RD - Systeme und Turing-Instabilitaet

Michael Rath

WWU Muenster

11. Juni 2008

Inhalt

Einleitung

- Chemische Reaktionsdiffusionssysteme bilden spontan Strukturen aus
- Turing-Instabilitaet: Raeumlich homogene, linear stabile Systeme werden im inhomgenen Fall instabil und bilden stationaere, raeumlich periodische Muster aus($\rightarrow$ 'diffusionsgetriebene Instabilitaet')
- $\rightarrow$ Erstaunlich, da Diffusion i.A. als stabilisierender Faktor aufgefasst wird
- Turing-Mechanismus auch heute im Mittelpunkt vieler chemischbiologischer Strukturbildungstheorien
- Anwendung: z.B. Tierfellmuster, Ausbildung von Strukturen in chemischen Systemen

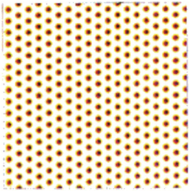
Einleitung

- Chemische Reaktionsdiffusionssysteme bilden spontan Strukturen aus
- Turing-Instabilitaet: Raeumlich homogene, linear stabile Systeme werden im inhomgenen Fall instabil und bilden stationaere, raeumlich periodische Muster aus($\rightarrow$ 'diffusionsgetriebene Instabilitaet')
- $\rightarrow$ Erstaunlich, da Diffusion i.A. als stabilisierender Faktor aufgefasst wird
- Turing-Mechanismus auch heute im Mittelpunkt vieler chemischbiologischer Strukturbildungstheorien
- Anwendung: z.B. Tierfellmuster, Ausbildung von Strukturen in chemischen Systemen

Einleitung

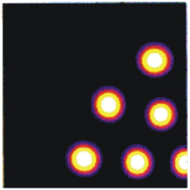
- Chemische Reaktionsdiffusionssysteme bilden spontan Strukturen aus
- Turing-Instabilitaet: Raeumlich homogene, linear stabile Systeme werden im inhomgenen Fall instabil und bilden stationaere, raeumlich periodische Muster aus($\rightarrow$ 'diffusionsgetriebene Instabilitaet')
- $\rightarrow$ Erstaunlich, da Diffusion i.A. als stabilisierender Faktor aufgefasst wird
- Turing-Mechanismus auch heute im Mittelpunkt vieler chemischbiologischer Strukturbildungstheorien
- Anwendung: z.B. Tierfellmuster, Ausbildung von Strukturen in chemischen Systemen

Selbstorganisierte raeumliche Strukturen



Stationary Turing Pattern

Stationary Meander



Stationary Quasi-Particles

Moving, rotating Spirals

- Viele zeitliche und raeumliche Strukturen nicht von aussen aufgepraegt, sondern vom jeweiligen System selbst erzeugt
- → Phaenomene (sog.„Strukturbildung in dissipativen Systemen“) grossteils gut beschrieben durch RD-Systeme

Allgemeinste Form:

$$\partial_t \mathbf{u} = \mathbf{D}\Delta\mathbf{u} + \mathbf{R}(\mathbf{u}) \tag{1}$$

wobei $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{r}, \mathbf{t})$ die Konzentration der Substanzen, $\mathbf{R}(\mathbf{u})$ die lokale Reaktionskinetik und $\mathbf{D}$ eine eine diagonale Diffusionsmatrix beschreibt

Reaktionsdiffusionssysteme

- Viele zeitliche und raeumliche Strukturen nicht von aussen aufgepraegt, sondern vom jeweiligen System selbst erzeugt
- $\rightarrow$ Phaenomene (sog.„Strukturbildung in dissipativen Systemen“) grossteils gut beschrieben durch RD-Systeme

Allgemeinste Form:

$$\partial_t \mathbf{u} = \mathbf{D}\Delta\mathbf{u} + \mathbf{R}(\mathbf{u}) \tag{1}$$

wobei $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{r}, \mathbf{t})$ die Konzentration der Substanzen, $\mathbf{R}(\mathbf{u})$ die lokale Reaktionskinetik und $\mathbf{D}$ eine eine diagonale Diffusionsmatrix beschreibt

- Bistabilitaeten schon im Falle stationaerer homogener Strukturen moeglich
- $\rightarrow$ Enstehung von raeumlichen, zeitlichen und raumzeitlichen inhomogenen Strukturen einschliesslich chaotischen Verhaltens
- Beispiele: Belousov-Zhabotinsky-Reaktion (homogener chemischer Oszillator), Gleichspannungsgasentladungssysteme

- Bistabilitaeten schon im Falle stationaerer homogener Strukturen moeglich
- $\rightarrow$ Enstehung von raeumlichen, zeitlichen und raumzeitlichen inhomogenen Strukturen einschliesslich chaotischen Verhaltens
- Beispiele: Belousov-Zhabotinsky-Reaktion (homogener chemischer Oszillator), Gleichspannungsgasentladungssysteme

Einkomponentige RD-Systeme

- Erste Arbeiten ueber einkomponentige RD-Systeme um 1937
- Nichtlinearer Quellterm $R(u) = u - u^2$ (Fisher u. Kolmogorov)
- $\rightarrow$ Spaeter allgemeiner $R(u) = u - u^n$

$$\partial_t u(x,t) = D\partial_x^2 u(x,t) + u - u^n$$

- Typische Interpretation der Loesung: propagierende Front
- $\rightarrow$ Trennt zwei homogene Nicht-Gleichgewichtszustaende voneinander (von denen einer stabil und einer instabil ist)

Einkomponentige RD-Systeme

- Erste Arbeiten ueber einkomponentige RD-Systeme um 1937
- Nichtlinearer Quellterm $R(u) = u - u^2$ (Fisher u. Kolmogorov)
- $\rightarrow$ Spaeter allgemeiner $R(u) = u - u^n$

$$\partial_t u(x,t) = D\partial_x^2 u(x,t) + u - u^n$$

- Typische Interpretation der Loesung: propagierende Front
- $\rightarrow$ Trennt zwei homogene Nicht-Gleichgewichtszustaende voneinander (von denen einer stabil und einer instabil ist)

Einkomponentige RD-Systeme

- Erste Arbeiten ueber einkomponentige RD-Systeme um 1937
- Nichtlinearer Quellterm $R(u) = u - u^2$ (Fisher u. Kolmogorov)
- $\rightarrow$ Spaeter allgemeiner $R(u) = u - u^n$

$$\partial_t u(x,t) = D\partial_x^2 u(x,t) + u - u^n$$

- Typische Interpretation der Loesung: propagierende Front
- $\rightarrow$ Trennt zwei homogene Nicht-Gleichgewichtszustaende voneinander (von denen einer stabil und einer instabil ist)

Zweikomponentige RD-Systeme

- Verallgemeinerung durch Alan Turing: mehrere Komponenten (The Chemical Basis of Morphogenesis - Alan Turing, 1952)

$$\begin{aligned} \partial_t u(\mathbf{r}, t) &= D_u \Delta u(\mathbf{r}, t) + f(u, v) \\ \tau \partial_t v(\mathbf{r}, t) &= D_v \Delta v(\mathbf{r}, t) + g(u, v) \end{aligned}$$

- τ : das Zeitverhaeltnis von u und v beschreibende dimensionslose Konstante
- (spaeter im Vortrag: Simulation fuer $f(u, v) = \lambda u - u^3 - v + \kappa$ und $g(u, v) = u - v$)

Zweikomponentige RD-Systeme

- Verallgemeinerung durch Alan Turing: mehrere Komponenten (The Chemical Basis of Morphogenesis - Alan Turing, 1952)

$$\begin{aligned} \partial_t u(\mathbf{r}, t) &= D_u \Delta u(\mathbf{r}, t) + f(u, v) \\ \tau \partial_t v(\mathbf{r}, t) &= D_v \Delta v(\mathbf{r}, t) + g(u, v) \end{aligned}$$

- τ : das Zeitverhaeltnis von u und v beschreibende dimensionslose Konstante
- (spaeter im Vortrag: Simulation fuer $f(u, v) = \lambda u - u^3 - v + \kappa$ und $g(u, v) = u - v$)

Zweikomponentige RD-Systeme

- Verallgemeinerung durch Alan Turing: mehrere Komponenten (The Chemical Basis of Morphogenesis - Alan Turing, 1952)

$$\begin{aligned} \partial_t u(\mathbf{r}, t) &= D_u \Delta u(\mathbf{r}, t) + f(u, v) \\ \tau \partial_t v(\mathbf{r}, t) &= D_v \Delta v(\mathbf{r}, t) + g(u, v) \end{aligned}$$

- τ : das Zeitverhaeltnis von u und v beschreibende dimensionslose Konstante
- (spaeter im Vortrag: Simulation fuer $f(u, v) = \lambda u - u^3 - v + \kappa$ und $g(u, v) = u - v$)

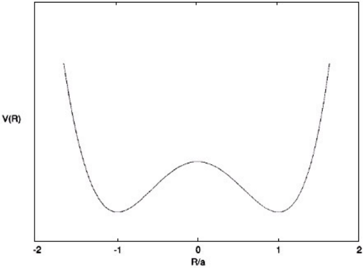
Grober Ueberblick ueber verschiedene Klassen von RD-Systemen

- Typischerweise Unterscheidung zwischen bistabilen, anregbaren und oszillierenden Systemen
- Bistabil: zwei stabile homogene Zustaende getrennt von einem instabilen Zustand
- Anregbar: nur ein stabiler Zustand
- Oszillierend: wenn bei anregbarem Zustand $\frac{1}{\tau} << 1 \rightarrow$ dauerhafte Instabilitaet, Oszillation

Grober Ueberblick ueber verschiedene Klassen von RD-Systemen

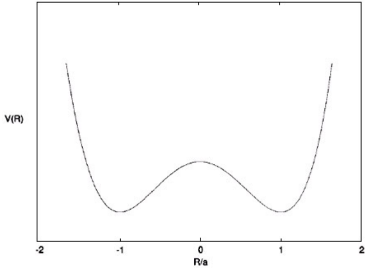
- Typischerweise Unterscheidung zwischen bistabilen, anregbaren und oszillierenden Systemen
- Bistabil: zwei stabile homogene Zustaende getrennt von einem instabilen Zustand
- Anregbar: nur ein stabiler Zustand
- Oszillierend: wenn bei anregbarem Zustand $\frac{1}{\tau} << 1 \rightarrow$ dauerhafte Instabilitaet, Oszillation

Bistabilitaet beispielhaft veranschaulicht:



(Anderes Beispiel fuer bistabiles System: Zeldovich-Frank-Kamenetsky Gleichung mit $R(u) = u(1-u)(u-\alpha), \alpha \in (0,1) \rightarrow$ wird genutzt um Flammenpropagation zu beschreiben)

Bistabilitaet beispielhaft veranschaulicht:



(Anderes Beispiel fuer bistabiles System: Zeldovich-Frank-Kamenetsky Gleichung mit $R(u) = u(1-u)(u-\alpha), \alpha \in (0,1)$ $\rightarrow$ wird genutzt um Flammenpropagation zu beschreiben)

Turing-Instabilitaet

- Raeumlich homogene, linear stabile Systeme koennen diffusionsgetrieben stationaere, raeumlich periodische Muster ausbilden
- Erstaunlich, da im Allgemeinen Diffusion eher als stabilisierender Faktor aufgefasst wird

Lineare Stabilitaet des homogenen Systems

Betrachte ganz allgemein

$$\partial_t \mathbf{u} = \mathbf{D}\Delta\mathbf{u} + \mathbf{R}(\mathbf{u}) \tag{2}$$

wobei

- $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{r}, \mathbf{t}) = (u, v)^T$ die Konzentration der Substanzen,
- $\mathbf{R}(\mathbf{u}) = (f(u, v), g(u, v))^T$ die lokale Reaktionskinetik und
- $$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} D_u & 0 \\ 0 & D_v \end{pmatrix}$$

  eine eine diagonale Diffusionskoeffizientenmatrix

beschreibt

Lineare Stabilitaet des homogenen Systems

Betrachte ganz allgemein

$$\partial_t \mathbf{u} = \mathbf{D}\Delta\mathbf{u} + \mathbf{R}(\mathbf{u}) \tag{2}$$

wobei

- $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{r}, \mathbf{t}) = (u, v)^T$ die Konzentration der Substanzen,
- $\mathbf{R}(\mathbf{u}) = (f(u, v), g(u, v))^T$ die lokale Reaktionskinetik und
- $$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} D_u & 0 \\ 0 & D_v \end{pmatrix}$$

  eine eine diagonale Diffusionskoeffizientenmatrix

beschreibt

Betrachte ganz allgemein

$$\partial_t \mathbf{u} = \mathbf{D}\Delta\mathbf{u} + \mathbf{R}(\mathbf{u}) \tag{2}$$

wobei

- $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{r}, \mathbf{t}) = (u, v)^T$ die Konzentration der Substanzen,
- $\mathbf{R}(\mathbf{u}) = (f(u, v), g(u, v))^T$ die lokale Reaktionskinetik und
-
$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} D_u & 0 \\ 0 & D_v \end{pmatrix}$$
eine eine diagonale Diffusionskoeffizientenmatrix

beschreibt

Betrachte ganz allgemein

$$\partial_t \mathbf{u} = \mathbf{D}\Delta\mathbf{u} + \mathbf{R}(\mathbf{u}) \tag{2}$$

wobei

- $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{r}, \mathbf{t}) = (u, v)^T$ die Konzentration der Substanzen,
- $\mathbf{R}(\mathbf{u}) = (f(u, v), g(u, v))^T$ die lokale Reaktionskinetik und
- $$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} D_u & 0 \\ 0 & D_v \end{pmatrix}$$

  eine eine diagonale Diffusionskoeffizientenmatrix

beschreibt

Sei (u_0, v_0) ein homogene Loesung des Systems, d.h $f(u_0, v_0) = g(u_0, v_0) = 0$.

Angenommen: System in Abwesenheit von Diffusionseffekten linear stabil, dann kann man zeigen, dass alle Eigenwerte von

$$\mathbf{A} = (\partial \mathbf{R}/\partial \mathbf{u})_{\mathbf{u}=\mathbf{u}_0} = \begin{pmatrix} f_u & f_v \\ g_u & g_v \end{pmatrix}$$

negativ sein muessen. Fuer zwei Komponenten ist dazu aequivalent, dass

$$Sp(\mathbf{A}) = f_u + g_v < 0$$

und

$$\det(\mathbf{A}) = f_u g_v - f_v g_u > 0$$

Sei (u_0, v_0) ein homogene Loesung des Systems, d.h
$f(u_0, v_0) = g(u_0, v_0) = 0$.
Angenommen: System in Abwesenheit von Diffusionseffekten linear stabil, dann kann man zeigen, dass alle Eigenwerte von

$$\mathbf{A} = (\partial \mathbf{R}/\partial \mathbf{u})_{\mathbf{u}=\mathbf{u}_0} = \begin{pmatrix} f_u & f_v \\ g_u & g_v \end{pmatrix}$$

negativ sein muessen. Fuer zwei Komponenten ist dazu aequivalent, dass

$$Sp(\mathbf{A}) = f_u + g_v < 0$$

und

$$\det(\mathbf{A}) = f_u g_v - f_v g_u > 0$$

Sei (u_0, v_0) ein homogene Loesung des Systems, d.h
$f(u_0, v_0) = g(u_0, v_0) = 0$.
Angenommen: System in Abwesenheit von Diffusionseffekten linear stabil, dann kann man zeigen, dass alle Eigenwerte von

$$\mathbf{A} = (\partial \mathbf{R} / \partial \mathbf{u})_{\mathbf{u}=\mathbf{u}_0} = \begin{pmatrix} f_u & f_v \\ g_u & g_v \end{pmatrix}$$

negativ sein muessen. Fuer zwei Komponenten ist dazu aequivalent, dass

$$Sp(\mathbf{A}) = f_u + g_v < 0$$

und

$$\det(\mathbf{A}) = f_u g_v - f_v g_u > 0$$

Nun betrachte kleine Stoerung $\tilde{\mathbf{u}}$, also $\mathbf{u} = \mathbf{u}_0 + \tilde{\mathbf{u}}$
$\Rightarrow$

$$\partial_t \tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{D}\Delta\tilde{\mathbf{u}} + \mathbf{A}\tilde{\mathbf{u}} \tag{3}$$

fuer $\tilde{\mathbf{u}} \propto \mathbf{a_k} e^{ikr}$ ergibt sich

$$\dot{\mathbf{a}}_\mathbf{k} = (\mathbf{A} - k^2\mathbf{D})\mathbf{a_k} = \mathbf{B}\mathbf{a_k}$$

Nun betrachte kleine Stoerung $\tilde{\mathbf{u}}$, also $\mathbf{u} = \mathbf{u}_0 + \tilde{\mathbf{u}}$
$\Rightarrow$

$$\partial_t \tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{D}\Delta\tilde{\mathbf{u}} + \mathbf{A}\tilde{\mathbf{u}} \tag{3}$$

fuer $\tilde{\mathbf{u}} \propto \mathbf{a_k} e^{ikr}$ ergibt sich

$$\dot{\mathbf{a}}_\mathbf{k} = (\mathbf{A} - k^2\mathbf{D})\mathbf{a_k} = \mathbf{B}\mathbf{a_k}$$

Nun wieder Stabilitaetsbedingungen

$$Sp(\mathbf{B}) < 0 \forall k$$

$$\det(\mathbf{B}) > 0 \forall k$$

nach weiterer Rechnung $\rightarrow$ komplettes System von Bedingungen fuer die Instabilitaet des homogenen Zustandes $\mathbf{u}_0$

- $f_u + g_v < 0$
- $f_u g_v - f_v g_u > 0$
- $D_u g_v + D_v f_u > 0$
- $\left(\frac{f_u}{D_u} + \frac{g_v}{D_v}\right)^2 > \frac{4 \det \mathbf{A}}{D_u D_v}$

Nun wieder Stabilitaetsbedingungen

$$Sp(\mathbf{B}) < 0 \forall k$$

$$\det(\mathbf{B}) > 0 \forall k$$

nach weiterer Rechnung $\rightarrow$ komplettes System von Bedingungen fuer die Instabilitaet des homogenen Zustandes $\mathbf{u}_0$

- $f_u + g_v < 0$
- $f_u g_v - f_v g_u > 0$
- $D_u g_v + D_v f_u > 0$
- $\left(\frac{f_u}{D_u} + \frac{g_v}{D_v}\right)^2 > \frac{4 \det \mathbf{A}}{D_u D_v}$

Bemerkung

In diesem Vortrag: numerische Simulation von

$$\begin{aligned} \partial_t u &= D_u \Delta u + \lambda u - u^3 - v + \kappa \\ \tau \partial_t v &= D_v \Delta v + u - v \end{aligned}$$

Bedingungen fuer Turing-Instabilitaet hierbei

- $f^{'}(u_0) < 1/\tau)$
- $f^{'}(u_0) < 1$
- $f^{'}(u_0) > D_u/D_v$
- $f^{'}(u_0) \geq 2\sqrt{\frac{D_u}{D_v}} - \frac{D_u}{D_v}$

Bemerkung

In diesem Vortrag: numerische Simulation von

$$\begin{aligned} \partial_t u &= D_u \Delta u + \lambda u - u^3 - v + \kappa \\ \tau \partial_t v &= D_v \Delta v + u - v \end{aligned}$$

Bedingungen fuer Turing-Instabilitaet hierbei

- $f^{'}(u_0) < 1/\tau)$
- $f^{'}(u_0) < 1$
- $f^{'}(u_0) > D_u/D_v$
- $f^{'}(u_0) \geq 2\sqrt{\frac{D_u}{D_v}} - \frac{D_u}{D_v}$

Das Aktivator-Inhibitor Prinzip

Nimmt man die gerade erhaltenen Bedingungen als gegeben an, so laesst sich zeigen, dass es fuer

$$\mathbf{A} = (\partial \mathbf{R}/\partial \mathbf{u})_{\mathbf{u}=\mathbf{u}_0} = \begin{pmatrix} f_u & f_v \\ g_u & g_v \end{pmatrix}$$

nur vier moegliche Realisierungen bzgl. der Vorzeichen in den Matrixkomponenten gibt $\longrightarrow$ unter anderem ergibt sich, dass f_u und g_v immer verschiedene Vorzeichen haben muessen.

Wenn $f_u > 0$ und $g_v < 0$, so heisst u Aktivator und v Inhibitor

Das Aktivator-Inhibitor Prinzip

Nimmt man die gerade erhaltenen Bedingungen als gegeben an, so laesst sich zeigen, dass es fuer

$$\mathbf{A} = (\partial \mathbf{R}/\partial \mathbf{u})_{\mathbf{u}=\mathbf{u}_0} = \begin{pmatrix} f_u & f_v \\ g_u & g_v \end{pmatrix}$$

nur vier moegliche Realisierungen bzgl. der Vorzeichen in den Matrixkomponenten gibt $\longrightarrow$ unter anderem ergibt sich, dass f_u und g_v immer verschiedene Vorzeichen haben muessen.

Wenn $f_u > 0$ und $g_v < 0$, so heisst u Aktivator und v Inhibitor

Das Aktivator-Inhibitor Prinzip

Nimmt man die gerade erhaltenen Bedingungen als gegeben an, so laesst sich zeigen, dass es fuer

$$\mathbf{A} = (\partial \mathbf{R}/\partial \mathbf{u})_{\mathbf{u}=\mathbf{u}_0} = \begin{pmatrix} f_u & f_v \\ g_u & g_v \end{pmatrix}$$

nur vier moegliche Realisierungen bzgl. der Vorzeichen in den Matrixkomponenten gibt $\longrightarrow$ unter anderem ergibt sich, dass f_u und g_v immer verschiedene Vorzeichen haben muessen.
Wenn $f_u > 0$ und $g_v < 0$, so heisst u <u>Aktivator</u> und v <u>Inhibitor</u>

Physikalische Interpretation

- Im Fall stationaerer Strukturen hat der Inhibitor v eine stabilisierende Wirkung
- Kommt besonders zur Geltung wenn v 'schneller' ist (in bezug auf τ) und nicht zu weit verteilt durch Diffusion
- Verlangsamung von v fuehrt zu zeitlicher Strukturbildung (z.B. Pulse, laufende Wellen)
- Erhoehte Diffusion fuehrt zu raeumlichen Mustern (z.B. periodische Turing-Strukturen, lokalisierte Filamente)
- Beides zusammen: weit komplexere Strukturen (z.B. atmende Filamente, raumzeitliches Chaos)

Physikalische Interpretation

- Im Fall stationaerer Strukturen hat der Inhibitor v eine stabilisierende Wirkung
- Kommt besonders zur Geltung wenn v 'schneller' ist (in bezug auf τ) und nicht zu weit verteilt durch Diffusion
- Verlangsamung von v fuehrt zu zeitlicher Strukturbildung (z.B. Pulse, laufende Wellen)
- Erhoehte Diffusion fuehrt zu raeumlichen Mustern (z.B. periodische Turing-Strukturen, lokalisierte Filamente)
- Beides zusammen: weit komplexere Strukturen (z.B. atmende Filamente, raumzeitliches Chaos)

Physikalische Interpretation

- Im Fall stationaerer Strukturen hat der Inhibitor v eine stabilisierende Wirkung
- Kommt besonders zur Geltung wenn v 'schneller' ist (in bezug auf τ) und nicht zu weit verteilt durch Diffusion
- Verlangsamung von v fuehrt zu zeitlicher Strukturbildung (z.B. Pulse, laufende Wellen)
- Erhoehte Diffusion fuehrt zu raeumlichen Mustern (z.B. periodische Turing-Strukturen, lokalisierte Filamente)
- Beides zusammen: weit komplexere Strukturen (z.B. atmende Filamente, raumzeitliches Chaos)

Physikalische Interpretation

- Im Fall stationaerer Strukturen hat der Inhibitor v eine stabilisierende Wirkung
- Kommt besonders zur Geltung wenn v 'schneller' ist (in bezug auf τ) und nicht zu weit verteilt durch Diffusion
- Verlangsamung von v fuehrt zu zeitlicher Strukturbildung (z.B. Pulse, laufende Wellen)
- Erhoehte Diffusion fuehrt zu raeumlichen Mustern (z.B. periodische Turing-Strukturen, lokalisierte Filamente)
- Beides zusammen: weit komplexere Strukturen (z.B. atmende Filamente, raumzeitliches Chaos)

- Numerische und analytische Behandlung von Aktivator-Inhibitor-RD-Systemen um grundlegende Mechanismen der Strukturbildung zu erforschen und prinzipielle Phaenomene theoretisch vorauszusagen
- Verwendung um Experimente an Plasma-Systemen (z.B. Gasentladungen) und Halbleitern zu interpretieren

Numerische Simulation einer Turing-Instabilitaet

Diskretisierung von

$$\begin{aligned}\partial_t u &= D_u \Delta u + \lambda u - u^3 - v + \kappa \\ \tau \partial_t v &= D_v \Delta v + u - v\end{aligned}$$

ueber Vorwaertsdifferenzverfahren, hier Beispielhaft fuer u

i,j Raumdimensionen, n Zeit, h Schrittweite Ort, k Schrittweite Zeit, dann

$\partial_t u_{i,j}^{(n)} = \frac{u_{i,j}^{(n+1)} - u_{i,j}^{(n)}}{h}$

$\Delta u_{i,j}^{(n)} = \frac{u_{i+1,j}^{(n)} - 2u_{i,j}^{(n)} + u_{i-1,j}^{(n)}}{k^2} + \frac{u_{i,j+1}^{(n)} - 2u_{i,j}^{(n)} + u_{i,j-1}^{(n)}}{k^2}$

$\Rightarrow$ Einsetzen und auf Form bringen $u_{i,j}^{(n+1)} = \ldots$

Numerische Simulation einer Turing-Instabilitaet

Diskretisierung von

$$\begin{aligned} \partial_t u &= D_u \Delta u + \lambda u - u^3 - v + \kappa \\ \tau \partial_t v &= D_v \Delta v + u - v \end{aligned}$$

ueber Vorwaertsdifferenzverfahren, hier Beispielhaft fuer u

i,j Raumdimensionen, n Zeit, h Schrittweite Ort, k Schrittweite Zeit, dann

$\partial_t u_{i,j}^{(n)} = \frac{u_{i,j}^{(n+1)} - u_{i,j}^{(n)}}{h}$

$\Delta u_{i,j}^{(n)} = \frac{u_{i+1,j}^{(n)} - 2u_{i,j}^{(n)} + u_{i-1,j}^{(n)}}{k^2} + \frac{u_{i,j+1}^{(n)} - 2u_{i,j}^{(n)} + u_{i,j-1}^{(n)}}{k^2}$

$\Rightarrow$ Einsetzen und auf Form bringen $u_{i,j}^{(n+1)} = \ldots$

Numerische Simulation einer Turing-Instabilitaet

Diskretisierung von

$$\begin{aligned} \partial_t u &= D_u \Delta u + \lambda u - u^3 - v + \kappa \\ \tau \partial_t v &= D_v \Delta v + u - v \end{aligned}$$

ueber Vorwaertsdifferenzverfahren, hier Beispielhaft fuer u

i,j Raumdimensionen, n Zeit, h Schrittweite Ort, k Schrittweite Zeit, dann

$$\partial_t u_{i,j}^{(n)} = \frac{u_{i,j}^{(n+1)} - u_{i,j}^{(n)}}{h}$$

$$\Delta u_{i,j}^{(n)} = \frac{u_{i+1,j}^{(n)} - 2u_{i,j}^{(n)} + u_{i-1,j}^{(n)}}{k^2} + \frac{u_{i,j+1}^{(n)} - 2u_{i,j}^{(n)} + u_{i,j-1}^{(n)}}{k^2}$$

$\Rightarrow$ Einsetzen und auf Form bringen $u_{i,j}^{(n+1)} = \ldots$

Diskretisierung von

$$\begin{aligned}\partial_t u &= D_u \Delta u + \lambda u - u^3 - v + \kappa \\ \tau \partial_t v &= D_v \Delta v + u - v\end{aligned}$$

ueber Vorwaertsdifferenzverfahren, hier Beispielhaft fuer u

i,j Raumdimensionen, n Zeit, h Schrittweite Ort, k Schrittweite Zeit, dann

$\partial_t u_{i,j}^{(n)} = \frac{u_{i,j}^{(n+1)} - u_{i,j}^{(n)}}{h}$

$\Delta u_{i,j}^{(n)} = \frac{u_{i+1,j}^{(n)} - 2u_{i,j}^{(n)} + u_{i-1,j}^{(n)}}{k^2} + \frac{u_{i,j+1}^{(n)} - 2u_{i,j}^{(n)} + u_{i,j-1}^{(n)}}{k^2}$

$\Rightarrow$ Einsetzen und auf Form bringen $u_{i,j}^{(n+1)} = \ldots$

Numerische Simulation der Zeitentwicklung in einer Dimension

turing1D.f90 - KWrite

Datei Bearbeiten Ansicht Lesezeichen Extras Einstellungen Hilfe

```
!skalare parameter

real*8 h, k, D_u, l, kappa, D_v, x_0,
x_1, NX, NY

h=0.0005
k=0.005
D_u=0.00028
l=1
kappa=0.08
D_v=0.005
```

Numerische Simulation der Zeitentwicklung in einer Dimension

turing1D.f90 - KWrite

Datei Bearbeiten Ansicht Lesezeichen Extras Einstellungen Hilfe

```fortran
Do n=1,Nn-1
Do i=1,Ii



If (i .eq. Ii) then
x_plus = 1
else
x_plus = i+1
end if
```

Numerische Simulation der Zeitentwicklung in einer Dimension

turing1D.f90 - KWrite

Datei Bearbeiten Ansicht Lesezeichen Extras Einstellungen Hilfe

```
x_minus = Ii
else
x_minus = i-1
end if


u_neu(i) = h* (D_u *(u(x_plus) - 2 *u(i) +
u(x_minus))/k**2 + l*u(i) - u(i)**3 +
kappa-v(i))   + u(i)

v_neu(i) = h* (D_v *(v(x_plus) -2 *v(i) +
v(x_minus))/k**2 + u(i) - v(i))  + v(i)
```

Numerische Simulation der Zeitentwicklung in einer Dimension

turing1D.f90 - KWrite

Datei Bearbeiten Ansicht Lesezeichen Extras Einstellungen Hilfe

```
!grafische Ausgabe

if (mod(n,1000) .eq. 0) then

Call metafl ('png')
call scrmod ('reverse')

call disini()
!call GRAF(0.,1.,0.,0.1,-10.,10.,-10.,1.)
call
graf(real(x_0),real(x_1),real(x_0),real((x_1
```

Numerische Simulation der Zeitentwicklung in einer Dimension

turing2D.f90 [Geändert] - KWrite

Datei Bearbeiten Ansicht Lesezeichen Extras Einstellungen Hilfe

```
!parameter

h=0.00125
k=0.005
D_u=0.00028
l=1
kappa=-0.11
D_v=0.005

hDu_k2=h*D_u/(k**2)
hDv_k2=h*D_v/(k**2)
```

Numerische Simulation der Zeitentwicklung in zwei Dimensionen

turing2D.f90 - KWrite <2>

Datei Bearbeiten Ansicht Lesezeichen Extras Einstellungen Hilfe

```
Do n=1,Nn-1

Do i=1,Ii
Do j=1,Jj

If (i .eq. Ii) then
x_plus = 1
else
x_plus = i+1
end if
```

Numerische Simulation der Zeitentwicklung in zwei Dimensionen

turing2D.f90 - KWrite <2>

Datei Bearbeiten Ansicht Lesezeichen Extras Einstellungen Hilfe

```fortran
y_plus = j+1
end if


If (j .eq. 1) then
y_minus = Jj
else
y_minus = j-1
end if


u_neu(i,j) = hDu_k2*(u(x_plus,j) - 2 *u(i,j) + u(x_minus,j) +
u(i,y_plus) - 2 *u(i,j) + u(i,y_minus)) + h* (l*u(i,j) -
u(i,j)**3 + kappa-v(i,j)) + u(i,j)

v_neu(i,j) = hDv_k2 *(v(x_plus,j) -2 *v(i,j) + v(x_minus,j) +
v(i,y_plus) -2 *v(i,j) + v(i,y_minus)) + h*(u(i,j) - v(i,j))  +
```

Numerische Simulation der Zeitentwicklung in zwei Dimensionen

turing2D.f90 - KWrite <2>

Datei Bearbeiten Ansicht Lesezeichen Extras Einstellungen Hilfe

```
v(i,j) = v_neu(i,j)


End Do
End Do
!grafische Ausgabe

if (mod(n,1000) .eq. 0) then


.

.

.......
   Call metafl ('png').

         DO I=1,Ii
           X=(I-1.)*k
```

Zusammenfassung

- $\partial_t \mathbf{u} = \mathbf{D}\Delta\mathbf{u} + \mathbf{R}(\mathbf{u})$
- Zentral: Diffusionsgetriebene Instabilitaet
- Explizites Differnzenverfahren funktioniert fuer nichtlineare Gleichungen:-)

Zusammenfassung

- $\partial_t \mathbf{u} = \mathbf{D}\Delta\mathbf{u} + \mathbf{R}(\mathbf{u})$
- Zentral: Diffusionsgetriebene Instabilitaet
- Explizites Differnzenverfahren funktioniert fuer nichtlineare Gleichungen:-)

Zusammenfassung

- $\partial_t \mathbf{u} = \mathbf{D}\Delta\mathbf{u} + \mathbf{R}(\mathbf{u})$
- Zentral: Diffusionsgetriebene Instabilitaet
- Explizites Differnzenverfahren funktioniert fuer nichtlineare Gleichungen:-)

Ende

Vielen Dank fuer Ihre Aufmerksamkeit!

Literatur

- Lateral self-organization in nonlinear transport systems described by reaction-diffusion equations (Svetlana V. Gurevich, 2006)
- http://www.uni-muenster.de/Physik.AP/Purwins/RD/index-de.html
- Pattern formation in chemical systems (Raymond Kapral, 1995)
- Nonlinear chemical dynamics (Francesc Sagues, Irving R. Epstein, 2003)
- Spatial pattern formation in chemical and biological systems (Maini, Painter, Nguyen Phong Chau, 1997)