 0.5$. Deutlich ist die Verschiebung des langsamen Inhibitors gegenüber dem Aktivator u zu erkennen. Der schnelle Inhibitor w umgibt die Aktivatorverteilung in allen Richtungen. Die Parameter sind $D_u = 10^{-3}$, $D_v = 1.25 \times 10^{-3}$, $D_w = 0.064$, $\kappa_1 = -6.92$, $\kappa_3 = 8.5$, $\kappa_4 = 1$, $\tau = 48$, $\theta = 1$, $\lambda = 2$, $L = 1$, $\Delta x = 0.026$ und $\Delta t = 0.035$.

4.2 Wechselwirkungsprozesse

Zur Untersuchung der Wechselwirkung von Quasiteilchen miteinander oder mit Inhomogenitäten muss das gewöhnliche, gekoppelte Differentialgleichungssystem (3.38)-(3.39) simuliert werden. Der Zeitaufwand ist im Vergleich zu den Simulationen der partiellen Differentialgleichungen verschwindend gering, da die Dynamik eines Quasiteilchen mit nur zwei gewöhnlichen Differentialgleichungen pro Raumdimension beschrieben werden kann. Zur Integration wurde ein Runge-Kutta-Verfahren zweiter Ordnung verwendet. Ebenso zu vernachlässigen ist der Zeitaufwand zur Bestimmung des Wechselwirkungsterms im vereinfachten Differentialgleichungssystem. Das Wechselwirkungsintegral lässt sich durch eine Koordinatentransformation derart umformen, dass die beiden Lösungen auf der x -Achse liegen, also z. B. bei $p_1 = (0, 0)$ und bei $p_2 = (d, 0)$:

$$\langle \nabla \bar{u}_1 | N'(\bar{u}_1) \bar{u}_2 \rangle = \langle (\bar{u}_{1,x}, \bar{u}_{1,y}) | N'(\bar{u}_1) \bar{u}_2 \rangle =: (-F_{\text{ww}}(d), 0). \quad (4.12)$$

Die y -Komponente des Wechselwirkungsintegrals verschwindet in diesem Fall aufgrund der Antisymmetrie des Integranden bezüglich $y = 0$. Das Integral muss daher lediglich für alle möglichen Teilchenabstände d ausgewertet werden. Nach der Rücktransformation auf die alten Teilchenpositionen ergibt sich als Wechselwirkungsterm

$$F_{\text{ww}}(d) \hat{d}, \quad (4.13)$$

wobei \hat{d} in Richtung von \bar{u}_2 zeigt, also $\hat{d} = (p_2 - p_1)/|p_2 - p_1|$. Ein negatives Vorzeichen von $F_{\text{ww}}(d)$ entspricht mit dieser Definition einer Abstoßung, ein positives Vorzeichen einer Attraktion. Die Bestimmung von $F_{\text{ww}}(d)$ wird vor den eigentlichen Simulationen durchgeführt. Benötigt wird lediglich die stationäre Verteilung einer einzelnen Lösung, die sich leicht in einer rotationssymmetrischen Darstellung wie in Abschnitt 2.1.1 beschrieben berechnen lässt. Qualitativ hängt das Wechselwirkungsverhalten für größere Abstände von der linearisierten Dynamik um den homogenen Zustand ab, so dass prinzipiell zwei Fälle unterschieden werden können: rein repulsive und räumlich oszillierende Wechselwirkung.

4.2.1 Ein Zwei-Teilchen-Stoßprozess

In diesem Abschnitt soll die Streuung zweier Quasiteilchen aneinander untersucht werden um überprüfen zu können, ob die einfachen Bewegungsgleichungen die Dynamik des Systems ausreichend genau beschreiben. Dazu wurde der folgende Parametersatz gewählt:

$$\begin{aligned} D_u &= 1.487 \times 10^{-3}, \quad D_v = 0, \quad D_w = 7.436 \times 10^{-3}, \\ \lambda &= 2.05, \quad \kappa_1 = -0.11, \quad \kappa_2 = 0, \quad \kappa_3 = \kappa_4 = 1, \\ \tau &= 1.01, \quad \theta = 0, \quad \Delta t = 0.25, \quad \Delta x = 0.01875. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Wegen $\kappa_3 = 1$ gilt $\tau_{\text{crit}} = 1$, so dass $\tau = 1.01$ ausreichend nahe am Bifurkationspunkt liegt, um eine gute Übereinstimmung zwischen reduzierter Dynamik und normaler Numerik zu erhalten. Zunächst wurde die stationäre Verteilung des Filaments bestimmt und

daraus der Wechselwirkungsterm $F_{\text{ww}}(d)$ berechnet. In Abb. 4.7 ist $F_{\text{ww}}(d)$ dargestellt. Da die Halbwertsbreite eines Filaments bei diesen Parametern etwa bei 0.15 liegt, ist der Bereich $d < 0.3$ uninteressant, weil er die Voraussetzungen der Näherung verletzt. Bei kleinen Abständen findet man repulsives Verhalten. Im Bereich zwischen $d > 0.6$ und $d < 0.87$ ergibt sich eine attraktive Wechselwirkung. Diese alternierende Charakteristik des Wechselwirkungsterms hat seine Ursache in den oszillierenden Ausläufern der stationären Verteilung \bar{u}_1 .

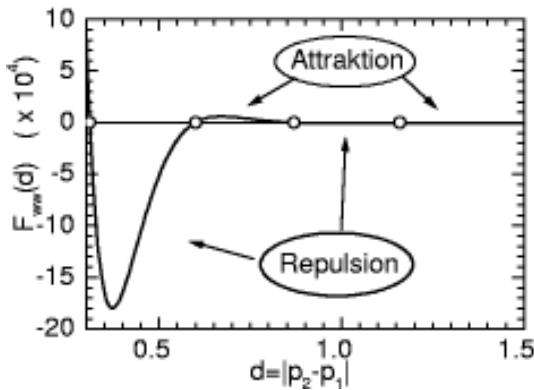


Abb. 4.7: Wechselwirkungseinfluss $F_{\text{ww}}(d)$ als Funktion des Teilchenabstands d : Die Nullstellen der Funktion sind durch Kreise markiert. Man erkennt abwechselnd Bereiche mit attraktiver und repulsiver Wechselwirkung. Die Parameter entsprechen (4.14).

Um die Übereinstimmung der analytisch bestimmten Näherung mit der Simulation des partiellen Differentialgleichungssystems zu untersuchen wurde die Geometrie aus Abb. 4.8 a) gewählt. Zwei Quasiteilchen bewegen sich mit antiparalleler Geschwindigkeit und einer Verschiebung d transversal zur Bewegungsrichtung aufeinander zu. Untersucht wurde die Änderung Φ der Bewegungsrichtung der Objekte vor und nach dem Wechselwirkungsprozess.

In Abb. 4.8 a) wurden neben der Geometrie auch exemplarisch die Trajektorien aus der Simulation und der vereinfachten Dynamik für den Stoßparameter $d = 0.525$ dargestellt. Die Symbole \times und $+$ stellen die Position des rechten Filaments für die Zeiten $T = 25n$, $n \geq 1$ dar. Vor dem Stoßprozess ist die Übereinstimmung sehr gut, d. h. die Geschwindigkeiten aus Theorie und Simulation stimmen überein. Nach dem Stoßprozess erkennt man deutlich, dass die Ablenkwinkel zwar nicht identisch sind, aber relativ gut übereinstimmen. Insbesondere werden auch charakteristische Merkmale des Stoßprozesses wiedergegeben: Bei der Annäherung findet zunächst eine schwache Attraktion statt, die bei noch kleineren Abständen, entsprechend dem Verhalten der Wechselwirkungsfunktion, in eine Abstoßung umschlägt. In Abb. 4.8 b) ist der Streuwinkel Φ als Funktion des Stoßparameters d dargestellt. Auch hier spiegelt sich der oszillierende Charakter der Funktion $F_{\text{ww}}(d)$ wieder: Im Bereich $d = 0.59$ bis 0.87 findet man negative Streuwinkel.

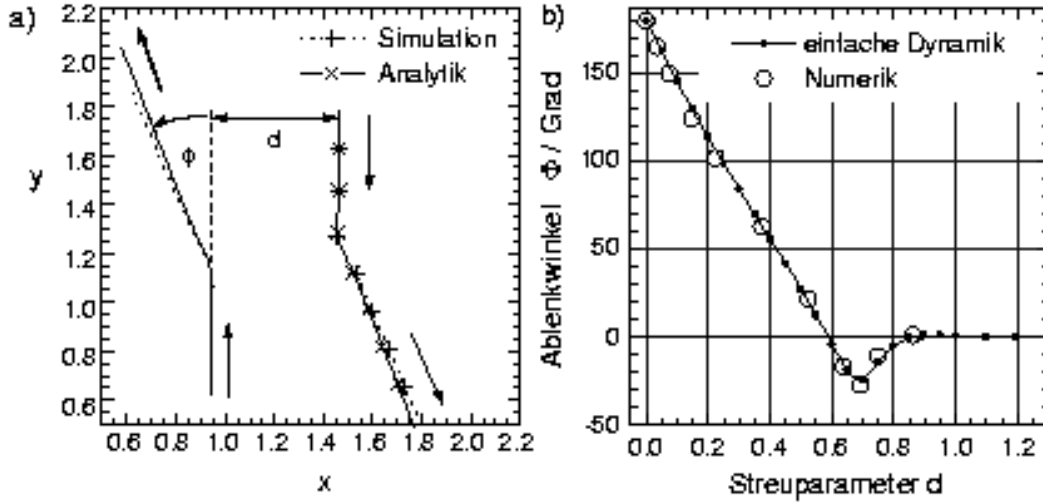


Abb. 4.8: a) Geometrie der Stoßsimulationen: Dargestellt sind die Trajektorien für $d = 0.525$ aus einer Simulation und der vereinfachten Numerik im Vergleich. Die Symbole markieren die Positionen des rechten Filaments zu den Zeiten $T = 25, 50, 75, \dots$ b) Abhängigkeit des Streuwinkels Φ als Funktion von d : Der Bereich mit attraktiver Wechselwirkung führt zu negativen Streuwinkeln Φ . Die Parameter sind in (4.14) angegeben.

4.2.2 Stoßende Quasiteilchen in drei Dimensionen

Auch dreidimensionale Stoßprozesse können mit dem theoretischen Modell der Dynamik behandelt werden. Die Simulationen des dreidimensionalen partiellen Differentialgleichungssystems wurden von Liehr [49] durchgeführt. Betrachtet wurde ein windschiefer Stoß zweier Quasiteilchen bei den Parametern

$$\begin{aligned}
 D_u &= 4.67 \times 10^{-3}, \quad D_v = 0, \quad D_w = 0.01, \\
 \lambda &= 5.67, \quad \kappa_1 = -1.126, \quad \kappa_2 = 0, \quad \kappa_3 = 1, \quad \kappa_4 = 3.333, \\
 \tau &= 1.03, \quad \theta = 0.01, \quad \Delta t = 0.001, \quad \Delta x = 0.0288, \quad L = 2.25.
 \end{aligned}
 \tag{4.15}$$

Da der numerische Aufwand zur Lösung des dreidimensionalen Reaktions-Diffusions-Problems in drei Dimensionen wesentlich höher ist, konnte hier nur ein Beispiel untersucht werden.

Die Auswertung des Wechselwirkungsterms $F_{\text{ww}}(d)$ zeigt nur sehr schwache oszillatorische Ausläufer, so dass der Stoßprozess durch die repulsive Wechselwirkung dominiert ist. Abbildung 4.9 a) zeigt die Trajektorien der beiden Objekte. Die Bewegungsrichtungen zu Beginn der Simulation wurden dabei durch Pfeile angedeutet. Die Anfangsbedingungen sind so gewählt, dass Spot 1 sich von hinten nach vorne, parallel zur x -Achse bewegt. Spot 2 läuft von links nach rechts, parallel zur y -Achse. Die z -Komponente der Anfangsbedingungen ist nicht identisch, so dass der Stoß nicht in einer Ebene abläuft. Die Ergebnisse der reduzierten Dynamik stimmen so gut mit der Numerik überein, dass die beiden Bahnen in der dreidimensionalen Darstellung kaum zu unterscheiden sind. Daher wurden in den

Teilbildern 4.9 b), c) und d) die Projektionen auf die Grundebenen des dreidimensionalen Grundgebiets abgebildet. Man erkennt eine leichte Divergenz der Bahnkurven nach dem Stoß.

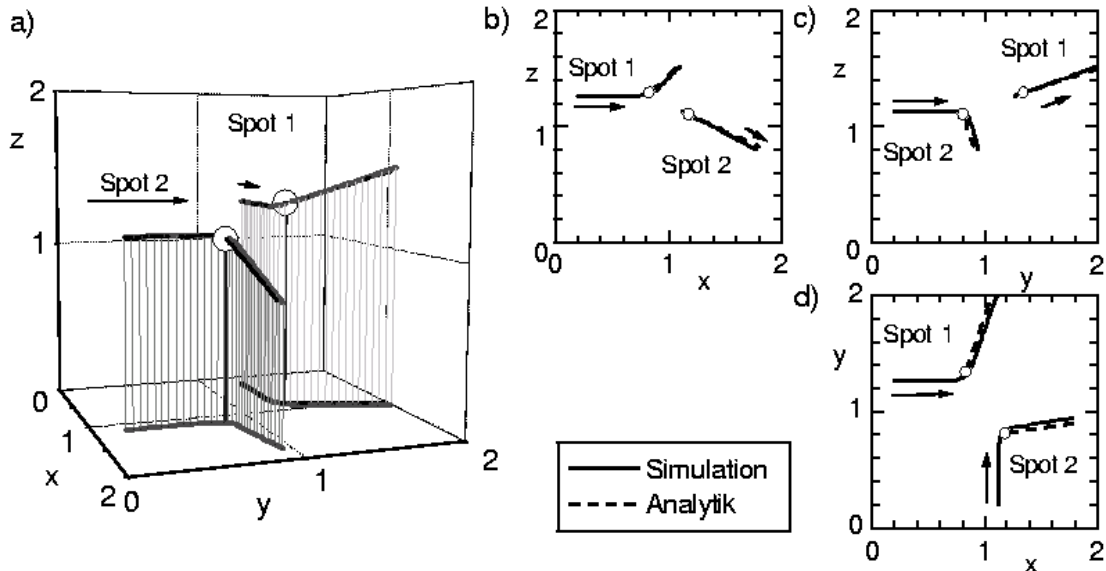


Abb. 4.9: a) Bahnkurven von zwei stoßenden Quasiteilchen in einem dreidimensionalen System: Die Abbildungen b), c) und d) zeigen jeweils die Projektionen der Bahnkurven auf die Grundflächen. Die Übereinstimmung zwischen dreidimensionaler Simulation und vereinfachter Dynamik ist gut zu erkennen. Parameter und Diskretisierung sind in (4.15) angegeben.

Für eine genauere Untersuchung des Stoßprozesses ist es nützlich andere Kenngrößen hinzuzuziehen, z. B. die Geschwindigkeit der Objekte oder ihren Abstand. In Abb. 4.10 a) ist der Abstand d der Spots beim Stoß als Funktion der Zeit eingezeichnet. Die Wechselwirkung setzt in der vereinfachten Dynamik bei etwas größeren Abständen ein. Die Abweichung ist allerdings gering (etwa 3 Prozent). In Abb. 4.10 b) sind die Geschwindigkeiten der beiden Spots im Verlauf des Stoßprozesses dargestellt. Die Ergebnisse der Numerik sind mit Fehlern von etwa 4 Prozent behaftet, weil die Ortsbestimmung aufgrund der geringen Auflösung nicht sehr genau war. Dennoch ist die gute Übereinstimmung zwischen Numerik und vereinfachter Numerik deutlich zu erkennen: Vor dem Stoß werden die Objekte abgebremst und ändern ihre Richtung. Spot 2 wird dabei aufgrund der Stoßgeometrie wesentlich stärker abgebremst. Nach dem Stoß führt die Abstoßung daher bei Spot eins sogar zu einer kurzzeitig gegenüber der Geschwindigkeit des freien Teilchens erhöhten Geschwindigkeit. Der Zeitpunkt $T = 60$ kurz nach dem Stoß wurde zur Verdeutlichung in Abb. 4.9 gekennzeichnet. Tatsächlich wird Spot 2 auch stärker abgelenkt. Die Ablenkung der Bewegungsrichtung beträgt für Teilchen 1 72 Grad und für Teilchen 2 83 Grad.

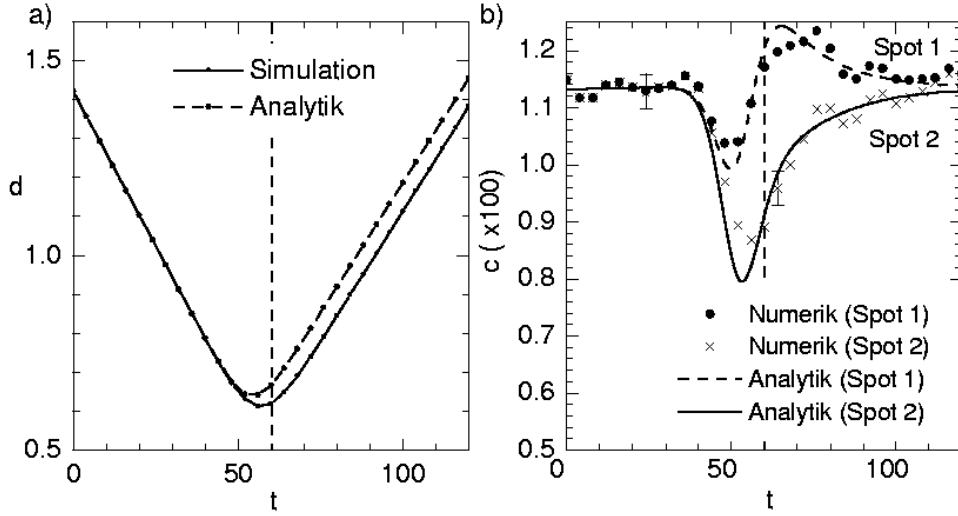


Abb. 4.10: a) Abstand d der beiden Spots als Funktion der Zeit b) Geschwindigkeiten der Spots als Funktion der Zeit: Die relativ großen Fehler in der Numerik sind eine Folge der geringen Ortsauflösung, die zu einer geringen Genauigkeit bei der Ortsbestimmung führt. Die Parameter entsprechen (4.15).

4.2.3 Die Dynamik von gekoppelten Teilchen

Eine wesentlich komplexere Dynamik kann man bei Lösungen beobachten, die, im Gegensatz zu den Beispielen aus den vorherigen Abschnitten, sehr stark ausgeprägte oscillatorische Ausläufer besitzen. In diesem Fall können sich gebundene Zustände mehrerer Einzelteilchen bilden, wenn die Attraktion zwischen zwei Lösungen stark genug wird. Die Zeitkonstante τ muss dafür niedrig gewählt werden, damit die Wechselwirkungskräfte die Eigendynamik der Spots dominieren. Dieser Fall führt nahe an den Bifurkationspunkt und daher zu sehr langsamen Zeitskalen, so dass der numerische Aufwand relativ hoch ist.

4.2.3.1 Die Wechselwirkung am Systemrand

Im Folgenden soll zunächst der vereinfachte Fall betrachtet werden, in dem sich ein halbes Filament am Rand des Grundgebiets befindet, wobei Neumann-Randbedingungen an allen Rändern verwendet wurden. Da Neumann-Ränder für die Verteilungen im Inneren des Grundgebiets wie Spiegel wirken, entspricht dies der Situation, in der zwei Filamente mit exakt antiparalleler Geschwindigkeit einen zentralen Stoß ausführen. Für die Parameter und die Diskretisierung der folgenden Simulationen wurde

$$\begin{aligned}
 D_u &= 1.1 \times 10^{-4}, \quad D_v = 0, \quad D_w = 9.64 \times 10^{-4}, \\
 \lambda &= 1.01, \quad \kappa_1 = -0.1, \quad \kappa_2 = 0, \quad \kappa_3 = 0.3, \quad \kappa_4 = 1, \\
 \theta &= 0, \quad \Delta t = 0.5, \quad \Delta x = 0.0065, \quad L = 1.25
 \end{aligned}
 \tag{4.16}$$

gewählt. Untersucht wurde die Dynamik des Filaments als Funktion der Inhibitorzeitkonstanten τ . In Abb. 4.11 a) ist die Verteilung des Aktivators $u(x, y)$ für diesen Fall dargestellt. Deutlich sind die stark oszillatorischen Ausläufer des Quasiteilchens zu erkennen. Die hintere und die rechte Begrenzungsfläche wirken wie Spiegel. Die Ränder zwingen dem System eine Symmetrie bezüglich der $y = 0$ - und $x = 0$ -Achsen auf, so dass keine Bewegung der Gesamtstruktur möglich ist. Fälle, bei denen sich etwa beide Filamente zusammen in eine Richtung bewegen, sind daher zunächst ausgeschlossen. In Abb. 4.11 b) ist der Wechselwirkungsterm $F_{\text{ww}}(d)$ für den untersuchten Parametersatz dargestellt. Die oszillatorischen Ausläufer klingen in diesem Beispiel relativ langsam ab. Es existiert daher im Gegensatz zu den bisher untersuchten Beispielen ein Abstandsintervall, in dem eine starke Attraktion vorherrscht.

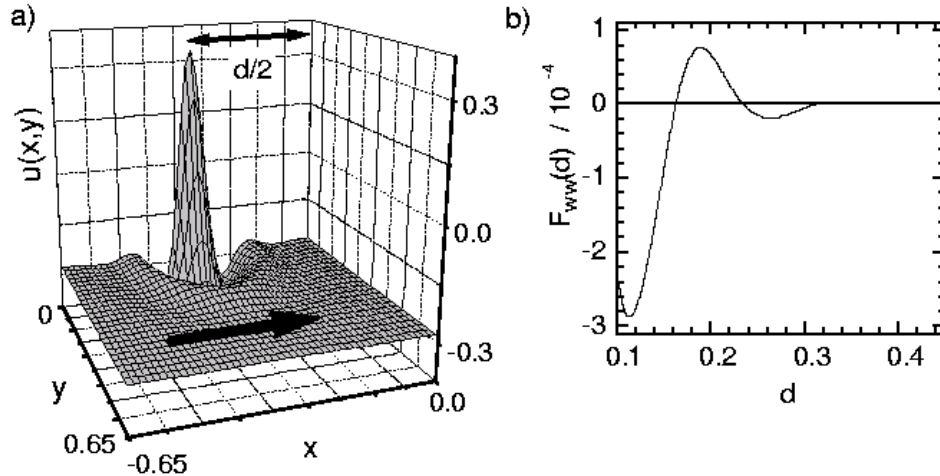


Abb. 4.11: a) Ausschnitt aus der Aktivatorverteilung $u(x, y)$: Die Ränder wirken als Spiegel auf die Verteilung. Die Größe d ist der Abstand vom Spiegelfilament. b) Wechselwirkungsterm $F_{\text{ww}}(d)$ für ein Filament bei den Parametern (4.16)

Bei der Wechselwirkung des Filaments mit dem Systemrand treten in Abhängigkeit des Parameters τ unterschiedliche Phänomene auf. In Abb. 4.12 sind drei charakteristische Fälle für $\tau = 3.4$, 3.48 und 3.506 dargestellt. Der Bifurkationspunkt liegt wegen $\kappa_3 = 0.3$ bei $\tau_{\text{crit}} = 3.\bar{3}$. Die obere Reihe, also die Abbildungen a), b) und c) sind aus der Simulation der partiellen Differentialgleichungen entstanden, die Bilder d), e) und f) sind die Vergleiche mit der analytischen Näherung. Dargestellt ist jeweils der Phasenraum der vereinfachten Dynamik, d. h. die Geschwindigkeit des Spots c_1 ist gegen den Abstand zum Spiegelfilament d aufgetragen.

Bei kleinen Werten von $\tau = 3.4$ in Abb. 4.12 a) und d) findet man einen stabilen Fokus im Phasenraum. Die Spots nähern sich mit der ungestörten Geschwindigkeit c_0 aneinander an. Bei $d < 0.16$ setzt die repulsive Wechselwirkung ein, so dass die Geschwindigkeit der Spots stark abnimmt und ihr Vorzeichen wechselt. Der Abstand vergrößert sich nun

wieder. Allerdings erreicht der Spot seine ursprüngliche Geschwindigkeit nicht mehr, sondern wird bei $d > 0.16$ vom nun attraktiven Wechselwirkungsterm wieder abgebremst. Es bildet sich ein gebundenes Filament-Paar. Ohne die Neumann-Ränder wäre diese Struktur instabil, da das Filament-Paar eine stationäre Struktur darstellt, die sich für $\tau > \tau_{\text{crit}}$ bewegen müsste. Bei etwas höheren Werten von $\tau = 3.48$ in Abb. 4.12 b) findet zwar immer noch ein Einfangprozess statt, allerdings ist der Fokus nicht mehr stabil, so dass sich ein Filament-Paar bildet, dessen Abstand oszilliert. Die reduzierte Dynamik in Abb. b) ergab allerdings in diesem Fall eine einfache Reflektion der Spots aneinander. Prinzipiell wäre der Effekt der Bildung oszillierender Filament-Paare allerdings auch in der reduzierten Dynamik möglich. Der Grund für das unterschiedliche Verhalten von Modell und Simulation liegt in diesem Fall in der Anregung der Atmungs-Mode während des Stoßes, die durch das Wechselwirkungsmodell nicht mehr beschrieben werden kann. Bei einer weiteren Erhöhung von τ findet sich sowohl in der vollen numerischen Simulation als auch in der reduzierten Dynamik eine einfache Reflektion. In Abb. 4.12 c) zeigt sich allerdings, dass in der Simulation tatsächlich mehr Freiheitsgrade aktiv sind, als im analytischen Zugang verwendet wurden, da in der Geschwindigkeit der auslaufenden Spots starke Oszillationen auftreten. Eine nähere Untersuchung dieses Effekts zeigt, dass er auf Oszillationen in der Amplitude des Filaments zurückzuführen ist. Neben der Propagator-Mode wird demnach bei der Wechselwirkung noch eine Atmungs-Mode mit $n = 0$ angeregt, die einen nur leicht negativen Realteil besitzt. Ein Vergleich mit der Stabilitätsanalyse des dreikomponentigen Gleichungssystems in Abschnitt 2.3.1 für den Fall $D_v = 0$ (Abb. 2.14) zeigt, dass schon bei τ wenig größer als τ_{crit} auch die Atmungs-Mode instabil wird, so dass diese Mode schon bei moderaten Werten von τ angeregt werden kann.

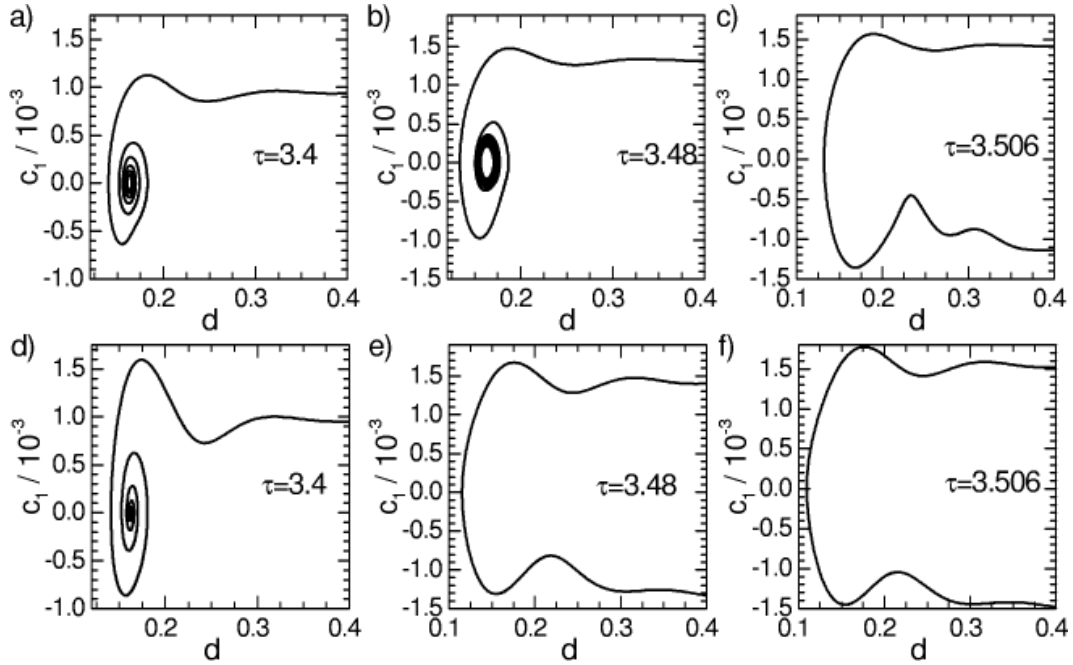


Abb. 4.12: Dargestellt sind die Trajektorien im Phasenraum (c_1, d) für die Wechselwirkung eines Spots mit dem Neumann-Rand für unterschiedliche τ . Die obere Reihe a), b) und c) enthält die Ergebnisse der vollen Numerik, die untere Reihe entstand aus der reduzierten Dynamik. Die verwendeten Parameter sind in (4.16) zusammengefasst.

Tatsächlich findet man bei einer weiteren Erhöhung von τ über 3.506 hinaus den Fall, dass das Filament am Rand nicht mehr reflektiert wird, sondern kurz nach der Reflektion vernichtet wird. Dieser Prozess ist auf eine sehr starke Anregung der Atmungs-Mode mit $n = 0$ zurückzuführen und ist in Abb. 4.13 dokumentiert. Dargestellt ist die auf die Gleichgewichtsmasse m_0 normierte Aktivatormasse m (vgl. A.102) des Spots zusammen mit dem Abstand d vom Spiegelfilament am Neumann-Rand. Im Verlauf der Annäherung an den Rand beobachtet man leichte Oszillationen der Masse, die dem attraktiven bzw. repulsiven Bereichen im Wechselwirkungsgesetz entsprechen. Bei der Reflektion wird das Filament so stark unterdrückt, dass es in der Folge vernichtet wird.

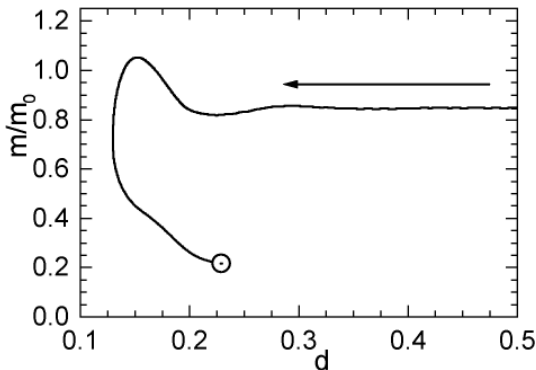


Abb. 4.13: Vernichtungsprozess des Filaments nach der Reflektion mit dem Rand bei $\tau = 3.52$: Dargestellt ist die auf die Gleichgewichtsmasse m_0 normierte Aktivatormasse m und der Abstand d vom Spiegelfilament. Durch die Wechselwirkung mit dem Stoßpartner bilden sich Oszillationen, die zur Vernichtung des Teilchens führen. Die übrigen Parameter sind in (4.16) angegeben.

Um die Ergebnisse aus den Simulationen des partiellen Differentialgleichungssystems besser einordnen zu können wird die Situation nun in der vereinfachten Dynamik (3.38)-(3.39) formuliert. Unter der Voraussetzung, dass sich das Teilchen von $p = -\infty$ zum Neumann-Rand bei $x = 0$ bewegt, erhält man die vereinfachte Dynamik in den Variablen $p = p_{1,x}$ und $\alpha = \alpha_{1,x}$

$$\dot{p} = \kappa_3 \alpha + F_{\text{ww}}(-2p) \quad (4.17)$$

$$\dot{\alpha} = \kappa_3^2 \left(\tau - \frac{1}{\kappa_3} \right) \alpha - \kappa_3 Q \alpha^3 + F_{\text{ww}}(-2p), \quad (4.18)$$

mit dem Formfaktor Q aus (3.45). In dieser Form lassen sich die Fixpunkte des Systems einfach bestimmen. Die Komponente α ergibt sich zu

$$\alpha_1 = 0 \text{ oder } \alpha_{2,3} = \pm \sqrt{\frac{\kappa_3 \tau - 2}{Q}}. \quad (4.19)$$

Die Punkte $\alpha_{2,3}$ existieren in der Nähe des Bifurkationspunktes $\tau = 1/\kappa_3$ nicht, so dass lediglich der Punkt $\alpha_1 = 0$ untersucht werden muss. Für ihn existieren verschiedene stationäre Positionen p_i , die durch die Gleichung $F_{\text{ww}}(-2p_i) = 0$ implizit gegeben sind. Die Stabilitätseigenschaften dieser Fixpunkte lassen sich durch die Linearisierung der Dynamik bestimmen. Die Jakobi-Matrix in den Punkten $(p_i, 0)$ lautet

$$L = \begin{pmatrix} -2F'_{\text{ww}} & \kappa_3 \\ -2F'_{\text{ww}} & \kappa_3(\kappa_3 \tau - 1) \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad F'_{\text{ww}} = F'_{\text{ww}}(-2p_i). \quad (4.20)$$

Die Eigenwerte von L in der Nähe des Bifurkationspunktes mit $\tau = 1/\kappa_3 + \Delta\tau$ ergeben sich zu

$$\lambda_{(1,2)} = \frac{1}{2} \Delta\tau \kappa_3^2 - F'_{\text{ww}} \pm \sqrt{\frac{\Delta\tau^2 \kappa_3^4}{4} + \kappa_3(\Delta\tau - 2)F'_{\text{ww}} + (F'_{\text{ww}})^2}. \quad (4.21)$$

Für die Wechselwirkungsbeziehung F_{ww} gilt im Allgemeinen $|F'_{\text{ww}}| \ll 2\kappa_3$, so dass die Eigenwerte im Fall $\Delta\tau = 0$ komplex sind. Daher bestimmt die Steigung der Funktion F_{ww} an den stationären Abständen die Stabilität des jeweiligen Fixpunktes für $\Delta\tau = 0$:

- $F'_{\text{ww}} > 0$: stabiler Fokus
- $F'_{\text{ww}} < 0$: Sattelpunkt

Für $\Delta\tau > 0$ kann der stabile Fokus allerdings durch eine Hopf-Bifurkation destabilisiert werden. Der kritische Punkt ist

$$\Delta\tau_{\text{Hopf}} = \frac{2F'_{\text{ww}}}{\kappa_3^2}. \quad (4.22)$$

Die Grenze der Hopf-Destabilisierung wurde nun mit Ergebnissen numerischer Simulationen des reduzierten Systems verglichen. Neben dem eigentlichen Bifurkationsparameter τ wurde auch die Abhängigkeit von einem weiteren, formalen Parameter $n = \{0, \dots, 8\}$ untersucht, der λ und κ_1 über die Beziehung

$$\lambda = 0.66 + 0.025n \quad \text{und} \quad \kappa_1 = -0.08 - 0.01n \quad (4.23)$$

beeinflusst. Die Variation der Parameter als Funktion von n wurde so gewählt, dass für einen möglichst großen Bereich von n weiterhin stationäre Lösungen für $\tau = 0$ existieren, wobei sich die Form der Lösungen allerdings ändert. Der Fall $n = 2$ entspricht den Parametern (4.16). Die Ergebnisse der Rechnungen sind in Abb. 4.14 dargestellt. Um die Dynamik untersuchen zu können, musste zunächst für jeden Parametersatz die stationäre Verteilung des Aktivators, der jeweilige Wechselwirkungsterm $F_{\text{ww}}(d)$ und der Formfaktor Q berechnet werden. Die Genauigkeit bei der Bestimmung des Formfaktors liegt bei etwa 2 Prozent. Die numerischen Ergebnisse aus Abb. 4.12 und einiger weiterer Simulationen bei anderen τ sind in dieser Abbildung ebenfalls eingetragen. Für jeden Parametersatz wurde der Hopf-Bifurkationspunkt aus der Steigung des Wechselwirkungsterms am Einrastpunkt bestimmt. Die Simulationen des reduzierten Gleichungssystems mit dem Fixpunkt als Startbedingung zeigen, dass es sich um eine superkritische Bifurkation handelt. Der Parameterbereich, in dem tatsächlich ein stabiler Grenzyklus existiert, ist allerdings sehr schmal. Die Existenzgrenze dieses Grenzyklus ist in Abb. 4.14 ebenfalls eingezeichnet. Verwendet man als Startbedingungen die Situation aus Abb. 4.12, dann ergibt sich nur im eingezeichneten Bereich $\tau < \tau_{\text{Einfang}}$ tatsächlich ein Doppelspot. Für $\tau > \tau_{\text{Einfang}}$ ergibt sich Reflektion. Anders als in der Numerik der partiellen Differentialgleichungen ist es demnach im reduzierten Modell nicht möglich, einen Teilcheneinfang zu beobachten, bei dem sich kein stationäres, sondern ein oszillierendes Molekül bildet. Dieser qualitative Unterschied ist darauf zurückzuführen, dass die Anregung einer Atmungs-Mode im Modell nicht berücksichtigt wurden. Das Auftreten oszillierender Doppelfilamente in der Numerik stimmt allerdings im Rahmen der numerischen Fehler mit der analytisch vorhergesagten Hopf-Bifurkation überein. Die Abhängigkeit der Bifurkationsgrenzen von n spiegelt die Änderung der Filamentform wieder. Für wachsendes n begibt man sich in einen Parameterbereich mit weniger ausgeprägten oszillatorischen Ausläufern. Die kritischen Zeitkonstanten, die notwendig sind, um einen gebundenen Zwei-Spot-Zustand zu destabilisieren, sind daher niedriger.

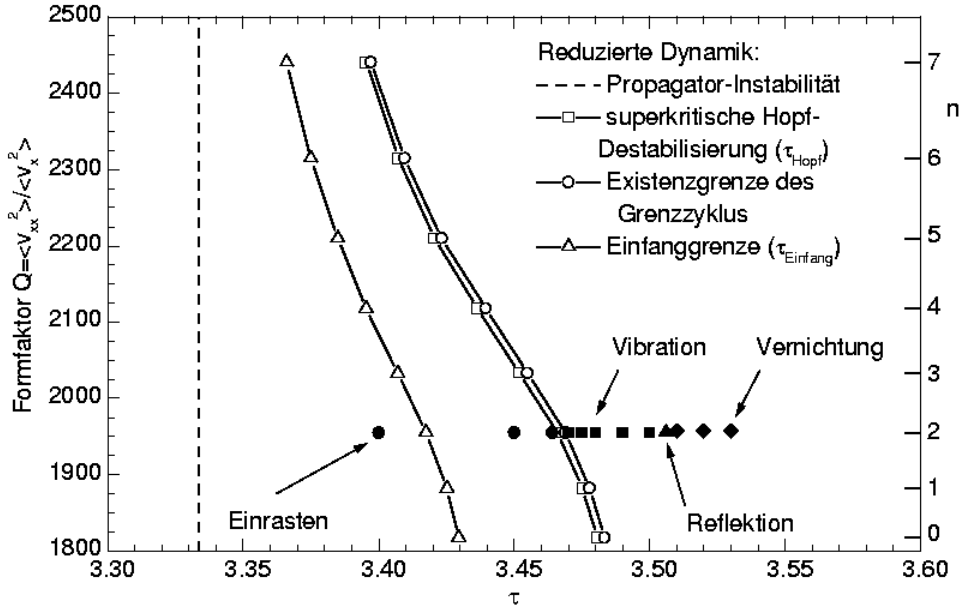


Abb. 4.14: Bifurkationsdiagramm für den Parameterraum (τ, n) : Eingezeichnet sind für die vereinfachte Numerik die superkritische Hopf-Bifurkation des ersten Einrastpunktes, die Existenzgrenze für den Grenzyklus, sowie die Einfanggrenze, unterhalb der sich bei der Annäherung aus großen Entfernungen Doppelspots bilden können. Zum Vergleich sind die Ergebnisse der vollen Numerik nach einem zentralen Stoß eingezeichnet. Die verwendeten Parameter sind in (4.16) und (4.23) aufgeführt.

4.2.3.2 Frei bewegte Doppelfilamente

Im Vergleich zu den Untersuchungen im vorangegangenen Abschnitt steigt die Zahl der Freiheitsgrade auch in der reduzierten Numerik stark an, wenn der Doppelspot nicht mehr durch die Randbedingungen fixiert ist. Während der Phasenraum im bisher untersuchten Fall durch den Abstand vom Rand und der Anregung der Propagator-Mode aufgespannt wurde, so sind es nun acht Freiheitsgrade, die untersucht werden müssen. Jeder Spot besitzt zwei translatorische und zwei innere Freiheitsgrade und es existieren keine Symmetriebedingungen mehr, die ihre Zahl weiter einschränkt. Beliebige Stoßprozesse sind daher allgemein schwer zu untersuchen, der Fall eines bewegten Doppelfilaments lässt sich allerdings behandeln.

Das Problem lässt sich etwas vereinfachen, indem das reduzierte Differentialgleichungssystem (3.38)-(3.39) in Schwerpunktskoordinaten überführt wird. Man ersetzt

$$p_{1,2} = \bar{p} \mp \frac{1}{2} \hat{p}, \quad \alpha_{1,2} = \bar{\alpha} \mp \frac{1}{2} \hat{\alpha}. \quad (4.24)$$

Mit dieser Definition ist \bar{p} der Mittelpunkt des Moleküls, $\bar{\alpha}$ die gemittelte Propagator-Mode und damit, bis auf leichte Störungen durch den Wechselwirkungsterm, proportional zur

Geschwindigkeit. Für die Dynamik des Doppelspots ergibt sich in den neuen Koordinaten

$$\dot{\bar{p}} = \kappa_3 \bar{\alpha}, \quad (4.25)$$

$$\dot{\hat{p}} = \kappa_3 \hat{\alpha} - 2F_{\text{ww}}(|\hat{p}|)\hat{p}, \quad (4.26)$$

$$\dot{\bar{\alpha}} = \varepsilon \bar{\alpha} - \kappa_3 Q \left(\left(\bar{\alpha}^2 + \left(\frac{\hat{\alpha}}{2} \right)^2 \right) \bar{\alpha} + \frac{1}{2} (\bar{\alpha} \cdot \hat{\alpha}) \hat{\alpha} \right), \quad (4.27)$$

$$\dot{\hat{\alpha}} = \varepsilon \hat{\alpha} - \kappa_3 Q \left(\left(\bar{\alpha}^2 + \left(\frac{\hat{\alpha}}{2} \right)^2 \right) \hat{\alpha} + 2(\bar{\alpha} \cdot \hat{\alpha}) \bar{\alpha} \right) - 2F_{\text{ww}}(|\hat{p}|)\hat{p} \quad (4.28)$$

mit dem normierten Bifurkationsparameter $\varepsilon = \kappa_3^2(\tau - 1/\kappa_3)$. Der Schwerpunkt des Doppelspots \bar{p} kann in der folgenden Stabilitätsanalyse vernachlässigt werden, da er nicht auf die anderen Größen zurückwirkt. Für den Einfluss des Wechselwirkungsterms ist jeweils nur der relative Abstand \hat{p} zwischen den Spots entscheidend.

Es soll nun die Stabilität eines Doppelspots untersucht werden, der sich gemäß Abb. 4.15 von links nach rechts bewegt. Die Verbindungsachse \hat{p} kann beliebig gegen die Bewegungsrichtung gedreht sein und der Abstand der Einzelspots voneinander sei so gewählt, dass $F_{\text{ww}}(|\hat{p}|) = 0$ gilt. Außerdem ist $\hat{\alpha} = 0$, d. h. beide Spots bewegen sich in exakt die gleiche Richtung. Durch Einsetzen dieser Voraussetzungen kann nachgewiesen werden, dass diese Situation einen Fixpunkt der Dynamik (4.26)-(4.28) darstellt.

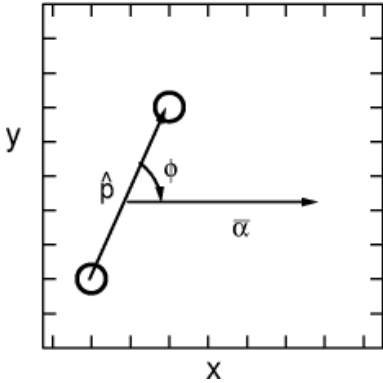


Abb. 4.15: Geometrische Situation im Fall eines frei bewegten Doppelspots: Der Abstand zwischen den Teilchen entspricht einem der Einrastabstände \hat{p} mit $F_{\text{ww}}(\hat{p}) = 0$. Die Orientierung ϕ ist beliebig, die Bewegungsrichtung ist parallel zur x -Achse.

Zur Überprüfung der Stabilität des bewegten Doppelspots ist es notwendig, die Jakobi-Matrix der Dynamik aufzustellen und deren Eigenwerte bzw. Eigenvektoren zu bestimmen. Analytisch ist das nur in den Spezialfällen $\phi = 0$ Grad und $\phi = 90$ Grad möglich. Eine numerische Eigenwertbestimmung zeigt allerdings, dass die Doppelspot-Konfiguration für die Parameter (4.16) für alle ϕ und τ stabil ist. Es existieren allerdings immer zwei neutrale Eigenmoden, die einer Drehung der Bewegungsrichtung $\bar{\alpha}$ und einer Drehung des Doppelspots \hat{p} entsprechen. Da das reduzierte Gleichungssystem aus einer Störungsreihe entstanden ist, die nach der dritten Ordnung abgebrochen wurde, ist nicht klar, ob die neutralen Eigenmoden auch in höheren Ordnungen neutral bleiben. Es wurden nun verschiedene Simulationen der Dynamik von Doppelspots durchgeführt. Als Parameter wurde wieder der Parametersatz (4.16) mit unterschiedlichen τ gewählt. Alle Rechnungen zeigen

qualitativ ein etwas anderes Bild, als aus den analytischen Überlegungen zu erwarten war: Der Doppelspot bewegt sich wie vorhergesagt ohne schnelle Änderung der Orientierung und unabhängig von τ wurden keine Oszillationen im Abstand der beiden Spots voneinander beobachtet. Auf einer langsameren Zeitskala kommt es jedoch zu einer Drehung, d. h. der Winkel ϕ und die Bewegungsrichtung ändern sich allmählich. Die Dynamik dieser beiden Größen aus einer Simulation bei $\tau = 3.4$ ist in Abb. 4.16 a) dargestellt. In der Abbildung erkennt man zunächst für $T < 1000$ eine Ausrichtung der Molekülachse bis fast in die Bewegungsrichtung des Objekts. Sowohl die Achse des Moleküls als auch die Bewegungsrichtung oszillieren dann auf einer längeren Zeitskala. Im Endzustand ist die Achsenrichtung mit der Bewegungsrichtung identisch, d. h. der Doppelspot bewegt sich in Richtung seiner Längsachse. Für $t \rightarrow \infty$ erfolgt die Bewegung entlang der Gitterdiagonalen in Richtung 225 Grad. Während das Einrasten von Molekülachse und Bewegungsrichtung aufeinander auf nichtlineare Beiträge höherer Ordnung in der Störungsrechnung zurückgeführt werden kann, ist die Bewegung entlang der Gitterdiagonalen ein Diskretisierungseffekt (vgl. 4.3.3).

Da innere Freiheitsgrade und insbesondere Abstandsschwankungen der Filamente bei den Simulationen bei $\tau = 3.4$ nicht angeregt wurden, bietet es sich an, das Doppelfilament als einzelne, asymmetrische stationäre Lösung aufzufassen und die Ergebnisse aus Abschnitt 3.2.3 anzuwenden. Dazu müssen zunächst die Koeffizienten Q_i und P_i bestimmt werden. Mit den Filamentpositionen $(-d/2, 0)$ und $(d/2, 0)$ ergibt sich mit einer Genauigkeit von etwa 3 Prozent:

$$\begin{aligned} Q_{xx} &= -1900, Q_{xy} = -1910, Q_{x\phi} = -12.5, P_x = -0.0219, \\ Q_{yy} &= -1925, Q_{yx} = -2050, Q_{y\phi} = -39.0, P_y = -0.0192, \\ Q_{\phi\phi} &= -19.0, Q_{\phi x} = -1960, Q_{\phi y} = -5825, P_\phi = 3.17. \end{aligned} \quad (4.29)$$

Mit Hilfe der Gleichungen für asymmetrische stationäre Strukturen lässt sich nun eine Simulation der Dynamik durchführen. Das Gleichungssystem (3.52) – (3.57) wurde allerdings für $\phi = 0$ hergeleitet, so dass der jeweilige dynamische Zustand erst durch eine Drehung auf den Fall $\phi = 0$ zurückgeführt werden muss. Das bedeutet, dass p und α um den Winkel $-\phi$ gedreht werden müssen, bevor die Dynamik mit den reduzierten Gleichungen berechnet werden kann. Die berechneten Größen müssen danach wieder in das alte System transformiert werden.

Die Ergebnisse einer Simulation der reduzierten Dynamik sind in Abb. 4.16 b) dargestellt. Man erkennt, dass sowohl das schnelle Einrasten der Molekülachse auf die Bewegungsrichtung als auch die folgenden Oszillationen wiedergegeben werden. Die Drehung der Bewegungsrichtung aufgrund des Gittereinflusses wird in der reduzierten Dynamik nicht erfasst bzw. müsste durch räumliche Inhomogenitäten simuliert werden (vgl. 4.3.3).

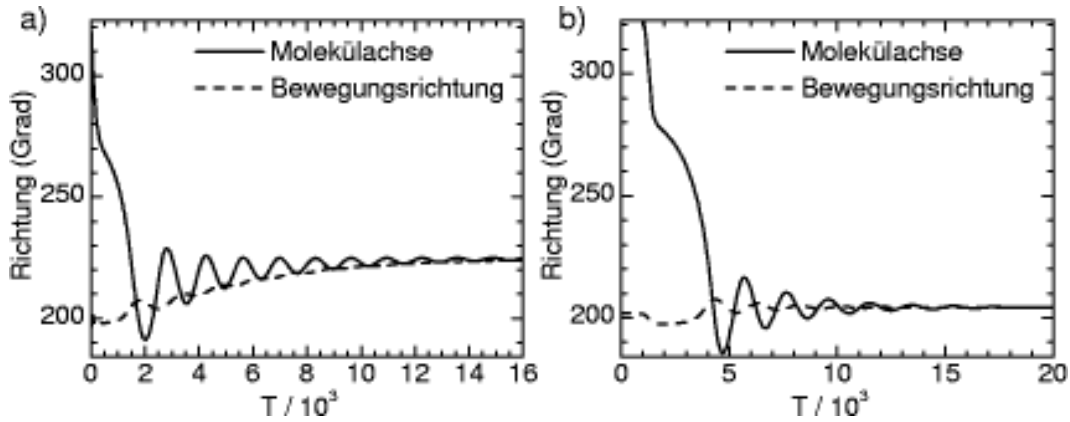


Abb. 4.16: Dargestellt ist die Orientierung der Molekülachse und der Bewegungsrichtung eines frei bewegten Doppelspots als Funktion der Zeit für $\tau = 3.4$. Die anderen Parameter sind wie in (4.16). In Abb. a) sind die Ergebnisse der numerischen Simulation dargestellt. Abb. b) enthält die Ergebnisse aus der Simulation der reduzierten Dynamik.

Neben der gleichförmigen Bewegung in Richtung der Längsachse sind noch zwei weitere Lösungen der reduzierten Dynamik denkbar: die Bewegung in Richtung der Querachse sowie die Rotation. Eine allgemeine analytische Überprüfung der Stabilität dieser Bewegungen in x -, y - oder ϕ -Richtung wurde aufgrund der Komplexität des Gleichungssystems (3.52)-(3.57) nicht durchgeführt. Eine numerische Eigenwertbestimmung zeigt allerdings, dass die Querbewegung instabil und die Längsbewegung stabil für alle $\tau \in [3.33, 5]$ ist. Durch direkte numerische Simulation der reduzierten Dynamik findet man darüber hinaus, dass die Rotation des Doppelfilaments für $\tau < 3.9 \pm 0.1$ stabil ist. Tatsächlich konnte die Existenz eines stabilen, rotierenden Doppelfilaments durch numerische Simulation für die Parameter (4.16) und $\tau = 3.4$ bestätigt werden. Der Endzustand dieser Rechnung ist in Abb. 4.17 a) dargestellt. Zum Vergleich zeigt Abb. 4.17 b) den bewegten Doppelspot. Die Bewegungsrichtung der Spots wird durch die Propagatormode definiert, die durch die Differenz $u - v$ als Graustufenbild sichtbar gemacht wurde. Der Abstand zwischen den beiden Spots ist im Fall a) mit $d = 0.170$ gegenüber Fall b) mit $d = 0.160$ leicht vergrößert und fällt daher nicht mit den Nullstellen des Wechselwirkungsterms zusammen. Für das rotierende Doppelfilament wird eine attraktive Kraft benötigt, um die Spots auf der Kreisbahn zu halten.

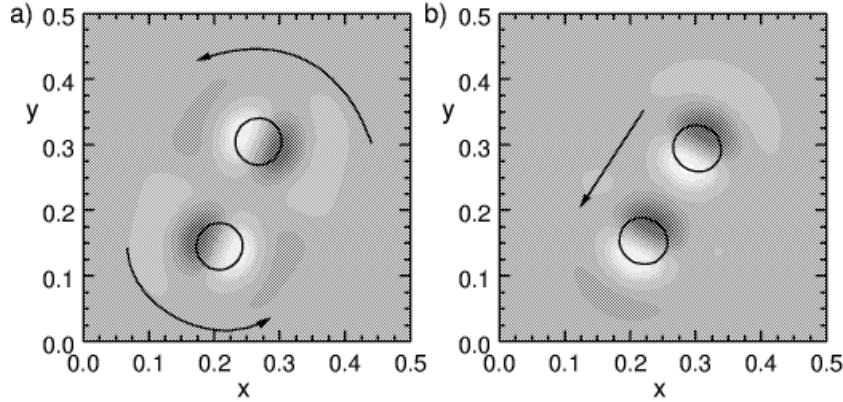


Abb. 4.17: Doppelspots aus der Simulation der vollen Numerik: Dargestellt sind jeweils die Aktivator $u = 0$ -Isolinie, sowie ein Graustufenbild der Propagator-Mode, also der Differenz $u - v$. Abb. a) zeigt ein rotierendes Doppelfilament, Abb. b) ein gleichförmig bewegtes Doppelfilament. Es wurden $\tau = 3.4$ und die Parameter aus (4.16) verwendet.

4.2.3.3 Die Bildungswahrscheinlichkeit für gekoppelte Filamente

Bei der Streuung zweier Teilchen kann aufgrund der Ergebnisse der vorangegangenen Abschnitte bei den Parametern (4.16) mehr erwartet werden als eine einfache Streuung. Bei geeignet gewählten Anfangsbedingungen ist auch die Bildung von rotierenden bzw. bewegten Doppelfilamenten möglich. Die reduzierte Dynamik erlaubt nun mit geringem numerischen Aufwand alle möglichen Streukonfigurationen zu erfassen.

Für die folgenden Betrachtungen geht man von zwei Quasiteilchen im Abstand $d = 0.8$ aus, die sich ausgehend von den Positionen $p_1 = (-d/2, 0)$ und $p_2 = (d/2, 0)$ in die Richtungen ϕ_1 bzw. ϕ_2 bewegen. Ein Winkel $\phi = 0$ entspricht einer Bewegung nach rechts. In Abb. 4.18 wurde für alle Streuwinkel der Endzustand nach dem Stoß dargestellt. Zu einer Annäherung und damit zu einem Wechselwirkungsprozess kann es allerdings nur kommen, falls die Winkel die Einschränkungen $\min(\phi_1, 2\pi - \phi_1) < \phi_2 < \max(\phi_1, 2\pi - \phi_1)$ erfüllen. In dem mit N bezeichneten Gebiet findet daher kein Stoßprozess statt. Darüber hinaus genügt es den Fall $\phi_1 < \pi$ zu betrachten, da die Ergebnisse symmetrisch bezüglich $\phi_1 = \pi$ sind. Im Bereich S entfernen sich die Teilchen nach dem Stoß wieder voneinander, bei T_i und R_i kommt es zur Bildung bewegter bzw. rotierender Doppelfilamente. Der Index i bezeichnet den Abstand zwischen den Einzelfilamenten in der Endkonfiguration. Für die bewegten Doppelspots T_i sind die Abstände $d_i = 0.163, 0.308, 0.453, \dots$ über die Nullstellen des Wechselwirkungsterm $F_{\text{ww}}(d_i) = 0$ zu bestimmen. Im Fall der rotierenden Objekte sind diese Abstände leicht vergrößert, da die Einzelfilamente auf den Kreisbahnen gehalten werden müssen. Aus diesem Grund ist die Bildung von $R_{2,3,\dots}$ -Doppelfilamenten nicht möglich: die Bindung durch die Wechselwirkungsterme ist zu schwach. Zum besseren Verständnis sind im Streudiagramm 4.18 noch die Extremallinien der Hilfsgrößen $P = \sqrt{(\cos \phi_1 + \cos \phi_2)^2 + (\sin \phi_1 + \sin \phi_2)^2}$ und $L = \sin \phi_1 - \sin \phi_2$ eingezeichnet. Die-

se entsprechen der Geschwindigkeit und Drehgeschwindigkeit der Gesamtstruktur in der Ausgangssituation. Die Bildung von gebundenen Strukturen findet bevorzugt in der Nähe der L_{\min} -Linien statt. Bei Annäherung an die Grenze P_{\max} , die parallelen Geschwindigkeitsvektoren entspricht, können sich bewegte Doppelfilamente mit immer größerem Bindungsabstand bilden, weil durch die geringen Relativgeschwindigkeiten nur ein minimaler Einfluss des Wechselwirkungsterms zur Stabilisierung notwendig ist.

Mit solchen Streudiagrammen wäre es prinzipiell möglich die Bildungswahrscheinlichkeiten für verschiedene Strukturen in einem dünnen „Filamentgas“ zu berechnen. Um zu einer Beschreibung zu gelangen müssten dann allerdings auch die Stöße zwischen Zweier- und Dreier-Clustern und einzelnen Filamenten berücksichtigt werden, so dass auch die Zerstörung von Strukturen und damit z. B. das Verhältnis von Doppel- zu Einzelfilamenten im Gleichgewicht bestimmt werden kann.

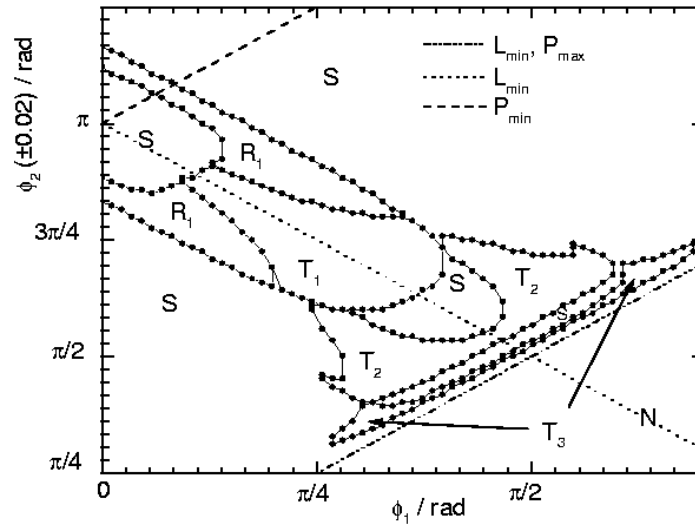


Abb. 4.18: In Abhängigkeit von den Anfangsbedingungen kann es nach einem Stoß zur Bildung von bewegten (T_i) oder rotierenden (R_i) Doppelfilamenten kommen. Im Gebiet N führen die Anfangsbedingungen nicht zu einer Annäherung, im Gebiet S entfernen sich die zwei Objekte nach dem Stoß wieder voneinander. Das Diagramm entstand aus einer Simulation der reduzierten Dynamik mit den Parametern (4.16) und $\tau = 3.43$.

4.2.4 Teilchenverschmelzung und Vernichtung

In den bisherigen Untersuchungen wurden die bewegten Lösungen jeweils als unzerstörbare und, bis auf die Propagator-Mode, unverformbare Grundbausteine der Dynamik betrachtet. Tatsächlich hängt es allerdings stark vom betrachteten Parameterbereich ab, ob die Quasiteilchen stabil sind bzw. wie empfindlich sie auf äußere Störungen, wie die Wechselwirkung mit anderen Lösungen oder Inhomogenitäten, reagieren. Die Aktivatorverteilungen der betrachteten Quasiteilchen besitzen, unabhängig davon, ob man sich im analytischen Grenzfall befindet, und unabhängig davon, ob rein repulsive oder oszillatorische Wechselwirkung vorliegt, in nächster Umgebung einen Bereich erhöhter Konzentration des Inhibitors w . Daher findet man bei großer Annäherung stets repulsives Verhalten. Da der repulsive Effekt bei steilen Inhibitorverteilungen stärker ist, findet man bei sehr starker Diffusion des schnellen Inhibitors häufig den Fall, dass sich die Teilchen sehr nahe kommen, so dass sie ihren Quasiteilchencharakter verlieren und die Dynamik nicht mehr analytisch vorhergesagt werden kann.

In Abb. 4.19 ist das Ergebnis von numerischen Simulationen des dreikomponentigen Systems für die Parameter

$$\begin{aligned} D_u &= 1.55 \times 10^{-4}, D_v = 1.93 \times 10^{-4}, D_w = 0.05, \\ \lambda &= 2, \kappa_1 = -8.71, \kappa_2 = 0, \kappa_3 = 8.45, \kappa_4 = 1, \\ \theta &= 0, \tau = 48, \Delta t = 1, \Delta x = 0.01, L = 1.3 \end{aligned} \tag{4.30}$$

dargestellt. In Abb. 4.19 a) nähern sich zwei bewegte Quasiteilchen leicht gegeneinander versetzt mit antiparalleler Geschwindigkeit aneinander an. Die starke Diffusion des schnellen Inhibitors führt zu einem flachen Inhibitorfeld w . Der langsame Inhibitor v bleibt sehr weit hinter dem Aktivator zurück. Es kommt zu einer Verschmelzung der Aktivatorzentren. Da eine weitere Ausbreitung nach vorne nicht mehr möglich ist, weicht der Aktivator in Richtung der minimalen Inhibitorverteilung, also schräg nach vorne aus, so dass es in der Folge wieder zur Bildung von zwei neuen Spots kommt, die schon nach kurzer Zeit auf ihre ursprüngliche Form relaxieren. In Abb. 4.19 b) wurde bei gleichen Parametern ein schräger Stoßwinkel durch die Anfangsbedingungen vorgegeben. Dadurch ist nach der Verschmelzung lediglich nach unten eine weitere Ausbreitung des Aktivators möglich. Es entsteht ein einzelnes neues Teilchen. Eine ähnliche Simulation wurde auch von Krischer [44] in einem zweikomponentigen System mit globaler Rückkopplung durchgeführt. Aufgrund der globalen Rückkopplung war das resultierende Filament in diesem Fall größer als die Ursprungsfilamente. In den hier vorgestellten Beispielen ohne globale Rückkopplung ist die Größe der Objekte unabhängig von der Teilchenzahl.

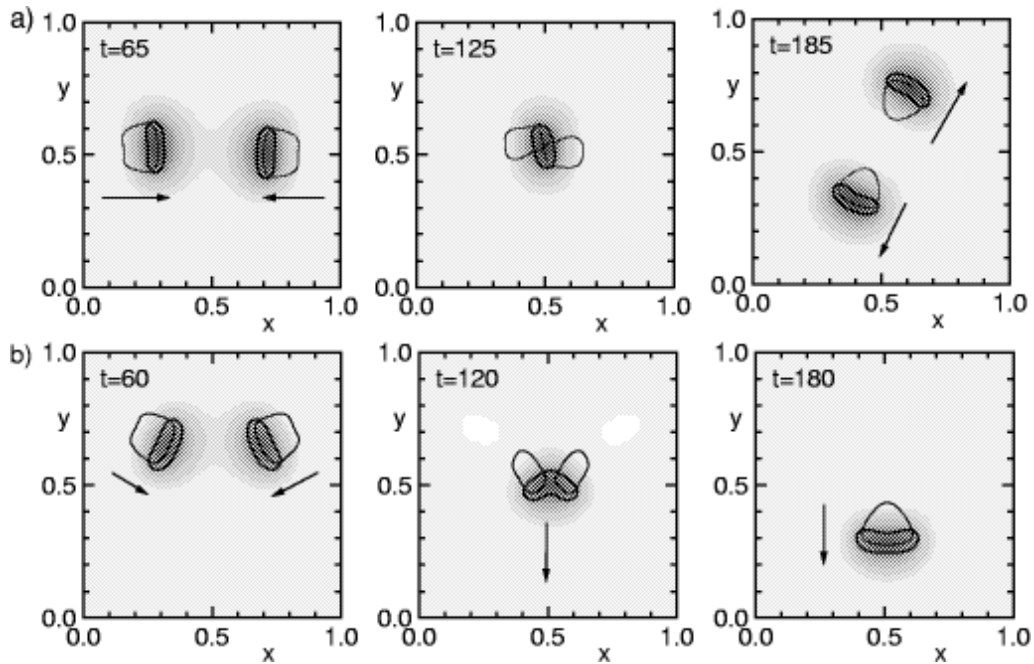


Abb. 4.19: Dargestellt sind die Verteilungen u , v und w im Verlauf eines Stoßprozesses mit kurzzeitiger Verschmelzung der Aktivatorverteilungen für die Parameter (4.30). Eingezeichnet sind die Halbwerts-Isolinien von u (dick) und v (dünn), sowie ein Grauwertbild des schnellen Inhibitors w .

Wird die Geschwindigkeit des langsamen Inhibitors erhöht und damit die Struktur weiter verlangsamt, so gelingt es dem Aktivator nicht mehr seitlich auszubrechen und es kommt zur Zerstörung der Struktur. Für die Parameter (4.30) tritt dieser Fall bei $\tau \approx 20$ auf. In Abb. 4.20 a) wurde ein solcher Fall für die Parameter aus (4.14) für $\tau = 1.1$ simuliert. Dargestellt sind die drei Komponenten u , v und w entlang der $y = 0$ -Achse aus der Simulation eines zentralen Stoßes mit Neumann-Rändern als Funktion der Zeit. Der Aktivator verschmilzt zunächst zu einem einzelnen Peak, wird dann aber vernichtet. Verringert man τ noch weiter, so wird die Struktur schon vor der Verschmelzung zerstört, da die repulsive Wechselwirkung stark ist. Ergebnisse einer zweidimensionalen numerischen Simulation bei $\tau = 1.03$ sind in Abb. 4.20 b) zusammengefasst. Eine weitere Absenkung von τ führt in Abb. c) bei $\tau = 1.015$ in Übereinstimmung mit den Ergebnissen des Wechselwirkungsmodells zu einer Reflektion an der $x = 1.5$ -Achse. Für die Parameter aus (4.30) konnte der Fall einer einfachen Reflektion nicht gefunden werden, da der Puls bei weiterer Absenkung von τ nicht mehr existiert. Umgekehrt konnte die Situation einer Teilchenverschmelzung mit nachfolgender Teilung für die Parameter (4.14) nicht mehr untersucht werden, da der Puls bei höherem τ instabil wird.

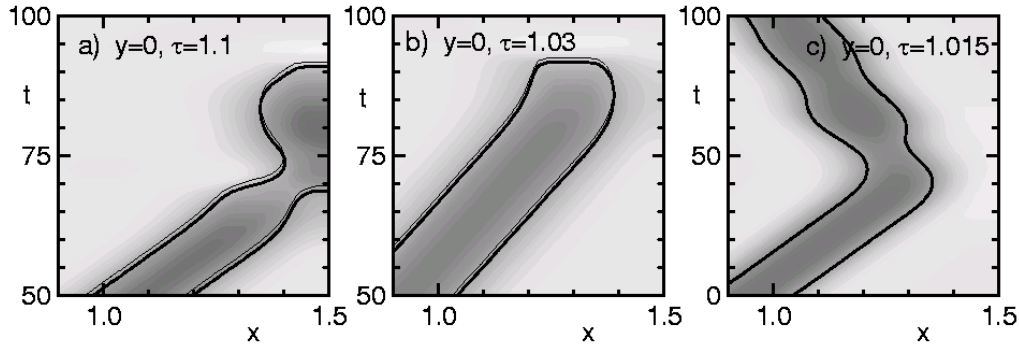


Abb. 4.20: Verlöschen zweier Filamente beim Stoß: Dargestellt ist jeweils ein Schnitt bei $y = 0$ für einen zentralen Stoßprozess als Funktion der Zeit. a) Bei $\tau = 1.1$ verschmelzen die Aktivatorverteilungen vor dem Stoß. b) Bei $\tau = 1.03$ werden die Filamente schon vor der Verschmelzung vernichtet und für $\tau = 1.015$ in c) ergibt sich eine Reflektion. Dargestellt sind die Verteilungen u , v und w auf der Stoßachse und als Funktion der Zeit für die Parameter (4.14) auf einem $L = 1.5$ Grundgebiet. Eingezeichnet sind die Halbwerts-Isolinien von u (dick) und v (dünn), sowie ein Grauwertbild des schnellen Inhibitors w . In c) liegen die Isolinien von u und v fast aufeinander und sind daher nicht zu unterscheiden. Als Ränder wurden Neumann-Ränder benutzt.

Einen Hinweis darauf, ob ein Filament beim zentralen Stoß reflektiert wird wie z. B. in Abschnitt 4.2.1 oder ob es vernichtet wird, gibt die Existenz einer stationären filamentären Verteilung bei den untersuchten Parametern. Bei einem zentralen Stoß mit Reflektion muss das Filament zwangsläufig kurzzeitig zum Stillstand gelangen. Existiert keine stationäre Verteilung, so ist die Wahrscheinlichkeit hoch, dass es zu einer Vernichtung der Struktur kommt. In welcher Weise die Stoßprozesse ablaufen, hängt außerdem stark von den Stoßparametern ab. Treffen die Strukturen nicht zentral aufeinander, dann ist die Ablenkung oft stark genug, um eine Verschmelzung oder Vernichtung der Verteilungen als Folge einer zu starken Annäherung zu verhindern. Auch kann der Stoß asymmetrisch gestaltet werden, so dass nur eines der Teilchen vernichtet wird, oder nach einer Verschmelzung nur ein bewegtes Quasiteilchen zurückbleibt. In Abb. 4.21 sind die Ergebnisse einer Simulation dargestellt, bei der ausgehend von einem zentralen Stoß der Stoßparameter d systematisch vergrößert wurde. Die Linien stellen die Trajektorien zu Stoßprozessen mit unterschiedlichem d dar. Das hinterlegte Graustufenbild ist die Startverteilung des Aktivators u einer Simulation. Bei der Annäherung kommt es zu einer repulsiven Wechselwirkung über die Ausläufer des schnellen Inhibitors w . Bei zu starker Verringerung der Pulsgeschwindigkeiten kommt es zur Vernichtung der Filamente. Im Innern des Diagramms ist die Abhängigkeit des Streuwinkels vom Stoßparameter dargestellt. Eine Verringerung von d führt zunächst zu größeren Streuwinkeln, bis die Schwelle zur Pulsvernichtung bei $d = 0.08 \pm 0.01$ überschritten wird.

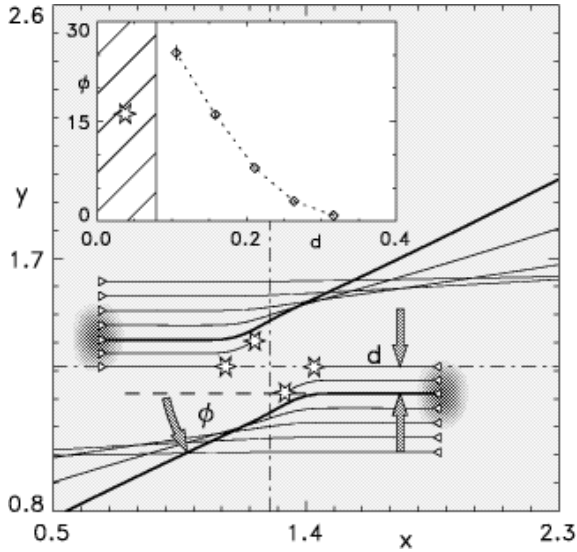


Abb. 4.21: Stoßprozess zwischen zwei Quasiteilchen bei variierendem Stoßparameter d : Beim nahezu zentralen Stoß kommt es zur Vernichtung der Teilchen, bei einem größeren d ergibt sich eine Ablenkung. Das Diagramm im Innern zeigt die Abhängigkeit des Streuwinkels Φ vom Stoßparameter d . Für $d < 0.08$ findet eine Teilchenvernichtung statt. Dieser Bereich wurde durch einen Stern gekennzeichnet. Die Parameter sind identisch mit denen aus Abbildung 4.6. Allerdings wurde das Grundgebiet auf $L = 2.6 \times 2.6$ vergrößert und für die Diskretisierung galt $\Delta x = 0.018$ und $\Delta t = 0.014$.

4.2.5 Teilchenverschmelzung in dreidimensionalen Systemen

Teilchenverschmelzung und Vernichtung lässt sich auch auf dreidimensionalen Grundgebieten beobachten. Liehr [49] führte die Simulation von zentralen Stößen für die Parameter bzw. Diskretisierung

$$\begin{aligned}
 D_u &= 1.5 \times 10^{-4}, \quad D_v = 1.86 \times 10^{-4}, \quad D_w = 9.6 \times 10^{-3}, \\
 \lambda &= 2, \quad \kappa_1 = -6.92, \quad \kappa_2 = 0, \quad \kappa_3 = 8.5, \quad \kappa_4 = 1, \\
 \theta &= 1, \quad \tau = 48, \quad \Delta x = 0.00833, \quad \Delta t = 0.002
 \end{aligned}
 \tag{4.31}$$

durch. In Abb. 4.22 a)-e) sind die Isoflächen des langsamen Inhibitors grün und die des Aktivators rot für verschiedene Zeiten t eingezeichnet. Die beiden Quasiteilchen nähern sich von rechts und links aneinander an. Bei $t = 52$ verschmelzen die Aktivatoren der beiden Spots zu einem transienten Zwischenzustand. Anders als in zwei Raumdimensionen sind in diesem Moment nicht nur zwei Raumrichtungen durch eine besonders niedrige InhibitorKonzentration ausgezeichnet, sondern alle Richtungen senkrecht zur Stoßachse. Der Aktivator breitet sich daher zunächst in alle Richtungen gleichzeitig aus, bis durch eine Symmetriebrechung zwei Richtungen selektiert werden, so dass in Analogie zum zweidimensionalen Fall zwei neue Spots entstehen. Prinzipiell wäre aber bei noch langsameren Inhibitorzeitskalen bzw. bei stärkerer Erregbarkeit des Mediums auch denkbar, dass sich der Aktivator erst später teilt und drei oder noch mehr Filamente entstehen. Dieser Fall konnte allerdings bisher nicht beobachtet werden.

In Abb. 4.22 f) ist das Aktivatorintegral für den Stoßprozess eingezeichnet. Das Ausgangsniveau $N = 2$ entspricht dem Wert, der für zwei räumlich getrennte Quasiteilchen zu erwarten ist. Während des Stoßprozesses sinkt das Integral in Folge der Verschmelzung auf einen Zwischenwert ab, der auch als transienter Ein-Teilchen-Zustand gedeutet

werden kann. Nach dem Stoßprozess geht das Integral im Wesentlichen wieder auf seinen Ursprungswert zurück. Allerdings sind die entstandenen Spots noch nicht vollständig ausrelaxiert, so dass noch einige Oszillationen zurück bleiben.

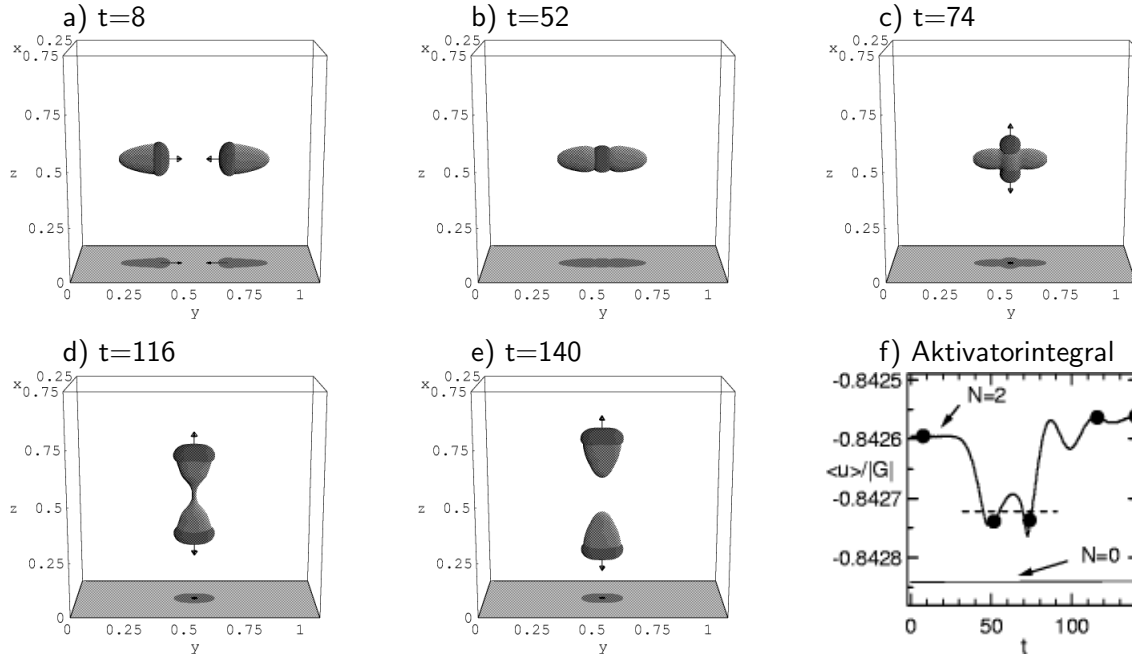


Abb. 4.22: a)-e) Isoflächendarstellung der Verschmelzung zweier dreidimensionaler Quasiteilchen während eines zentralen Stoßprozesses: Die Aktivator-Isofläche ist rot gezeichnet, die des langsamen Inhibitors v grün. f) Zeitreihe des normierten Aktivatorintegrals: Die markierten Stellen gehören jeweils zu den Isoflächen aus den Abbildungen a)-e). $N=0$ entspricht dem Aktivatorintegral im homogenen Fall. Als Parameter wurden die Werte aus (4.31) und ein Grundgebiet mit den Kantenlängen $L_x = 1$, $L_y = 1.33$ und $L_z = 1$ verwendet, von dem in x-Richtung lediglich der Bereich 0.25 bis 0.75 dargestellt wurde.

Auch im dreidimensionalen Fall kann eine Parameteränderung dazu führen, dass es nach der Verschmelzung der Teilchen zur Auslöschung der Struktur kommt. Im zweidimensionalen Fall wurde dies in einem Beispiel durch eine Verringerung der Teilchengeschwindigkeit über die Beschleunigung der Inhibitorndynamik durchgeführt. In diesem Fall sind die Objekte langsamer und der Aktivator ist nicht mehr in der Lage nach dem Stoß seitlich auszuweichen. Dieser Fall wurde auch in drei Dimensionen numerisch simuliert. Ausgehend von den Parametern in (4.31) wurde τ auf $\tau = 25$ abgesenkt. Das Ergebnis dieser Rechnung ist in Abb. 4.23 dargestellt. Anhand der Isoflächen erkennt man, dass der Stoßprozess zunächst analog zum Fall $\tau = 48$ abläuft, die Teilchen allerdings nach der Verschmelzung verlöschen. Auch am Verlauf des Aktivatorintegrals in Abb. 4.23 f) kann man die Ähnlichkeit der beiden Prozesse bis zur Verschmelzung erkennen. Zunächst bildet sich wieder ein transienter Ein-Teilchen-Zustand, so dass das Integral lediglich bis zu einem Zwischenwert absinkt, bevor es gegen den Wert des homogenen Falls relaxiert.

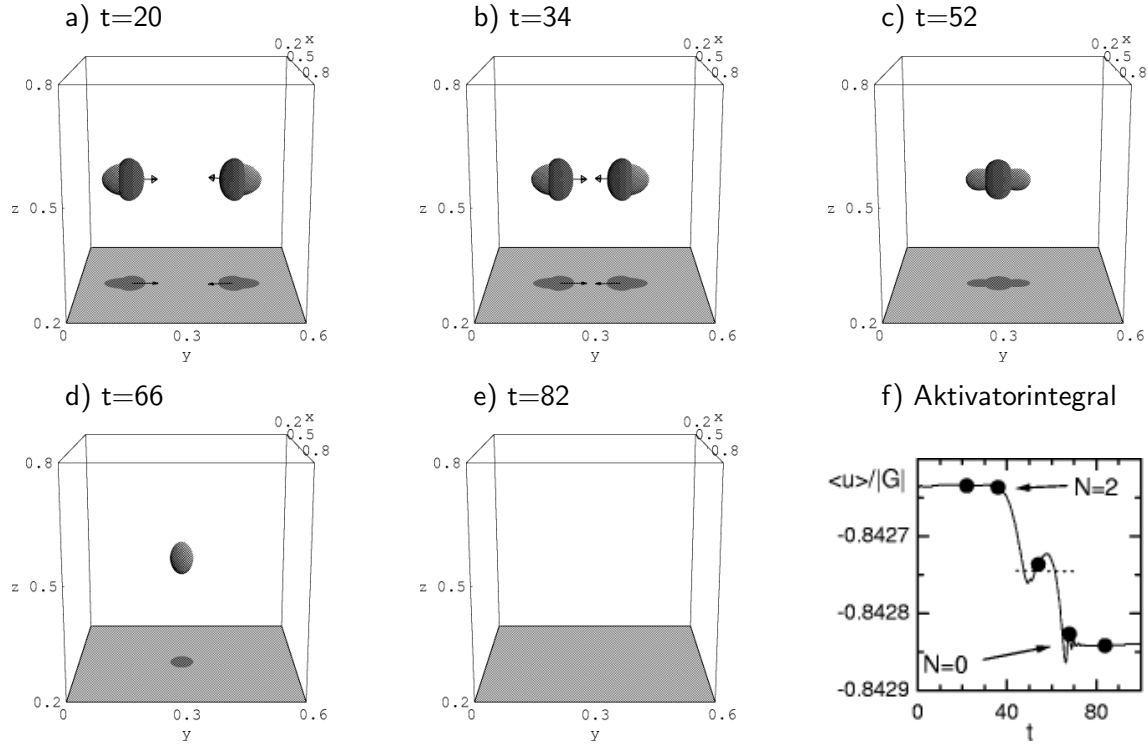


Abb. 4.23: a)-e) Isoflächendarstellung eines Vernichtungsprozesses zweier dreidimensionaler Quasiteilchen nach einem zentralen Stoßprozess: Die Aktivator-Isofläche ist rot eingezeichnet, die des langsamen Inhibitors v grün. f) Zeitreihe des normierten Aktivatorintegrals: Die markierten Zeitpunkte entsprechen den jeweiligen Isoflächen-Darstellungen. Als Parameter wurden die Werte aus (4.31) mit $\tau = 25$ und als Grundgebiet der Einheitswürfel verwendet. Dargestellt wurde nur der Ausschnitt $0.2 < x < 0.8$.

4.3 Inhomogenitäten

Die Untersuchung der Wechselwirkung von Quasiteilchen mit Inhomogenitäten des Systems ist insbesondere nützlich, da es nicht möglich ist, ein exakt homogenes System experimentell zu realisieren. Aber auch bei der Simulation des partiellen Differentialgleichungssystems führt die Raumdiskretisierung zu inhomogenen Einflüssen. Die Auswirkungen auf die Dynamik von bewegten Lösungen sollen im Folgenden diskutiert werden.

4.3.1 Teilchenstreuung an Inhomogenitäten

Zunächst soll die Teilchenstreuung an einer lokalisierten Inhomogenität betrachtet werden. Als Störung wurde eine rotationssymmetrische Verteilung des Parameters κ_1 in der Form

$$\kappa_1(r) = \kappa_H + \kappa_I \exp \frac{-\ln(2)(r - r_M)^2}{x_{hw}^2} \quad (4.32)$$

angenommen, wobei r_M das Zentrum des Grundgebiets bezeichnet. Mit dieser Definition ist x_{hw} der Halbwertsradius der Inhomogenität. Unter der Voraussetzung, dass die

inhomogene Störung κ_I als klein angesehen werden kann, darf in diesem Fall das Gleichungssystem (3.60)-(3.61) verwendet werden. Die einfachste Möglichkeit zur Auswertung des Wechselwirkungsterm $\langle \nabla \bar{u} | \delta \kappa \rangle$ besteht darin die Inhomogenität durch eine schräge Ebene zu nähern. Diese Näherung versagt allerdings in den hier untersuchten Beispielen, da die Inhomogenität ähnliche Ortsskalen aufweist wie die betrachtete Lösung. Aufgrund der Rotationssymmetrie ist es jedoch möglich die Wechselwirkung mit der Inhomogenität als Zentralkraft aufzufassen. Als Wechselwirkungsterm ergibt sich dann

$$\langle \nabla \bar{u}(r-p) | \delta \kappa(r-r_M) \rangle = \frac{p-r_M}{|p-r_M|} \underbrace{\langle \bar{u}_x(x) | \delta \kappa(x+|p-r_M|, y) \rangle}_{F_{\text{ih}}(|p-r_M|)}, \quad (4.33)$$

so dass nicht mehr für jede Teilchenposition r das Integral ausgeführt werden muss. Es genügt das Integral für verschiedene Abstände $|r-r_M|$ auszuwerten.

Für die folgenden Beispiele wurden, bis auf die Inhomogenität, die gleichen Parameter verwendet wie bei der Untersuchung der Streuprozesse in Abschnitt 4.2.1:

$$\begin{aligned} D_u &= 1.487 \times 10^{-3}, D_v = 0, D_w = 7.436 \times 10^{-3}, \\ \lambda &= 2.05, \kappa_H = -0.11, \kappa_2 = 0, \kappa_3 = \kappa_4 = 1, \\ \tau &= 1.01, \theta = 0, \Delta t = 0.25, \Delta x = 0.01875, L = 2.4. \end{aligned} \quad (4.34)$$

Zunächst wurde eine Inhomogenität mit $\kappa_I = -0.035$ und einer Halbwertsbreite von $x_{\text{hw}} = 0.22$ betrachtet. Einige Trajektorien aus Simulationen der partiellen Differentialgleichungen sind in Abb. 4.24 zusammen mit den aus den Bewegungsgleichungen bestimmten Bahnen dargestellt. Da eine Verringerung von κ_1 die Erregbarkeit des Mediums verringert, ist die in den Simulationen beobachtete Abstoßung von der Inhomogenität zu erwarten. Die Übereinstimmungen zwischen vereinfachter und echter Numerik sind besonders bei kleinen Streuwinkeln gut. Im Fall starker Annäherung an die Inhomogenität steigt die Amplitude der Inhomogenität, so dass sich die Güte der Näherung verschlechtert.

In Abb. 4.24 b) ist die Stärke des Wechselwirkungsterms $F_{\text{ih}}(|r-r_M|)$ für $x_{\text{hw}} = 0.22$ und $x_{\text{hw}} = 0.44$ für die Amplitude $\kappa_I = 1$ dargestellt. Die gestrichelte Linie ist aus der Näherung der Inhomogenität durch eine Ebene an der Teilchenposition entstanden und ist damit proportional zur Steigung der Gaußkurve. Im Gegensatz zu der durch Integration ermittelten Kurve existiert dann allerdings im Fall $x_{\text{hw}} = 0.22$ kein Überschwinger, so dass mit dieser Näherung nur eine rein repulsive Wirkung der Inhomogenität erklärt werden kann. Die Trajektorie (3) in Abb. a), bei der eindeutig eine attraktive Wechselwirkung besteht, wäre damit nicht zu erklären.

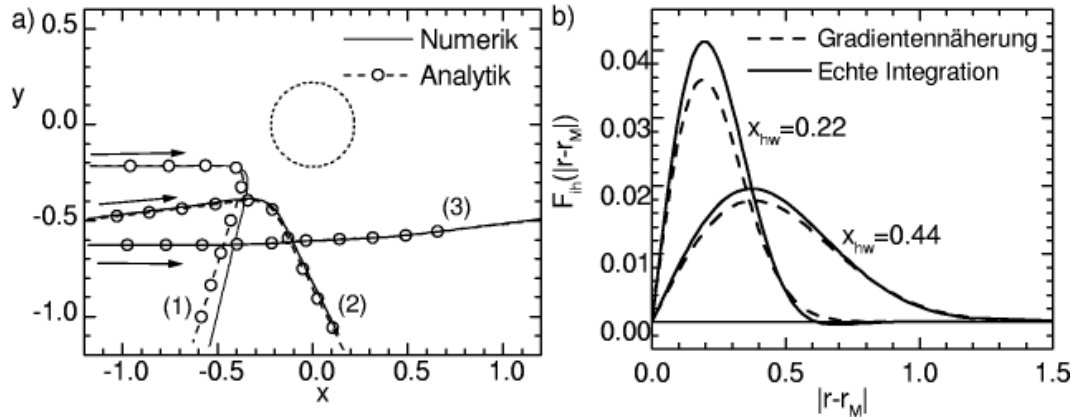


Abb. 4.24: a) Wechselwirkung eines Quasiteilchens mit einer Inhomogenität bei $\kappa_I = -0.035$ und $x_{hw} = 0.22$: Die Halbwertslinie der Inhomogenität ist gepunktet eingezeichnet. Man erkennt gut den Zentralkraftcharakter. b) Wechselwirkungsterm F_{ih} als Funktion des Abstands für $x_{hw} = 0.22$ und $x_{hw} = 0.44$ und $\kappa_I = 1$: Bei der korrekten Auswertung des Wechselwirkungsintegrals erhält man, im Gegensatz zur Gradientennäherung, im Fall $x_{hw} = 0.22$ einen leichten Überschwinger, entsprechend einem Bereich schwach attraktiver Wechselwirkung. Die Parameter und die Diskretisierung sind wie in (4.34) gewählt.

Das Beispiel in Abb. 4.25 wurde mit $\kappa_I = 0.005$ und $x_{hw} = 0.44$ gerechnet. Die Inhomogenität ist in diesem Fall so stark attraktiv, dass das Filament in ihr festgehalten wird. Es bildet sich ein Grenzzzyklus und der Spot umkreist das Zentrum der Inhomogenität. Im Vergleich zwischen reduzierter und voller Numerik ist auch hier bei großen Abständen vom Zentrum eine sehr gute Übereinstimmung zu erkennen. Der Einfangprozess mit dem Einrasten auf dem Grenzzzyklus wird qualitativ wiedergegeben. Die Radien der Grenzzyklen aus reduzierter und voller Numerik unterscheiden sich allerdings um etwa 10 Prozent.

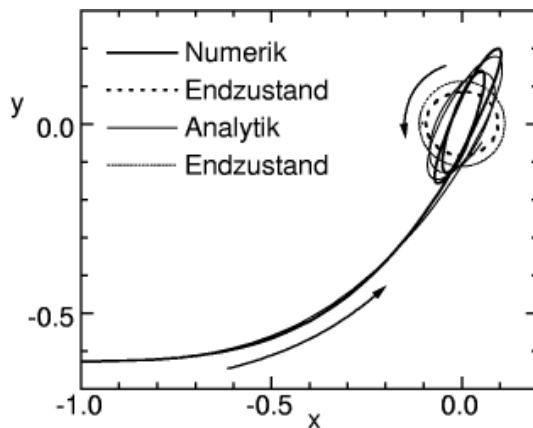


Abb. 4.25: Wechselwirkung eines Quasiteilchens mit einer Inhomogenität bei $\kappa_I = 0.005$ und $x_{hw} = 0.44$: Die Anziehung der Inhomogenität führt zu einem Teilcheneinfang und zur Bildung eines Grenzzykus'. Die Parameter sind in (4.34) angegeben.

Ein letztes Beispiel soll die mögliche Komplexität der Dynamik veranschaulichen. Als Parameter wurden $\kappa_I = 0.0042$ und $x_{hw} = 0.22$ gewählt. In Abb. 4.26 a) ist die Trajektorie eines von rechts unten einlaufenden Teilchens dargestellt. Zunächst scheint es sich um einen einfachen Einfangprozess zu handeln und das Objekt schwenkt fast auf einen Grenzzykus

ein, verlässt dann aber die Inhomogenität nach einigen Umläufen. In Abb. 4.26 b) sind die Ergebnisse der vereinfachten Numerik dargestellt. Qualitativ erhält man hier das gleiche Verhalten, allerdings hält sich das Teilchen viel länger in der Inhomogenität auf, nämlich fast fünf Umläufe anstatt etwas über drei in der Simulation.

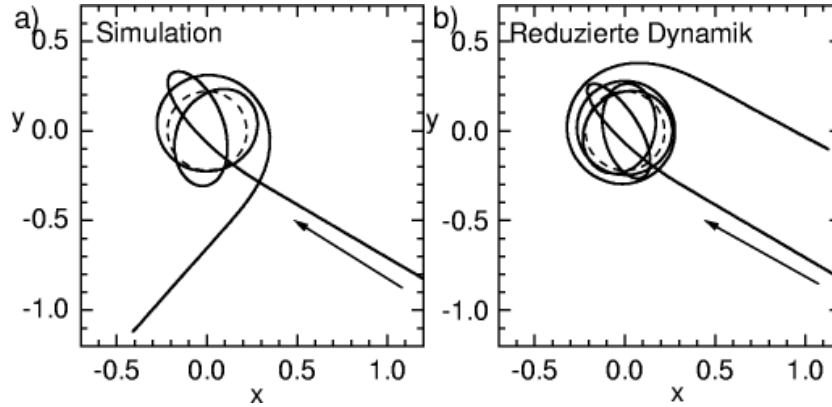


Abb. 4.26: a) Wechselwirkung eines Quasiteilchens mit einer Inhomogenität bei den Parametern aus (4.34) und $\kappa_I = 0.0042$ und $x_{hw} = 0.22$: Die Attraktion der Inhomogenität ist zu schwach um das Objekt dauerhaft einzufangen. b) Der Vergleich mit der reduzierten Numerik zeigt wohl qualitative, aber keine quantitative Übereinstimmung. Bei einer mehrfachen Umkreisung der Inhomogenität können allerdings kleinste Schwankungen der Anfangsbedingungen schon zu signifikanten Änderungen des Streuwinkels führen.

Um diese Ergebnisse zu erklären kann wiederum das Gleichungssystem (3.60)-(3.61) verwendet werden. Es soll untersucht werden, in welchen Parameterbereichen die einfallenden Spots von der Inhomogenität auf eine Kreisbahn gezwungen werden können. Zunächst wird das Gleichungssystem in Polarkoordinaten (Φ, R) für den Ort des Spots und (ϕ_c, c) für die Propagator-Mode umgeschrieben. Das Zentrum der Inhomogenität liegt bei $R = 0$. Man gelangt zu dem Gleichungssystem

$$\dot{\Phi} = \kappa_3 \frac{c}{R} \sin(\phi_c - \Phi), \quad (4.35)$$

$$\dot{R} = \kappa_3 c \cos(\phi_c - \Phi) - F_{ih}(R), \quad (4.36)$$

$$\dot{\phi}_c = \frac{1}{c} \sin(\phi_c - \Phi) F_{ih}(R), \quad (4.37)$$

$$\dot{c} = \varepsilon c - \kappa_3 Q c^3 - \cos(\phi_c - \Phi) F_{ih}(R), \quad (4.38)$$

wobei $\varepsilon = \kappa_3^2(\tau - 1/\kappa_3)$ wie im vorherigen Abschnitt der normierte Bifurkationsparameter ist. Kreisbahnen entsprechen Lösungen dieser Gleichungen mit den Eigenschaften $\dot{\phi}_c - \dot{\Phi} = 0$, $\dot{R} = 0$ und $\dot{c} = 0$. Aus diesen Forderungen ergibt sich der Radius der Bahnen als Lösung der impliziten Gleichung

$$\frac{\varepsilon R}{(1 + QR^2)} =: g(R) \stackrel{!}{=} F_{ih}(R). \quad (4.39)$$

Die grafische Lösung dieser Gleichung wurde in Abb. 4.27 a) skizziert. Das Ergebnis einer numerischen Lösung wurde in Abb. 4.27 b) dargestellt. Die Stabilität der errechneten

Lösungen konnte durch numerische Auswertung der Jakobi-Matrix überprüft werden. Für sehr stark attraktive Inhomogenitäten $\kappa_I > 0.028$ ist der Fixpunkt $R = 0, c = 0$ stabil und es existiert ein instabiler Grenzzyklus der im Sinne einer Separatrix die Einfanggrenze für Teilchen darstellt. Je weiter sich ein einfallendes Teilchen diesem Grenzzyklus nähert, um so häufiger rotiert es um das Zentrum der Inhomogenität. Die Zahl der Rotationen divergiert bei der Annäherung an den Grenzzyklus [12]. Bei $\kappa_I < 0.028$ entsteht durch eine Hopf-Bifurkation ein stabiler Grenzzyklus und der Fixpunkt verliert seine Stabilität, so dass ein Teilcheneinfang zu einer Rotation des Filaments um die Inhomogenität wie in Abb. 4.25 führt. Bei $\kappa_I < 0.0046$ verschwinden beide Grenzzyklen. In diesem Bereich wirkt die Inhomogenität weiter attraktiv, ist aber nicht stark genug um ein Objekt dauerhaft an sich zu binden. Dies entspricht genau der Situation aus Abb. 4.26.

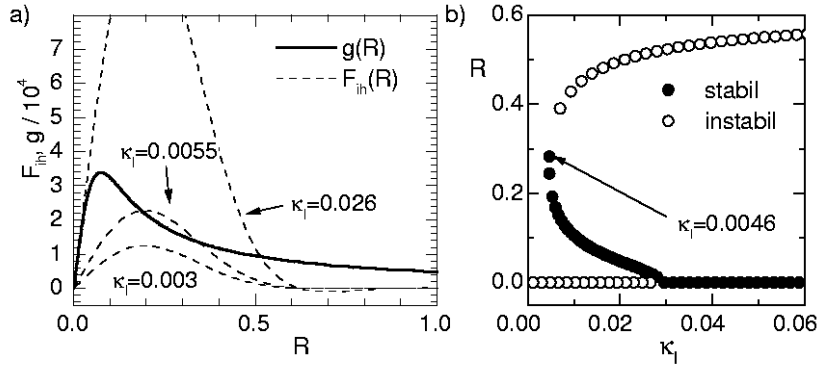


Abb. 4.27: a) Grafische Lösung der Gleichung (4.39): In Abhängigkeit von der Amplitude κ_I existieren zwei, ein oder kein Grenzzyklus. b) Dargestellt sind die Radien der Kreisbahnen eines Filaments in Abhängigkeit der Amplitude der Inhomogenität κ_I : Der stabile, gepinnte Zustand wird bei $\kappa_I < 0.028 \pm 0.0005$ instabil. Für $\kappa_I < 0.0046 \pm 0.0002$ existieren keine Grenzzyklen mehr. Die Parameter entsprechen (4.34).

4.3.2 Teilungsprozesse in einer Inhomogenität

Auch bei der Wechselwirkung mit Inhomogenitäten kann die Form des Filaments so stark gestört werden, dass die Beschreibung mittels des Teilchenbildes versagt. Bei stark repulsiver Inhomogenität wäre beispielsweise die Auslöschung des Filaments vor Erreichen der Inhomogenität denkbar.

In diesem Abschnitt soll die Wirkung eines sehr stark attraktiven Potentials mit großer Halbwertsbreite auf das bewegte Quasiteilchen diskutiert werden. Es wurden die Parameter

$$\begin{aligned}
 D_u &= 1.21 \times 10^{-4}, \quad D_v = 1.7 \times 10^{-3}, \quad D_w = 1.46 \times 10^{-2}, \\
 \lambda &= 4.3, \quad \kappa_2 = 0, \quad \kappa_3 = 1, \quad \kappa_4 = 8, \\
 \tau &= 60, \quad \theta = 0, \quad \Delta t = 0.1, \quad \Delta x = 0.00625, \quad L = 1, \\
 \kappa_H &= -12.34, \quad \kappa_I = 0.8, \quad x_{hw} = 0.139
 \end{aligned}
 \tag{4.40}$$

verwendet. Die Ergebnisse der Simulation sind in Abb. 4.28 dargestellt. Das Quasiteilchen läuft von links ein und wird in die Inhomogenität hinein gezogen. Da die Erregbarkeit des Mediums dort wesentlich höher ist, kann sich das Filament vergrößern und teilen. Eines der neu entstandenen Objekte verlässt die Inhomogenität dann nach oben. Das zweite Teilchen verbleibt noch für einige Zeit in der Inhomogenität und führt dort noch drei weitere Teilungsprozesse durch, die in der Abbildung allerdings nicht mehr dargestellt sind, bevor es ebenfalls aus der Störung herausläuft. Anders als bei den bisher betrachteten Prozessen handelt es sich hier um einen Mechanismus zur Teilchenerzeugung.

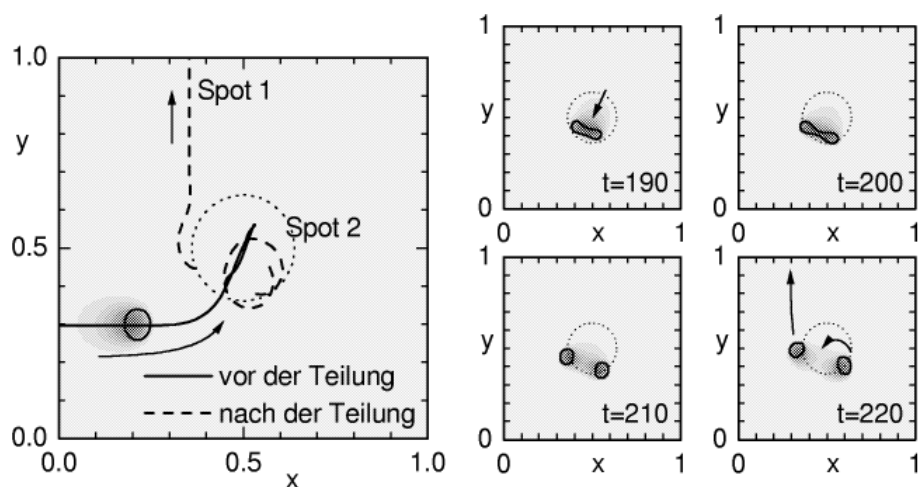


Abb. 4.28: Teilungsprozess eines Quasiteilchens innerhalb einer Inhomogenität bei den Parametern aus (4.40): Dargestellt ist jeweils die Aktivator $u(x, y) = 0$ -Isolinie sowie ein Grauwertbild des langsamen Inhibitors v . Links sind die Bahnen der Objekte dargestellt, rechts der Teilungsprozess im Detail. Die Inhomogenität erhöht die Erregbarkeit des Mediums, so dass sich das Filament vergrößern und teilen kann.

Die Untersuchungen der Auswirkungen räumlicher Inhomogenitäten zeigen, warum in experimentellen Beobachtungen bewegter Strukturen geradlinige Bewegungen schwer zu finden sind. Schon schwache Inhomogenitäten können zu Ablenkungen der Bewegungsrichtung führen, größere auch zu Pinning-Effekten. Experimentell kann es daher unter Umständen schwer sein, eine gleichförmige von einer rein stochastischen Bewegung zu unterscheiden.

4.3.3 Behandlung des Diskretisierungsfehlers als Inhomogenität

Aufgrund der Diskretisierung des Laplace-Operators ist jede numerische Rechnung mit prinzipiellen Gitterfehlern behaftet. Bei der Wahl der geeigneten Diskretisierungslänge ist jedoch immer zwischen benötigter Rechenzeit und tolerierbarem Fehler abzuwägen, so dass man sich letztlich im Klaren darüber sein sollte, welche Auswirkungen mangelhafte Diskretisierungen haben können. Bei bewegten Lösungen führen sehr schlechte Diskreti-

sierungen häufig zum Pinning, d. h. die Anregungen können sich über die Kopplungen nicht mehr ausbreiten. Bei etwas besseren Diskretisierungen sind die Einflüsse subtiler.

Bei der numerischen Simulation der Bewegung eines einzelnen Spots auf homogenem Grundgebiet erwartet man eine gleichförmige Bewegung. Tatsächlich dreht sich die Bewegungsrichtung allerdings im Laufe der Zeit in die Richtung einer Symmetrieachse des Gitters. Meist sind dies die Richtungen entlang der x - bzw. y -Achse oder die Winkelhalbierenden. Vereinzelt, vorwiegend bei sehr schlechter Diskretisierung, treten allerdings auch andere Vorzugsrichtungen auf. In Abb. 4.29 wurde die Drehgeschwindigkeit der Bewegungsrichtung für die Parameter (4.34) als Funktion der Richtung dargestellt. Die Geschwindigkeiten für andere Winkel können aus Symmetrieargumenten geschlossen werden. In dieser vereinfachten Dynamik stellen die Richtungen parallel zum Diskretisierungsgitter instabile und die Winkelhalbierenden stabile Fixpunkte dar.

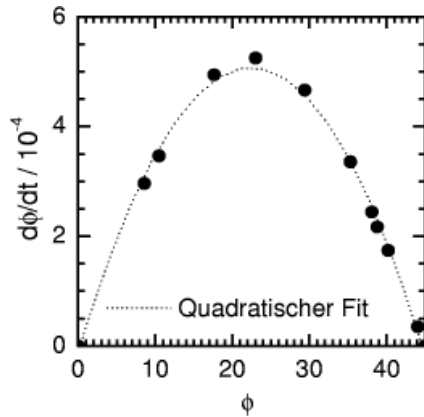


Abb. 4.29: Drehgeschwindigkeit der Bewegungsrichtung für ein bewegtes Einzelfilament bei den Parametern (4.34) mit einer Diskretisierungslänge von $1/64$: Die Richtung der Winkelhalbierenden des Gitters ist ein stabiler Fixpunkt dieser Dynamik. Näherungsweise kann die Drehgeschwindigkeit durch einen quadratischen Fit ersetzt werden. Die Rechnungen wurden mit $L = 1.2$ durchgeführt und es wurde nachgeprüft, dass die Drehgeschwindigkeit bei größeren L konstant bleibt.

Es soll nun versucht werden, diese am Gitter orientierte Bewegung zumindest qualitativ als die Wechselwirkung eines Teilchens mit einer periodischen Inhomogenität zu deuten. Dazu soll die Bewegung eines Einzelteilchens in einer Inhomogenität der Form

$$\delta\kappa(x, y) = \kappa_I \sin \frac{2\pi N_x x}{L_x} = \kappa_I \sin k_x x, \quad (4.41)$$

betrachtet werden, wobei k_x der Wellenvektor der Störung in x -Richtung ist. Die Überlagerung von zwei solchen, um 90 Grad gegeneinander versetzten Störungen, kann als einfachste Modellierung einer Gitter-Inhomogenität betrachtet werden. In Abb. 4.30 a) ist die Richtungsänderung eines Einzelspots aus einer Simulation der Bewegungsgleichungen als Funktion der Zeit mit einer solchen Inhomogenität bei $\kappa_I = 0.00001$ und $k_x = 523.6$ dargestellt. Bei einer Bewegung entlang der x -Achse ändert sich die Bewegungsrichtung zunächst sehr langsam. Die Drehgeschwindigkeit steigt allerdings mit zunehmender Orientierung zur y -Achse stetig an, bevor der Spot auf eine Bewegung entlang der y -Achse einrastet. Eine detaillierte Betrachtung der Dynamik in Abb. 4.30 b) zeigt, dass die Richtungsänderung von einer ständigen Oszillation begleitet ist. Diese Oszillationen klingen erst nach dem Einrasten auf dem Endzustand ab.

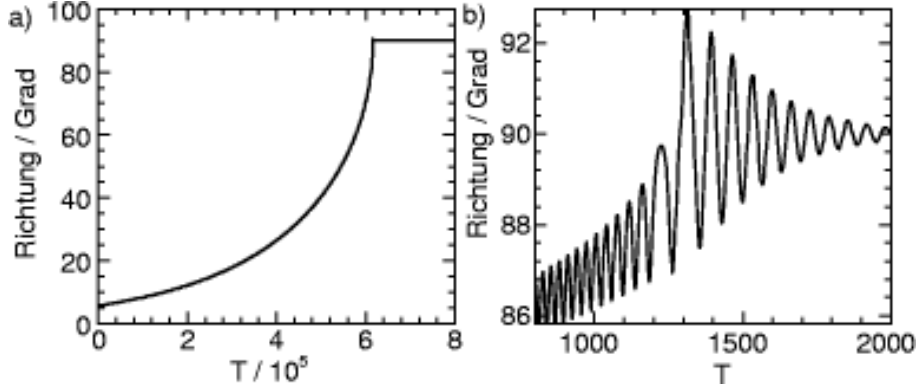


Abb. 4.30: Richtungsänderung eines Einzelspots in der vereinfachten Numerik im periodischen Gitter als Funktion der Zeit: Der Einrastprozess auf die stabile 90 Grad-Richtung verläuft mit zunehmender Geschwindigkeit. In Abb. b) ist der Einrastprozess nochmals detailliert dargestellt. Das Gitter bewirkt Oszillationen in der Spotgeschwindigkeit, die im Mittel zu einer Drehung führen. Als Parameter wurden (4.34) und $\kappa_I = 0.00001$ mit $N_x = 200$ und $L_x = 2.4$ verwendet.

Diese Ergebnisse in der reduzierten Dynamik lassen sich durch eine Störungsrechnung unter der Voraussetzung kleiner Amplituden κ_I auch analytisch ableiten. Für die Drehgeschwindigkeit $\dot{\phi}(\phi)$ in rad erhält man den Ausdruck

$$\dot{\phi} = \frac{\kappa_I^2 Q (\kappa_3 (k_x^2 + 4Q) \cos^2 \phi + 4Q\hat{\tau}) \tan \phi}{2\hat{\tau} (\kappa_3 k_x^2 \cos^2 \phi + 4Q\hat{\tau})}. \quad (4.42)$$

Die Herleitung dieser Formel wird in Anhang A.6 durchgeführt. In Abb. 4.31 a) ist der Vergleich von (4.42) mit den Ergebnissen der Rechnung aus Abb. 4.30 dargestellt. Die Näherung ist offensichtlich für $\kappa_I = 0.00001$ sehr gut erfüllt. Die Divergenz der Drehgeschwindigkeit bei $\phi = \pi/2$ besteht wegen des Faktors $\tan \phi$ unabhängig von den Parametern. Die theoretisch erwartete Drehgeschwindigkeit ist für unterschiedliche Wellenvektoren k_x in Abb. 4.31 b) dargestellt. Für $Q(9 - 8\kappa_3\hat{\tau}) > 2k_x^2$ hat die Funktion aus (4.42) ein Maximum, so dass eine größere Ähnlichkeit zu den Ergebnissen aus Abb. 4.29 besteht. Die Ausprägung des Maximums hängt stark vom Bifurkationsparameter $\hat{\tau}$ ab. Große Werte für $\hat{\tau}$ führen zu flacheren Maxima.

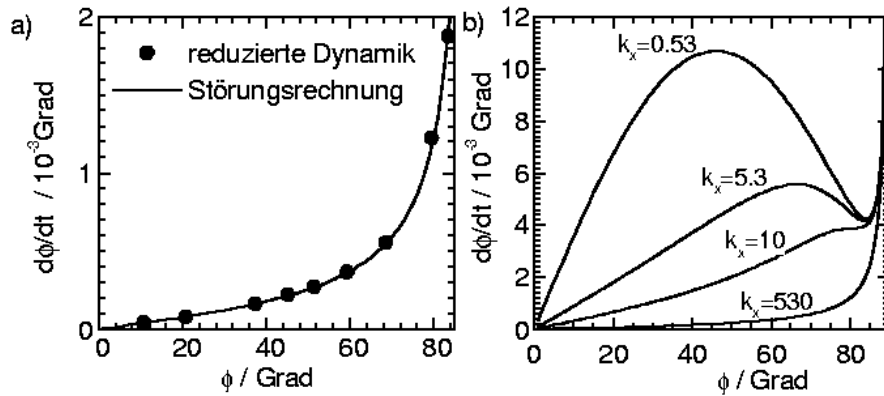


Abb. 4.31: a) Vergleich der analytisch und numerisch bestimmten Drehgeschwindigkeit $\dot{\phi}(\phi)$ für das Beispiel aus Abb. 4.30 b) In Abhängigkeit von k_x kann die Drehgeschwindigkeit $\dot{\phi}(\phi)$ ein Maximum aufweisen.

Auch wenn die numerischen Resultate sich erheblich von denen der reduzierten Dynamik unterscheiden und die Modellierung des Gitters mit einer periodischen, festen Inhomogenität nur eine grobe Näherung darstellen kann, machen sie doch prinzipiell deutlich, in welcher Weise eine Inhomogenität mit einer vorgegebenen Symmetrie die Bewegungsrichtung eines Einzelspots beeinflussen kann. Dass eine Divergenz der Drehgeschwindigkeit nicht nur ein Artefakt der Störungsrechnung ist, kann mit dem folgenden Beispiel gezeigt werden. Die Bewegungsrichtung als Funktion der Zeit aus einer numerischen Simulation ist in Abb. 4.32 dargestellt und entspricht qualitativ dem Verhalten, das für einfache Inhomogenitäten vom Typ (4.41) bei Annäherung an eine Einrastposition vorhergesagt wurde. Der unsaubere Kurvenverlauf ist auf die prinzipiellen Schwierigkeiten bei der Bestimmung sub-pixel genauer Positionen zurückzuführen. Die Parameter sind in der Abbildung angegeben. Wegen $D_w \neq 0$ handelt es sich nicht um den analytischen Grenzfall und ein quantitativer Vergleich mit den Ergebnissen aus Abb. 4.30 ist nicht möglich.

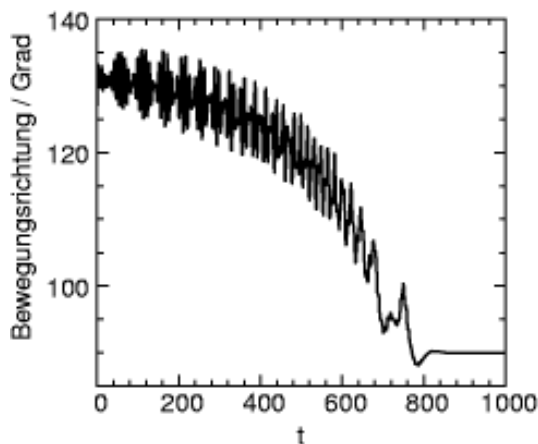


Abb. 4.32: Bewegungsrichtung eines bewegten Einzelspots als Funktion der Zeit: Die Richtung parallel zu den Grundgebietskanten ist stabil. Das Verhalten entspricht qualitativ den Ergebnissen aus Abb. 4.30. Die Parameter sind $D_u = 4.83 \times 10^{-4}$, $D_v = 6.81 \times 10^{-3}$, $D_w = 0.0583$, $\lambda = 4.3$, $\kappa_H = -12.34$, $\kappa_2 = 0$, $\kappa_3 = 1$, $\kappa_4 = 8$, $\tau = 42$ und $\theta = 0$ auf einem Grundgebiet der Kantenlänge $L = 1$. Die Diskretisierung war $\Delta t = 1$ und $\Delta x = 0.0125$.

4.4 Viel-Teilchen-Systeme

In den vorherigen Abschnitten wurden die Eigenschaften von Einzelfilamenten und Stoßprozesse zwischen zwei Filamenten sehr detailliert behandelt. Dabei zeigte sich, dass die Behandlung der Dynamik mit wechselwirkenden Filamenten in vielen Fällen erfolgreich ist. Diese Ergebnisse können nun als Ausgangspunkt für die Behandlung von Viel-Teilchen-Systemen dienen. Solche Systeme mit 10-100 Filamenten können durch die direkte numerische Lösung der Reaktions-Diffusions-Gleichungen nicht in praktikabler Zeit gelöst werden. In experimentellen Systemen findet man allerdings häufig große Filamentzahlen, so dass eine Behandlung solcher Probleme notwendig wird. Mittels des Teilchenbildes besitzt man nun eine gute und praktisch anwendbare Alternative zu detaillierten Simulationen. Die Grundlage für die Untersuchungen in diesem Abschnitt bildet das Gleichungssystem (3.38)-(3.39) für die reduzierte Dynamik, wobei der Wechselwirkungsterm wie in Abschnitt 3.2.5 auf den Viel-Teilchen-Fall ausgeweitet wird.

Bei der Untersuchung solcher Phänomene muss zunächst die Form des Wechselwirkungseinflusses festgelegt werden. Prinzipiell müssen zwei qualitativ unterschiedliche Fälle behandelt werden: repulsive und räumlich oszillierende Wechselwirkung. Während sich die Filamente im ersten Fall zunächst über das ganze Grundgebiet verteilen, kann es bei oszillierender Wechselwirkung auch zur Bildung von Teilchen-Molekülen oder eines Teilchen-Kristalls kommen. Ein anderer wichtiger Punkt ist die Form des Grundgebiets. Während bei der Behandlung von Ein- und Zweiteilchenphänomenen meist der Einfluss der Ränder vernachlässigt wurde, ist die Untersuchung von Viel-Teilchen-Effekten eng an ihre Wechselwirkung mit dem Rand gekoppelt. Den einfachsten Fall stellt die Dynamik auf einem Torus dar, d. h. die Ränder sind zyklisch geschlossen. Unabhängig von der Art der Teilchenwechselwirkung bildet sich in diesem Fall nach genügend langer Einschwingphase stets ein gleichförmig bewegtes und geordnetes System aus, wobei die Bewegung im Fall oszillierender Wechselwirkung auch eine Rotation sein kann. Dieses Ergebnis kann ausgehend von einer beliebigen Viel-Teilchen-Anordnung im Fall $\tau = 0$ interpretiert werden, in dem die Eigendynamik der Objekte verschwindet und sich ein stationärer Zustand bildet. Ein solcher stationärer Zustand besitzt, ebenso wie Einzelfilamente, eine Propagator-Mode, die bei $\tau > \frac{1}{\kappa_3}$ destabilisiert wird, so dass der Zustand in Bewegung versetzt wird.

4.4.1 Kreisförmige Grundgebiete

Anders als bei zyklisch geschlossenen Rändern ist im Fall von Neumann-Randbedingungen eine gleichförmige Translationsbewegung nicht mehr möglich. Aus diesem Grund bilden sich im Fall scheibenförmiger Grundgebiete mit Neumann-Rändern immer kollektive Rotationen aus. In einem typischen Szenario geht man dabei von einem Grundgebiet fester Größe aus und erhöht die Teilchenzahl. Die Filamente ordnen sich zunächst auf Kreisringen an, wobei die Randbereiche zuerst gefüllt werden. Ein solcher Fall ist in Abb. 4.33

anhand eines Beispiels mit den Parametern

$$\begin{aligned} D_u &= 0.07, D_v = 0, D_w = 1.0, \theta = 0, \tau = 1.01, \\ \lambda &= 5, \kappa_1 = -0.47, \kappa_2 = 0, \kappa_3 = \kappa_4 = 1 \end{aligned} \quad (4.43)$$

gezeigt. Als Grundgebiet wurde eine Scheibe mit einem Radius von $L = 30$ verwendet. Der äußere Ring ist bereits gefüllt. Neu hinzugefügte Filamente füllen die nächsten Ringe sukzessive auf. Jeder der dargestellten Kreisringe bewegt sich dabei mit der durch den Parameter τ vorgegebenen Geschwindigkeit, d. h. die Winkelgeschwindigkeiten sind unterschiedlich. Lediglich im Fall oszillierender Wechselwirkung und sehr kleiner Parameter τ können zwei benachbarte Ringe koppeln und sich mit gleicher Winkelgeschwindigkeit bewegen. In diesem Fall können sich auch Cluster von Filamenten bilden, die sich am Grundgebietsrand entlang bewegen.

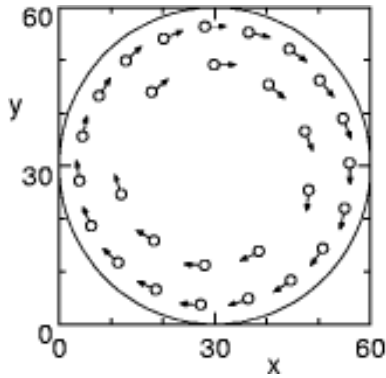


Abb. 4.33: Zustand aus 28 Filamenten auf scheibenförmigem Grundgebiet bei den Parametern (4.43): Nach einer genügend langen Einschwingzeit kommt es zur Ausbildung einer Rotationsbewegung. Die Quasiteilchen ordnen sich von außen nach innen auf Kreisringen an.

4.4.2 Quadratische Grundgebiete

Bei rechteckigen oder quadratischen Rändern ist sowohl die Translation als auch die kollektive Rotation durch die Ränder stark behindert, so dass es vom Bifurkationsparameter τ abhängt, ob sich geordnete oder ungeordnete Zustände ergeben. Diese Situation wird im Folgenden genauer untersucht.

4.4.2.1 Repulsive Wechselwirkung

Zunächst wurde der Fall repulsiver Wechselwirkung für den Parametersatz (4.43) untersucht. Als Grundgebiet wurde ein Quadrat der Kantenlänge $L = 50$ verwendet und es wurden 45 Filamente simuliert. Als Anfangsbedingung diente jeweils eine zufällige Verteilung der Filamentpositionen und Geschwindigkeitsvektoren. Nach einer Einschwingphase bis $t = 40000$ wurde alle 20 Zeiteinheiten die Filamentverteilung bis $t = 60000$ aufgenommen. Um die entstandenen Zustände zu klassifizieren, wurde anhand dieser Daten die Aufenthaltswahrscheinlichkeit $\Phi(d)$ für ein Filament im Abstand $d < L/2$ zu einem anderen Filament bestimmt. Für eine zufällige Verteilung von Filamenten ist diese Funktion $\Phi(d)$ proportional zu d . Wegen $\int_0^{L/2} \Phi(d) dx \stackrel{!}{=} 1$ gilt daher $\Phi(d) = 8d/L^2$.

In Abb. 4.34 a) ist die Funktion $\Phi(d)$ für verschiedene Parameter τ als Grauwertbild dargestellt. Die Rechnung wurde für die an der y -Achse angegebenen Werte von τ durchgeführt. Bei kleinen τ ist die Eigenbewegung der Filamente vernachlässigbar gering. Auf sehr großen Grundgebieten erwartet man daher eine hexagonale Anordnung, die aus der abstoßenden Wechselwirkung zwischen den Filamenten entsteht. In dem dargestellten Fall prägen die Randbedingungen des relativ kleinen Grundgebiets der Struktur am Rand des Gebiets eine quadratische Ordnung auf. Das Ergebnis der Rechnung für $\tau = 1$ ist in Abb. 4.34 c) dargestellt. Die Bewegungsrichtung der Spots ist durch die Pfeile angedeutet. Die Linienstruktur der rechts dargestellten zugehörigen Aufenthaltswahrscheinlichkeit $\Phi(d)$ wird durch die quadratische Ordnung dominiert. Die durch Pfeile angedeuteten Peaks entsprechen Maxima bei $d = 7.1, 7.55, 10.5, 14.1, 16.4$ und 21.3 . Diese lassen sich als charakteristische Abstände innerhalb des Musters deuten: $d_Q = 7.1$ ist die quadratische Gitterkonstante, $d_H = 7.55$ die des hexagonalen Anteils. Weil die Ausdehnung des Bereichs hexagonaler Strukturen sehr klein ist, sind die Extrema bei größeren Abständen durch das quadratische Gitter dominiert. Normiert auf die Konstante d_Q liegen sie bei $1.47, 1.98, 2.30$ und 3.00 . Bei stärkerer Eigendynamik verschwindet die Linienstruktur in der Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Die Hauptlinie, die den minimalen Teilchenabstand charakterisiert, bleibt allerdings auch in stark ungeordneten Zuständen erhalten. In Abb. 4.34 b) wird das Ergebnis der Rechnung für $\tau = 1.02$ mit der zugehörigen Aufenthaltswahrscheinlichkeit $\Phi(d)$ gezeigt. Die Linienstruktur ist bis auf den ersten Peak verschwunden. Dieser minimale Teilchenabstand verschiebt sich aufgrund der stärkeren Dynamik zu $d = 6.5$.

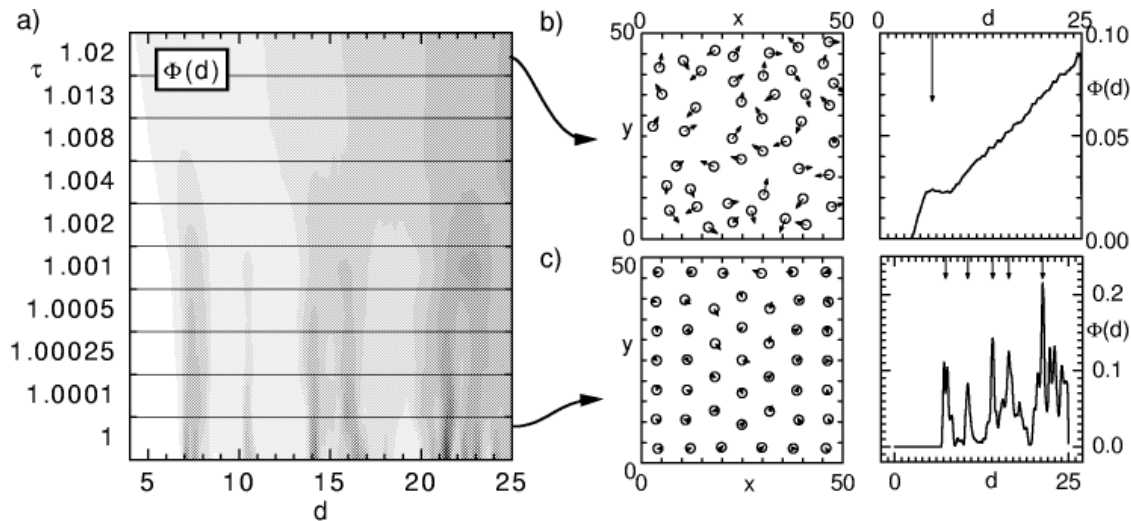


Abb. 4.34: a) Aufenthaltswahrscheinlichkeit $\Phi(d)$ als Funktion des Abstandes und des Bifurkationsparameters τ b) Für große τ findet man ungeordnete Zustände. c) Für kleine τ bilden sich fast stationäre Gitter. Zur Berechnung des Wechselwirkungsterms wurden die Parameter (4.43) zugrunde gelegt.

4.4.2.2 Oszillierende Wechselwirkung

Im Fall räumlich oszillierender Wechselwirkung sind wesentlich komplexere Phänomene als im Fall repulsiver Wechselwirkung möglich. Als Beispiel wurde der Parametersatz (4.14) verwendet, bei dem auch schon in Abschnitt 4.2.1 der Zwei-Teilchen-Stoß untersucht wurde. Bei diesen Parametern besitzen die Filamente oszillierende Ausläufer. Die Simulationen wurden in der gleichen Weise durchgeführt wie bei der Untersuchung der Filamente mit repulsiver Wechselwirkung, allerdings mit 30 Filamenten auf einem 6×6 -Grundgebiet. Aufgrund der attraktiven Wechselwirkung bilden sich bei niedrigen Werten von $\tau < 1.003$ zunächst hexagonal angeordnete Filamentcluster. Bei sehr kleinem τ sind diese Cluster fest am Systemrand bzw. in den Ecken gebunden. Bei etwas größerer Zeitkonstante können sie sich teilweise ablösen und bewegen sich am Rand und im Inneren des Grundgebiets. Eine typische Situation ist in Abb. 4.35 a) für $\tau = 1.001$ gezeigt. Unter den Filament-Konfigurationen ist jeweils die Paarkorrelationsfunktion $\Phi(d)$ eingezeichnet. Für $\tau = 1.001$ besteht ein hoher Ordnungsgrad, der im Innern hexagonal und am Rand quadratisch ist. Die Abstände sind nicht mehr wie im repulsiven Fall durch die Abstoßung oder den „Filament-Druck“ bestimmt, sondern über die oszillierende Wechselwirkung und den ersten Einrastabstand. Entsprechend liegen die Extrema der Paarkorrelationsfunktion ungefähr bei $1, \sqrt{2}, \sqrt{3}$ und 2 normiert auf das erste Maximum.

Bei höheren τ erwartet man aufgrund der stärkeren Eigendynamik analog zum Fall mit repulsiven Wechselwirkungen einen geringeren Ordnungsgrad. Bei $\tau = 1.003$ bildet sich allerdings zunächst ein sehr stark geordneter Zustand. Der Grund ist die Bildung eines rotierenden Filament-Clusters, der in Abb. 4.35 b) dargestellt ist. Das einzelne Filament rechts bewegt sich in diesem Fall ständig zwischen dem oberen und unterem Rand hin und her. Prinzipiell ist diese Bewegungsform auch für $\tau < 1.003$ möglich und stabil. Die Bildung aus dem ungeordneten Ausgangszustand heraus ist allerdings für kleine τ sehr unwahrscheinlich. Erst bei $\tau = 1.003$ können sich die hexagonalen Cluster vom Rand ablösen und gelangen ins Innere des Grundgebiets, so dass sie dort eine ungestörte Rotationsbewegung ausbilden können.

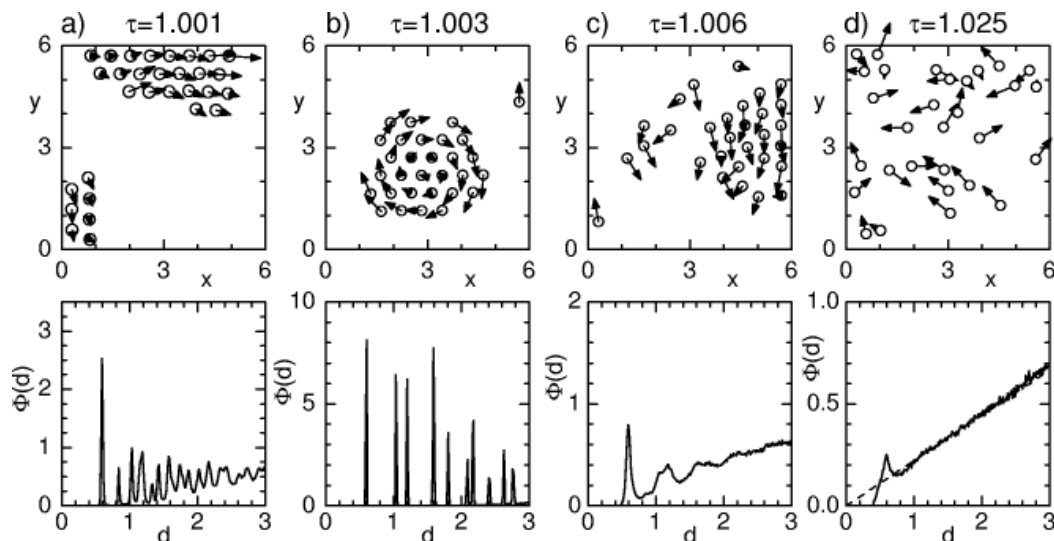


Abb. 4.35: In der oberen Reihe sind typische Konfigurationen von Filamenten für unterschiedliche Werte von τ bei den Parametern (4.14) mit 30 Filamenten auf einem 6×6 -Grundgebiet dargestellt. Als Anfangsbedingung wurde jeweils eine zufällige Filamentverteilung gewählt. Die untere Reihe zeigt die Paarkorrelationsfunktion $\Phi(d)$. In Abb. d) wurde zum Vergleich die Paarkorrelationsfunktion für die ungestörte, wechselwirkungsfreie Bewegung eingezeichnet.

Bei weiterer Erhöhung von τ verringert sich die Wahrscheinlichkeit zur Ausbildung einer Rotationsbewegung. Die Dynamik ist in diesem Parameterbereich schon so stark, dass die Cluster zersplittern können, so dass der Ansatz einer Drehbewegung eines Clusters immer wieder durch andere Fragmente gestört wird. Trotzdem bleibt die Rotation eines Clusters eine stabile Lösung. Simulationen zeigen, dass die Rotation bei diesen Parametern erst bei $\tau \approx 1.0085 \pm 0.0003$ instabil wird. In Abb. 4.36 wurde ein rotierender Cluster simuliert. Ausgehend von einer stabilen Rotation bei $t = 0$ und $\tau = 1.0082$ wurde τ auf 1.0085 erhöht. Die attraktive Wechselwirkung zwischen den Filamenten ist nun nicht mehr stark genug, um diese auf den Kreisbahnen zu halten. Die äußeren Filamente, die sich bei $t = 0$ auf der linken Seite befinden, ziehen einen ganzen Cluster von Spots aus der Spirale heraus. Im weiteren Verlauf wird die Spirale durch die Stöße mit den am Rand gestreuten Bruchstücken gänzlich zerstört. Man gelangt so zu der Situation, die in Abb. 4.35 c) für $\tau = 1.006$ dargestellt ist. An der Paarkorrelationsfunktion lässt sich der höhere Unordnungsgrad erkennen. Es existieren zwar teilweise noch größere Gruppen, aber einzelne Filamente oder Bruchstücke können leicht abgelöst werden. Bei $\tau = 1.025$ in Abb. 4.35 d) ist die attraktive Wechselwirkung im Vergleich zur Eigendynamik so gering, dass sie keinen Einfluss auf die Dynamik mehr ausübt. Man gelangt zu einer Paarkorrelationsfunktion $\Phi(d)$ wie sie für stoßende Teilchen mit hartem Kern typisch ist.

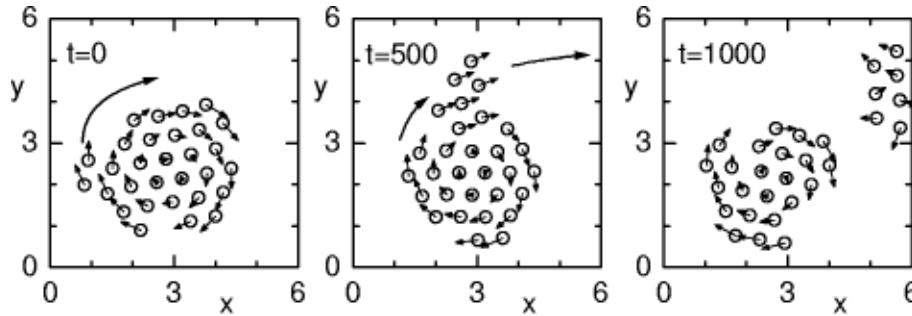


Abb. 4.36: Destabilisierung eines rotierenden Filament-Clusters bei $\tau = 1.0085 \pm 0.0003$: Die Filamente können durch die attraktive Wechselwirkung nicht mehr zusammengehalten werden. Die Parameter entsprechen (4.14) mit 30 Filamenten auf einem 6×6 -Grundgebiet.

4.5 Beispiele für komplexe Strukturen

Der Schwerpunkt der Arbeit lag bisher fast ausschließlich auf der Untersuchung von Spots oder Filamenten und deren Verhalten, da diese Strukturen sowohl experimentell häufig beobachtet wurden als auch numerisch in weiten Parameterbereichen stabil sind. Bei geeigneter Wahl der Parameter bzw. Reaktionsterme sind allerdings auch andere Typen lokalisierter Strukturen möglich. Einige Beispiele, die sich im Rahmen der analytischen Ergebnisse sehr gut einordnen lassen, sollen in diesem Abschnitt behandelt werden.

4.5.1 Zielscheiben-Strukturen

Betrachtet wird weiterhin das dreikomponentige Differentialgleichungssystem (2.29) im zweidimensionalen Fall. Bei den Parametern

$$\begin{aligned} D_u &= 6.46 \times 10^{-5}, \quad D_v = 0, \quad D_w = 5.66 \times 10^{-4}, \\ \lambda &= 1.84, \quad \kappa_1 = -0.102, \quad \kappa_2 = 0, \quad \kappa_3 = \kappa_4 = 1, \\ \tau &= 0, \quad \theta = 0, \end{aligned} \tag{4.44}$$

die durch ihre Nachbarschaft zur Turing-Instabilität gekennzeichnet sind, findet man in diesem System eine außergewöhnliche Art einer lokalisierter stationärer Struktur: einen Kreisring mit einem Zentralfilament, der im Folgenden auch als Zielscheibe bezeichnet wird, und der nicht mit den dynamischen Target-Patterns in anderen erregbaren Systemen verwechselt werden darf [80, 62]. Die Verteilung des Aktivators $u(x, y)$ dieser Struktur ist in Abb. 4.37 a) dargestellt. Der Parameterbereich, in dem diese Struktur existiert und stabil ist, ist relativ eng. Die Stabilisierung des Kreisrings erfolgt über die starken oszillierenden Ausläufer des Zentralfilaments. Durch diese Ausläufer ist das Zentralfilament in der Lage eine attraktive Kraft auf den Ring auszuüben. Der Ring befindet sich genau auf diesen Ausläufern.

Besonders interessant ist die Untersuchung dieser Struktur im Hinblick auf die dynamischen Phänomene, also die Bewegung der Struktur im Rahmen der analytischen Betrachtungen. Da man sich in einem Bereich der Koexistenz von Filamenten und Zielscheiben befindet, ist ein Vergleich mit der Bewegung eines Einzelfilaments möglich. In Abb. 4.37 b) ist die Geschwindigkeit der beiden Lösungen als Funktion des Parameters τ dargestellt. Man erkennt die unterschiedlichen Steigungen im Bifurkationspunkt bei $\tau = 1$. Die Ursache ist der unterschiedliche Wert des Formfaktors $Q = \langle \bar{u}_{xx}^2 \rangle / \langle \bar{u}_x^2 \rangle$ für die beiden Lösungen. Es ergibt sich:

Q	Zielscheibe	Filament
aus stationärer Verteilung ($\pm 5\%$)	3830	3280
aus numerischer Lösung ($\pm 20\%$)	4100	3500

(4.45)

Die systematische Abweichung zu geringeren Werten bei den Ergebnissen aus der numerischen Lösung ist in diesem Fall auf die Diskretisierung zurückzuführen. Dennoch ist die Übereinstimmung zwischen Theorie und Numerik in diesem Beispiel besser als bei der Geschwindigkeitsbestimmung in Abschnitt 4.1.1, weil die Untersuchungen noch näher am Bifurkationspunkt durchgeführt wurden. Die theoretisch bestimmten Geschwindigkeiten für die aus der stationären Verteilung berechneten Werte von Q sind in Abb. 4.37 eingetragen und liefern qualitativ das gleiche Resultat wie die numerischen Ergebnisse. In beiden Fällen ergibt sich, dass das Filament um den Faktor 1.08 ± 0.01 schneller sein sollte als die Zielscheibe.

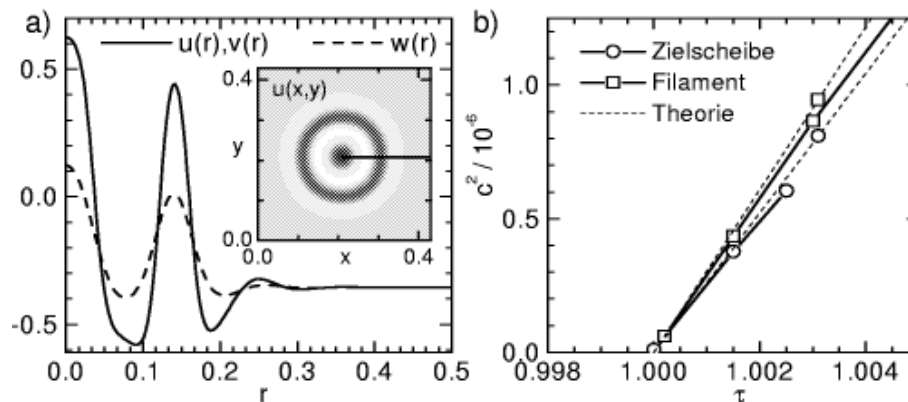


Abb. 4.37: a) Die Verteilungen $u(r)$, $v(r)$ und $w(r)$ einer Zielscheiben-Lösung bei den Parametern aus (4.44) mit $\Delta x = 0.023$: Das Graustufenbild zeigt die Aktivatorverteilung als Funktion von x und y . b) Geschwindigkeitsquadrat eines Filaments und der Lösung aus Abbildung a) bei Variation des Parameters τ : Die Steigungen im Bifurkationspunkt sind unterschiedlich, so dass eine Zielscheibe sich bei den gleichen Parametern langsamer bewegt als ein Filament.

Die Geschwindigkeitsbestimmung war für die Zielscheiben-Struktur nur bis $\tau = 1.0025$ möglich. Schon bei $\tau = 1.0035$ ist die bewegte Struktur instabil gegenüber einer Teilung des Kernfilaments. In Abb. 4.38 ist der Destabilisierungsmechanismus dargestellt. Die Rechnung begann bei $T = 0$ und $\tau = 1.005$ mit einer stabilen, bewegten Struktur aus einer Rechnung mit $\tau = 1.0025$. Bei $T = 150$ erkennt man bereits deutlich die leichte Verbreiterung des zentralen Filaments. Es kommt zu einer Teilung, bei der der Ring zunächst intakt bleibt und sich lediglich deformiert. Erst bei $T = 210$ bricht er auf und wandelt sich in eine Kette von Filamenten um. In dieser Simulation entstehen durch Teilung und durch Zündung in der Überlagerung von drei und mehr Filamentausläufern neue Filamente bis das Grundgebiet gänzlich gefüllt ist.

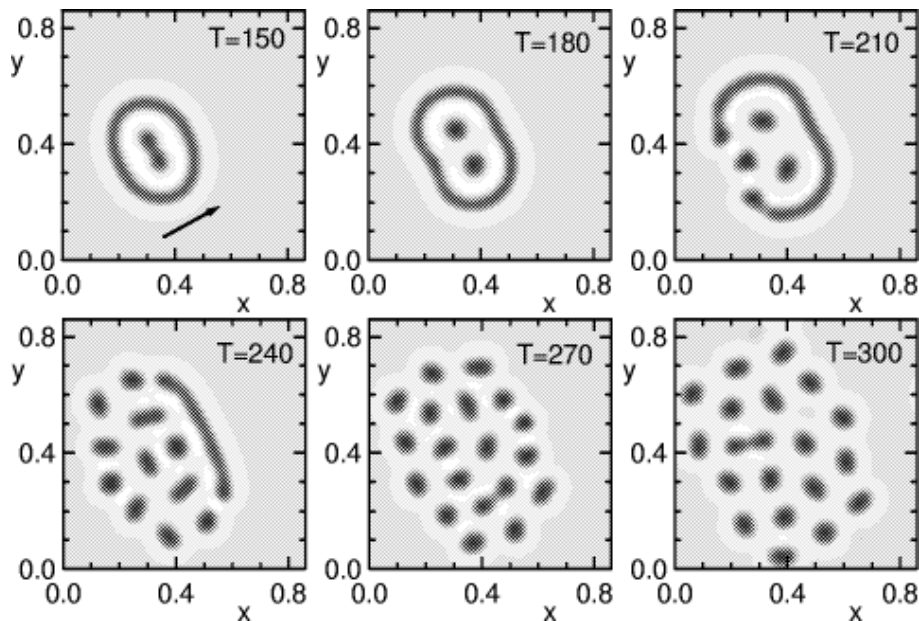


Abb. 4.38: Zerstörung einer Zielscheiben-Struktur durch Teilung des Zentralfilaments nach der Erhöhung von τ auf 1.005: Dargestellt sind die Verteilungen $u(x, y)$ für die angegebenen Zeiten als Graustufenbilder. Die übrigen Parameter entsprechen (4.44) mit $\Delta x = 0.023$ und $\Delta t = 1$.

Aufgrund der geringen Stabilität der Zielscheiben-Struktur gestaltet sich die Untersuchung von Wechselwirkungsprozessen relativ schwierig. Schon bei kleinen Zeitkonstanten τ kann ein Stoß zwischen einem Filament und einer Zielscheibe zur Zerstörung der Struktur führen. In Abb. 4.39 ist ein Beispiel für einen solchen Prozess bei $\tau = 1.002$ gezeigt. Dargestellt sind Graustufenbilder der Aktivatorverteilungen $u(x, y)$ kurz vor und während des Stoßes. Das Filament stört den Ring so stark, dass dieser aufgetrennt wird. Die Störung pflanzt sich wie eine Front über den Ring fort und spaltet ihn dabei in Einzelfilamente auf. In der Folge finden noch einige Filamentzündungen in den Überlagerungen oszillatorischer Ausläufer statt. Das Grundgebiet ist allerdings am Ende nicht mit Filamenten angefüllt wie im vorherigen Beispiel. Sowohl beim Stoß als auch bei der Zerstörung beobachtet man

für zu große Zeitkonstanten τ somit die Konkurrenz zwischen zwei stabilen Strukturen: den einzelnen Filamenten und der Zielscheiben-Struktur. Die Simulationen zeigen, dass die Filamente sehr stabil gegen Störungen sind, während die Zielscheiben bereits bei kleinen äußeren Störungen zerstört werden können.

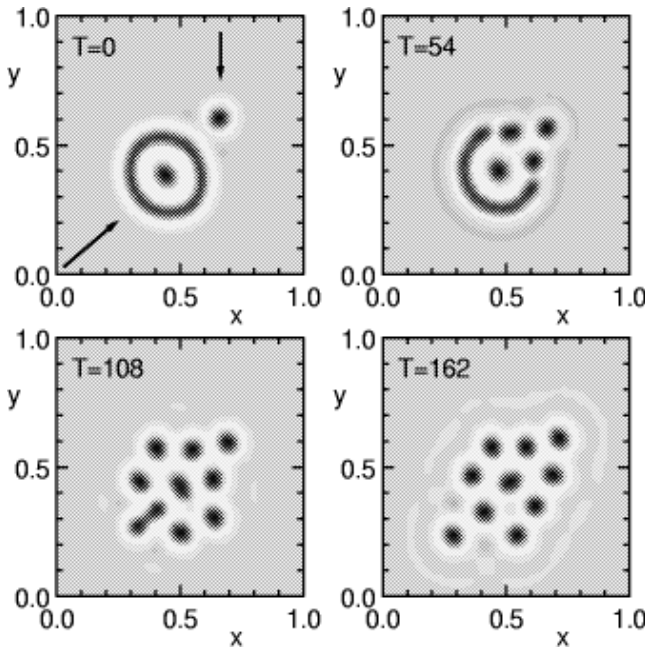


Abb. 4.39: Zerstörung einer Zielscheiben-Struktur durch den Stoß mit einem Filament bei $\tau = 1.002$: Das Zusammentreffen mit dem Filament führt zur Auftrennung des Rings. Das Resultat ist ein kleiner Filament-Cluster. Dargestellt wurden die Aktivatorverteilungen $u(x, y)$. Als Parameter wurde (4.44) mit $\Delta x = 0.023$ und $\Delta t = 1$ verwendet.

Zur weiteren Untersuchung der Dynamik kann das Wechselwirkungsmodell verwendet werden. Bei seiner Herleitung wurde an keiner Stelle vorausgesetzt, dass die beiden wechselwirkenden Lösungen identisch sein müssen. Man kann die Ergebnisse der Rechnung daher auch für den Fall der Wechselwirkung einer Zielscheibe mit einem Filament verwenden. Die Geschwindigkeiten der bewegten Strukturen unterscheiden sich gemäß Abb. 4.37 nur geringfügig voneinander. Für die Wechselwirkungsterme ergibt sich nach Abschnitt 3.2.6 die Beziehung $F_{\text{ww,Ring}} = -\langle \bar{u}_{\text{Fila},x}^2 \rangle / \langle \bar{u}_{\text{Ring},x}^2 \rangle F_{\text{ww,Fila}} = -0.107(\pm 0.0005) F_{\text{ww,Fila}}$, so dass das sehr suggestive Bild der „schweren“ Zielscheibe und des „leichten“ Filaments tatsächlich zutrifft.

In Abb. 4.40 sind die Ergebnisse der Simulation eines Stoßes zwischen den beiden Objekten dargestellt. In Abb. 4.40 a) sind die Trajektorien der beiden Strukturen dargestellt. Die Punkte entsprechen jeweils den gleichen Zeitpunkten. Man erkennt deutlich, dass die Bahn der Zielscheibe kaum beeinflusst wird, während das Filament seine Bewegungsrichtung um über 90 Grad ändert. In Abb. 4.40 b) wird diese Eigenschaft durch die Geschwindigkeiten der beiden Objekte nochmals verdeutlicht. Das Filament wird durch die Kollision mit der Zielscheibe kurz beschleunigt und nimmt danach wieder seine Normalgeschwindigkeit an. Die Geschwindigkeit der Zielscheibe wird wesentlich schwächer beeinflusst. Allerdings erkennt man in der Geschwindigkeit der Zielscheibe Oszillationen mit einer Periode von $T \approx 250 \pm 30$, die nicht auf den Stoß mit dem Filament zurückzuführen

sind. Es handelt sich dabei um den Einfluss innerer Freiheitsgrade auf die Geschwindigkeit der Zielscheibe, die nicht in der analytischen Behandlung berücksichtigt worden sind. Die Mode, die für diese Geschwindigkeitsoszillationen verantwortlich ist, ist numerisch bestimmt und in Abb. 4.40 c) dargestellt worden. Es handelt sich um eine Oszillation in der Mode $n = 2$, die zu einer leichten, elliptischen Deformation der Struktur führt und so die Geschwindigkeit beeinflusst. Um die Form dieser Mode zu extrahieren wurden die Aktivatorverteilungen der Zielscheibe zu zwei Zeitpunkten mit $\Delta T = 125$ zentriert und voneinander abgezogen. Die Zeitpunkte müssen so gewählt werden, dass nicht die Nulldurchgänge der Modenamplitude ausgewählt werden. Sobald die Struktur ihre endgültige Geschwindigkeit erreicht hat, verschwinden die Oszillationen, so dass die Endgeschwindigkeit nicht beeinflusst wird. In den Ergebnissen aus dem Wechselwirkungsmodell tauchen die Oszillationen nicht auf. Dieses Beispiel zeigt deutlich, dass einerseits zwar die wesentlichen Aspekte der Dynamik durch das Wechselwirkungsmodell beschrieben werden, dass aber andererseits bestimmte Effekte systematisch ignoriert werden.

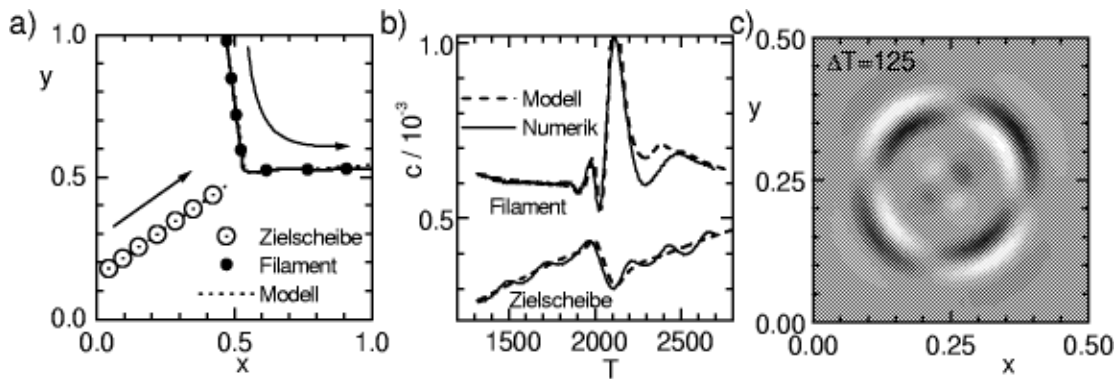


Abb. 4.40: Stoß einer Zielscheibe mit einem Filament bei $\tau = 1.0012$, den übrigen Parametern aus (4.44), $\Delta x = 0.052$ und $\Delta t = 1$ a) Bahnen der Schwerpunkte der beiden Objekte b) Geschwindigkeit von Filament und Zielscheibe während des Stoßes c) Graustufendarstellung des Aktivatoranteils der $n = 2$ -Mode, die die Oszillationen in der Geschwindigkeit der Zielscheibe beeinflusst

4.5.2 Ring-Strukturen

In einigen Parameterbereichen existieren auf zweidimensionalen Grundgebieten stabile, stationäre Aktivitätsringe. Ein Beispiel für einen solchen Ring ist in Abb. 4.41 a) anhand der Aktivatorverteilung $u(x, y)$ dargestellt. Um auf systematische Weise zu einer solchen Struktur zu gelangen kann man von einem stabilen, stationären Filament ($\bar{u}(x), \bar{v}(x), \bar{w}(x)$) in dem eindimensionalen, dreikomponentigen System (3.1) bei $\tau = 0$ und $D_v = 0$ ausgehen. Eine solche Lösung kann in ein zweidimensionales System übertragen und dort zu einem Ring mit einem beliebigen Radius R geschlossen werden. Die Dynamik im zweidimensionalen Fall wird dann bei großem Radius R allein über den Krümmungskoeffizienten K in

der Form $\dot{R} \sim K/R$ bestimmt, wobei K der Form aus der Gleichung (2.23) entspricht¹. Der Fall $K > 0$ führt nicht zu einer stabilen Struktur, sondern zu einem expandierenden Kreisring. Man variiert daher die Parameter mit dem Ziel den Krümmungskoeffizienten K etwas kleiner als 0 einzustellen. In diesem Fall wird sich der Ring zusammenziehen bis es zu einer repulsiven Wechselwirkung mit der jeweils gegenüberliegenden Seite kommt. Falls der Betrag von K nicht zu groß ist, bildet sich auf diese Weise eine stabile, stationäre Struktur. Andernfalls kollabiert die Struktur oder es bildet sich ein Einzelfilament. Im Folgenden wurde der Parametersatz

$$\begin{aligned} D_u &= 1.37 \times 10^{-4}, D_v = 0, D_w = 2.73 \times 10^{-3}, \\ \lambda &= 2.5, \kappa_1 = -0.32, \kappa_2 = 0, \kappa_3 = \kappa_4 = 1, \\ \tau &= 0, \theta = 0, \Delta x = 0.004, \Delta t = 1 \end{aligned} \quad (4.46)$$

untersucht. Für $\lambda = 2.51$ gilt $K = 0$. Bei $\lambda = 1.44$ kollabiert der Ring zu einem Einzelfilament, weil der Krümmungseinfluss die in diesem Parameterbereich vorliegende repulsive Wechselwirkung übersteigt. Die Wahl von $\lambda = 2.5$ führt daher zu einem stabilen Ring, der allerdings einen Eigenwert mit relativ kleinem negativen Realteil in der Mode $n = 0$ besitzt. Dieser Eigenwert entspricht einer Änderung des Radius' der Struktur. Auch in diesem Parameterbereich koexistieren Filamente mit der Ringstruktur, so dass ein direkter Vergleich der dynamischen Eigenschaften der beiden Strukturen im Fall $\tau > 1$ ermöglicht wird. Die Ergebnisse der Simulationen zur Geschwindigkeitsbestimmung sind in Abb. 4.41 b) dargestellt. Wie die folgende Tabelle mit den Formfaktoren $Q = \langle \bar{u}_{xx}^2 \rangle / \langle \bar{u}_x^2 \rangle$ für die verschiedenen Fälle zeigt, sind die Unterschiede in der Geschwindigkeit zwischen den beiden Strukturen, anders als im vorherigen Abschnitt beim Vergleich von Zielscheibe und Filament, sehr gering.

Q	Ring	Filament
aus stationärer Verteilung ($\pm 5\%$)	3050	3000
aus numerischer Lösung ($\pm 20\%$)	3770	3570

(4.47)

In diesem Fall ist der systematische Diskretisierungsfehler so groß, dass es nicht mehr möglich ist, den Geschwindigkeitsunterschied zwischen Ring und Filament tatsächlich nachzuprüfen, obwohl die Tendenz, dass der Ring sich etwas langsamer bewegen sollte, vorhanden ist.

¹Der Koeffizient K wurde für Fronten motiviert, gilt aber auch für Filamente bzw. für andere lokalisierte 1D-Strukturen.

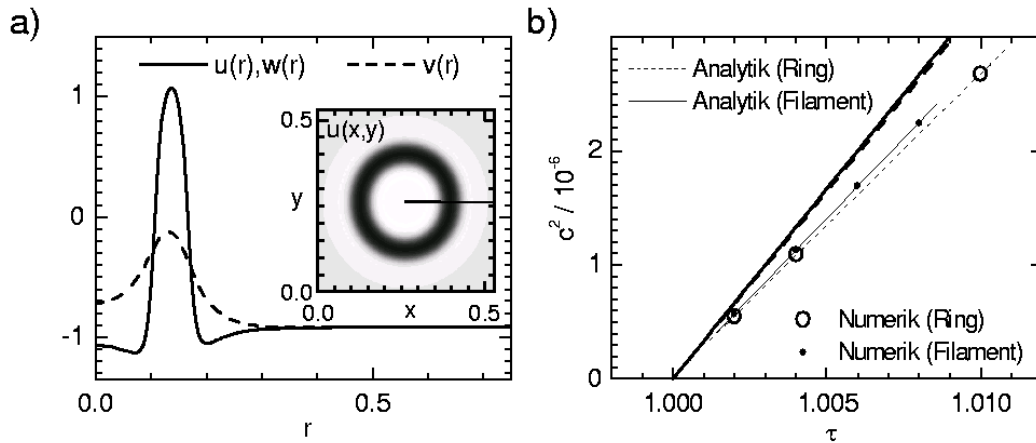


Abb. 4.41: a) Verteilung der Komponenten $u(r)$, $v(r)$ und $w(r)$ für einen Ring: Die Aktivatorverteilung $u(x,y)$ ist zusätzlich als Graustufenbild dargestellt. Die Parameter sind in (4.46) angegeben. b) Geschwindigkeitsquadrat der Ringstruktur und von Einzelfilamenten als Funktion des Parameters τ : Der analytisch vorhergesagte Wert weicht aufgrund des Diskretisierungsfehlers etwas von den numerischen Ergebnissen ab.

Bei den Wechselwirkungsprozessen ist die Situation wieder ähnlich wie im Fall aus dem vorherigen Abschnitt. Der Einfluss der Wechselwirkungsterme des Rings auf das Filament ist um einen Faktor 4.94 ± 0.02 stärker als umgekehrt. In Abb. 4.42 a) sind die Ergebnisse einer Stoßsimulation zwischen Ring und Filament auf einem Grundgebiet $G = [0, 1] \times [0, 1]$ mit zyklischen Rändern dargestellt. Die Trajektorien der Objekte zeigen deutlich, dass das Filament stärker abgelenkt wird als die Ringstruktur. Die Ergebnisse des Wechselwirkungsmodells stimmen mit der Numerik überein. Als Graustufenbild wurde die Ausgangsverteilung des Aktivators hinterlegt. In Abb. 4.42 b) sind die Aktivator-Massen (vgl. A.102) der beiden Objekte im Zeitverlauf dargestellt. Beide Kurven sind auf die Größe des ungestörten Einzelobjekts normiert. Obwohl die Ablenkung des Filaments sehr viel stärker ist als die des Rings, sind die Oszillationen der Größe deutlich kleiner. Der Grund liegt in der Anregung des schwach negativen Eigenwerts der Mode $n = 0$ des Rings, die wie oben dargestellt, einer Oszillation des Radius entspricht. Diese Oszillationen klingen nach dem Stoß wieder ab. Da das Grundgebiet zyklisch geschlossen ist, kommt es im Verlauf der Rechnung erneut zu Stößen, die allerdings alle unter recht flachen Winkeln ablaufen und keine deutlichen Auswirkungen in der Masse-Kurve zeigen. Für $t \rightarrow \infty$ bewegen sich beide Strukturen parallel.

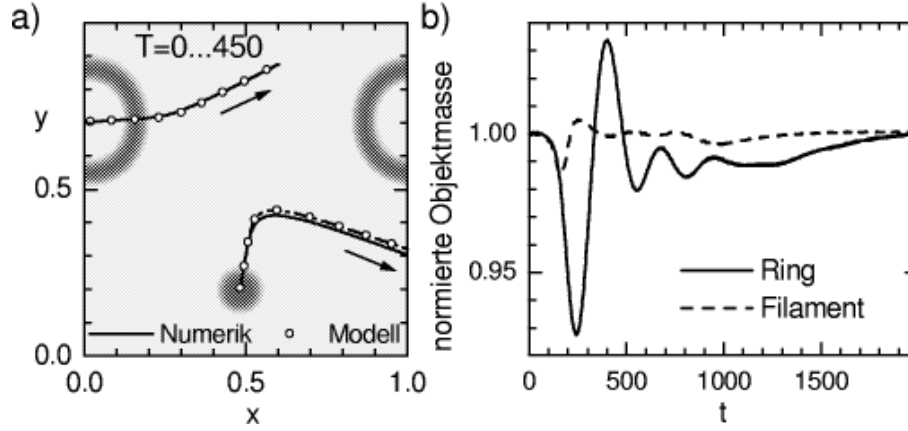


Abb. 4.42: a) Dargestellt sind die Trajektorien eines Rings und eines Filaments während eines Stoßprozesses für den Zeitrahmen $T=0 \dots 450$ für die Parameter aus (4.46) mit $\tau = 1.0075$. In Abbildung b) wurden die Aktivator-Massen der beiden Objekte normiert auf ihre Ruhemasse dargestellt. Durch den Stoßprozess wird die Mode $n = 0$ des Rings stark angeregt.

4.6 Koexistenz stehender und bewegter Filamente

Bei der analytischen Behandlung der Bewegung lokalisierter Strukturen im Grenzfall $\theta = 0$ und $D_v = 0$ findet man eine superkritische Pitchfork-Bifurkation zu laufenden Strukturen. In diesem Bild ist demnach eine Koexistenz von laufenden und stationären stabilen Strukturen nicht zu erwarten. Da aber durchaus experimentelle Systeme existieren, die eine solche Koexistenz aufweisen, stellt sich die Frage, ob es prinzipiell möglich ist in einem dreikomponentigen Gleichungssystem vom Typ (2.29) gleichzeitig stationäre und bewegte Strukturen zu finden.

Obwohl bei den Untersuchungen des Systems (2.29) eine Koexistenz von bewegten und stationären Lösungen nicht nachgewiesen werden konnte, ist es dennoch durch geeignete Manipulation der Reaktionsterme möglich zu einem System zu gelangen, dass diese Eigenschaft aufweist. Als Ausgangspunkt der folgenden Überlegungen dient das Gleichungssystem

$$\dot{u} = D_u \Delta u + f(u) - \kappa_3 v - \kappa_4 w + \kappa_1, \quad (4.48)$$

$$\dot{v} = F_\tau(u - v), \quad (4.49)$$

$$0 = D_w \Delta w + u - w. \quad (4.50)$$

Zunächst sei $F_\tau(x) = \frac{1}{\tau}x$ gewählt, so dass dieses Gleichungssystem dem analytisch untersuchten, dreikomponentigen Modell (2.29) entspricht. Die Funktion $F_\tau(x)$ ist in diesem Fall eine Ursprungsgerade und wurde in Abb. 4.43 für $\tau = 0.7$ und $\tau = 1.3$ eingezeichnet. Im Fall $\kappa_3 = 1$ sind Lösungen bei $\tau = 0.7$ stationär, während sie sich bei $\tau = 1.3$ bewegen. Da im stationären Fall das Argument $u - v$ der Funktion F_τ identisch verschwindet, hängt die Stabilität stationärer Lösungen lediglich von der Steigung von F_τ im Ursprung

ab. Im Fall bewegter Lösungen verschwindet der Term $u - v$ nicht. Wenn man nun eine Funktion $F_\tau(x)$ konstruiert deren Steigung im Ursprung dem stationären Fall entspricht, die aber für $x > x_{\text{crit}}$ in den Reaktionsterm des dynamischen Falls übergeht, so sind die Voraussetzungen für die Koexistenz von stationären und bewegten Filamenten geschaffen, sofern x_{crit} klein genug gewählt wird.

Dem beschriebenen Konstruktionsprinzip folgend, wird für die Reaktionskinetik die Definition

$$F_\tau(x) := \frac{(x/x_{\text{crit}})^2 \tau + \Delta\tau + \tau}{(x/x_{\text{crit}})^2 + 1} \tau (\Delta\tau + \tau) x \quad (4.51)$$

verwendet. Die Steigung dieser Funktion im Nullpunkt ist $1/\tau$ und für $x \rightarrow \infty$ geht sie in die Ursprungsgerade mit der Steigung $1/(\tau + \Delta\tau)$ über. Die Definition (4.51) wirkt relativ kompliziert, liefert aber exakt die Eigenschaften, die gefordert wurden und spiegelt so das Konstruktionsprinzip wieder. Wahrscheinlich ist es auch möglich einfachere Funktionen $F_\tau(x)$ zu finden, die einen Koexistenzbereich stationärer und dynamischer Lösungen zeigen. In Abb. 4.43 a) wurde die Funktion F_τ für $\tau = 0.7$, $\Delta\tau = 0.6$ und $x_{\text{crit}} = 0.01$ eingezeichnet.

Um die Eigenschaften dieses neuen Systems zu überprüfen wurden zunächst Simulationen eines eindimensionalen Systems bei den Parametern

$$\begin{aligned} D_u &= 2 \times 10^{-3}, D_w = 0.03, \\ \lambda &= 2.8, \kappa_1 = -0.32, \kappa_3 = \kappa_4 = 1, \\ \Delta\tau &= 0.15, x_{\text{crit}} = 0.05, L = 5 \end{aligned} \quad (4.52)$$

mit zyklischen Randbedingungen und der Diskretisierung $\Delta x = 0.025$ und $\Delta t = 0.2$ durchgeführt. In diesem Parameterbereich findet man für $\tau = 0$ stationäre Filamente. In der Simulation wurde der Parameter τ zwischen 0.8 und 1.05 variiert. Die Geschwindigkeit der Filamente ist in Abb. 4.43 b) als Funktion von τ dargestellt. Man erkennt deutlich das für subkritische Bifurkationen typische hysteretische Verhalten. Im Parameterbereich $\tau = [0.863, 0.978]$ findet man in dieser Simulation die Koexistenz zwischen bewegten und stationären Filamenten.

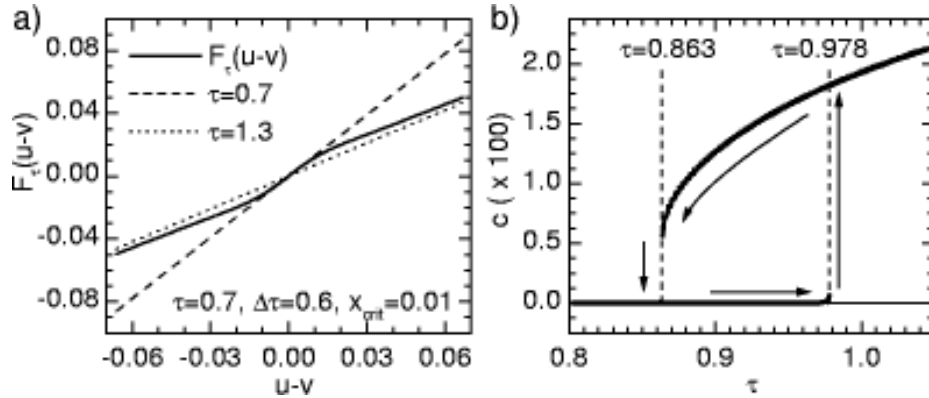


Abb. 4.43: a) Darstellung des Reaktionsterms $F_\tau(x)$: Der Standardfall entspricht Ursprungsgeraden mit der Steigung $1/\tau$. Um eine subkritische Bifurkation der Geschwindigkeit zu finden wird eine Funktion F_τ mit der Definition aus (4.51) verwendet. b) Dargestellt ist die Geschwindigkeit eines eindimensionalen Filaments für die Parameter aus (4.52) für τ im Intervall $[0.8, 1.05]$. Man findet einen Bistabilitätsbereich, in dem sowohl stationäre als auch dynamische Lösungen existieren.

Eine analytische Behandlung der Teilchenbewegung bzw. der Teilchenwechselwirkung ist mit dem nichtlinearen Reaktionsterm F_τ allgemein nicht mehr möglich. So kann zwar der Destabilisierungspunkt für stationäre Strukturen an der Steigung von F_τ im Ursprung abgelesen werden, weiter gehende Informationen gewinnt man allerdings nicht. Um dennoch einen Überblick über einige mögliche Phänomene zu geben, sollen im Folgenden einige Stoßprozesse in zwei Raumdimensionen diskutiert werden. Der verwendete Parametersatz ist

$$\begin{aligned}
 D_u &= 1.1 \times 10^{-4}, \quad D_w = 9.64 \times 10^{-4}, \quad \lambda = 1.01, \\
 \kappa_1 &= -0.1, \quad \kappa_2 = 0, \quad \kappa_3 = 0.3, \quad \kappa_4 = 1, \\
 \Delta t &= 0.25, \quad \Delta x = 0.0068, \quad x_{\text{crit}} = 0.025, \quad \Delta \tau = 0.5.
 \end{aligned}
 \tag{4.53}$$

Bis auf die nichtlineare Kennlinie des langsamen Inhibitors v entspricht dieser Parametersatz dem aus Abschnitt 4.2.3. Die Filamente zeigen in diesem Parameterbereich stark oszillierende Ausläufer und es gibt einen Bereich attraktiver Wechselwirkung.

Für $\tau = 3.1$ ist bereits eine Koexistenz laufender und stationärer Strukturen möglich. In Abb. 4.44 a) sind die Bahnen zweier Filamente während eines Stoßprozesses eingezeichnet. Filament 1 bewegt sich bei $t = 0$ in die durch den Pfeil angedeutete Richtung, Filament 2 ist stationär. In Abb. 4.44 b) ist die Geschwindigkeit der beiden Teilchen als Funktion der Zeit dargestellt. Die markierten Punkte entsprechen dabei den Zeitpunkten aus der Abb. a). Der Wechselwirkungsprozess zeigt sich in der Verringerung der Geschwindigkeit von Filament 1 und der kurzzeitigen Beschleunigung von Filament 2. Durch den Stoß wird in diesem Fall die Geschwindigkeit des bewegten Teilchens so weit abgesenkt, dass es in den stationären Zustand übergeht. Es findet noch eine schwache Drehbewegung statt, bevor der entstandene Zweier-Cluster endgültig stationär wird.

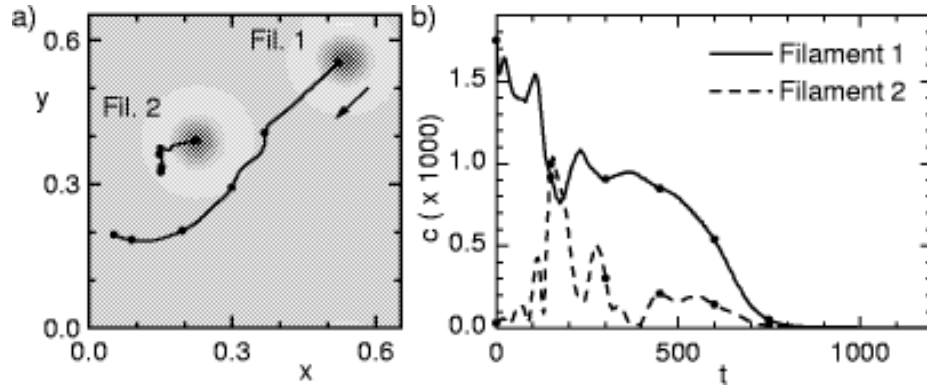


Abb. 4.44: a) Stoßprozess eines ruhenden (2) und bewegten (1) Quasiteilchens: Eingezeichnet sind die Trajektorien. Die Aktivator-Anfangsverteilung ist als Graustufenbild hinterlegt. In Abb. b) sind die Geschwindigkeiten der beiden Objekte als Funktion der Zeit dargestellt. Die Parameter der Rechnung waren aus (4.53) sowie $\tau = 3.1$.

Durch eine Erhöhung des Parameters τ können die Stabilitätsverhältnisse zugunsten der bewegten Lösung verschoben werden. In Abb. 4.45 a) sind die Trajektorien für die gleichen Parameter und Anfangsbedingungen, sowie $\tau = 3.125$ dargestellt. In Abb. 4.45 b) sind die zugehörigen Geschwindigkeiten als Funktion der Zeit gezeigt. Der Stoßprozess beginnt sehr ähnlich. Das bewegte Teilchen wird abgebremst, das andere leicht angestoßen. In der Summe kann das bewegte Teilchen nicht gänzlich abgebremst werden. Durch die attraktive Wechselwirkung zieht es das Filament 2 hinter sich her und überführt es damit in den bewegten Zustand. Es bildet sich eine komplizierte Bewegungsform, in der abwechselnd Filament 1 und Filament 2 die Führungsrolle übernehmen. In Abb. b) erkennt man anhand der Geschwindigkeiten sehr gut, wie die Objekte sich in ihren Rollen abwechseln. Bei einer weiteren Erhöhung des Parameters τ auf 3.15 findet man wieder einfachere Verhältnisse. Die bewegten Lösungen sind in diesem Fall deutlich stabiler und das laufende Quasiteilchen kann durch den Stoß das Stationäre in den bewegten Zustand überführen. Es bildet sich ein gleichförmig bewegter Doppelpot.

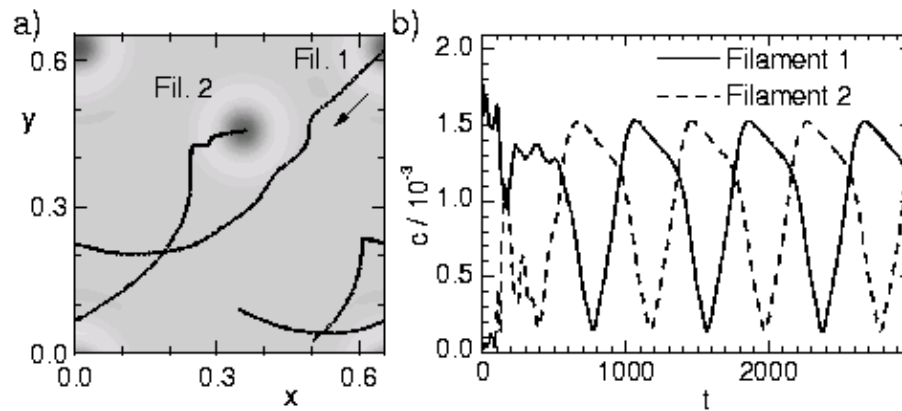


Abb. 4.45: a) Stoßprozess eines ruhenden (2) und bewegten (1) Quasiteilchens: Eingezeichnet sind die Trajektorien für $t = 0$ bis 1000. Die Aktivator-Anfangsverteilung ist als Graustufenbild hinterlegt. In Abb. b) sind die Geschwindigkeiten der beiden Objekte als Funktion der Zeit dargestellt. Die Parameter der Rechnung waren (4.53), sowie $\tau = 3.125$.

Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurde die Dynamik lokalisierter Strukturen in verschiedenen Reaktions-Diffusions-Systemen untersucht. Zunächst wurden die grundlegenden Eigenschaften von ein-, zwei- und dreikomponentigen Reaktions-Diffusions-Medien besprochen. Es konnte gezeigt werden, dass die realisierbare Strukturvielfalt mit der Zahl der Komponenten anwächst. Insbesondere wurde die Wellen-Bifurkation in dreikomponentigen Systemen diskutiert, die einen gegenüber zweikomponentigen Systemen grundlegend neuen Destabilisierungsmechanismus darstellt. Es konnten Amplitudengleichungen in einer endlichdimensionalen, zentralen Mannigfaltigkeit hergeleitet werden, die in der Lage sind grundsätzliche Fragen nach der relativen Stabilität von Hexagonen, Streifen oder bewegten Streifen zu beantworten. Für eine detailliertere Analyse solcher Strukturen wäre nun eine Beschreibung auf der Basis eines Ginzburg-Landau-Formalismus wünschenswert. Dieser umfasst nicht nur wenige Moden, sondern auch deren, im Sinne der Bifurkationszeitskala, langsame, raum-zeitliche Variation [41]. Auch die Analyse der Konkurrenz zwischen Turing- und Wellen-Moden am Kodimension-2-Punkt $\tau = 1/\kappa_3$ kann weiterführende Einsichten bringen – insbesondere da experimentelle Bifurkationsszenarien existieren, die der theoretischen Situation zumindest phänomenologisch entsprechen.

Durch eine numerische Untersuchung konnten der Existenzbereich und die Stabilität rotationssymmetrischer stationärer Strukturen in einem zweikomponentigen System mit fünf Parametern mit geringen Einschränkungen angegeben werden. Die so berechneten Strukturen dienten als Ausgangspunkt für die Stabilitätsanalyse des um einen Inhibitor erweiterten dreikomponentigen Systems. Diese Analyse zeigte wesentliche neue Merkmale gegenüber zweikomponentigen Systemen, nämlich die Möglichkeit einer primären Bifurkation in der Mode $n = 1$ ohne eine globale Rückkopplung, die auch in zwei- oder dreidimensionalen Systemen zu lokalisierten, bewegten Strukturen führen kann. Es konnte gezeigt werden, dass für diese Eigenschaft lediglich die Existenz eines genügend schnellen und eines genügend langsamen Inhibitors vorausgesetzt werden muss. Desweiteren haben die Beispiele, unter anderem auch das eines Halbleitersystems, gezeigt, dass die lineare Stabilitätsanalyse großamplitudiger Strukturen ein sehr nützliches Mittel bei der Untersuchung der Dynamik in sehr unterschiedlichen Reaktions-Diffusions-Systemen darstellt und weitreichende Informationen über die Eigenschaften des Systems an den Destabilisierungsgrenzen liefern kann.

Aufbauend auf den Ergebnissen über die Existenz- und Stabilitätseigenschaften lokalisierter Strukturen konnte im Folgenden ein Modell hergeleitet werden, das sowohl die Bewegung als auch die Wechselwirkung dieser Quasiteilchen beschreibt. Diese Ergebnisse basierten auf der Annahme von zwei Freiheitsgraden pro Raumdimension: der Position des Objekts und der Verschiebung des Inhibitors bezüglich des Aktivators. Das Modell konnte für etliche Spezialfälle erweitert werden. Dazu zählen die Wechselwirkung zwischen unterschiedlichen Objekten, mit Inhomogenitäten, Viel-Teilchen-Effekte oder die Dynamik asymmetrischer Strukturen. Weiterführende Untersuchungen könnten auch die Möglichkeit von Vernichtungs- oder Generationsprozessen berücksichtigen. Ein möglicher Ansatzpunkt für analytische Untersuchungen in dieser Richtung stellt die Berücksichtigung einer Eigenmode mit $n = 0$ in der Störungsrechnung dar. Die Existenz einer solchen Mode mit schwach negativem Realteil des Eigenwerts wurde numerisch bereits nachgewiesen und ein quadratischer Einfluss auf die Teilchengeschwindigkeit beobachtet. Eine genügend große Anregung könnte daher je nach Vorzeichen als Teilungs- oder Vernichtungsprozess interpretiert werden. Einen interessanten Spezialfall stellte die Dynamik von Quasiteilchen im Bereich der Koexistenz von stationären und dynamischen Strukturen dar. Auch in diesem Fall könnte die Herleitung von Bewegungsgleichungen aus einer Störungsrechnung durchgeführt werden, indem beispielsweise die Deformation der Inhibitorodynamik als klein aufgefasst wird.

Durch numerische Untersuchungen konnte die Gültigkeit der abgeleiteten Bewegungsgleichungen sowohl für Einzelobjekte als auch für Teilchenwechselwirkungen bestätigt werden. Dabei wurden vorwiegend Rechnungen in der Nähe des Bifurkationspunktes zu laufenden Strukturen durchgeführt, so dass lediglich die $n = 1$ -Eigenmoden destabilisiert wurden und die Voraussetzungen der Störungstheorie gut erfüllt waren. In größerem Abstand zum Bifurkationspunkt traten auch Teilchenvernichtungen bzw. die Verschmelzung von Teilchen als Folge von Stößen auf. Dabei konnten die verschiedenen Phänomene in Abhängigkeit der Zeitkonstanten τ und damit der Teilchengeschwindigkeit qualitativ beschrieben werden. Im Hinblick auf Stoßprozesse wurden auch in dreidimensionalen Systemen bereits etliche Fälle untersucht. Besonders erwähnenswert ist dort die kurzzeitige Verschmelzung zweier Spots beim Stoß, der auf eine geringe gegenseitige Abstoßung bzw. auf eine große Teilchengeschwindigkeit zurückgeführt werden kann. In den bisherigen dreidimensionalen Simulationen wurde in der Folge eines Stoßes lediglich die Generation von zwei neuen Teilchen wie sie bereits aus zweidimensionalen Systemen bekannt ist beobachtet. Prinzipiell wäre bei einer weiteren Geschwindigkeitserhöhung auch die Generation von drei und mehr Spots denkbar, so dass ein echt dreidimensionales Phänomen vorläge.

Die Beschreibung der Bewegung von lokalisierten Strukturen in den betrachteten Systemen ermöglichte den Übergang von der mikroskopischen Ebene zu einer makroskopischen Sichtweise. Ähnlich wie bei der Beschreibung periodischer Strukturen durch wenige relevante Fourier-Moden, konnte auch für die hier betrachteten lokalisierten Strukturen eine Reduktion der Dynamik auf wenige relevante Freiheitsgrade durchgeführt werden. Beispielsweise die Untersuchung von Viel-Teilchen-Prozessen war so ohne die zeitaufwendige numerische Lösung der mikroskopischen Gleichungen möglich. Das Verständnis von Strukturbildungsprozessen in diesen Systemen konnte so wesentlich verbessert werden. Auch in Parameterbereichen, die der durchgeführten Störungsrechnung nicht zugänglich sind, konnte das Teilchenbild immer noch qualitativ die Dynamik erklären.

Anhang

A.1 Greensche Funktion des Diffusionsproblems

Mit Hilfe der greenschen Funktionen $g(x - x')$ mit $x, x' \in \mathbf{R}^d$ der Gleichung

$$0 = D_w \Delta w(x) - w(x) + u(x) \quad (\text{A.54})$$

ist es formal möglich die Gleichung nach der Funktion $w(x)$ aufzulösen und diese als Integral

$$w(x) = \int_G g(x - x') w(x') dg' \quad (\text{A.55})$$

darzustellen. Die greensche Funktion ist in diesem Fall die Lösung der Gleichung

$$D_w \Delta g(x) - g(x) = -\delta(x). \quad (\text{A.56})$$

Aufgrund der Rotationssymmetrie lässt sich das Problem in Polarkoordinaten bzw. Kugelkoordinaten behandeln:

$$D_w(g_{rr}(r) + \frac{(d-1)}{r}g_r(r)) - g(r) = -\delta(r). \quad (\text{A.57})$$

Für $r > 0$ sind die 2 linear unabhängigen, homogenen Lösungen dieser Gleichung bekannt. Für $r \rightarrow \infty$ müssen die Lösungen gegen 0 abklingen, so dass lediglich ein Koeffizient zu bestimmen bleibt. Die Anschlussbedingung an $r = 0$ erhält man durch die Integration über eine Kugel um 0 mit Radius ε im Grenzfall $\varepsilon \rightarrow 0$. Es ergeben sich die folgenden Funktionen:

$$\text{d=1: } g(x - x') = \frac{1}{2\sqrt{D_w}} \exp\left(-\frac{|x - x'|}{\sqrt{D_w}}\right) \quad (\text{A.58})$$

$$\text{d=2: } g(x - x') = \frac{1}{2\sqrt{\pi D_w}} K_0\left(\frac{|x - x'|}{\sqrt{D_w}}\right) \quad (\text{A.59})$$

$$\text{d=3: } g(x - x') = \frac{1}{4\pi|x - x'|D_w} \exp\left(-\frac{|x - x'|}{\sqrt{D_w}}\right) \quad (\text{A.60})$$

$K_0(x)$ bezeichnet die modifizierte Besselfunktion 2. Gattung 0. Ordnung.

A.2 Herleitung von Amplitudengleichungen

In diesem Abschnitt soll die Dynamik von kleinamplitudigen, in der Folge einer Wellen-Bifurkation abzweigender Lösungen bestimmt werden. Es wird die Methode der zentralen Mannigfaltigkeit verwendet. Um Lösungen beschreiben zu können, die in einer Pitchfork-Bifurkation abzweigen, ist eine Approximation der Dynamik bis zur Ordnung $\varepsilon^{3/2}$ erforderlich, wenn der Bifurkationsparameter ε über $\varepsilon := f'(u^{(f)}) - f'_c$ definiert ist.

Die Gleichungen (1.17)-(1.18) werden nun im Fall $D_v = 0$ betrachtet und die Nichtlinearität um den homogenen Zustand entwickelt. Man gelangt zu dem Gleichungssystem

$$\dot{u} = D_u \Delta u + (f'_c + \varepsilon)u - \kappa_3 v - \int_{\mathbf{R}^2} g(x - x') u(x') dx' + \frac{f''}{2} u^2 + \frac{f'''}{6} u^3, \quad (\text{A.61})$$

$$\tau \dot{v} = u - v, \quad (\text{A.62})$$

in dem $f'_c + \varepsilon$, f'' und f''' für die Ableitungen der Nichtlinearität im Fixpunkt $u^{(f)}$ stehen. Die kritische Steigung im Fall der Wellen-Bifurkation liegt bei $f'_c = f'_{\text{Wel}} = -\sigma + 2\sqrt{\sigma} + 1/\tau$. Als Grundgebiet wird das Parallelogramm mit den Basiskanten $e_1 = (L, 0)$ und $e_2 = (L/2, L\sqrt{3}/2)$ mit zyklisch geschlossenen Rändern verwendet. Die Kantenlänge L sei so gewählt, dass eine Mode mit der kritischen Wellenzahl k_c am Bifurkationspunkt die Randbedingungen erfüllt. Diese auf den ersten Blick sehr konstruiert erscheinenden Bedingungen ermöglichen die Diskussion der experimentell und numerisch dominierend auftretenden hexagonalen und streifenförmigen Strukturen und deren relative Stabilität. Die Integraldarstellung des schnellen Inhibitors kann trotz des endlichen Gebiets weiterhin verwendet werden, da ausschließlich periodisch fortsetzbare Funktionen bei der Integration auftreten. Die Beschränkung auf ein endliches Grundgebiet führt allerdings dazu, dass beim Überschreiten der Destabilisierungsgrenze zunächst nur die sechs Moden mit den Wellenvektoren aus Gleichung (1.26) instabil werden. Mit diesen Wellenvektoren können sowohl Streifen als auch Hexagone dargestellt werden. Die folgende Bestimmung der zentralen Mannigfaltigkeit wird bis auf eine Genauigkeit von $O(\varepsilon^{3/2})$ durchgeführt, die ausreicht, die in einer Pitchfork-Bifurkation abzweigenden Streifen zu beschreiben. Im Fall einer Pitchfork-Bifurkationen skalieren die Amplituden der kritischen Moden mit $\sqrt{\varepsilon}$. Die zentrale Mannigfaltigkeit wird durch die Basis-Funktionen

$$\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1/(1 + i\omega_c \tau) \end{pmatrix} E(A_i(t), \omega_c, k_i) \text{ mit } i = 1, \dots, 6 \quad (\text{A.63})$$

aufgespannt, ist also 12-dimensional, da die Koeffizienten A_i im Allgemeinen nicht reell sind. Der Zusammenhang zwischen Aktivator und Inhibitor ergibt sich direkt aus der Inhibitorgleichung und gilt aufgrund ihrer Linearität auch bei einer beliebigen Superposition von Moden. Im Folgenden soll zunächst lediglich die Dynamik für $A_1(t)$ berechnet werden.

Durch die Nichtlinearität bedingt werden verschiedene Moden der stabilen Mannigfaltigkeit angeregt. Die Amplituden der Moden in der stabilen Mannigfaltigkeit skalieren mit

ε , daher genügt es im Rahmen der geforderten Genauigkeit die folgenden 12 Moden

$$k_{s,i} = k_1 - k_i, \omega_{s,i} = 0 \quad \text{für } i = 1, \dots, 6 \quad (\text{A.64})$$

$$k_{s,i} = k_1 - k_{i-6}, \omega_{s,i} = 2\omega_c \quad \text{für } i = 7, \dots, 12 \quad (\text{A.65})$$

zu berücksichtigen. Nur diese 12 Moden ergeben nach Einsetzen in die Nichtlinearitäten noch relevante Beiträge in der Mode A_1 . Weiter müssen die Amplituden $A_{s,i}$ der jeweiligen stabilen Moden berechnet werden. Dazu wird der Ansatz

$$\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \sum_{i=1, \dots, 12} \left(\frac{1}{1+i\omega_{s,i}\tau} \right) E(A_{s,i}, \omega_{s,i}, k_{s,i}) + \quad (\text{A.66})$$

$$\sum_{j=1, \dots, 6} \left(\frac{1}{(1+i\omega_c\tau)} \right) E(A_j, \omega_c, k_j) \quad (\text{A.67})$$

in das Gleichungssystem (A.61)-(A.62) eingesetzt. Die Zeitableitung, kubische Terme, sowie alle quadratisch auftretenden Anteile der stabilen Mannigfaltigkeit können vernachlässigt werden. Durch Projektion auf die verschiedenen stabilen Moden $(\omega_{s,i}, k_{s,i})$ ergeben sich nun die Amplituden $A_{s,i}$. Man gelangt für die verschiedenen Wellenzahlen zu den Ausdrücken

$$A_{s,1} = -f'' K_{4,0} A_4^* A_1, \quad (\text{A.68})$$

$$A_{s,2} = -f'' K_{3,0} (A_5^* A_1 + A_4^* A_2), \quad (\text{A.69})$$

$$A_{s,3} = -f'' K_{1,0} (A_6^* A_1 + A_4^* A_3), \quad (\text{A.70})$$

$$A_{s,4} = -1/2 f'' K_{0,0} \left(\sum_{i=1, \dots, 6} |A_i|^2 \right), \quad (\text{A.71})$$

$$A_{s,5} = -f'' K_{1,0} (A_2^* A_1 + A_4^* A_5), \quad (\text{A.72})$$

$$A_{s,6} = -f'' K_{3,0} (A_3^* A_1 + A_4^* A_6), \quad (\text{A.73})$$

$$A_{s,7} = -1/2 f'' K_{4,2\omega_c} A_1^2, \quad (\text{A.74})$$

$$A_{s,8} = -f'' K_{3,2\omega_c} A_1 A_2, \quad (\text{A.75})$$

$$A_{s,9} = -f'' K_{1,2\omega_c} A_1 A_3, \quad (\text{A.76})$$

$$A_{s,10} = -f'' K_{0,2\omega_c} (A_1 A_4 + A_2 A_5 + A_3 A_6), \quad (\text{A.77})$$

$$A_{s,11} = -f'' K_{1,2\omega_c} A_1 A_5, \quad (\text{A.78})$$

$$A_{s,12} = -f'' K_{3,2\omega_c} A_1 A_6, \quad (\text{A.79})$$

wobei die Konstanten $K_{n,\omega}$ definiert sind durch

$$K_{n,\omega} := \left(2(-n\sigma k_c^2 - \frac{\kappa_3}{1+i\tau\omega} - i\omega + f' - \frac{1}{1+nk_c^2}) \right)^{-1}. \quad (\text{A.80})$$

Die Kenntnis der Amplituden $A_{s,i}$ erlaubt nun die Berechnung der Dynamik in der zentralen Mannigfaltigkeit. Dazu wird der gewonnene Ausdruck wiederum in das Gleichungssystem eingesetzt und auf die kritische Mode (ω_c, k_1) projiziert. Man gewinnt das

Gleichungssystem

$$\begin{aligned} \dot{A}_1 = & \varepsilon A_1 + A_1 \left(\alpha_1 |A_1|^2 + \alpha_2 (|A_2|^2 + |A_6|^2) + \alpha_3 (|A_3|^2 + |A_5|^2) + \alpha_4 |A_4|^2 \right) \\ & + \beta (A_4^* (A_2 A_5 + A_3 A_6)). \end{aligned} \quad (\text{A.81})$$

Die Gleichungen für die anderen fünf Amplituden A_i ergeben sich aus Symmetriegründen durch Indexrotation. Die Konstanten α_i und β ergeben sich zu

$$\alpha_1 = \frac{1}{8} \left(f''' - (4K_{0,0} + 2K_{4,2\omega_c})(f'')^2 \right), \quad (\text{A.82})$$

$$\alpha_2 = \frac{1}{2} \left(f'''/2 - (K_{0,0} + K_{1,0} + K_{3,2\omega_c})(f'')^2 \right), \quad (\text{A.83})$$

$$\alpha_3 = \frac{1}{2} \left(f'''/2 - (K_{0,0} + K_{3,0} + K_{1,2\omega_c})(f'')^2 \right), \quad (\text{A.84})$$

$$\alpha_4 = \frac{1}{2} \left(f'''/2 - (K_{0,0} + K_{4,0} + K_{0,2\omega_c})(f'')^2 \right), \quad (\text{A.85})$$

$$\beta = -\frac{1}{2} (K_{1,0} + K_{3,0} + K_{0,2\omega_c})(f'')^2. \quad (\text{A.86})$$

Der Fall der Turing-Bifurkation wurde bereits bei Schütz [75] behandelt. Die zentrale Mannigfaltigkeit ist dort lediglich sechs-dimensional. Es ergibt sich nach analoger Vorgehensweise das Gleichungssystem

$$\dot{A}_1 = \varepsilon A_1 + \frac{f''}{2} A_3^* A_5^* + \alpha_T |A_1|^2 A_1 + \beta_T (|A_3|^2 + |A_5|^2) A_1, \quad (\text{A.87})$$

mit den Koeffizienten

$$\alpha_T = \frac{1}{8} f''' - \left(\frac{1}{4} K_{4,0} + \frac{1}{2} K_{0,0} \right) (f'')^2, \quad (\text{A.88})$$

$$\beta_T = \frac{1}{4} f''' - \left(\frac{1}{2} K_{3,0} + \frac{1}{2} K_{0,0} \right) (f'')^2. \quad (\text{A.89})$$

Im Gegensatz zur Wellen-Bifurkation können bei der Turing-Bifurkation zwei kritische Moden jeweils in die dritte Mode einkoppeln und das transkritische Abzweigen eines Lösungsastes aus Hexagonen ermöglichen.

A.3 Behandlung der Nichtlinearität in der Störungsrechnung

Mit dem Ansatz (3.13)-(3.14) zur Lösung des Problems (3.2)-(3.3) ergibt sich ein nichtlinearer Term der Form

$$N(\bar{u}_1 + \bar{u}_2 + \varepsilon^2 r_u + \varepsilon^3 R_u). \quad (\text{A.90})$$

Um diesen Term befriedigend behandeln zu können ist eine Zerlegung notwendig. Da die Störungsrechnung nur bis zur Ordnung ε^3 getrieben wird, können Terme höherer Ordnung vernachlässigt werden. Eine Taylorentwicklung nach ε führt nicht zu einer sinnvollen Zerlegung, da die Lösungen \bar{u}_1 und \bar{u}_2 in Abhängigkeit des Ortes über Größenordnungen von ε^2 variieren. Mit der Voraussetzung der Störungsrechnung, dass am Ort von Filament i die jeweils andere Lösung bereits auf Ordnung ε^2 abgeklungen ist, ist die korrekte Beurteilung, in welchen Ordnungen die jeweiligen Terme auftreten, in Verbindung mit der Projektion auf die adjungierten Moden möglich. Die Projektionen erfolgen auf die adjungierten Goldstone- bzw. Propagator-Moden, also im Prinzip auf $\bar{u}_{1,x}$, wenn die Gleichungen für Teilchen \bar{u}_1 hergeleitet werden. Die Nichtlinearität wird daher zunächst als Polynom vom Grad größer gleich zwei aufgefasst und jeder Term nach Projektion auf $\bar{u}_{1,x}$ nach Ordnungen ε sortiert. Es ergibt sich

$$(\bar{u}_1 + \bar{u}_2 + \varepsilon^2 r_u + \varepsilon^3 R_u)^i = \sum_{\substack{N=(n_1, n_2, n_3, n_4) \\ \sum_j n_j = i}} \frac{(\sum_j n_j)!}{\prod_j n_j!} \bar{u}_1^{n_1} \bar{u}_2^{n_2} (\varepsilon^2 r_u)^{n_3} (\varepsilon^3 R_u)^{n_4}. \quad (\text{A.91})$$

An den Multi-Indizes N können die Ordnungen direkt abgelesen werden. Jedes Produkt \bar{u}_1 bzw. $\bar{u}_{1,x}$ mit \bar{u}_2 ergibt einen Faktor ε^2 . Ein Term mit dem Multi-Index N ist daher nach der Projektion auf $\bar{u}_{1,x}$ von der Ordnung

$$2 \min(1 + n_1, n_2) + 2n_3 + 3n_4 \quad \text{in} \quad \varepsilon. \quad (\text{A.92})$$

Die verbleibenden Terme lassen sich neu ordnen und unterschiedliche Potenzen in i können wieder zusammengefasst werden, so dass sich

$$N(\bar{u}_1) + N(\bar{u}_2) + N'(\bar{u}_1)(\bar{u}_2 + \varepsilon^2 r_u + \varepsilon^3 R_u) + O(\varepsilon^4) \quad (\text{A.93})$$

ergibt. Es sei nochmals betont, dass diese Näherung nur für die Herleitung der Gleichung für die Lösung \bar{u}_1 gilt. Für die andere Lösung ergibt sich der entsprechende Term durch Indexrotation.

A.4 Numerische Lösungsmethoden

In diesem Anhang soll anhand einer allgemeinen Formulierung eines Reaktions-Diffusions-Problems das numerische Integrationsverfahren dargestellt werden, das zur Lösung der untersuchten Differentialgleichungssysteme verwendet wurde. Den Ausgangspunkt stellt das folgende parabolische Reaktions-Diffusions-Problem für die Variablen $u = u(r, t), v = v(r, t), \dots$ in der Form

$$\dot{u} = D_u \Delta u + F_u(u, v, \dots), \quad (\text{A.94})$$

$$\dot{v} = D_v \dots \quad (\text{A.95})$$

\vdots

dar, mit den skalaren Diffusionskonstanten D_u, D_v, \dots und beliebigen Funktionen F_u, \dots der beteiligten Komponenten. Das Grundgebiet war in den meisten Fällen quadratisch oder rechteckig, als Ränder wurden Neumann- oder zyklisch geschlossene Ränder verwendet.

Das Gleichungssystem wurde zunächst mittels finiter Differenzen diskretisiert. In der diskretisierten Form werden die Verteilungen mit

$$u(x, y, t) \Leftrightarrow u_{i,j}^k \quad (\text{A.96})$$

bezeichnet, wobei die Indizes i und j den Ort in Diskretisierungspunkten und k den Zeitschritt bezeichnen. Die Zeitschrittweite wird im Folgenden als Δt , die Diskretisierungslänge als Δx angegeben. Verwendet man für den Laplace-Operator eine Fünf-Punkt-Formel, für die Zeitableitung den gewöhnlichen Differenzenquotienten und ein halb-implizites Crank-Nicolson-Integrationschema so gelangt man zu der diskretisierten Form des Gleichungssystems (A.94)

$$\frac{u_{i,j}^{k+1} - u_{i,j}^k}{\Delta t} = D_u \frac{u_{i+1,j}^{k+\frac{1}{2}} + u_{i-1,j}^{k+\frac{1}{2}} + u_{i,j+1}^{k+\frac{1}{2}} + u_{i,j-1}^{k+\frac{1}{2}} - 4u_{i,j}^{k+\frac{1}{2}}}{\Delta x^2} + F_u(u_{i,j}^{k+\frac{1}{2}}, v_{i,j}^{k+\frac{1}{2}}, \dots), \quad (\text{A.97})$$

mit den Bezeichnungen $u_{i,j}^{k+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(u_{i,j}^{k+1} + u_{i,j}^k)$ für den Mittelwert zwischen den Verteilungen zur Zeit k und $k+1$. Bei dieser Formulierung handelt es sich um ein implizites Gleichungssystem für $u_{i,j}^{k+1}$. Selbst wenn F_u eine lineare Funktion wäre, müsste zur direkten Lösung eine $N \times N$ -Matrix invertiert werden, wenn N die Gesamtzahl der Stützpunkte bezeichnet. Da dieser Weg nicht gangbar ist, wird das Gleichungssystem iterativ gelöst. Dazu wird die Funktion F_u um $u_{i,j}^k$ linearisiert und die Gleichung soweit wie möglich nach $u_{i,j}^{k+1}$ aufgelöst. Es ergibt sich die folgende Iterationsvorschrift zur Berechnung einer verbesserten Lösung $u_{i,j}^{k+1,\text{neu}}$ aus dem jeweils vorhergehenden Lösungsversuch $u_{i,j}^{k+1}$:

$$u_{i,j}^{k+1,\text{neu}} = \frac{1}{(1 + \Delta t (\frac{2D_u}{\Delta x^2} + \partial_u F_u(u_{i,j}^k, v_{i,j}^k, \dots)))} \times \quad (\text{A.98})$$

$$\left[u_{i,j}^k + \Delta t \left(D_u \frac{u_{i+1,j}^{k+\frac{1}{2}} + u_{i-1,j}^{k+\frac{1}{2}} + u_{i,j+1}^{k+\frac{1}{2}} + u_{i,j-1}^{k+\frac{1}{2}} - 2u_{i,j}^k}{\Delta x^2} + F_u(u_{i,j}^{k+\frac{1}{2}}, v_{i,j}^{k+\frac{1}{2}}, \dots) - \partial_u F_u(u_{i,j}^k, v_{i,j}^k, \dots) u_{i,j}^{k+1} \right) \right].$$

Der gesamte Ablauf zur Berechnung eines Zeitschrittes von k nach $k+1$ ist in Abb. A.1 dargestellt. Gestartet wird das Verfahren mit $u_{i,j}^{k+1} = u_{i,j}^k$. Für alle Punkte i, j des Grundgebiets wird nun jeweils die Korrektur $\Delta u_{i,j} = u_{i,j}^{k+1, \text{neu}} - u_{i,j}^{k+1}$ aus der Gleichung (A.98) bestimmt und angebracht. Man gelangt so zu einer verbesserten Lösung für $u_{i,j}^{k+1, \text{neu}}$. Diese Schleife wird wiederholt, bis die Änderung der zu berechnenden Verteilung ein globales Fehlerkriterium f_{MAX} unterschreitet. Betrachtet man mehrkomponentige Systeme, so ist für jede Komponente die entsprechende Korrektur anzubringen.

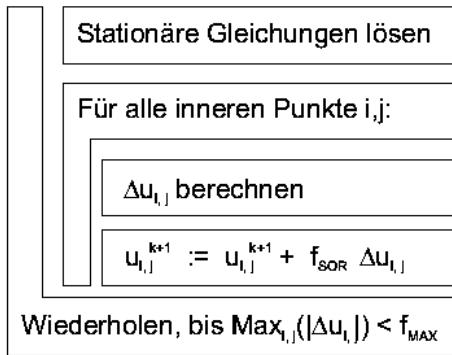


Abb. A.1: Ablaufdiagramm für die numerische Integration zur Bestimmung der Verteilung $u_{i,j}^{k+1}$ aus $u_{i,j}^k$: Bis zum Erreichen der gewünschten Genauigkeit f_{MAX} wird jeweils über alle inneren Punkte iteriert und die Verteilung $u_{i,j}^{k+1}$ wird verbessert. Betrachtet man parallel auch stationäre Gleichungen, so sind diese vor jeder inneren Iteration bis zur Genauigkeit f_{MAX} zu lösen.

Um eine schnelle Konvergenz des Verfahrens zu erzielen, erfolgt die Abarbeitung der Schleife über die Punkte i, j nach dem sogenannten Red-Black-Gauss-Seidel-Schema. Das Diskretisierungsgitter wird hier mit einem Schachbrett verglichen. Zunächst wird nur über die weißen, danach über die schwarzen Felder iteriert. Ein zweiter Punkt ist der Einsatz des „Successive Overrelaxation“-Verfahrens (SOR). Die Korrektur $\Delta u_{i,j}$, wie sie sich aus Gleichung (A.98) ergibt, wird mit einem festen Faktor $f_{\text{SOR}} \in]0, 2[$ multipliziert. Für $f_{\text{SOR}} > 1$ spricht man von Überrelaxation und erreicht eine verbesserte Konvergenz.

A.4.1 Behandlung von stationären Gleichungen

Besondere numerische Probleme können auftreten, wenn im Gleichungssystem (A.94) auch stationäre Gleichungen mit starker Diffusion auftreten. Dieser Fall entspricht genau dem analytisch betrachteten Grenzfall aus Kapitel 3. Eine solche Gleichung

$$0 = D_w \Delta w + F_w(u, \dots, w) \quad (\text{A.99})$$

muss zu jedem Zeitpunkt erfüllt sein. Für das verwendete Crank-Nicolson-Iterationsverfahren muss die Komponente w zur Zeit $k + \frac{1}{2}$ berechnet werden, d. h.

$$0 = D_w \Delta w^{k+\frac{1}{2}} + F_w(u^{k+\frac{1}{2}}, \dots, w^{k+\frac{1}{2}}). \quad (\text{A.100})$$

Es genügt also nicht zu Beginn eines Zeitschrittes k die Verteilung w^k aus den u^k, \dots zu berechnen, sondern nach jeder Verbesserung von u^{k+1} muss auch $w^{k+\frac{1}{2}}$ neu berechnet werden. Bei starker Diffusion ist es mit einfachen Iterationsverfahren allerdings nicht möglich das stationäre Gleichungssystem in vernünftiger Zeit zu lösen. Vielmehr musste für diesen

Fall zur Lösung des stationären Gleichungssystems ein lineares Mehrgitter-Verfahren implementiert werden. Mehrgitter-Verfahren sind die einzigen Verfahren, die stationäre Gleichungen vom Typ (A.99) unabhängig von der Stärke der Diffusion schnell lösen können. Eine Beschreibung von Mehrgitter-Verfahren findet man z. B. in [69].

Auch wenn Gleichungen mit sehr kleinen Zeitkonstanten bei nichtverschwindender Diffusion betrachtet werden stößt man auf ähnliche Probleme. Es kann zur Integration zwar nach wie vor der Algorithmus aus Abb. A.1 verwendet werden, die Konvergenz wird allerdings sehr schlecht bzw. die Zeitschrittweite Δt muss sehr klein gewählt werden.

A.5 Bestimmung der Geschwindigkeit bewegter Lösungen

Da die Bestimmung der Geschwindigkeiten bewegter solitärer Lösungen bei der Auswertung fast aller Simulationen in dieser Arbeit eine Rolle gespielt hat, soll die Methode an dieser Stelle noch kurz vorgestellt werden und numerische Probleme bei der Geschwindigkeitsbestimmung angesprochen werden.

Die Bestimmung der Geschwindigkeit wird zurückgeführt auf die Bestimmung der Positionen der einzelnen Objekte für definierte Zeitpunkte in der jeweiligen, in diskreter Form vorliegenden Verteilung $u_{i,j}$. Als Objekt in einer Verteilung wird jede über das Gitter zusammenhängende Indexmenge

$$\mathbf{O} := \{(i, j) | u_{i,j} > u_g\}$$

bezeichnet, wobei der Grenzwert u_g zwischen $u_{\min} = \min_{i,j} u_{i,j}$ und $u_{\max} = \max_{i,j} u_{i,j}$ liegen muss. Als günstig hat sich ein Grenzwert von $u_g = \frac{3}{4}u_{\min} + \frac{1}{4}u_{\max}$ erwiesen. Verwendet man niedrigere Werte, so werden oszillatorische Ausläufer von Filamenten teilweise als Einzelobjekte erfasst. Höhere Werte reduzieren die Zahl der zu einem Objekt gehörigen Punkte und damit die Genauigkeit der Ortsbestimmung. Die Minima und Maxima der Verteilung werden für jedes zu untersuchende Bild neu bestimmt. Dies bietet Vorteile bei Parametervariationen, weil eine Anpassung von u_g mit dieser Definition meist nicht erforderlich ist.

Mit dieser Definition kann die Position des Objekts bestimmt werden. Dabei werden Bereiche mit hohem u stärker gewichtet:

$$x_O := \frac{\sum_{(i,j) \in \mathbf{O}} i \Delta x (u_{i,j} - u_g)}{\sum_{(i,j) \in \mathbf{O}} u_{i,j} - u_g}. \quad (\text{A.101})$$

Analog wird auch die y_O -Komponente definiert. Um Störungen in der Form eines Filaments im Verlauf einer Simulation verfolgen zu können wird neben der Position gelegentlich auch die Objektmasse mit der Definition

$$m_O := \sum_{(i,j) \in \mathbf{O}} (u_{i,j} - u_g) \quad (\text{A.102})$$

verwendet. Diese Größe ist beispielsweise nützlich um festzustellen, ob ein Filament bereits ausrelaxiert ist oder nicht. Die Definition (A.101) stellt sicher, dass die Funktion $x_O(t)$ stetig ist. In den Ableitungen können allerdings sehr wohl Unstetigkeiten auftreten. Eine einfache Abschätzung über die Genauigkeit der Geschwindigkeitsbestimmung erhält man, wenn man mit dieser Definition die gleichförmige Bewegung einer trapezförmigen Verteilungen betrachtet. Die Geschwindigkeit, die aus der Ableitung der Ortskoordinate bestimmt werden kann, ist mit der oben angesetzten Definition proportional zur Zahl der Diskretisierungspunkte auf den Trapezflanken. Betrachtet man demnach ein typisches Filament aus den numerischen Simulationen, das auf seinen Flanken mit etwa 10-20 Punkten diskretisiert ist, so sind Schwankungen in der Größenordnung von 5 – 10 Prozent zu erwarten. Für eine genaue Geschwindigkeitsbestimmung muss daher ein zeitliche Mittelung durchgeführt werden.

A.6 Richtungsänderung in einer periodischen Inhomogenität

In diesem Abschnitt soll ein Einzelspot in der reduzierten Dynamik unter dem Einfluss einer periodischen Inhomogenität untersucht werden. Wir betrachten das Gleichungssystem

$$\dot{p}_x = \kappa_3 \alpha_x + \varepsilon A \sin(k_x p_x), \quad (\text{A.103})$$

$$\dot{\alpha}_x = \hat{\tau} \alpha_x - \kappa_3 Q (\alpha_x^2 + \alpha_y^2) \alpha_x + \varepsilon A \sin(k_x p_x), \quad (\text{A.104})$$

$$\dot{\alpha}_y = \hat{\tau} \alpha_y - \kappa_3 Q (\alpha_x^2 + \alpha_y^2) \alpha_y, \quad (\text{A.105})$$

mit $\hat{\tau} = \kappa_3^2 (\tau - 1/\kappa_3)$ und dem Formfaktor $Q = \frac{\langle \bar{u}_{xx}^2 \rangle}{\langle \bar{u}_z^2 \rangle}$. Die Gleichung für die Bewegung in y -Richtung braucht nicht berücksichtigt werden, weil sie keinen Einfluss auf die Drehgeschwindigkeit haben kann. Die Amplitude der Inhomogenität wird mit dem kleinen Parameter ε skaliert. Es soll angenommen werden, dass sich die dynamischen Variablen als Reihe in ε darstellen lassen. Wir verwenden daher den Ansatz

$$p_x = p_{x,0} + \varepsilon p_{x,1} + \varepsilon^2 p_{x,2}, \quad (\text{A.106})$$

$$\alpha_x = \alpha_{x,0} + \varepsilon \alpha_{x,1} + \varepsilon^2 \alpha_{x,2}, \quad (\text{A.107})$$

$$\alpha_y = \alpha_{y,0} + \varepsilon \alpha_{y,1} + \varepsilon^2 \alpha_{y,2}. \quad (\text{A.108})$$

Dieser Ansatz wird in das Gleichungssystem (A.103)-(A.105) eingesetzt, die Sinus- und Cosinus-Terme werden nach den kleinen Größen entwickelt und das System in Ordnungen von ε geordnet. Man gelangt zu der folgenden Störungshierarchie bis zur Ordnung ε^2 :

$O(\varepsilon^0)$:

$$\dot{p}_{x,0} = \kappa_3 \alpha_{x,0} \quad (\text{A.109})$$

$$\dot{\alpha}_{x,0} = \hat{\tau} \alpha_{x,0} - \kappa_3 Q (\alpha_{x,0}^2 + \alpha_{y,0}^2) \alpha_{x,0} \quad (\text{A.110})$$

$$\dot{\alpha}_{y,0} = \hat{\tau} \alpha_{y,0} - \kappa_3 Q (\alpha_{x,0}^2 + \alpha_{y,0}^2) \alpha_{y,0} \quad (\text{A.111})$$

$O(\varepsilon^1)$:

$$\dot{p}_{x,1} = \kappa_3 \alpha_{x,1} + A \sin(k_x p_{x,0}) \quad (\text{A.112})$$

$$\begin{aligned} \dot{\alpha}_{x,1} &= \hat{\tau} \alpha_{x,1} - \kappa_3 Q \left((3\alpha_{x,0}^2 + \alpha_{y,0}^2) \alpha_{x,1} + 2\alpha_{x,0} \alpha_{y,0} \alpha_{y,1} \right) \\ &\quad + A \sin(k_x p_{x,0}) \end{aligned} \quad (\text{A.113})$$

$$\dot{\alpha}_{y,1} = \hat{\tau} \alpha_{y,1} - \kappa_3 Q \left((\alpha_{x,0}^2 + 3\alpha_{y,0}^2) \alpha_{y,1} + 2\alpha_{x,0} \alpha_{y,0} \alpha_{x,1} \right) \quad (\text{A.114})$$

$O(\varepsilon^2)$:

$$\dot{p}_{x,2} = \kappa_3 \alpha_{x,2} + A k_x p_{x,1} \cos(k_x p_{x,0}) \quad (\text{A.115})$$

$$\begin{aligned} \dot{\alpha}_{x,2} &= \hat{\tau} \alpha_{x,2} - \kappa_3 Q \left((3\alpha_{x,0}^2 + \alpha_{y,0}^2) \alpha_{x,2} + 2\alpha_{x,0} \alpha_{y,0} \alpha_{y,2} \right) + A k_x p_{x,1} \cos(k_x p_{x,0}) \\ &\quad - \kappa_3 Q \left((3\alpha_{x,1}^2 + \alpha_{y,1}^2) \alpha_{x,0} + 2\alpha_{x,1} \alpha_{y,1} \alpha_{y,0} \right) \end{aligned} \quad (\text{A.116})$$

$$\begin{aligned} \dot{\alpha}_{y,2} &= \hat{\tau} \alpha_{y,2} - \kappa_3 Q \left((\alpha_{x,0}^2 + 3\alpha_{y,0}^2) \alpha_{y,2} + 2\alpha_{x,0} \alpha_{y,0} \alpha_{x,2} \right) \\ &\quad - \kappa_3 Q \left((\alpha_{x,1}^2 + 3\alpha_{y,1}^2) \alpha_{y,0} + 2\alpha_{x,1} \alpha_{y,1} \alpha_{x,0} \right) \end{aligned} \quad (\text{A.117})$$

Die 0. Ordnung dieser Hierarchie führt auf die Bewegungsgleichungen des ungestörten Teilchens. Die Bewegungsrichtung ist beliebig und wird mit ϕ bezeichnet. Es ergibt sich

$$\alpha_{x,0} = \frac{v_0}{\kappa_3} \cos \phi, \quad (\text{A.118})$$

$$\alpha_{y,0} = \frac{v_0}{\kappa_3} \sin \phi, \quad (\text{A.119})$$

$$p_{x,0} = v_0 t \cos \phi, \quad (\text{A.120})$$

mit $v_0 = \sqrt{\frac{\hat{\tau} \kappa_3}{Q}}$. Einsetzen dieser Ausdrücke in die Ordnung ε ergibt ein lineares Gleichungssystem mit einem periodischen Treiber für die dynamischen Variablen der Ordnung ε . Die Lösung ist prinzipiell einfach, allerdings recht umfangreich. Es ergibt sich

$$\alpha_{x,1} = \frac{A (k_x (2Q \sin(\omega t) \cos(\phi) v_0 - \kappa_3 \cos(\omega t) k_x) \cos(\phi)^2 - 4Q \cos(\omega t) \hat{\tau} \sin(\phi)^2)}{(\kappa_3 \cos(\phi)^3 k_x^3 + 4Q \hat{\tau} \cos(\phi) k_x) v_0}, \quad (\text{A.121})$$

$$\alpha_{y,1} = \frac{2AQ \sin(\phi) (2 \cos(\omega t) \hat{\tau} / v_0 + \sin(\omega t) \cos(\phi) k_x)}{\kappa_3 \cos(\phi)^2 k_x^3 + 4Q \hat{\tau} k_x}, \quad (\text{A.122})$$

$$\begin{aligned} p_{x,1} &= \left(AQ (- 4 \cos(\omega t) \cos(\phi) k_x \hat{\tau}^2 / v_0 - 4Q \sin(\omega t) \sin(\phi)^2 \hat{\tau} - \right. \\ &\quad \left. \cos(\phi)^2 k_x (\cos(\omega t) \cos(\phi) v_0 k_x^2 + \kappa_3 \sin(\omega t) k_x + 2Q \cos(\omega t) \cos(\phi) v_0) \right) / \\ &\quad (\hat{\tau} \cos(\phi)^2 k_x^2 (\kappa_3 \cos(\phi)^2 k_x^2 + 4Q \hat{\tau})), \end{aligned} \quad (\text{A.123})$$

mit $\omega = v_0 k_x \cos \phi$. Die Gleichung der Ordnung ε^2 muss nicht mehr explizit gelöst werden. Zur Bestimmung der Richtungsänderung genügen zunächst die Gleichungen für $\alpha_{x,2}$ und $\alpha_{y,2}$. Nach Einsetzen der Ergebnisse der niedrigeren Ordnungen kann die Gleichung zeitlich

über eine Periode $T = 1/\omega$ gemittelt werden. Es verbleibt ein lineares Gleichungssystem mit konstanter Inhomogenität. In Drehrichtung $(-\sin \phi, \cos \phi)$ besitzt dieses einen Eigenwert 0. Daher ergibt die Projektion der Inhomogenität auf die Drehrichtung normiert auf den Betrag von $(\alpha_{x,0}, \alpha_{y,0})$ die gesuchte Drehgeschwindigkeit

$$\dot{\phi} = \frac{\kappa_1^2 Q (\kappa_3 (k_x^2 + 4Q) \cos^2 \phi + 4Q \hat{\tau}) \tan \phi}{2\hat{\tau} (\kappa_3 k_x^2 \cos^2 \phi + 4Q \hat{\tau})}. \quad (\text{A.124})$$

Literaturverzeichnis

- [1] J. Abshagen, A. Schulz, und G. Pfister. The taylor-couette flow: A paradigmatic system for instabilities, pattern formation, and routes to chaos. In S. Parisi, S. Müller, und W. Zimmermann, Ed., *Lecture Notes in Physics*, Springer, Berlin (1996). (document)
- [2] E. Ammelt. *Untersuchungen zur Strukturbildung in planaren Gasentladungssystemen mit bildverarbeitenden Methoden*. Dissertation, Universität Münster (1995). 1.4.2, 2.14
- [3] E. Ammelt, Y. Astrov, und H.-G. Purwins, *Stripe turing structures in a two-dimensional gas discharge system*, Phys. Rev. E **55**, 6731–6739 (1997). (document), 1.4.2, 1.5
- [4] E. Ammelt, D. Schweng, und H.-G. Purwins, *Spatio-temporal pattern formation in a lateral high-frequency glow discharge system*, Phys. Lett. A **179**, 348–354 (1993). (document)
- [5] Y. Astrov, *mündliche Mitteilung* (1999). 1.4.2
- [6] Y. Astrov, E. Ammelt, S. Teperick, und H.-G. Purwins, *Hexagon and stripe turing structures in a gas discharge system*, Phys. Lett. A **211**, 184–190 (1996). (document), 1.5
- [7] Y. A. Astrov und Y. A. Logvin, *Formation of clusters of localized states in a gas discharge system via a self completion szenario*, Phys. Rev. Lett. **79**(16), 2983–2987 (1997). (document)
- [8] A. I. Beletskii und N. A. Vlasenko, *Autowaves in thin-film electroluminescent structures with intrinsic memory*, Techn. Phys. Lett. **19**(1), 13 (1993). (document)
- [9] Bénard, Rev. Gen. Sci. Pure Appl. **11**, 1261 (1900). (document)
- [10] M. Bode. *Beschreibung strukturbildender Prozesse in eindimensionalen Reaktions-Diffusions-Systemen durch Reduktion auf Amplitudengleichungen und Elementarstrukturen*. Dissertation, Universität Münster (1992). 1.2.2, 1.2.2, 1.2.2, 1.3.2, 1.3.2, 2.2

- [11] M. Bode, *Front-bifurcations in reaction-diffusion systems with inhomogenous parameter distributions*, Physica D **106**, 270–286 (1997). 1.3.2
- [12] M. Bode. *Pattern Formation in Complex Dissipative Systems: A Particle Approach*. Habilitationsschrift, Universität Münster (1998). 4.3.1
- [13] M. Bode und H.-G. Purwins, *Pattern formation in reaction-diffusion systems - dissipative solitons in physical systems*, Physica D **86**, 53–63 (1995). (document)
- [14] M. Bode, D. Ruwisch, P. Schütz, M. Alonso, V. Pérez-Muñuzuri, V. Pérez-Villar, und M. Markus, *Parallel analog computation of coupled biological oscillators*, J. Biol. Sys. **3**, 81–93 (1995). 2.2.3.1
- [15] V. Castets, E. Dulos, J. Boissonade, und P. De Kepper, *Experimental evidence of a sustained standing turing-type nonequilibrium chemical pattern*, Phys. Rev. Lett. **64**, 2953–2956 (1990). (document)
- [16] M. C. Cross und P. C. Hohenberg, *Pattern formation outside of equilibrium*, Rev. Mod. Phys. **65**, 851 (1993). (document), 1.3.1, 1.3.1
- [17] M. A. Dahlem und S. C. Müller, *Self-induced splitting of spiral-shaped spreading depression waves in chicken retina*, Exp. Brain Res. **115**(2), 319–324 (1997). (document)
- [18] M. Eiswirth und G. Ertl. Pattern formation on catalytic surfaces. In R. Kapral und K. Showalter, Ed., *Chemical Waves and Patterns*, Seite 447–483, Kluwer, Netherlands (1995). 4.1.2
- [19] C. Elphick, A. Hagberg, und E. Meron, *Dynamic front transition and spiral-vortex nucleation*, Phys. Rev. E **51**, 3053 (1995). 1.3.2
- [20] C. Elphick, E. Meron, J. Rinzel, und E. A. Spiegel, *Impulse pattering and relaxational propagation in excitable media*, J. Theor. Biol. **146**, 249 (1990). (document), 1.3.2
- [21] C. Elphick, E. Meron, J. Rinzel, und E. A. Spiegel, *Patterns of propagating pulses*, SIAM J. Appl. Math. **50**(2), 490 (1990). (document), 1.3.2
- [22] G. Ertl, *Ordnung und Dynamik an Festkörperoberflächen*, Physikalische Blätter **46**, 339 (1990). (document)
- [23] G. Ertl, *Reactions at well-defined surfaces*, Surface Science **299/300**, 742–752 (1994). (document)
- [24] R. J. Field und M. Burger, *Oscillations and Travelling Waves in Chemical Systems*, Wiley and Sons (1985). (document)

- [25] J. Fineberg und O. Lioubashevski, *Propagating solitary states in highly dissipative driven fluids*, *Physica A* **249**, 10–17 (1998). (document)
- [26] R. FitzHugh, *Impulses and physiological states in theoretical models of nerve membrane*, *Biophys. J.* **1**, 445 (1961). 1.3
- [27] M. Golubitsky, I. Stewart, und D. G. Schaeffer, *Singularities and Groups in Bifurcation Theory*, Band II, Springer, Berlin (1985). 1.3.1
- [28] N. Gottschalk, F. Mertens, M. Bär, M. Eiswirth, und R. Imbil, *Chemical waves in media with state-dependent anisotropy*, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 3483 (1994). (document), 4.1.2
- [29] J. Guckenheimer und P. Holmes, *Nonlinear Oscillations, Dynamical Systems, and Bifurcations of Vector Fields*, Springer, Berlin (1983). 1.4.2
- [30] A. Hagberg und E. Meron, *A mechanism for spatio-temporal disorder in bistable reaction-diffusion systems*, *Nonlinear Science Today* (1996). 1.3.2, 1.3.2
- [31] A. Hagberg und E. Meron, *The dynamics of curved fronts: Beyond geometry*, *Phys. Rev. Lett.* **78**(6), 1166–1169 (1997). (document), 1.3.2
- [32] A. Hagberg, E. Meron, I. Rubinstein, und B. Zaltzman, *Order parameter equations for front transitions: Planar and circular fronts*, *Phys. Rev. E* **55**, 4450 (1997). 1.3.2
- [33] D. Haim, G. Li, Q. Ouyang, W. D. McCormick, H. L. Swinney, A. Hagberg, und E. Meron, *Breathing spots in a reaction-diffusion system*, *Phys. Rev. Lett.* **77**(1), 190–193 (1996). 1.3.2
- [34] G. Heidemann, M. Bode, und H.-G. Purwins, *Fronts between hopf- and turing-type domains in a two-component reaction-diffusion system*, *Phys. Lett. A* **177**, 225–230 (1993). (document)
- [35] A. L. Hodgkin und A. F. Huxley, *A quantitative description of membrane current and its application to conduction and excitation in nerve*, *J. Physiol.* **117**, 500–544 (1952). (document), 1.3
- [36] R. Imbihl und G. Ertl, *Oscillatory kinetics in heterogeneous catalysis*, *Chem. Rev.* **95**(3), 697–733 (1995). (document)
- [37] G. Jetschke, *Mathematik der Selbstorganisation*, Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin (1989). 1.3.1, 1.4.2
- [38] S. Kawaguchi und M. Mimura, *Collision of travelling waves in a reaction-diffusion system with global coupling effect*, *SIAM J. Appl. Math.* **59**(3), 920–941 (1999). 2.8

- [39] B. S. Kerner und V. V. Osipov, *Autosolitons*, Sov. Phys. Uspek. **32**, 101–138 (1989). (document)
- [40] M. Kleinkes. *Numerische Untersuchungen von Stromdichtestrukturen in $p^+n^+pn^-$ -Dioden mit einem zweidimensionalen Reaktions-Diffusions-Modell*. Diplomarbeit, Universität Münster (1996). 2.4, 2.4.2
- [41] E. Knobloch und J. De Luca, *Amplitude equations for travelling wave convection*, Nonlinearity **3**, 975–980 (1990). 1.4.1, 4.6
- [42] S. Koga und Y. Kuramoto, *Localized patterns in reaction-diffusion-systems*, Prog. Theor. Phys. **63**, 106 (1980). (document), 1.3.2
- [43] E. L. Koschmieder. Instabilities in fluid dynamics. In Haken, Ed., *Synergetics*, Seite 70–78, Springer, Berlin (1977). (document)
- [44] K. Krischer und A. Mikhailov, *Bifurcation to traveling spots in reaction-diffusion systems*, Phys. Rev. Lett. **73**, 3165 (1994). 2.8, 4.1.2, 4.2.4
- [45] B. Kukuk, S. Zuccaro, F.-J. Niedernostheide, und H.-G. Purwins, *Pattern formation and bifurcations in electroluminescent ZnS:Mn films*, Acta Techn. **42**, 717–722 (1997). (document)
- [46] Y. Kuramoto, *Chemical Oscillations, Waves, and Turbulence*, Springer, Berlin (1984). (document)
- [47] W. Lange, Y. Logvin, und T. Ackemann, *Spontaneous optical patterns in an atomic vapor: Observation and simulation*, Physica D **96**, 230–241 (1996). (document)
- [48] I. Lengyel und I. Epstein. The chemistry behind the first experimental chemical examples of turing patterns. In R. Kapral und K. Showalter, Ed., *Chemical Waves and Patterns*, Seite 297–322, Kluwer, Netherlands (1995). 1.1, 4.1.2
- [49] A. Liehr. *Numerische Untersuchung dreidimensionaler Strukturen in einem Reaktions-Diffusions-System*. Diplomarbeit, Universität Münster (1999). 1.5.2, 4.2, 4.2.2, 4.2.5
- [50] O. Lioubashevski, H. Arbell, und J. Fineberg, *Dissipative solitary states in driven surface waves*, Phys. Rev. Lett. **76**(21), 3959–3962 (1996). (document)
- [51] C.-Y. Liu und I. Lin, *Clusters of ionization clumps in weakly ionized rf discharges*, Phys. Rev. E **57**(3), 3379–3382 (1998). (document)
- [52] H. Meinhardt, *Morphogenesis of lines and nets*, Differentiation **6**, 117–123 (1976). 4.1.2

- [53] H. Meinhardt, *Models of Biological Pattern Formation*, Academic Press, London (1982). (document)
- [54] H. Meinhardt, *The Algorithmic Beauty of Sea Shells*, Springer, Berlin (1994). (document)
- [55] C. Muratov und V. Osipov, *Scenarios of domain pattern formation in a reaction-diffusion system*, Phys. Rev. E **54**, 4860–4879 (1997). 2.7
- [56] J. Nagumo, S. Arimoto, und S. Yoshizawa, *An active pulse transmission line simulating nerve axon*, Proc. IRE **50**, 2061–2070 (1962). (document), 1.3
- [57] F.-J. Niedernostheide, M. Ardes, M. Or-Guil, und H.-G. Purwins, *Spatiotemporal behavior of localized current filaments in p-n-p-n diodes: Numerical calculations and comparison with experimental results*, Phys. Rev. B **49**, 7370–7384 (1994). 2.4, 2.4
- [58] F.-J. Niedernostheide, R. Dohmen, H. Willebrand, B. S. Kerner, und H.-G. Purwins, *Transition from pulsating to rocking localized solitary structures in nonlinear dissipative distributive media with global inhibition*, Physica D **69**, 425–435 (1993). 2.4
- [59] F.-J. Niedernostheide, B. S. Kerner, und H.-G. Purwins, *Spontaneous appearance of rocking localized current filaments in a nonequilibrium distributive system*, Phys. Rev. B **46**(12), 7559–7569 (1992). (document), 2.4, 2.4, 2.4
- [60] F.-J. Niedernostheide, M. Or-Guil, M. Kleinkes, und H.-G. Purwins, *Dynamical behavior of spots in a nonequilibrium distributive active medium*, Phys. Rev. E **55**, 4107–4111 (1997). 2.8, 2.4
- [61] B. Oelker. *Numerische Untersuchungen an einem Modell zur Beschreibung ein- und zweidimensionaler Stromdichteverteilungen in pnpn-Dioden*. Diplomarbeit, Universität Münster (1995). 2.4.2, 2.4.2
- [62] T. Ohta, Y. Hayase, und R. Kobayashi, *Spontaneous formation of concentric waves in a two-component reaction-diffusion system*, Phys. Rev. E **54**(6), 6074–6082 (1996). 4.5.1
- [63] T. Ohta, M. Mimura, und R. Kobayashi, *Higher dimensional localized patterns in excitable media*, Physica D **34**, 115–144 (1989). (document), (document), 1.3.2
- [64] M. Or-Guil. *Elementare Anregungen und ihre Wechselwirkungen – Untersuchungen von Reaktions-Diffusions-Modellen im Vergleich mit elektrischen Durchbruchsexperimenten*. Dissertation, Universität Münster (1997). 1.3.1
- [65] M. Or-Guil und M. Bode, *Propagation of Turing-Hopf fronts*, Physica A **249**, 174–178 (1998). 1.3.1

- [66] M. Or-Guil, M. Bode, C. P. Schenk, und H.-G. Purwins, *Spot bifurcations in three-component reaction-diffusion-systems: The onset of propagation*, Phys. Rev. E **57**(6), 6432–6437 (1998). 2.3.2
- [67] Q. Ouyang und H. Swinney, *Transition from a uniform state to hexagonal and striped turing patterns*, Nature **352**, 610 (1991). (document)
- [68] A. V. Panfilov und J. P. Keener, *Dynamics of dissipative structures in reaction-diffusion equations*, SIAM J. Appl. Math. **55**(1), 205–219 (1995). 2.2.3.1
- [69] W. Press, S. Teukolsky, W. Vetterling, und B. Flannery, *Numerical Recipes in C*, Cambridge University Press (1996). A.4.1
- [70] I. Schebesch. *Numerische und analytische Untersuchungen an einem Reaktions-Diffusions-System in der Nähe eines singulären Grenzfalls*. Diplomarbeit, Universität Münster (1994). 2.2.3.4, 4.1.2
- [71] C. P. Schenk. *Wechselwirkung solitärer Strukturen in Reaktions-Diffusions-Systemen*. Diplomarbeit, Universität Münster (1995). 2.2, 2.7, 2.8, 3.1.1, 3.1.3
- [72] C. P. Schenk, M. Or-Guil, M. Bode, und H.-G. Purwins, *Interacting pulses in three-component reaction-diffusion systems on two-dimensional domains*, Phys. Rev. Lett. **78**, 3781–3783 (1997). 4.1.2
- [73] C. P. Schenk, P. Schütz, M. Bode, und H.-G. Purwins, *Interaction of self-organized quasiparticles in a two-dimensional reaction-diffusion system: The formation of molecules*, Phys. Rev. E **57**(6), 6480–6486 (1998). 2.2, 3.1.1, 3.1.3
- [74] L. Schimansky-Geier, M. Mieth, H. Rosé, und H. Malchow, *Structure formation by active brownian particles*, Phys. Lett. A **207**, 140–146 (1995). 2.8, 4.1.2
- [75] P. Schütz. *Strukturen mit großen Amplituden in Reaktions-Diffusions-Systemen vom Aktivator-Inhibitor-Typ*. Dissertation, Universität Münster (1995). 1.3.1, 1.4.1, 1.4.2, 1.4.2, 2.8, 2.2.3.4, A.2
- [76] A. Skeldon und M. Silber, *New stability results for patterns in a model of long-wavelength convection*, Physica D **122**, 117–133 (1998). 1.4.2
- [77] S. Strogatz, *Nonlinear Dynamics and Chaos*, Addison-Wesley, Reading (1996). 1.3.1
- [78] G. I. Taylor, *Stability of a viscous liquid contained between two rotating cylinders*, Phil. Trans. Roy. Soc. A **223**, 289 (1923). (document)
- [79] A. M. Turing, *The chemical basis of morphogenesis*, Phil. Trans. Roy. Soc. **237**, 37–72 (1952). (document), 1.3, 1.4.1

- [80] J. Tyson und P. Fife, *Target patterns in a realistic model of the belousov-zhabotinskii reaction*, J. Chem. Phys. **73**, 2224–2237 (1980). 4.5.1
- [81] P. B. Umbanhowar, F. Melo, und H. L. Swinney, *Localized excitations in a vertically vibrated granular layer*, Nature **382**, 793–796 (1996). (document)
- [82] P. B. Umbanhowar, F. Melo, und H. L. Swinney, *Periodic, aperiodic and transient patterns in vibrated granular layers*, Physica A **249**, 1–9 (1998). (document)
- [83] M. Watzl und A. F. Münster, *Turing-like spatial patterns in a polyacrylamide-methylene blue-sulfide-oxygen system*, Chem. Phys. Lett. **242**(3), 273–278 (1995). (document)
- [84] H. Willebrand, F.-J. Niedernostheide, E. Ammelt, R. Dohmen, und H.-G. Purwins, *Spatio-temporal oscillations during filament splitting in gas discharge systems*, Phys. Lett. A **153**(8), 437 (1991). (document)
- [85] H. Willebrand, F.-J. Niedernostheide, R. Dohmen, und H.-G. Purwins. Stationary and dynamical patterns of the current density in gas discharge systems. In L. Rensing, Ed., *Oscillations and Morphogenesis*, Seite 81–109, Marcel Dekker, New York (1993). (document), 1.5
- [86] H. Willebrand, M. Or-Guil, M. Schilke, und H.-G. Purwins, *Experimental and numerical observation of quasiparticle like structures in a distributed dissipative system*, Phys. Lett. A **177**, 220–224 (1993). (document)
- [87] A. T. Winfree, *When Time Breaks Down*, Princeton University Press (1987). (document), 1.3.2
- [88] R. Woesler, P. Schütz, M. Bode, M. Or-Guil, und H.-G. Purwins, *Oscillations of fronts and front pairs in two- and three-component reaction-diffusion systems*, Physica D **91**, 376–405 (1996). 1.3.2
- [89] A. N. Zaikin, *Fizicheskaya Mysl' Rossii* **1**(1), 54 (1995). 4.1.2
- [90] A. Zhabotinsky, M. Dolnik, und I. Epstein, *Pattern formation arising from wave instability in a simple reaction-diffusion system*, J. Chem. Phys. **103**(23), 10306–10314 (1995). 1.4.1
- [91] A. M. Zhabotinsky, *A history of chemical oscillations and waves*, Chaos **1**, 379–386 (1991). (document)
- [92] A. M. Zhabotinsky und A. B. Rovinsky, *Mechanism and nonlinear dynamics of an oscillating chemical reaction*, J. Stat. Phys. **48**, 959–975 (1987). (document)

Danksagung

Mein erster Dank gilt meinem Doktorvater, Herrn Prof. Dr. Purwins, der mir die Anfertigung der Promotion am Institut für Angewandte Physik ermöglichte und unterstützte. Besonders wertvoll waren für mich auch die Diskussionen mit Herrn Priv. Doz. Mathias Bode, der auch in den schönsten Ergebnissen immer die kritischen Stellen erkannte, und meist auch mit konstruktiven Ideen deren Verbesserung vorantrieb. Auch allen anderen Mitarbeitern am Institut möchte ich für ihre Zusammenarbeit danken. Namentlich erwähnt seien an dieser Stelle Dr. Michal Or-Guil, Dr. Eberhard Ammelt, Dr. Yuri Astrov, Herrn Dipl.-Phys. Ingo Brauer und Herrn Dipl.-Phys. Andreas Liehr. Mein letzter Dank gehört meinen Eltern, die mir das Studium ermöglicht und auch die Promotion nicht unwesentlich unterstützt haben und meiner Freundin Dina Faigle, die immer für mich da war.

Lebenslauf

Christian Peter Schenk,
geboren am 19.11.1969 in Bamberg;
ledig;
Eltern: Dietmar Schenk und Dagmar Schenk, geb. Schneibel;

Schulbildung: Grundschule von 1976 bis 1980 an der
 Mauritius-Grundschule in Ibbenbüren;
 Gymnasium von 1980 bis 1989 am Goethe-
 Gymnasium in Ibbenbüren;
 Abitur am 5. Mai 1989 in Ibbenbüren;

Studium: Physik (Diplom) an der Westfälischen
 Wilhelms-Universität von 1989 bis 1995;

Prüfungen: Diplom im Fach Physik am 30. Juni 1995 an der
 Westfälischen Wilhelms-Universität;

Tätigkeiten: Wissenschaftliche Hilfskraft seit dem 1. Ju-
 li 1995, Westfälische Wilhelms-Universität,
 Münster;

Beginn der Dissertation: 1. Juli 1995 am Institut für Angewandte Physik
 bei Prof. Dr. H.-G. Purwins

Materialsammlung

Zu dieser Arbeit existiert eine Materialsammlung mit verschiedenen Daten. Die Sammlung ist im HTML-Format ausführlich dokumentiert. Die folgende Liste gibt einen Überblick über das verfügbare Material:

- Postscript-Files, Sources und Bilder dieser Arbeit, meiner Diplomarbeit und verschiedener Paper.
- Einige Filme im AVI-Format von ausgewählten numerischen Simulationen.
- Zwei Java-Applets: Eines ermöglicht die interaktive Simulation der reduzierten Gleichungen, das zweite realisiert einen einfachen zellularen Automaten, der ähnliche Eigenschaften wie das in dieser Arbeit besprochene, dreikomponentige Reaktions-Diffusions-System aufweist.
- Verschiedene Programme, unter anderem zur Simulation der R-D-Gleichungen und der reduzierten Gleichungen.
- Rohdaten numerischer Simulationen, sowie Kurzanleitungen zum Auffinden von Daten und zur Bearbeitung der Daten.

Das Material befindet sich auf dem Rechner BACKUP.UNI-MUENSTER.DE in einer ZIP-Datei (ca. 500MB) unter dem Namen /home/hsm1/scheuk/cdrom.zip, und ist für jedes Mitglied der Arbeitsgruppe Purwins lesbar. Das Material ist in geeigneter Form, um beispielsweise als CD-R weitergegeben zu werden.