

**Frontinstabilitäten in
Nichtgleichgewichtssystemen**

**Front Instabilities in
Systems far from Equilibrium**

Bachelorarbeit

im Rahmen des Studiengangs
Physik (Bachelor of Science)

ausgegeben und betreut von
Prof. Dr. Rudolf Friedrich
Institut für Theoretische Physik

vorgelegt von
Felix Tabbert

Münster, Januar 2012

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
1 Grundlagen der Reaktions-Diffusions-Systeme	3
1.1 Kontinuumshypothese	3
1.2 Reaktions-Diffusions-Gleichungen	4
1.3 Einbeziehung von Advektion	6
1.4 Strukturbildung in Reaktions-Diffusions-Systemen	6
2 Das Zeldovich-Modell	11
2.1 Zeldovich-Gleichung	11
2.2 Stationäre Lösungen der modifizierten Zeldovich-Gleichung	11
2.2.1 Homogene stationäre Zustände	11
2.2.2 Lineare Stabilitätsanalyse der homogenen stationären Lösungen .	12
2.2.3 Stationäre Frontlösung	13
2.2.4 Lineare Stabilitätsanalyse der stationären Frontlösung	13
3 Frontentwicklung im Zeldovich-Modell	19
3.1 Übergang zu lokal-orthogonalen Koordinaten	19
3.2 Die Zeldovich-Gleichung in lokal-orthogonalen Koordinaten	21
3.3 Störungstheoretische Betrachtung	23
3.3.1 Störungstheoretische Analyse nullter Ordnung	23
3.3.2 Störungstheoretische Analyse erster Ordnung	24
3.4 Koordinatenrücktransformation	27
4 Erste Betrachtungen im FitzHugh-Nagumo-Modell	29
4.1 Das FitzHugh-Nagumo-Modell	29
4.2 Koordinatentransformation in einer Dimension	31
4.3 Ausblick: Allgemeine Koordinatentransformation	33
Schlussbetrachtungen	35
Literatur	i

Einleitung

In fast allen Bereichen der Natur lassen sich faszinierende Beispiele für die Bildung teils sehr komplexer Muster finden. Die typische Fellmusterung bestimmter Tiere wie Tigern oder Leoparden, die periodische Strukturierung von Wüstensand durch Wind, aber auch chemische Reaktionen mit raum-zeitlicher Periodizität wie die Belousov-Zhabotinsky-Reaktion [1] [2] sind Beispiele für Strukturbildung, die üblicherweise den unterschiedlichsten naturwissenschaftlichen Unterdisziplinen zugeordnet werden. Das Phänomen der Strukturbildung ist damit nicht auf physikalische Themengebiete im engeren Sinne beschränkt.

Dennoch lassen sich Eigenschaften feststellen, welche für viele Systeme mit spontaner Strukturbildung charakteristisch sind. Die Strukturbildung erfolgt spontan, d.h. weder Form noch typische raumzeitliche Skalen der entstehenden Struktur werden dem System von außen aufgeprägt. Die raumzeitliche Struktur entsteht vielmehr natürlich aus der Dynamik des Systems, es handelt sich daher um eine Form der *Selbstorganisation* [3].

Zudem handelt es sich bei Systemen, die selbstorganisierte Strukturbildung aufweisen, um *Nichtgleichgewichtssysteme*. Die Ausbildung bzw. die Aufrechterhaltung komplexer d.h. insbesondere inhomogener raumzeitlicher Strukturen im thermodynamischen Gleichgewicht ist nicht möglich [3]. Auf welche Weise das System dem Gleichgewicht ferngehalten wird, variiert hierbei stark. Das System kann beispielsweise durch Krafteinwirkung, wie sie im Fall der Strukturen im Wüstensand durch Wind verursacht wird, aber auch durch permanentes Hinzuführen oder Abführen einer Komponente im Falle chemischer Reaktionen im Nichtgleichgewicht erhalten werden.

Einen ersten wesentlichen Schritt zum theoretischen Verständnis selbstorganisierter Strukturbildung stellt die richtungsweisende Arbeit von A. Turing [4] dar, in der die spontane Entstehung periodischer Strukturen, so genannter Turing-Strukturen¹, in chemischen Systemen auf das Zusammenspiel von Reaktionen und Diffusion zurückgeführt wird. Zudem werden in dieser Arbeit erste Ansätze präsentiert, wie die gewonnenen Erkenntnisse auf biologische Systeme zu übertragen sind.

Es lassen sich in chemischen Systemen jedoch auch Strukturen beobachten, die deutlich von den Turing-Strukturen abweichen. So wurde u.a. von Lee et al. [5] [6] die Entstehung raumfüllender labyrinthartiger Strukturen in chemischen Systemen nachgewiesen.

Wie Simulationen von Goldstein et al. [7] nahelegen, lassen sich solche Strukturen durch bistabile Reaktions-Diffusions-Systeme modellieren. Die beiden homogenen und linear stabilen Zustände des Systems koexistieren und werden von einer dynamischen Front getrennt.

Ebenfalls in der Arbeit von Goldstein et al. wird im Rahmen des FitzHugh-Nagumo-Modells [8] analytisch eine Bestimmungsgleichung für diese Frontdynamik abgeleitet.

¹Englisch: Turing pattern

Bei H. A. Siddiqui [9] wird die Frontdynamik im bistabilen Zeldovich-Modell untersucht. Mittels einer Koordinatentransformation wird die zeitliche Entwicklung kleiner Abweichungen von einer planaren Front zwischen den beiden stabilen Zuständen in einer Dimension betrachtet.

An diese Überlegungen soll die vorliegende Arbeit nun anknüpfen. Ziel dieser Arbeit ist es, mittels einer Koordinatentransformation eine Evolutionsgleichung für die Frontdynamik im Zeldovich-Modell zu bestimmen. Hierbei wird ähnlich wie bei H.A. Siddiqui [9] vorgegangen, das Verfahren soll jedoch durch die Verwendung einer Koordinatentransformation in lokal-orthogonale Koordinaten verallgemeinert und durch die störungstheoretische Berücksichtigung von Krümmungseffekten verfeinert werden.

Hierzu wird im ersten Kapitel allgemein das mathematische Modell des Reaktions-Diffusions-Systems vorgestellt. Zudem wird Advektion als zusätzliche Ursache von Strömung eingeführt.

Anschließend wird im zweiten Kapitel das Zeldovich-Modell vorgestellt. Es handelt sich hierbei um ein einkomponentiges bistabiles Reaktions-Diffusions-System dessen Frontlösung im Fall eines planaren Frontverlaufs leicht bestimmbar ist.

Für das Zeldovich-Modell wird im dritten Kapitel eine Frontdynamik entwickelt. Hierzu wird zunächst die Koordinatentransformation in lokal-orthogonale Koordinaten durchgeführt, welche auch von Goldstein et al. [7] in ähnlicher Form verwendet wird. Es wird im Weiteren von einem schwach gekrümmten Frontverlauf ausgegangen, der es ermöglicht die Frontlösung ausgehend von der Frontlösung im planaren Fall störungstheoretisch zu entwickeln.

Aus diesem Ansatz für die Frontlösung soll dann eine Bestimmungsgleichung für die zeitliche Entwicklung der lokal-orthogonalen Koordinaten ermittelt werden. Aus dieser lässt sich letztlich die zeitliche Entwicklung des Frontverlaufs ableiten.

Im vierten Kapitel werden dann erste Überlegungen angestellt, wie sich die vorangegangenen Betrachtungen auf das von Goldstein et al. verwendete FitzHugh-Nagumo-Modell übertragen lassen.

1 Grundlagen der Reaktions-Diffusions-Systeme

Das mathematische Modell des Reaktions-Diffusions-Systems wird zur Modellierung einer Vielzahl von Prozessen aus den Bereichen der Chemie, Biologie oder Physik verwendet, bei denen sowohl lokale Wechselwirkung als auch räumliche Durchmischung der Komponenten zur raumzeitlichen Entwicklung eines Systems beitragen [10].

Im ursprünglichen Sinne handelt es sich bei einem Reaktions-Diffusions-System um ein chemisches System bestehend aus mehreren Komponenten, welche in einer Träger-substanz gelöst sind. Die Teilchenzahl mindestens einer der Komponenten ist variabel, die Stoffmengen weiterer Komponenten können durch Hinzuführen oder Abführen konstant gehalten werden. Die zeitliche Veränderung der variablen Stoffmengen wird durch räumliche Verschiebung der Teilchen aufgrund von Diffusion oder eines zusätzlichen Geschwindigkeitsfeldes verursacht. Zudem führen lokale Reaktionen zur Vernichtung oder Erzeugung der Komponenten.

Im Folgenden soll das mathematische Modell des Reaktions-Diffusions-Systems kurz vorgestellt werden. Es wird hierbei von einem chemischen System bestehend aus n -Komponenten variabler Stoffmenge ausgegangen. Diese Betrachtung dient der Anschaulichkeit, schränkt aber die Übertragbarkeit der folgenden Überlegungen auf andere Systeme mit ähnlicher mathematischer Struktur nicht ein.

1.1 Kontinuumshypothese

Allen folgenden Überlegungen liegt die Annahme zu Grunde, dass sich die betrachteten Fluide und Fluid-Lösungen als Kontinuum beschreiben lassen. Bedingung hierfür ist, dass die typischen räumlichen Skalen des Systems deutlich größer als die charakteristischen mikroskopischen Längen sind [11]. Als Maß für die typischen räumlichen Skalen des Systems dient beispielsweise die Diffusionskonstante D bzw. deren Quadratwurzel \sqrt{D} . Charakteristische mikroskopische Längen sind der mittlere Teilchenabstand sowie die mittlere freie Weglänge.

Ist die oben genannte Bedingung erfüllt, so befindet sich selbst in infinitesimal kleinen Volumina, welche auch als Kontinuumsteilchen bezeichnet werden, noch eine große Anzahl an Teilchen. Dies macht die Beschreibung der Stoffmenge durch eine kontinuierliche Dichtefunktion $\rho(\mathbf{x}, t)$ möglich [10]. Aufgrund der hohen Teilchenzahl innerhalb infinitesimaler Kontinuumsteilchen lässt sich auch der statistische Charakter der Brown'schen Molekularbewegung vernachlässigen, der Prozess der Diffusion lässt sich daher makroskopisch über das Fick'sche Gesetz beschreiben [12].

Bleibt die Stoffmenge einer bestimmten Substanz, welche durch die kontinuierliche Dich-

tefunktion $\rho(\mathbf{x}, t)$ beschrieben wird, im Gesamtsystem erhalten, so lässt sich die zeitliche Entwicklung der Dichte ρ durch die Kontinuitätsgleichung beschreiben [13]:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0.$$

Eine zeitliche Änderung der Dichte wird hier nur durch eine räumliche Veränderung der Stromdichte $\mathbf{j}(\mathbf{x}, t)$ verursacht.

1.2 Reaktions-Diffusions-Gleichungen

Betrachtet wird nun ein System von n Komponenten variabler Stoffmenge, welche in einem Trägerfluid gelöst sind. Die Fluidlösung wird als in guter Näherung inkompressibel angenommen, die Dichte $C_i(\mathbf{x}, t)$ ¹ jeder Komponente kann jedoch räumlich und zeitlich variieren. Das Gesamtsystem lässt sich daher durch den n -dimensionalen Vektor $\mathbf{C}(\mathbf{x}, t)$ beschreiben, welcher aus den einzelnen Komponenten C_i gebildet wird.

Ausgangspunkt der mathematischen Betrachtung dieses Systems ist die Gleichgewichtsgleichung² [9]. Es handelt sich hierbei um eine modifizierte Kontinuitätsgleichung, in der nun berücksichtigt wird, dass die einzelnen Komponenten des Systems in chemischen Reaktionen erzeugt oder vernichtet werden können. Die Teilchenzahl einer Komponente bleibt daher im Gesamtsystem nicht erhalten. Die Gleichgewichtsgleichung für die Dichte einer Komponente $C_i(\mathbf{x}, t)$ eines Reaktions-Diffusions-Systems lautet nun:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}_i(\mathbf{C}, \mathbf{x}, t) = R_i(\mathbf{C}(\mathbf{x}, t)). \quad (1.1)$$

Hierbei ist \mathbf{J}_i die Stromdichte der i -ten Komponente des Systems. Sie kann im allgemeinen Fall von den Dichten aller Komponenten \mathbf{C} abhängen. R_i ist ein Reaktionsterm, der die Erzeugung und Vernichtung der i -ten Komponente in chemischen Reaktionen berücksichtigt. Der Reaktionsterm kann im Falle chemischer Reaktionen durch Betrachtung von allen möglichen Reaktionen sowie der zugehörigen Reaktionspartner und der Reaktionsraten aufgestellt werden. Beispiele hierfür finden sich u.a. bei H. Haken [3]. Auch der Reaktionsterm hängt in der Regel von den Dichten der anderen Komponenten ab, da diese gegebenenfalls als Reaktionspartner fungieren. Die Abhängigkeit dieses Termes von $\mathbf{C}(\mathbf{x}, t)$ ist im Allgemeinen nichtlinear und damit maßgeblich für die Entwicklung komplexer raumzeitlicher Strukturen verantwortlich.

Die Bedeutung der einzelnen Terme lässt sich durch Betrachtung eines beliebigen Volumens V veranschaulichen [14]. Integration von (1.1) über V ergibt:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V d\mathbf{x} C_i + \int_V d\mathbf{x} \nabla \cdot \mathbf{J}_i(\mathbf{C}, \mathbf{x}, t) = \int_V d\mathbf{x} R_i(\mathbf{C}(\mathbf{x}, t)).$$

Das erste Integral der Gleichung entspricht der Teilchenzahl N_i im betrachteten Volumen. Das zweite Integral lässt sich mit Hilfe des Integralsatzes von Gauss umschreiben:

$$\frac{\partial N_i}{\partial t} = - \oint_{\delta V} d\mathbf{A} \cdot \mathbf{J}_i + \int_V d\mathbf{x} R_i(\mathbf{C}(\mathbf{x}, t)).$$

¹ $C_i(\mathbf{x}, t)$ kann hierbei auch als Konzentration aufgefasst werden. Aufgrund der als konstant angenommenen Gesamtdichte der Fluidlösung stehen die Dichte einer Komponente und der relative Anteil dieser Komponente an der Gesamtstoffmenge in einem festen Verhältniss.

²Englisch: balance equation

$d\mathbf{A}$ ist hierbei das orientierte Flächenelement des Volumens, integriert wird über die komplette Volumenoberfläche δV . Die zeitliche Veränderung der Anzahl der Teilchen N_i im Volumen V ist also abhängig von den zur Oberfläche senkrechten Strömungsanteilen, welche die austretende bzw. eintretende Strömung charakterisieren. Außerdem hängt die zeitliche Veränderung von den im Volumen ablaufenden Reaktionen ab. Deren Bilanz wird lokal durch die Funktion R_i wiedergegeben, bzw. im Gesamtvolumen durch die räumliche Integration über R_i .

Für die Ströme $\mathbf{J}_i(\mathbf{C}, \mathbf{x}, t)$ kommen zwei mögliche Ursachen in Frage [9]:

- *Diffusion*: Eine räumliche Änderung der Konzentration erfolgt durch Konzentrationsausgleich. Mikroskopische Ursache der Diffusion ist die Brown'sche Molekularbewegung, welche auf der bereits vorhandenen kinetischen Energie der Teilchen beruht. Die Diffusion erfolgt daher ohne zusätzliche Energieaufnahme und kann insofern als *passiv* bezeichnet werden.
- *Advektion*: Strömungen werden im Fall der Advektion durch ein zusätzliches Geschwindigkeitsfeld $\mathbf{U}(\mathbf{C}, \mathbf{x}, t)$ verursacht. Die gelösten Teilchen werden hierbei mit der Strömung, d.h. der mittleren Geschwindigkeit des Lösungsmittels, transportiert. Unterscheiden lässt sich die aktive von der passiven Advektion. Bei der passiven Advektion werden die gelösten Teilchen durch ein unabhängiges äußeres Geschwindigkeitsfeld transportiert. Im Falle der aktiven Advektion hängt das Geschwindigkeitsfeld selbst von der Konzentration der gelösten Komponenten ab.

Die Einbeziehung von Advektions-Strömungen wird im folgenden Abschnitt betrachtet. An dieser Stelle wird, wie in Reaktions-Diffusions-Systemen üblich, nur von Diffusion gemäß dem Fick'schen Gesetz als Ursache für räumliche Strömungen ausgegangen. Mikroskopische Betrachtungen, wie sie beispielsweise von A. Einstein [15] angestellt wurden, in denen die Brownsche Bewegung als Ursache von Diffusion einbezogen wird, werden aufgrund der makroskopischen räumlichen Skalen des Systems vernachlässigt.

In diesem Fall ist die durch Diffusion verursachte mittlere Stromdichte in Systemen mit räumlich inhomogener Konzentrationsverteilung gemäß 1. Fick'schem Gesetz [12] proportional zum Konzentrationsgradienten. Es gilt:

$$\mathbf{J}_i = -D_i \nabla C_i(\mathbf{x}, t).$$

D_i ist hierbei der Diffusionskoeffizient der Komponente i , d.h. ein Maß für die Beweglichkeit der Teilchen dieser Komponente. Einsetzen in (1.1) ergibt die Reaktions-Diffusionsgleichung:

$$\frac{\partial}{\partial t} C_i(\mathbf{x}, t) = R_i(\mathbf{C}(\mathbf{x}, t)) + D_i \Delta C_i(\mathbf{x}, t).$$

Für den Vektor \mathbf{C} bestehend aus den Dichten aller n Komponenten ergibt sich so:

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{C}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{R}(\mathbf{C}(\mathbf{x}, t)) + \mathbf{D} \Delta \mathbf{C}(\mathbf{x}, t). \quad (1.2)$$

In dieser Vektorgleichung ist \mathbf{D} eine Diagonalmatrix deren Einträge den Diffusionskoeffizienten der einzelnen Komponenten des Systems entsprechen.

1.3 Einbeziehung von Advektion

Neben Diffusion kann auch ein äußeres Geschwindigkeitsfeld räumliche Veränderungen des Systems verursachen. In diesem Fall wird das Trägerfluid und mit ihm sämtliche gelösten Komponenten einem Geschwindigkeitsfeld $\mathbf{U}(\mathbf{x}, t)$ ausgesetzt. Die mittlere Stromdichte einer Komponente ist unter Berücksichtigung von Diffusion und eines äußeren Geschwindigkeitsfelds $\mathbf{U}(\mathbf{x}, t)$ gegeben durch:

$$\mathbf{J}_i = \mathbf{U}(\mathbf{x}, t)C_i(\mathbf{x}, t) - D_i\nabla C_i(\mathbf{x}, t). \quad (1.3)$$

Einsetzen von (1.3) in Gleichung (1.1) führt zu:

$$\frac{\partial}{\partial t}C_i(\mathbf{x}, t) + \mathbf{U}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla C_i = R_i(\mathbf{C}(\mathbf{x}, t)) + D_i\Delta C_i(\mathbf{x}, t).$$

Hierbei wird ausgenutzt, dass für eine inkompressible Fluidlösung gilt [9]:

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = 0.$$

Es spielt für die folgenden Überlegungen keine Rolle, ob es sich um ein externes Geschwindigkeitsfeld d.h. passive Advektion handelt, oder ob das Geschwindigkeitsfeld selbst von der Dichteverteilung $\mathbf{C}(\mathbf{x}, t)$ abhängt. Für eine genauere Betrachtung verschiedener Modelle für aktive Advektion empfiehlt sich die Arbeit von H. A. Siddiqui [9].

1.4 Strukturbildung in Reaktions-Diffusions-Systemen

Räumlich ausgedehnte Reaktions-Diffusions-Systeme zeigen abhängig von den auftretenden Parametern und der genauen Form des Reaktionsterms eine Vielzahl qualitativ unterschiedlicher Strukturen. Für eine Auflistung verschiedener Systeme und deren möglicher Strukturen wird auf die Dissertation von S. Gurevich [16] verwiesen.

Das Konzept, Strukturbildung durch das Zusammenspiel von Reaktion und Diffusion zu erklären, geht auf A. Turing [4] zurück. Im Turing-Modell entstehen raumfüllende periodische Strukturen aus homogenen Zuständen, welche bei Berücksichtigung von Diffusion linear instabil sind [7].

Die Entstehung von Turing-Strukturen lässt sich gut an einem zweikomponentigen Reaktions-Diffusions-System veranschaulichen [9]. Ein System bestehend aus einem Aktivator u , der die Entstehung beider Komponenten fördert, und einem Inhibitor v , der die Entstehung beider Komponenten hemmt, kann dann Turing-Strukturen ausbilden, wenn die Komponenten mit unterschiedlicher Geschwindigkeit diffundieren [16].

Diffundiert in einem räumlich begrenzten System die Inhibitorsubstanz schneller als die Aktivatorsubstanz, so bilden sich periodische Strukturen hoher bzw. niedriger Aktivatorkonzentration. Anschaulich erklären lässt sich dies, wenn man davon ausgeht, dass das System ohne Berücksichtigung von Diffusion (beispielsweise bei permanenter Durchmischung) in einem linear stabilen Zustand (u_0, v_0) verweilen würde. Lässt man nun Diffusion zu und betrachtet eine räumlich periodische Störung [7] des Aktivators,

so führt dies zur Entstehung von mehr Aktivator- und Inhibitorsubstanz an den Stellen lokal leicht erhöhter Aktivatorkonzentration.

Unter Berücksichtigung von Diffusion wird dieser Prozess nicht vollständig von der Inhibitorsubstanz gehemmt, da diese schneller diffundiert als der Aktivator und somit am Ort der lokal erhöhten Aktivatorkonzentration in geringerer Menge vorhanden ist. Der Zustand wird daher instabil. Dieser Diffusionsprozess führt wiederum an den Stellen niedriger Aktivatorkonzentration zu lokal erhöhter InhibitorKonzentration. In diesen Bereichen wird die Entstehung der Aktivator- sowie weiterer Inhibitorsubstanz weiter gehemmt. Aus der anfangs schwachen Störung bilden sich somit periodische Strukturen, welche von deutlichen Konzentrationsunterschieden geprägt sind.

Die entscheidende Rolle, die dem Diffusionsprozess in diesem Modell zukommt, scheint zunächst kontraintuitiv, da Diffusion im Allgemeinen als glättender und somit stabilisierender Effekt aufgefasst wird [9]. Dass Diffusion im Zusammenspiel mit Reaktionen zwischen Komponenten unterschiedlicher Diffusivität zur Entstehung von Turing-Strukturen führen kann, ist jedoch auch experimentell mehrfach bestätigt worden [17] [18].

Es kann jedoch auch in Systemen, welche auch unter Berücksichtigung von Diffusion stationäre stabile Zustände besitzen, zur Ausbildung komplexer raumzeitlicher Strukturen kommen.

So kann es in räumlich ausgedehnten Systemen dazu kommen, dass zwei stationäre Zustände von einer Front getrennt koexistieren.

Ist einer der Zustände stabil und der andere instabil, so ist das Verhalten des Systems qualitativ leicht verständlich. Es kommt zu einer Ausbreitung des stabilen in Richtung des instabilen Zustands bis letztgenannter verschwindet. Quantitativ ist hierbei vor allem von Interesse, mit welcher Geschwindigkeit die Frontverschiebung in Richtung des instabilen Zustandes stattfindet. Diese Ausgangssituation wird in dieser Arbeit nicht weiter behandelt. Für einen Überblick zu diesem Themengebiet empfiehlt sich der Übersichtsartikel von W. van Saarloos [19].

Thema der folgenden Kapitel sind Reaktions-Diffusions-Systeme, in denen zwei stabile Zustände von einer Front getrennt koexistieren. Motivation für die Betrachtung solcher bistabiler Systeme sind experimentelle Ergebnisse von Lee et al. [5] [6], die in chemischen Systemen die Bildung raumfüllender labyrinthartiger Strukturen feststellten. Diese Strukturen zeichnen sich durch anfangs kompakte Regionen unterschiedlicher chemischer Zusammensetzung aus, welche durch scharfe Fronten getrennt sind und sich, wie in Abb. 1.1 gezeigt, mit zunehmender Zeit labyrinthartig ausbreiten.

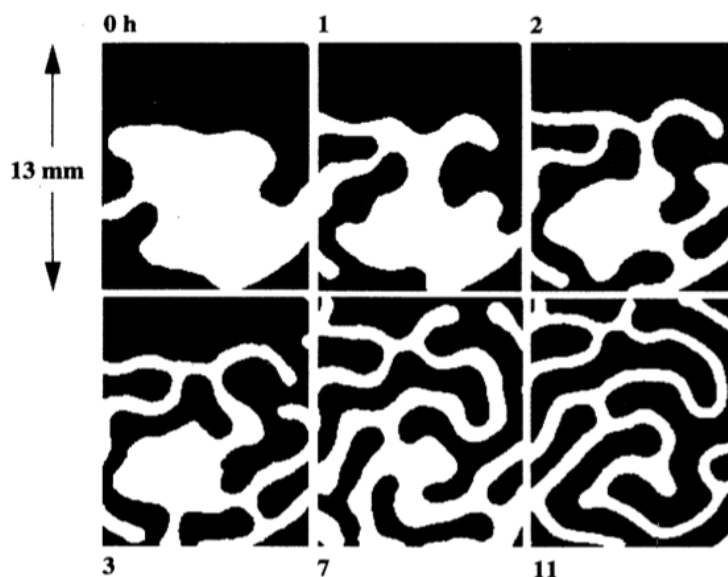


Abbildung 1.1: Bildung einer labyrinthartigen Struktur in einem in zwei Dimensionen räumlich ausgedehnten Jodid-Ferrocyanid-Sulfit-Reaktions-System von Lee et al. [6]. Regionen niedrigen pH-Werts werden weiß, Regionen hohen pH-Werts schwarz dargestellt. Die Zeit verläuft von oben links nach unten recht und wird in Stunden nach einer einmaligen Störung angegeben.

Dass bistabile Reaktions-Diffusions-Systeme ein adäquates Modell zur Beschreibung labyrinthartiger Strukturbildung darstellen, legt die Arbeit von Goldstein et al. [7] nahe. Grundlage dieser Arbeit ist das FitzHugh-Nagumo-Modell. Es handelt sich hierbei um ein zweikomponentiges Aktivator-Inhibitor-System, welches für zwei räumliche Dimensionen in entdimensionalisierter Form wie folgt dargestellt werden kann:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= D\Delta u - u(u-r)(u-1) - \rho(v-u), \\ \epsilon \frac{\partial v}{\partial t} &= \Delta v - (v-u). \end{aligned} \quad (1.4)$$

Für dieses System wurden innerhalb des bistabilen Parameterbereichs Simulationen durchgeführt, deren Ergebnisse qualitativ eine große Ähnlichkeit zu den experimentellen Resultaten von Lee et al. aufweisen. Die Simulation eines sich ausbreitenden Labyrinths ist in Abb. 1.2 dargestellt. Die Betrachtung zweier stabiler Zustände, welche durch eine Frontlösung voneinander getrennt sind, führt damit schon qualitativ zu überraschenden Ergebnissen als die Betrachtung eines stabilen und eines instabilen Zustands.

Im weiteren Verlauf der Arbeit wird der Fall betrachtet, in dem die beiden stabilen Zustände von einer schwach gekrümmten Front getrennt sind. In diesem Fall ist der Zustand des Systems auf beiden Seiten der Front in einigem Abstand zur Front stabil und in guter Näherung homogen. Der Übergang zwischen beiden stabilen Zuständen, der als Frontlösung bezeichnet wird, ist jedoch inhomogen und nicht zwangsläufig stabil.

Die Dynamik einer solchen Front soll in den folgenden Kapiteln untersucht werden. Hierzu wird zunächst das Zeldovich-Modell als einfaches Beispiel für ein bistabiles Reaktions-Diffusions-System vorgestellt.

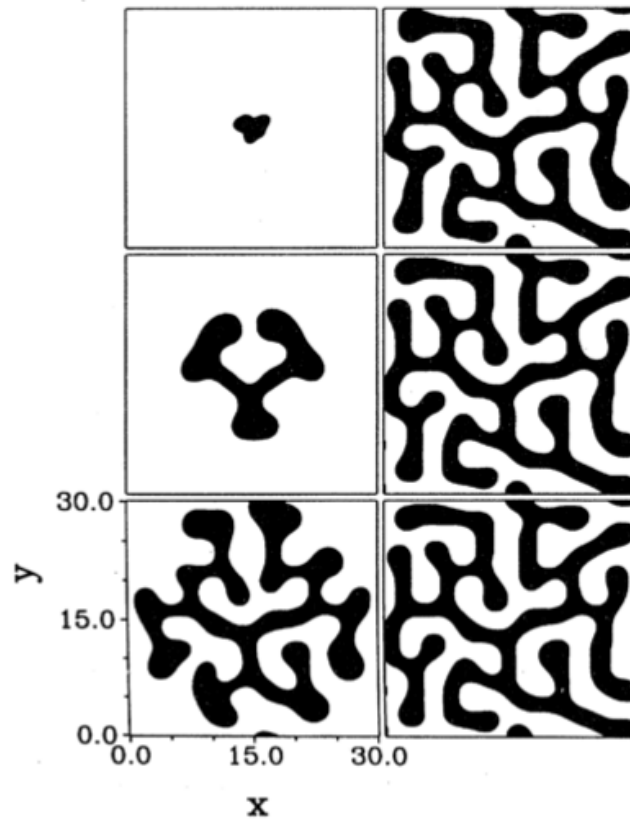


Abbildung 1.2: Simulation des FitzHugh-Nagumo-Modells aus der Arbeit von Goldstein et al. [7]. Dargestellt ist die Aktivatorkonzentration u . Werte von $u \leq 0,5$ werden weiß, Werte von $u \geq 0,5$ schwarz dargestellt. Die zugrunde liegenden Parameter in Gleichung (1.4) sind $D = 0,01$, $\rho = 0,15$ und $r = 0,52$. Die Zeit verläuft in Schritten der reskalierten Zeit $\tau = 0, 5, 10, 15, 20, 25$.

2 Das Zeldovich-Modell

Beim Zeldovich-Modell handelt es sich um ein einkomponentiges Reaktions-Diffusions-System, welches in bestimmten Parameterbereichen bistabil ist. Im Fall einer planaren Front zwischen beiden stabilen Zuständen ist zudem die Frontlösung für dieses System analytisch leicht zu ermitteln. Aufgrund dieser Eigenschaften bietet sich das Zeldovich-Modell für eine Untersuchung der Frontdynamik an, welche im nächsten Kapitel durchgeführt wird. In diesem Kapitel wird das Zeldovich-Modell zunächst vorgestellt sowie auf stabile stationäre Lösungen untersucht.

2.1 Zeldovich-Gleichung

Das bistabile Reaktions-Diffusions-System wird in zwei räumlichen Dimensionen und zunächst in den kartesischen Koordinaten $\mathbf{x} = (x_1, x_2)$ betrachtet. Es wird durch die Zeldovich-Frank-Kamenetski-Gleichung beschrieben, welche ursprünglich zur Modellierung von Flammenpropagation verwendet wurde [9]:

$$\frac{\partial}{\partial t} C(\mathbf{x}, t) = \epsilon C(\mathbf{x}, t) - C(\mathbf{x}, t)^3 + D \Delta C(\mathbf{x}, t). \quad (2.1)$$

D ist hierbei die Diffusionskonstante der Komponente C , ϵ ist ein reeller Parameter.

Berücksichtigt man zusätzlich Advektion, so muss (2.1), wie in Abschnitt 1.3 beschrieben, modifiziert werden:

$$\frac{\partial}{\partial t} C + \mathbf{U} \cdot \nabla C = \epsilon C - C^3 + D \Delta C. \quad (2.2)$$

Hierbei kann das Geschwindigkeitsfeld \mathbf{U} im Fall aktiver Advektion von C abhängen.

2.2 Stationäre Lösungen der modifizierten Zeldovich-Gleichung

Im Folgenden wird das durch die Zeldovich-Gleichung bestimmte System auf stabile stationäre Lösungen untersucht.

2.2.1 Homogene stationäre Zustände

Zunächst lassen sich stationäre homogene Lösungen des Systems finden. Die Bedingung für eine stationäre Lösung ist:

$$\frac{d}{dt} C = 0.$$

Homogene Lösungen werden charakterisiert durch die Bedingung:

$$\nabla C = \mathbf{0}.$$

Unter Berücksichtigung dieser Bedingungen liefert (2.2) die möglichen Lösungen $C_0 = \pm\sqrt{\epsilon}$ sowie $C_0 = 0$. Hierbei stellen die ersten beiden Ergebnisse nur für $\epsilon > 0$ relevante Lösungen dar, da C als reell angenommen wird.

2.2.2 Lineare Stabilitätsanalyse der homogenen stationären Lösungen

Um zu bestimmen, welche der homogenen stationären Lösungen stabil und welche instabil sind, wird von einem Ansatz

$$C(t) = C_0 + c_1(t) \tag{2.3}$$

ausgegangen, welcher sich additiv aus einer der homogenen stationären Lösungen C_0 und einer kleinen zeitabhängigen Störung $c_1(t)$ zusammensetzt. Untersucht wird nun, wie sich die Störung $c_1(t)$ zeitlich entwickelt. Einsetzen von Gleichung (2.3) in Gleichung (2.2) ergibt:

$$\frac{d}{dt}c_1(t) = \epsilon C_0 - C_0^3 + \epsilon c_1 + C_0^2 c_1.$$

Da von einer kleinen Störung c_1 ausgegangen wird, werden alle Terme der Ordnung $\mathcal{O}(c_1^2)$ und höher vernachlässigt. Da für alle homogenen stationären Lösungen

$$\epsilon C_0 - C_0^3 = 0$$

gilt, ergibt sich:

$$\frac{d}{dt}c_1(t) = \epsilon c_1 + C_0^2 c_1.$$

Für $C_0 = 0$ ergibt sich hieraus:

$$c_1(t) \sim e^{\epsilon t}.$$

Für $\epsilon > 0$ wird jede minimale Abweichung von $C_0 = 0$ exponentiell verstärkt. Die Lösung ist daher instabil. Im Fall $\epsilon < 0$ werden kleine Abweichungen exponentiell gedämpft und verschwinden für $t \rightarrow \infty$, die Lösung ist daher im Rahmen kleiner Störungen stabil.

Setzt man $C_0 = \pm\sqrt{\epsilon}$ so ergibt sich:

$$c_1(t) \sim e^{-2\epsilon t}.$$

Im Fall $\epsilon > 0$ werden kleine Abweichungen von der stationären Lösung exponentiell gedämpft. Es handelt sich also um stabile Lösungen. Der Fall $\epsilon < 0$ wird nicht betrachtet, da in diesem Fall $C_0 = \pm\sqrt{\epsilon}$ keine physikalisch relevanten Lösungen darstellt.

Im Fall $\epsilon > 0$ beschreibt die modifizierte Zeldovich-Gleichung (2.2) also ein bistabiles System mit den homogenen stabilen Lösungen $C_0 = \pm\sqrt{\epsilon}$. Alle weiteren Überlegungen beschränken sich daher auf den Parameterbereich $\epsilon > 0$.

2.2.3 Stationäre Frontlösung

Betrachtet wird nun der nichthomogene Zustand, in dem beide stabilen Lösungen räumlich getrennt koexistieren und von einer Frontlösung getrennt sind. Auch hier kann es bei Verschwinden des Geschwindigkeitsfeldes $\mathbf{U}(\mathbf{x}, t)$ zu einer stationären Lösung kommen. Diese ist ebenfalls durch ein Verschwinden der zeitlichen Ableitung von $C(\mathbf{x}, t)$ charakterisiert.

Um einen analytisch leicht lösbaren Einstieg zu ermöglichen, wird zunächst ein System betrachtet, in dem die unterschiedlichen stabilen homogenen Zustände im linken bzw. rechten Halbraum vorliegen und durch eine Frontlösung $C_0(x_1 - x_1^0)$ getrennt sind. Der Übergang zwischen den beiden stabilen homogenen Zuständen findet in Richtung der kartesischen Koordinate x_1 statt. Unter diesen Bedingungen ergibt sich aus (2.2) die Bestimmungsgleichung für die stationäre Front-Lösung zu:

$$\epsilon C_0 - (C_0)^3 + D \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} C_0 = 0. \quad (2.4)$$

Lösungen sind:

$$C_0(x_1 - x_1^0) = \pm \sqrt{\epsilon} \tanh \left(\sqrt{\frac{\epsilon}{2D}} (x_1 - x_1^0) \right). \quad (2.5)$$

Die Lösungen gehen für die Grenzwerte $\lim x_1 \rightarrow \pm\infty$ gegen die beiden stabilen homogenen Zustände $C = \pm\sqrt{\epsilon}$. Sie sind symmetrisch um x_1^0 . Durch x_1^0 lässt sich eine in diesem Fall planare Front mit der Eigenschaft $C(x_1 = x_1^0) = 0$ definieren. Im Folgenden wird die Lösung mit positivem Vorzeichen verwendet. Ohne die Allgemeingültigkeit der folgenden Überlegungen einzuschränken, wird also von einer Situation ausgegangen, bei der sich die homogene Lösung $C = -\sqrt{\epsilon}$ im linken und $C = \sqrt{\epsilon}$ im rechten Halbraum befindet. Außerdem wird von

$$x_1^0 = 0$$

ausgegangen. Der Gradient der Frontlösung verläuft damit symmetrisch zu $x_1 = 0$. Der Verlauf der Frontlösung C_0 ist schematisch in Abbildung 2.1 dargestellt.

Die Sinnhaftigkeit dieser Lösung lässt sich ebenfalls an ihrer Abhängigkeit von der Diffusionskonstante D illustrieren. Die Steigung der Frontlösung sinkt mit steigenden Werten von D , d.h. bei stärkeren Diffusionsströmen. Der Übergang wird daher flacher, er erstreckt sich über einen größeren Bereich. Im Falle schwacher Diffusion werden die beiden homogenen Bereiche von einer steileren Frontlösung getrennt. Im Grenzfall verschwindender Diffusion ($D \rightarrow 0$) konvergiert die Frontlösung gegen die unstetige Heavyside-Funktion, der Übergang zwischen beiden Zuständen findet sprunghaft statt.

2.2.4 Lineare Stabilitätsanalyse der stationären Frontlösung

Um die Frontlösung $C_0(x_1)$ auf ihre Stabilität zu untersuchen wird von einer kleinen Störung $c_1(\mathbf{x}, t)$ der stationären Lösung ausgegangen:

$$C = C_0(x_1) + c_1(\mathbf{x}, t).$$

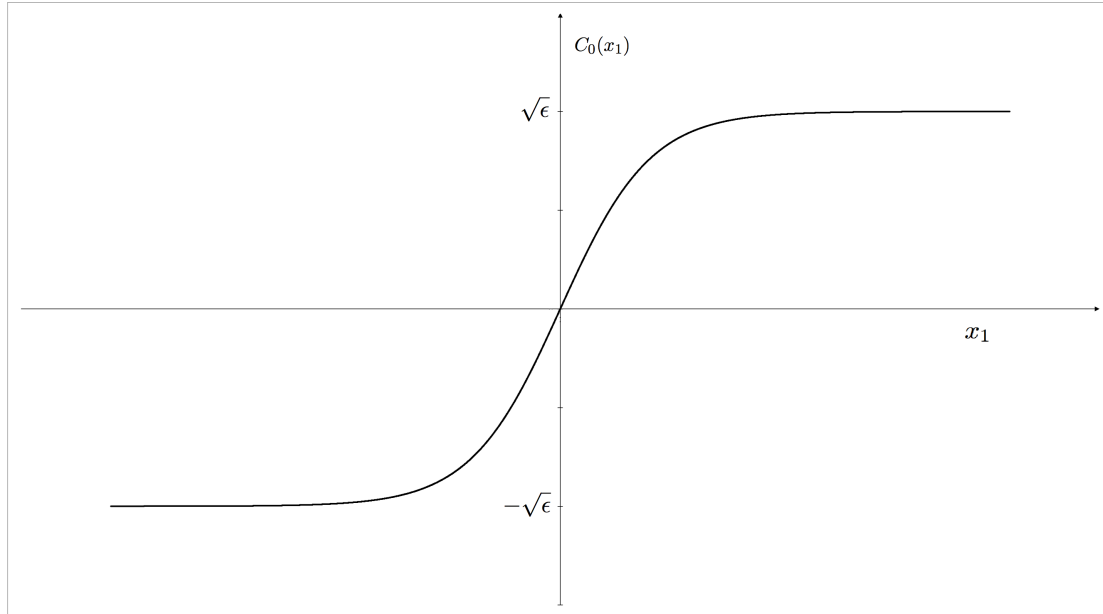


Abbildung 2.1: Schematische Darstellung der Frontlösung $C_0(x_1) = \sqrt{\epsilon} \tanh\left(\sqrt{\frac{\epsilon}{2D}}x_1\right)$. Quelle: selbsterstellt.

Einsetzen in (2.2) liefert unter Ausnutzung von (2.4) sowie bei Vernachlässigung aller Terme der Ordnung $\mathcal{O}(c_1^2)$ und höher:

$$\frac{\partial}{\partial t}c_1 = \left(\epsilon - 3C_0^2 + D\Delta\right)c_1.$$

Hier lässt sich nun der Operator L wie folgt definieren:

$$L := \left(\epsilon - 3C_0^2 + D\Delta\right). \quad (2.6)$$

Die Verwendung des Ansatzes

$$c_1(\mathbf{x}, t) = C_1(\mathbf{x})e^{\lambda t} \quad (2.7)$$

führt nun auf das lineare Eigenwertproblem:

$$\lambda C_1 = LC_1.$$

Entscheidend für die Stabilität der Frontlösung sind daher die Vorzeichen der möglichen Eigenwerte λ des Operators L .

Das Spektrum von L

Zunächst wird das Spektrum des Operators L untersucht. Zu lösen ist die Eigenwertgleichung

$$LC = \lambda C.$$

Hierbei ist L der gemäß Gleichung (2.6) eingeführte Operator, λ ist ein Eigenwert. Einsetzen von L ergibt:

$$\left(\epsilon - 3\epsilon \tanh^2 \left(\sqrt{\frac{\epsilon}{2D}} x_1 \right) + D\Delta \right) C(x_1, x_2) = \lambda C(x_1, x_2).$$

Mit Hilfe des Separationsansatzes

$$C(x_1, x_2) = G(x_1) \cdot H(x_2)$$

ergibt sich:

$$\lambda - \epsilon = \frac{1}{G} \left(D \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - 3\epsilon \tanh^2 \left(\sqrt{\frac{\epsilon}{2D}} x_1 \right) \right) G + \frac{1}{H} \left(D \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \right) H = \text{const.} \quad (2.8)$$

Da die beiden Summanden in Gleichung (2.8) voneinander unabhängig sind und jeweils nur von einer der beiden Variablen abhängen, müssen beide Summanden konstant sein, damit die Summe der beiden in jedem Fall konstant ist. Es ergeben sich zwei voneinander unabhängige eindimensionale Eigenwertprobleme:

$$\begin{aligned} \frac{1}{G} \left(D \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - 3\epsilon \tanh^2 \left(\sqrt{\frac{\epsilon}{2D}} x_1 \right) \right) G &= \text{const.} =: g, \\ \frac{1}{H} \left(D \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \right) H &= \text{const.} =: h. \end{aligned}$$

Das Eigenwertproblem für $H(x_2)$ ist durch einen Exponentialansatz leicht lösbar. Es ergibt sich die allgemeine Lösung:

$$H(x_2) = \tilde{A} e^{\sqrt{\frac{h}{D}} x_2} + \tilde{B} e^{-\sqrt{\frac{h}{D}} x_2}.$$

Die Form dieser Lösung hängt vom Vorzeichen von h ab. Für $h > 0$ ergeben sich reelle Exponentialfunktionen. Diese sind unbeschränkt und kommen daher nicht für eine kleine Störung in Frage.

Für $h < 0$ ergeben sich komplexe Exponentialfunktionen, d.h. räumliche Schwingungen der Form:

$$H(x_2) = A \cos(kx_2) + B \sin(kx_2)$$

mit:

$$k = \sqrt{-\frac{h}{D}}.$$

Zu beachten ist, dass auch die Lösung $H = \text{const.}$ entsprechend $h = 0$ eine physikalisch relevante Lösung darstellt.

Für $G(x_1)$ ergibt sich folgende Differentialgleichung:

$$\left(D \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - 3\epsilon \tanh^2 \left(\sqrt{\frac{\epsilon}{2D}} x_1 \right) - g \right) G = 0.$$

Es handelt sich hierbei der Form nach um eine Schrödingergleichung mit einem Potential, welches sich auf ein verschobenes Potential der Form $1/\cosh^2(x)$ zurückführen lässt. Dieses lässt sich analytisch behandeln [20]:

Die Substitution

$$\xi := \tanh\left(\sqrt{\frac{\epsilon}{2D}} x_1\right)$$

führt unter Berücksichtigung der notwendigen Ableitung

$$\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} = \frac{\partial^2 \xi}{\partial x_1^2} \frac{\partial}{\partial \xi} + \left(\frac{\partial \xi}{\partial x_1}\right)^2 \frac{\partial^2}{\partial \xi^2}$$

zu folgender Differentialgleichung:

$$\begin{aligned} & -2\xi(1-\xi^2) \frac{\partial G}{\partial \xi} + (1-\xi^2)^2 \frac{\partial^2 G}{\partial \xi^2} - 6\xi^2 G - 2\frac{g}{\epsilon} G = 0 \\ \Leftrightarrow & -2\xi(1-\xi^2) \frac{\partial G}{\partial \xi} + (1-\xi^2)^2 \frac{\partial^2 G}{\partial \xi^2} + 6(1-\xi^2) G - 6G - 2\frac{g}{\epsilon} G = 0 \\ \Leftrightarrow & \frac{\partial}{\partial \xi} \left[(1-\xi^2) \frac{\partial G}{\partial \xi} \right] + \left[6 - \frac{6\epsilon + 2g}{\epsilon(1-\xi^2)} \right] G = 0. \end{aligned}$$

Diese Differentialgleichung entspricht der allgemeinen Legendregleichung:

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \left[(1-\xi^2) \frac{\partial G}{\partial \xi} \right] + \left[s(s+1) - \frac{m^2}{(1-\xi^2)} \right] G = 0.$$

Im vorliegenden Spezialfall gilt:

$$s = 2, \quad m = \pm \sqrt{\frac{6\epsilon + 2g}{\epsilon}}. \quad (2.9)$$

Lösungen der allgemeinen Legendregleichung sind die assoziierten Legendrepolynome. Diese Lösungen treten im Intervall $-1 \leq \xi \leq 1$ (entsprechend dem Intervall $-\infty \leq x_1 \leq \infty$) genau dann auf, wenn s und m ganzzahlig sind und die Bedingung $0 \leq m \leq s$ erfüllt ist.

Aus dieser Bedingung ergeben sich für $s = 2$ drei möglich Werte g_i und somit gemäß

$$\lambda = h + g + \epsilon \quad (2.10)$$

drei unterschiedliche Ausdrücke für den Eigenwert λ :

$$\begin{aligned} g_1 = -3\epsilon & \Rightarrow \lambda_1 = h - 2\epsilon, \\ g_2 = -\frac{5}{2}\epsilon & \Rightarrow \lambda_2 = h - \frac{3}{2}\epsilon, \\ g_3 = -\epsilon & \Rightarrow \lambda_3 = h. \end{aligned}$$

Gesondert muss noch der Fall negativer Terme unter der Wurzel in Gleichung (2.9) betrachtet werden. Im quantenmechanischen Analogon entspricht dies positiven Energien,

d.h. ungebundenen Zuständen. Das Spektrum ist in diesem Bereich kontinuierlich. Im vorliegenden Beispiel führt dies bei positivem ϵ gemäß

$$g < -3\epsilon$$

zu negativen Werten von g und damit gemäß Gleichung (2.10) zu negativen Eigenwerten λ .

Im Allgemeinen gilt also $\lambda < 0$, was gemäß dem Ansatz aus Gleichung (2.7) einer gedämpften Störung entspricht. Die Frontlösung $C_0(x_1)$ ist daher stabil gegen Störungen dieser Form.

Die einzige Ausnahme bildet der ebenfalls mögliche Eigenwert $\lambda = 0$ entsprechend $h = 0$ und $g = -\epsilon$. Die zugehörige Eigenfunktion ist konstant in x_2 und proportional zum assoziierten Legendre-Polynom für $s = m = 2$ [21]:

$$P_2^{(2)}(\xi) = 3(1 - \xi^2).$$

Durch Resubstitution und geeignete Normierung lässt sich die Eigenfunktion G_0 zum zugehörigen Eigenwert $\lambda = 0$ darstellen als:

$$G_0(x_1) = \frac{\epsilon}{\sqrt{2D}} \left(1 - \tanh^2 \left(\sqrt{\frac{\epsilon}{2D}} x_1 \right) \right) = \frac{\partial C_0}{\partial x_1}. \quad (2.11)$$

Die Eigenmode wird auch als Goldstone-Mode des Operators bezeichnet. Gemäß Ansatz (2.7) wird eine kleine Störung in Form der Goldstone-Mode weder verstärkt noch gedämpft. Die Frontlösung ist daher invariant gegenüber Störungen dieser Form. Dies lässt sich durch folgende Überlegung plausibel machen:

Man betrachtet eine kleine Verschiebung m der Frontlösung C_0 :

$$C_0(x_1) \rightarrow C_0(x_1 + m).$$

Diese Verschiebung sollte die Stabilität oder die Form der Frontlösung nicht beeinflussen, da die Betrachtungen andernfalls abhängig von der Wahl des Koordinatensystems wären. Entwickelt man $C_0(x_1 + m)$ um den Punkt x_1 ergibt sich:

$$C_0(x_1 + m) = C_0(x_1) + m \frac{\partial C_0(x_1)}{\partial x_1} = C_0 + mG_0.$$

Weitere Terme können im Fall einer kleinen Verschiebung m vernachlässigt werden. Es handelt sich hierbei um eine kleine Störung in Form der Goldstone-Mode G_0 . Die Invarianz der Frontlösung gegenüber kleinen Störungen in Form der Goldstone-Mode entspricht daher der Translationsinvarianz des Systems.

3 Frontentwicklung im Zeldovich-Modell

Wie im vorangegangenen Abschnitt gezeigt, ist die Frontlösung bei planarem Frontverlauf zwischen den beiden homogenen Zuständen stabil und kann lediglich bei gleichbleibender Form räumlich verschoben werden. Für die Entwicklung labyrinthartiger Strukturen ist insbesondere die zeitliche Entwicklung des Frontverlaufs bei Abweichungen von der planaren Front von Interesse.

Die zeitliche Entwicklung einer kleinen Abweichung in x_1 -Richtung wurde bereits in der Arbeit von H. A. Siddiqui [9] untersucht. In diesem Fall führte der Übergang von x_1 zu einer zeitabhängigen Koordinate

$$y_1 = x_1 - f(x_2, t) \quad (3.1)$$

unter Annahme eines aus Gleichung (2.5) bekannten Frontverlaufes der Form

$$C_0(y_1) = \sqrt{\epsilon} \tanh\left(\sqrt{\frac{\epsilon}{2D}} y_1\right)$$

zu einer Evolutionsgleichung für $f(x_2, t)$. Dieser Überlegung liegt letztlich die plausible Annahme zu Grunde, dass kleine Abweichungen von der planaren Front die Form C_0 der Frontlösung nicht wesentlich verändern. Diese Annahme findet sich auch bei Goldstein et al. [7]. Auf diese Überlegungen aufbauend soll nun eine verallgemeinerte Evolutionsgleichung für das Zeldovich-System bestimmt werden.

Hierzu wird zum einen eine allgemeinere Form der Koordinatentransformation gewählt. Anstatt nur eine der beiden Koordinaten als zeitabhängig aufzufassen, wird eine vollständige Koordinatentransformation in lokal-orthogonale Koordinaten [7] durchgeführt. Zudem soll nun im Rahmen einer störungstheoretischen Betrachtung die Abhängigkeit der Frontlösung von der Krümmung der Kurve berücksichtigt werden.

3.1 Übergang zu lokal-orthogonalen Koordinaten

Ausgegangen wird nun von einer nicht-planaren Trennung zwischen den beiden homogenen Zuständen des Systems. Durch die Eigenschaft $C = 0$ wird also zum Zeitpunkt $t = 0$ eine Bahnkurve mit schwacher Krümmung definiert, welche sich in Abhängigkeit des Parameters τ als $\mathbf{r}(\tau)$ parametrisieren lasse.

Wurde das System bisher in den kartesischen Koordinaten

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$$

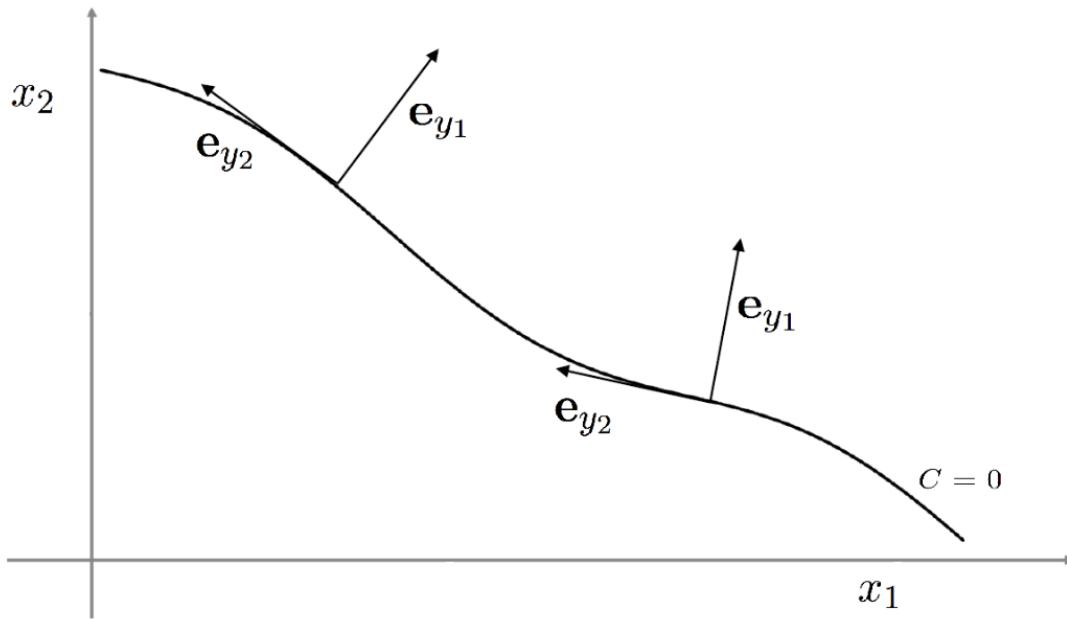


Abbildung 3.1: Schematische Darstellung der lokal-orthogonalen Einheitsvektoren \mathbf{e}_{y_1} und \mathbf{e}_{y_2} in den kartesischen Koordinaten \mathbf{x} . Die Bahnkurve wird durch die Eigenschaft $C = 0$ definiert. Quelle: selbsterstellt.

beschrieben, so wird nun übergegangen zu den dynamischen Koordinaten

$$\mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_1(x_1, x_2, t) \\ y_2(x_1, x_2, t) \end{pmatrix}.$$

Hierbei wird \mathbf{y} so definiert, dass der Einheitsvektor \mathbf{e}_{y_1} stets senkrecht auf der Bahnkurve und der Einheitsvektor \mathbf{e}_{y_2} parallel zur Bahnkurve steht. Dies wird schematisch in Abbildung 3.1 dargestellt. Betrachtet man die Bahnkurve in den neuen gekrümmten Koordinaten, liegt nun die bereits behandelte Situation einer planaren Front vor. Der Koordinatenursprung des neuen Koordinatensystems wird in den Punkt $\mathbf{r}(\tau = 0)$ gelegt. Der y_2 -Wert eines beliebigen Punktes auf der Bahnkurve entspricht der Bogenlänge [22]:

$$y_2(\tau) = \int_0^\tau \frac{d\mathbf{r}}{d\tau'} d\tau'.$$

Mithilfe von $y_2(\tau)$ lässt sich $\tau(y_2)$ bestimmen. Die Bahnkurve lässt sich nun nach ihrer Bogenlänge als $\mathbf{r}(y_2)$ parametrisieren. Aus dieser Darstellung lassen sich leicht der Tangenteneinheitsvektor sowie der Normaleneinheitsvektor bestimmen. Diese entsprechen den Einheitsvektoren \mathbf{e}_{y_2} und \mathbf{e}_{y_1} . Es ergeben sich:

$$\mathbf{e}_{y_2} = \frac{d\mathbf{r}}{dy_2},$$

sowie:

$$\mathbf{e}_{y_1} = \frac{1}{\kappa} \frac{d^2\mathbf{r}}{dy_2^2}.$$

Der Faktor $\frac{1}{\kappa}$ dient hierbei der Normierung des Einheitsvektors \mathbf{e}_{y_1} . κ bezeichnet man als Krümmung der Bahnkurve an der betrachteten Stelle [22].

Ein beliebiger Punkt \mathbf{x} abseits der Bahnkurve kann nun wie folgt dargestellt werden:

$$\mathbf{x}(y_1, y_2) = \mathbf{r}(y_2) + \frac{1}{\kappa} \frac{d^2 \mathbf{r}}{dy_2^2} y_1. \quad (3.2)$$

Aus diesem Zusammenhang ergeben sich die Koordinaten y_1 sowie y_2 eines beliebigen Punktes \mathbf{x} . Bei gekrümmten Kurven ist es möglich, dass für bestimmte Punkte \mathbf{x} mehrere Vektoren \mathbf{y} Bedingung (3.2) erfüllen. Ein Teil dieser Fälle lässt sich durch die zusätzliche Bedingung vermeiden, dass y_1 , d.h. der Abstand zur Bahnkurve, minimiert werden muss.

Zu beachten ist trotzdem, dass die oben beschriebene Transformationsvorschrift unterbestimmt ist. Punkte auf der Bahnkurve können zwar eindeutig bestimmt werden, für Punkte, die sich in einiger Entfernung oder in der Nähe starker Krümmung der Bahnkurve befinden, lassen sich jedoch gegebenenfalls mehrere mögliche Koordinaten \mathbf{y} finden. Die Zuordnung ist daher nicht eindeutig. Im Grenzfall schwacher Krümmung und Betrachtungen, die sich auf die unmittelbare Kurvenumgebung beschränken, kann diese Ungenauigkeit jedoch vernachlässigt werden.

Die folgenden Überlegungen beschränken sich auf schwach gekrümmte Bahnkurven. Zudem beziehen sich alle Überlegungen auf die Frontlösung in naher Umgebung der Kurve. Der Gradient der Frontlösung ist eine in der Umgebung der Bahnkurve stark lokalisierte Funktion. In größerer Entfernung nehmen wir die stabilen homogenen Lösungen $C = \pm\sqrt{\epsilon}$ an. Die Näherung scheint daher vertretbar. Ziel der Arbeit ist letztlich die Bestimmung der zeitlichen Entwicklung der Bahnkurve

$$\mathbf{r}(y_2, t) = \mathbf{x}(y_1 = 0, y_2, t).$$

Relevant ist die Rücktransformation $\mathbf{y}(\mathbf{x}, t) \rightarrow \mathbf{x}(\mathbf{y}, t)$ daher letztlich an der Stelle $y_1 = 0$. Auch dies gibt Grund zu der Annahme, dass die Schwierigkeiten der Koordinatentransformation abseits der Bahnkurve, d.h. für große Werte von y_1 , vernachlässigbar sind.

3.2 Die Zeldovich-Gleichung in lokal-orthogonalen Koordinaten

Die Größe $C(\mathbf{x}, t)$ wird im neuen System zu $C(\mathbf{y}(\mathbf{x}, t), t)$. Die für die Zeldovich-Gleichung (2.2) relevanten Ableitungen lassen sich nun durch Ableitungen nach den neuen Koordinaten ausdrücken. Es ergibt sich:

$$\dot{C}(\mathbf{x}, t) = \dot{\mathbf{y}}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla_{\mathbf{y}} C(\mathbf{y}(\mathbf{x}, t), t) + \frac{\partial}{\partial t} C(\mathbf{y}(\mathbf{x}, t), t).$$

\dot{C} ist hierbei die totale Ableitung nach der Zeit, $\nabla_{\mathbf{y}}$ ist der zweidimensionale Nablaoperator, dessen Komponenten aus den jeweiligen Ableitungen nach den neuen Koordinaten y_i bestehen. Außerdem ergeben sich:

$$\mathbf{U} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} C = U_{x_j} \frac{\partial y_i}{\partial x_j} \frac{\partial C}{\partial y_i},$$

sowie

$$\Delta_x C = G_{ij} \frac{\partial^2 C}{\partial y_i \partial y_j} + (\Delta_x y_l) \frac{\partial C}{\partial y_l},$$

mit

$$G_{ij} = \frac{\partial y_i}{\partial x_k} \frac{\partial y_j}{\partial x_k}.$$

Hierbei gilt, wie auch im weiteren Verlauf der Arbeit, die Einstein'sche Summenkonvention: Über Indizes, die innerhalb eines Produktes doppelt auftreten, wird summiert.

Einsetzen der obigen Terme in Gleichung (2.2) ergibt nun:

$$\begin{aligned} & \dot{\mathbf{y}} \cdot \nabla_y C + \frac{\partial C}{\partial t} + U_{x_j} \frac{\partial y_i}{\partial x_j} \frac{\partial C}{\partial y_i} \\ &= \epsilon C - C^3 + D \left(G_{ij} \frac{\partial^2 C}{\partial y_i \partial y_j} + (\Delta_x y_l) \frac{\partial C}{\partial y_l} \right). \end{aligned}$$

Umstellen der Terme und Addition von $D\Delta_y C$ führt zu:

$$\frac{\partial C}{\partial y_i} \left(\dot{y}_i + U_{x_j} \frac{\partial y_i}{\partial x_j} - D\Delta_x y_i \right) = \epsilon C - C^3 + D\Delta_y C + D(G_{ij} - \delta_{ij}) \frac{\partial^2 C}{\partial y_i \partial y_j} - \frac{\partial C}{\partial t}. \quad (3.3)$$

Für diese Gleichung gilt es nun unter Berücksichtigung verschiedener Näherungen Lösungsbedingungen zu formulieren um zu einer Entwicklungsgleichung der Front zu gelangen.

Zunächst wird angenommen, dass die Zeitabhängigkeit von $C(\mathbf{y}(\mathbf{x}, t), t)$ vollständig durch die zeitabhängigen Ortskoordinaten $\mathbf{y}(\mathbf{x}, t)$ ausgedrückt wird. Es gilt also:

$$\frac{\partial}{\partial t} C(\mathbf{y}, t) = 0.$$

Betrachtet man als Bahnkurve eine Gerade, d.h. den Grenzfall verschwindender Krümmung, so lässt sich die Koordinatentransformation im allgemeinen Fall als eine Translation um den Vektor

$$\mathbf{t} = \begin{pmatrix} t_1 \\ t_2 \end{pmatrix}$$

bei anschließender Drehung um einen Winkel φ darstellen. Es gilt [22]:

$$\begin{aligned} y_1 &= (x_1 + r_1) \cos \varphi + (x_2 + r_2) \sin \varphi, \\ y_2 &= (x_1 + r_1) \sin \varphi + (x_2 + r_2) \cos \varphi. \end{aligned}$$

Für den durch obige Transformation beschriebenen Grenzfall verschwindender Krümmung lässt sich durch elementares Einsetzen zeigen, dass gilt:

$$G_{ij} = \delta_{ij}.$$

Da sich sämtliche folgenden Betrachtungen auf die Annahme schwacher Krümmung beschränken, lässt sich annehmen, dass

$$(G_{ij} - \delta_{ij}) \ll 1.$$

Es bietet sich daher an, diese Größe als Parameter einer störungstheoretischen Betrachtung zu nutzen, um so die Abhängigkeit der Frontlösung von der schwachen Krümmung der Bahnkurve zu berücksichtigen.

3.3 Störungstheoretische Betrachtung

Als Ausgangspunkt wird die in Abschnitt 2.2 betrachtete stationäre Frontlösung gewählt. In diesem vereinfachten Model wird zunächst davon ausgegangen, dass der Gradient von C auch im komplexeren Fall einer gekrümmten Bahnkurve ausschließlich senkrecht zur Bahnkurve mit $C = 0$ verläuft. Motiviert wird dieser Ansatz dadurch, dass die Ausgangsposition in den gekrümmten Koordinaten \mathbf{y} der in Abschnitt 2.2 betrachteten Situation entspricht: Die Bahnkurve verläuft planar, senkrecht zu y_1 . In erster Näherung wird die Frontlösung daher gemäß Gleichung (2.5) durch

$$C_0(y_1) = \sqrt{\epsilon} \tanh\left(\sqrt{\frac{\epsilon}{2D}} y_1\right)$$

beschrieben. In diesem ersten Lösungsansatz wird die Tatsache, dass es sich bei \mathbf{y} um gekrümmte Koordinaten handelt, vernachlässigt. Anschaulich wird an jedem Punkt der Bahnkurve ein zur Tangente senkrechter Verlauf in Form eines Tangens Hyperbolicus, wie in Abb. 2.1 dargestellt, angenommen. Die Tatsache, dass die Krümmung der Bahnkurve zu einer Veränderung der Frontlösung führen kann, wird ebenso vernachlässigt, wie die in Abschnitt 3.1 beschriebenen prinzipiellen Probleme der Koordinatentransformation.

Für die störungstheoretische Untersuchung wird C nun ausgehend von C_0 in Potenzen von $(G_{ij} - \delta_{ij}) = \mu$ entwickelt. Es wird also davon ausgegangen, dass die Tensorelemente $(G_{ij} - \delta_{ij})$ im Fall kleiner Abweichungen vom ungekrümmten Fall näherungsweise gleich sind. Der Ansatz lautet daher:

$$C(\mathbf{y}) = C_0(y_1) + \sum_k C_k(\mathbf{y})\mu^k.$$

3.3.1 Störungstheoretische Analyse nullter Ordnung

Bei Vernachlässigung sämtlicher Potenzen von $(G_{ij} - \delta_{ij})$ ergibt sich Gleichung (3.3) zu:

$$\frac{\partial C_0}{\partial y_1} \left(\dot{y}_1 + U_{x_i} \frac{\partial y_1}{\partial x_i} - D \Delta_x y_1 \right) = \epsilon C_0 - C_0^3 + D \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} C_0.$$

Die rechte Seite verschwindet hierbei für stationäre Lösungen gemäß Gleichung (2.4). Diese Eigenschaft wurde bereits bei der Herleitung der stationären Frontlösung C_0 in Abschnitt 2.2 ausgenutzt. Da

$$\frac{\partial C_0}{\partial y_1} \neq 0$$

gilt, ergibt sich folgende Evolutionsgleichung für y_1 :

$$\dot{y}_1 + U_{x_i} \frac{\partial y_1}{\partial x_i} - D \Delta_x y_1 = 0. \quad (3.4)$$

Aussagen über die raumzeitliche Entwicklung von y_2 lassen sich an dieser Stelle nicht treffen, da aufgrund der Eigenschaft

$$\frac{\partial C_0}{\partial y_2} = 0$$

die entsprechenden Terme aus Gleichung (3.3) verschwinden. Ein Spezialfall, bei dem die Bestimmung der zeitlichen Entwicklung beider Koordinaten überflüssig ist, wurde in der Arbeit von H.A. Siddiqui behandelt [9]. Ausgehend von einer in x_2 -Richtung verlaufenden planaren Front werden kleine lokale Abweichungen in x_1 -Richtung betrachtet. Die Koordinatentransformation lautet in diesem Fall:

$$y_1 = x_1 - f(x_2, t), \quad (3.5)$$

$$y_2 = x_2. \quad (3.6)$$

Hierbei beschreibt $f(x_2, t)$ die Abweichung der vorliegenden Front von einer planaren Front in Abhängigkeit von x_2 und t . Es handelt sich bei dieser Transformation offensichtlich um einen Spezialfall der in Abschnitt 3.1 beschriebenen allgemeineren Transformation. Da y_2 im vorliegenden Beispiel keiner weiteren Bestimmung bedarf, sollte das Ergebnis in nullter Ordnung ausreichen, um den Frontverlauf zu beschreiben. Da außerdem in der Arbeit von H.A. Siddiqui von einem Konzentrationsverlauf der Form C_0 ausgegangen wird, ohne Korrekturen aufgrund der Krümmung zu berücksichtigen, sollte Gleichung (3.4) zu den bereits bekannten Ergebnissen von H.A. Siddiqui führen. Einsetzen der Gleichungen (3.5) und (3.6) in (3.4) führt auf:

$$\dot{f}(x_2, t) + U_{x_2}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial f(x_2, t)}{\partial x_2} = U_{x_1}(\mathbf{x}, t) + D \frac{\partial^2 f(x_2, t)}{\partial x_2^2}.$$

Dies entspricht dem Ergebnis von H.A. Siddiqui.

3.3.2 Störungstheoretische Analyse erster Ordnung

Für die störungstheoretische Analyse erster Ordnung ist der Lösungsansatz:

$$C = C_0(y_1) + \mu C_1(\mathbf{y}).$$

Unter Vernachlässigung sämtlicher Terme der Ordnung $\mathcal{O}(\mu^2)$ und höher ergibt sich Gleichung (3.3) zu:

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\partial C_0}{\partial y_1} + \mu \frac{\partial C_1}{\partial y_1} \right) \left(\dot{y}_1 + U_{x_j} \frac{\partial y_1}{\partial x_j} - D \Delta_x y_1 \right) + \mu \frac{\partial C_1}{\partial y_2} \left(\dot{y}_2 + U_{x_j} \frac{\partial y_2}{\partial x_j} - D \Delta_x y_2 \right) \\ & = \epsilon C_0 - C_0^3 + D \Delta_y C_0 + \mu \left(\epsilon - 3C_0^2 + D \Delta_y \right) C_1 + D(G_{11} - 1) \frac{\partial^2 C_0}{\partial y_1^2}. \end{aligned}$$

Die \mathbf{y} -Abhängigkeit der Tensorelemente μ wurde hierbei als klein vernachlässigt, es gilt:

$$\frac{\partial \mu}{\partial y_i} \approx 0.$$

Auf der rechten Seite der Gleichung lässt sich erneut die Definition der Frontlösung C_0 ausnutzen:

$$\epsilon C_0 - C_0^3 + D\Delta_y C_0 = 0.$$

Zudem lässt sich der in Gleichung (2.6) definierte Operator L in obiger Gleichung identifizieren. Zu beachten ist, dass es sich bei dem im Operator enthaltenen Laplace-Operator nun um den Laplace-Operator in den neuen Koordinaten \mathbf{y} handelt.

Die obige Gleichung lässt sich nun wie folgt umschreiben:

$$\left(\frac{\partial C_0}{\partial y_i} + \mu \frac{\partial C_1}{\partial y_i} \right) \left(\dot{y}_i + U_{x_j} \frac{\partial y_i}{\partial x_j} - D\Delta_x y_i \right) - \mu D \frac{\partial^2 C_0}{\partial y_1^2} = \mu L C_1.$$

Diese Gleichung lässt bereits Schlüsse über die Größenordnung des Klammerterms

$$\left(\dot{y}_i + U_{x_j} \frac{\partial y_i}{\partial x_j} - D\Delta_x y_i \right) \quad (3.7)$$

zu. Da die rechte Seite der Gleichung nur aus Termen der Größenordnung $\mathcal{O}(\mu)$ besteht, muss dies insgesamt auch für die linke Seite gelten. Da die Ableitung

$$\frac{\partial C_0}{\partial y_1}$$

im Bereich der Front von der Ordnung eins ist, folgt, dass der Klammerterm selbst von der Größenordnung $\mathcal{O}(\mu)$ sein muss. Dies führt insbesondere zu:

$$\mu \frac{\partial C_1}{\partial y_i} \left(\dot{y}_i + U_{x_j} \frac{\partial y_i}{\partial x_j} - D\Delta_x y_i \right) \sim \mu^2.$$

In erster Ordnung können somit auch diese Terme vernachlässigt werden. Dies führt auf:

$$\frac{\partial C_0}{\partial y_i} \left(\dot{y}_i + U_{x_j} \frac{\partial y_i}{\partial x_j} - D\Delta_x y_i \right) - \mu D \frac{\partial^2 C_0}{\partial y_1^2} = \mu L C_1. \quad (3.8)$$

Zur Formulierung einer Lösungsbedingung werden nun Eigenschaften des Operators L herangezogen. Zum einen wurde in Gleichung (2.11) bereits die Goldstone-Mode G_0 des Operators L eingeführt. Für diese gilt:

$$L G_0 = L \frac{\partial C_0}{\partial y_1} = 0. \quad (3.9)$$

Zudem ist der Operator L auf dem Hilbert-Raum \mathcal{L}^2 der quadratnormierbaren Funktionen selbstadjungiert:

$$L = L^\dagger. \quad (3.10)$$

Diese Eigenschaft folgt direkt aus der Selbstadjungiertheit des Laplace-Operators und lässt sich auf gleiche Weise zeigen. Multiplikation von Gleichung (3.8) mit der Goldstone-Mode G_0 und Integration über $d\mathbf{y}$ ergeben:

$$\int d\mathbf{y} G_0 \frac{\partial C_0}{\partial y_i} \left(\dot{y}_i + U_{x_j} \frac{\partial y_i}{\partial x_j} - D\Delta_x y_i \right) - \mu \int d\mathbf{y} G_0 D \frac{\partial^2 C_0}{\partial y_1^2} = \mu \int d\mathbf{y} G_0 LC_1.$$

Die einzelnen Integralterme entsprechen Skalarprodukten reeller Funktionen gemäß des kanonischen Skalarprodukts in \mathcal{L}^2 [21]. Die rechte Seite der obigen Gleichung lässt sich unter Ausnutzung der Eigenschaften (3.9) und (3.10) wie folgt umformen:

$$\int d\mathbf{y} G_0 LC_1 = \int d\mathbf{y} LG_0 C_1 = 0.$$

Auch der zweite Integralterm auf der linken Seite verschwindet bei Vernachlässigung der \mathbf{y} -Abhängigkeit von μ :

$$\int d\mathbf{y} G_0 \frac{\partial^2 C_0}{\partial y_1^2} = \int d\mathbf{y} \frac{\partial C_0}{\partial y_1} D \frac{\partial^2 C_0}{\partial y_1^2} = \frac{1}{2} \int d\mathbf{y} D \frac{\partial}{\partial y_1} \left(\frac{\partial C_0}{\partial y_1} \right)^2 = 0.$$

Es ergibt sich so die Bedingung:

$$\int d\mathbf{y} \frac{\partial C_0}{\partial y_1} \frac{\partial C_0}{\partial y_i} \left(\dot{y}_i + U_{x_j} \frac{\partial y_i}{\partial x_j} - D\Delta_x y_i \right) = 0. \quad (3.11)$$

Da im allgemeinen Fall nicht von speziellen Symmetrien ausgegangen werden kann, die die Erfüllung von Bedingung (3.11) gewährleisten, muss der Integrand selbst verschwinden. Aufgrund der Eigenschaft

$$\frac{\partial C_0}{\partial y_1} \neq 0$$

ergibt sich die Bedingung:

$$\frac{\partial C_0}{\partial y_i} \left(\dot{y}_i + U_{x_j} \frac{\partial y_i}{\partial x_j} - D\Delta_x y_i \right) = 0.$$

Wie schon im Abschnitt (3.3.1) lässt sich aufgrund der Eigenschaft

$$\frac{\partial C_0}{\partial y_2} = 0$$

keine Aussage über die zeitliche Entwicklung von y_2 treffen. Für y_1 ergibt sich das bereits bekannte Ergebnis:

$$\dot{y}_1 + U_{x_j} \frac{\partial y_1}{\partial x_j} - D\Delta_x y_1 = 0. \quad (3.12)$$

Dies ist das bereits ohne Berücksichtigung der Krümmung erhaltene Ergebnis. Aussagen, die über das bereits bekannte Ergebnis hinausgehen, lassen sich an dieser Stelle nicht treffen.

Es spricht jedoch für die Gültigkeit des unter grober Näherung erhaltenen Ergebnisses, dass es sich auch unter störungstheoretischer Einbeziehung der Krümmung reproduzieren lässt.

Bemerkenswert ist zudem, dass die konstituierenden Terme der Bestimmungsgleichung (3.12) nicht aus dem Reaktionsterm der Zeldovich-Gleichung folgen. Sie resultieren ausschließlich aus den transformierten Ableitungsoperatoren, d.h. aus Laplace- und Nabla-Operator sowie der zeitlichen Ableitung von C . Dies legt die Vermutung nahe, dass sich das Verfahren auf andere bistabile Reaktions-Diffusions-Systeme, bei denen eine ähnliche Argumentation möglich ist, übertragen lässt und gegebenenfalls zu ähnlichen Resultaten führt.

Im Folgenden soll nun obige Differentialgleichung für y_1 durch Überlegungen bezüglich der Koordinatenrücktransformation auf eine Bestimmungsgleichung für die \mathbf{x} -Koordinaten zurückgeführt werden. Hierbei wird sich herausstellen, dass trotz fehlender Information über die zeitliche Entwicklung von y_2 die Bestimmung der zeitlichen Entwicklung beider \mathbf{x} -Koordinaten und damit auch die Bestimmung der zeitlichen Entwicklung des Frontverlaufs möglich ist.

3.4 Koordinatenrücktransformation

Sowohl bei Vernachlässigung als auch bei störungstheoretischer Einbeziehung des Tensors ($G_{ij} - \delta_{ij}$) in erster Ordnung ergab sich für die y_1 -Koordinate das folgende Ergebnis:

$$\frac{\partial y_1}{\partial t} + U_{x_l} \frac{\partial y_1}{\partial x_l} - D \Delta_x y_1 = 0.$$

Mit der Substitution

$$\Delta_x y_1 = \frac{\partial y_k}{\partial x_n} \frac{\partial}{\partial y_k} \frac{\partial y_1}{\partial x_n}$$

lässt sich das obige Ergebnis wie folgt umschreiben:

$$\frac{\partial y_1}{\partial t} + U_{x_l} \frac{\partial y_1}{\partial x_l} - D \frac{\partial y_k}{\partial x_n} \frac{\partial}{\partial y_k} \frac{\partial y_1}{\partial x_n} = 0. \quad (3.13)$$

Diese partielle Differentialgleichung für y_1 sollte nun in eine Gleichung oder ein System von Gleichungen umgeformt werden, welches die Bestimmung von $\mathbf{x}(\mathbf{y}, t)$ oder zumindest $\mathbf{x}(y_1 = 0, y_2, t)$ erlaubt.

Hierzu wird zunächst ausgenutzt, dass sich die lokal-orthogonalen Koordinaten $\mathbf{y}(\mathbf{x}, t)$ als Funktionen abhängig von den karthesischen Koordinaten \mathbf{x} und der Zeit t beschreiben lassen. Gleichzeitig lassen sich aber auch die karthesischen Koordinaten $\mathbf{x}(\mathbf{y}, t)$ als Funktion der lokal-orthogonalen Koordinaten \mathbf{y} und der Zeit t auffassen. Betrachtet man nun y_1 als Funktion von $\mathbf{x}(\mathbf{y}, t)$ und t so gilt:

$$y_1(\mathbf{x}(\mathbf{y}, t), t) = y_1.$$

Beidseitiges Differenzieren dieser Gleichung nach der Zeit ergibt:

$$\begin{aligned} \frac{\partial y_1}{\partial t} + \frac{\partial y_1}{\partial x_l} \frac{\partial x_l}{\partial t} &= 0 \\ \Leftrightarrow \frac{\partial y_1}{\partial t} &= - \frac{\partial y_1}{\partial x_l} \frac{\partial x_l}{\partial t}. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Außerdem wird folgender Zusammenhang ausgenutzt:

$$\frac{\partial y_i}{\partial y_j} = \frac{\partial y_i}{\partial x_l} \frac{\partial x_l}{\partial y_j} = \delta_{ij}. \quad (3.15)$$

Ableiten dieses Ausdrucks nach y_k ergibt:

$$\frac{\partial}{\partial y_k} \left(\frac{\partial y_i}{\partial x_l} \frac{\partial x_l}{\partial y_j} \right) = \left(\frac{\partial}{\partial y_k} \frac{\partial y_i}{\partial x_l} \right) \frac{\partial x_l}{\partial y_j} + \frac{\partial y_i}{\partial x_l} \frac{\partial^2 x_l}{\partial y_j \partial y_k} = 0.$$

Es folgt:

$$\left(\frac{\partial}{\partial y_k} \frac{\partial y_i}{\partial x_l} \right) \frac{\partial x_l}{\partial y_j} = - \frac{\partial y_i}{\partial x_l} \frac{\partial^2 x_l}{\partial y_j \partial y_k}. \quad (3.16)$$

Multiplikation von Gleichung (3.16) mit $\frac{\partial y_j}{\partial x_n}$ ergibt:

$$\left(\frac{\partial}{\partial y_k} \frac{\partial y_i}{\partial x_l} \right) \frac{\partial x_l}{\partial y_j} \frac{\partial y_j}{\partial x_n} = - \frac{\partial y_j}{\partial x_n} \frac{\partial y_i}{\partial x_l} \frac{\partial^2 x_l}{\partial y_j \partial y_k}. \quad (3.17)$$

Gleichung (3.17) gilt auch ohne Summation über j für beliebiges j . Addition der Gleichungen für $j = 1$ und für $j = 2$ ergibt unter erneuter Ausnutzung von (3.15):

$$\frac{\partial}{\partial y_k} \frac{\partial y_i}{\partial x_n} = - \frac{\partial y_j}{\partial x_n} \frac{\partial y_i}{\partial x_l} \frac{\partial^2 x_l}{\partial y_j \partial y_k}. \quad (3.18)$$

Einsetzen der Ausdrücke (3.14) und (3.18) für $i = 1$ in Gleichung (3.13) ergibt nun:

$$\left(- \frac{\partial x_l}{\partial t} + U_{x_l} + D \frac{\partial y_k}{\partial x_n} \frac{\partial y_j}{\partial x_n} \frac{\partial^2 x_l}{\partial y_j \partial y_k} \right) \frac{\partial y_1}{\partial x_l} = 0.$$

Damit obige Gleichung in jedem Fall erfüllt ist muss für beliebiges l gelten:

$$- \frac{\partial x_l}{\partial t} + U_{x_l} + D \frac{\partial y_k}{\partial x_n} \frac{\partial y_j}{\partial x_n} \frac{\partial^2 x_l}{\partial y_j \partial y_k} = 0.$$

Auswerten dieser Differentialgleichungen an der Stelle $y_1 = 0$ unter Berücksichtigung einer durch die Anfangssituation gegebenen Anfangsbedingung liefert die zeitliche Entwicklung der Bahnkurve $\mathbf{r}(y_2, t)$:

$$\frac{\partial r_l}{\partial t} = U_{x_l} + D \frac{\partial y_k}{\partial x_n} \frac{\partial y_j}{\partial x_n} \frac{\partial^2 r_l}{\partial y_j \partial y_k} \Big|_{y_1=0}. \quad (3.19)$$

Diese Gleichung ist das zentrale Ergebnis dieser Arbeit. Sie beschreibt die zeitliche Entwicklung jeder karthesischen Komponente $r_l(y_2, t)$ der Bahnkurve $\mathbf{r}(y_2, t)$. Direkt einsichtig ist hierbei die Abhängigkeit der Bahnkurve vom äußeren Geschwindigkeitsfeld $\mathbf{U}(\mathbf{x}, t)$. Die Bahnkurve verschiebt sich unter dem Einfluss des Geschwindigkeitsfeldes mit der lokalen Geschwindigkeit des Feldes.

Der zweite Term sollte den Einfluss leichter Krümmung auf die Frontdynamik repräsentieren. Inwiefern dies tatsächlich zu einer realistischen Beschreibung der Frontdynamik führt, müsste in numerischen Simulationen von Gleichung (3.19) für verschiedene Anfangsbedingungen überprüft werden.

4 Erste Betrachtungen im FitzHugh-Nagumo-Modell

Abschließend sollen in diesem Kapitel erste Überlegungen angestellt werden, wie die vorangegangene Vorgehensweise auf das FitzHugh-Nagumo-Modell zu übertragen ist.

4.1 Das FitzHugh-Nagumo-Modell

Beim FitzHugh-Nagumo-Modell handelt es sich um ein zweikomponentiges Aktivator-Inhibitor-Modell, welches eine Vereinfachung des vierkomponentigen Hodgkin-Huxley-Modells darstellt. Es wird u.a. zur Beschreibung der Membranspannung in Neuronen bei Stimulation durch einen externen Strom verwendet [23]. Auch dieses Modell wird wieder in zwei räumlichen Dimensionen und zunächst in den kartesischen Koordinaten $\mathbf{x} = (x_1, x_2)$ betrachtet. In der reskalierten Form, wie sie bei Goldstein et al. verwendet wird, gilt für die beiden Komponenten $u(\mathbf{x}, t)$ und $v(\mathbf{x}, t)$ [7]:

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t} &= D\Delta u - u(u-r)(u-1) - \rho(v-u), \\ \epsilon \frac{\partial v}{\partial t} &= \Delta v - (v-u).\end{aligned}\tag{4.1}$$

Das System wurde hierbei so gewählt, dass die auftretenden Diffusionskonstanten mit der Diffusionskonstante des Inhibitors v normiert werden können. Die Diffusionskonstante D des Aktivators u wird somit in Einheiten der Diffusionskonstante des Inhibitors angegeben, die Diffusionskonstante des Inhibitors ergibt sich zu eins.

Reaktionshemmend wirkt in obigen Gleichungen nicht die Konzentration v , sondern die Differenz $(v-u)$. Der Einfachheit halber wird jedoch die Konzentration v als InhibitorKonzentration bezeichnet, u wird dementsprechend als AktivatorKonzentration bezeichnet.

Dem Reaktionsterm in der Aktivatorgleichung (4.1) kann ein Doppelmuldenpotential $F(u, r)$ zugeordnet werden [7]:

$$\begin{aligned}\frac{\partial F}{\partial u} &= u(u-r)(u-1), \\ F &= \frac{1}{4}u^2(u-1)^2 + \left(r - \frac{1}{2}\right) \left(\frac{1}{2}u^2 - \frac{1}{3}u^3 - \frac{1}{12}\right).\end{aligned}$$

Das Potential besitzt in dieser Form lokale Minima bei $u = 0$ sowie $u = 1$, diese sind auch unter Berücksichtigung von Diffusion in weiten Parameterbereichen linear stabil. Die ausführliche Stabilitätsanalyse des Systems findet sich bei Goldstein et al. [7]. Bei

r handelt es sich um einen symmetriebrechenden Parameter: Für $r = 1/2$ ist das Potential symmetrisch. Weicht r im Bereich $0 < r < 1$ von diesem Wert ab, entsteht eine Potentialdifferenz ΔF zwischen den beiden Potentialminima:

$$\Delta F := F(u = 1, r) - F(u = 0, r) = \frac{1}{6} \left(r - \frac{1}{2} \right).$$

Für $r > 1/2$ ist damit $u = 0$ der stabilere Zustand, im Fall $r < 1/2$ gilt dies für $u = 1$.

Der Parameter ϵ ist ein Maß dafür, wie schnell sich zeitliche Änderungen des Inhibitors im Vergleich zum Aktivator einstellen. Im Folgenden wird wie auch bei Goldstein et al. vom Grenzfall $\epsilon \rightarrow 0$ eines schnellen Inhibitors¹ ausgegangen. Hierbei handelt es sich um eine Form der adiabatischen Eliminierung [3]. Die Inhibitorkonzentration v verliert in diesem Grenzfall ihre eigenständige Zeitabhängigkeit. Eine Veränderung der Aktivorkonzentration u bewirkt gemäß Gleichung (4.3) instantan eine Veränderung der Inhibitorkonzentration v . Das FitzHugh-Nagumo-Modell reduziert sich daher in diesem Grenzfall auf ein System mit einer unabhängigen Komponente und wird durch folgende Gleichungen bestimmt:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D\Delta u - u^3 + u^2(1+r) + u(\rho-r) - \rho v, \quad (4.2)$$

$$0 = \Delta v - (v - u). \quad (4.3)$$

Gleichung (4.3) lässt sich unter Verwendung einer Greenschen Funktion $\mathcal{G}(\mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}})$ nach v auflösen:

$$v(\mathbf{x}, t) = \int d\tilde{\mathbf{x}} \mathcal{G}(\mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}}) u(\tilde{\mathbf{x}}).$$

Die Greensche Funktion wird in einer bzw. zwei Dimensionen gegeben durch [7]:

$$\mathcal{G}(|x - \tilde{x}|) = \frac{1}{2} e^{-|x - \tilde{x}|},$$

$$\mathcal{G}(|\mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}}|) = \frac{1}{2\pi} K_0(|\mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}}|).$$

Hierbei ist K_0 die modifizierte Besselfunktion der Ordnung null. Gleichung (4.2) ergibt sich nun zu:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D\Delta u - u^3 + u^2(1+r) + u(\rho-r) - \rho \int d\tilde{\mathbf{x}} \mathcal{G}(\mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}}) u(\tilde{\mathbf{x}}). \quad (4.4)$$

Es handelt sich bei Gleichung (4.4) der Form nach um eine einkomponentige Reaktions-Diffusions-Gleichung, in der ein sogenannter nichtlokaler Term in Form des Integralterms auftritt.

Die zeitliche Veränderung des Aktivators an einem Ort \mathbf{x} hängt nun nicht nur von der gegenwärtigen Aktivorkonzentration an der Stelle \mathbf{x} ab. Aufgrund des Integralterms wirkt sich die Aktivorkonzentration an jedem Punkt $\tilde{\mathbf{x}}$ des Systems auf die lokale zeitliche Veränderung aus. Aufgrund der Form der Greenschen Funktion $\mathcal{G}(\mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}})$ sinkt diese nichtlokale Wechselwirkung allerdings mit größer werdendem Abstand $|\mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}}|$.

¹Englisch: fast-inhibitor limit

Analog zum Vorgehen in Abschnitt 2.2.3 lassen sich nun Bedingungen für eine stationäre Frontlösung $u_0(x_1)$ zwischen den Zuständen formulieren. Es wird wieder von einem Übergang in x_1 -Richtung ausgegangen. In diesem Fall gilt:

$$\begin{aligned}\frac{\partial u_0}{\partial t} &= 0, \\ \frac{\partial u_0}{\partial x_2} &= 0.\end{aligned}$$

Aus Gleichung (4.4) ergibt sich nun die Bestimmungsgleichung für die Frontlösung u_0 :

$$0 = D \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} u_0 - u_0^3 + u_0^2(1+r) + u_0(\rho-r) - \rho \int d\tilde{\mathbf{x}} \mathcal{G}(\mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}}) u_0(\tilde{x}_1). \quad (4.5)$$

Diese Differentialgleichung ist nicht, wie im Fall der Zeldovich-Gleichung, problemlos geschlossen lösbar. Für die folgenden Betrachtungen genügt es jedoch, dass die Frontlösung u_0 implizit durch Gleichung (4.5) bestimmt ist.

4.2 Koordinatentransformation in einer Dimension

Wie bereits in Abschnitt 3.3.1 wird zunächst ein Spezialfall der allgemeinen Koordinatentransformation betrachtet. Ausgehend von einer in x_2 -Richtung verlaufenden planaren Front werden kleine lokale Abweichungen $f(x_2, t)$ in x_1 -Richtung angenommen. Die Koordinatentransformation lautet in diesem Fall:

$$\begin{aligned}y_1 &= x_1 - f(x_2, t), \\ y_2 &= x_2.\end{aligned}$$

Die in Gleichung (4.4) auftretenden Ableitungsoperatoren ergeben sich in neuen Koordinaten wie folgt:

$$\dot{u} = -\dot{f} \frac{\partial u}{\partial y_1}. \quad (4.6)$$

Hierbei wird wieder davon ausgegangen, dass die Zeitabhängigkeit des Systems vollständig durch die Zeitabhängigkeit der neuen Koordinaten \mathbf{y} ausgedrückt wird. Die explizite Zeitabhängigkeit der Aktivatorkonzentration u verschwindet daher.

Es ergibt sich außerdem:

$$\Delta_x u = \frac{\partial^2 u}{\partial y_1^2} + \left(\frac{\partial f}{\partial x_2} \right)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial y_1^2} - 2 \frac{\partial f}{\partial x_2} \frac{\partial^2 u}{\partial y_1 \partial y_2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y_2^2} - \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} \frac{\partial u}{\partial y_1}. \quad (4.7)$$

Als erster Ansatz wird wieder die stationäre Frontlösung in Abhängigkeit von der neuen Koordinate y_1 verwendet:

$$u(\mathbf{x}) = u_0(y_1) = u_0(x_1 - f(x_2, t)). \quad (4.8)$$

Einsetzen der Ausdrücke (4.6), (4.7) sowie (4.8) in die verbliebene Gleichung des FitzHugh-Nagumo-Modells (4.4) ergibt:

$$\begin{aligned}-\dot{f} \frac{\partial u_0}{\partial y_1} &= D \frac{\partial^2 u_0}{\partial y_1^2} - u_0^3 + u_0^2(1+r) + u_0(\rho-r) \\ + D \left(\frac{\partial f}{\partial x_2} \right)^2 \frac{\partial^2 u_0}{\partial y_1^2} &- D \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} \frac{\partial u_0}{\partial y_1} - \rho \int d\tilde{\mathbf{x}} \mathcal{G}(\mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}}) u_0(\tilde{x}_1 - \tilde{f}(\tilde{x}_2, t)).\end{aligned} \quad (4.9)$$

Im Folgenden wird der Integralterm

$$\int d\tilde{\mathbf{x}} \mathcal{G}(\mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}}) u_0(\tilde{x}_1 - \tilde{f}(\tilde{x}_2, t)) = \int d\tilde{x}_2 \int d\tilde{x}_1 \mathcal{G}(x_1 - \tilde{x}_1, x_2 - \tilde{x}_2) u_0(\tilde{x}_1 - \tilde{f}(\tilde{x}_2, t))$$

genauer betrachtet. Eine Entwicklung von $u_0(\tilde{x}_1 - \tilde{f}(\tilde{x}_2, t))$ um \tilde{x}_1 nach \tilde{f} ergibt:

$$\begin{aligned} \int d\tilde{\mathbf{x}} \mathcal{G}(\mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}}) u_0(\tilde{x}_1 - \tilde{f}(\tilde{x}_2, t)) &= \int d\tilde{\mathbf{x}} \mathcal{G}(\mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}}) u_0(\tilde{x}_1) \\ &\quad - \int d\tilde{\mathbf{x}} \tilde{f}(\tilde{x}_2, t) \mathcal{G}(x_1 - \tilde{x}_1, x_2 - \tilde{x}_2) \frac{\partial}{\partial \tilde{x}_1} u_0(\tilde{x}_1). \end{aligned}$$

Hierbei werden Terme der Ordnung $\mathcal{O}(\tilde{f}^2)$ vernachlässigt. Der erste auftretende Term entspricht dem Integralterm aus der Bestimmungsgleichung (4.5) der stationären Frontlösung u_0 . Wie auch bei Goldstein et al. [7] wird nun davon ausgegangen, dass die Übergangsbereiche zwischen beiden stabilen Lösungen, im Vergleich zu den sonstigen räumlichen Dimensionen des Systems, klein sind. Die im zweiten Integralterm auftretende Ableitung $\frac{\partial}{\partial \tilde{x}_1} u_0(\tilde{x}_1)$ ist daher eine an der Stelle $\tilde{x}_1 = 0$ stark lokalisierte Funktion. Dies erlaubt die Näherung:

$$\frac{\partial}{\partial \tilde{x}_1} u_0(\tilde{x}_1) \approx \eta \cdot \delta(\tilde{x}_1).$$

Hierbei ist η die Ableitung von u_0 an der Stelle $\tilde{x}_1 = 0$:

$$\eta = \frac{\partial}{\partial \tilde{x}_1} u_0(\tilde{x}_1 = 0).$$

Die Integration über $d\tilde{x}_1$ lässt sich unter Berücksichtigung dieser Näherung leicht ausführen:

$$\begin{aligned} \int d\tilde{\mathbf{x}} \mathcal{G}(\mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}}) u_0(\tilde{x}_1 - \tilde{f}(\tilde{x}_2, t)) &= \\ \int d\tilde{\mathbf{x}} \mathcal{G}(\mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}}) u_0(\tilde{x}_1) - \int d\tilde{x}_2 \tilde{f}(\tilde{x}_2, t) \mathcal{G}(x_1, x_2 - \tilde{x}_2) \eta. \end{aligned}$$

Nach Einsetzen dieses Ausdrucks in (4.9) lässt sich innerhalb der Gleichung die Bestimmungsgleichung der stationären Frontlösung (4.5) identifizieren und gleich null setzen. Aus (4.9) folgt unter Ausnutzung der Bestimmungsgleichung für die Frontlösung:

$$-\dot{f} \frac{\partial u_0}{\partial y_1} = D \left(\frac{\partial f}{\partial x_2} \right)^2 \frac{\partial^2 u_0}{\partial y_1^2} - D \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} \frac{\partial u_0}{\partial y_1} - \rho \int d\tilde{x}_2 \tilde{f}(\tilde{x}_2, t) \mathcal{G}(x_1, x_2 - \tilde{x}_2) \eta.$$

Das Auswerten obiger Gleichung an der Front, d.h. bei $y_1 = 0$, ergibt die Evolutionsgleichung für die Abweichung $f(x_2, t)$:

$$\dot{f} = D \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} + \rho \int d\tilde{x}_2 \tilde{f}(\tilde{x}_2, t) \mathcal{G}(f, x_2 - \tilde{x}_2). \quad (4.10)$$

Als wesentlicher Unterschied zum Zeldovich-Modell fällt der nichtlokale Integralterm auf. Die Integration erfolgt über $d\tilde{x}_2$, d.h. entlang der Front. Die von Goldstein et al. [7] auf anderem Wege abgeleitete Frontdynamik enthält einen qualitativ ähnlichen Term. In beiden Ergebnissen wird die zeitliche Entwicklung der Front an einem Punkt von einer nichtlokalen Wechselwirkung zwischen diesem und allen weiteren Punkten der Front bestimmt.

4.3 Ausblick: Allgemeine Koordinatentransformation

Analog zum Vorgehen beim Zeldovich-Modell wäre nun die Betrachtung der allgemeineren Koordinatentransformation aus Abschnitt 3.1 der nächste Schritt. Diese Betrachtung ist jedoch im Falle des FitzHugh-Nagumo-Modells mit den im Folgenden aufgeführten Schwierigkeiten verbunden und wird daher nicht mehr vollständig im Rahmen dieser Arbeit behandelt.

Die Darstellung von Gleichung (4.4) des FitzHugh-Nagumo-Modells in den neuen Koordinaten erfolgt analog zum Vorgehen beim Zeldovich-Modell in Abschnitt 3.2. Hierbei ergibt sich der Integralterm:

$$\int d\tilde{\mathbf{x}} \mathcal{G}(\mathbf{x}(\mathbf{y}, t) - \tilde{\mathbf{x}}(\tilde{\mathbf{y}}, t))u(\tilde{\mathbf{x}}(\tilde{\mathbf{y}}, t)) = \int d\tilde{\mathbf{y}} |\det \mathcal{J}| \mathcal{G}(\mathbf{x}(\mathbf{y}, t) - \tilde{\mathbf{x}}(\tilde{\mathbf{y}}, t))u(\tilde{\mathbf{x}}(\tilde{\mathbf{y}}, t)),$$

mit der Funktionaldeterminante:

$$|\det \mathcal{J}| = \left| \frac{\partial x_1}{\partial y_1} \frac{\partial x_2}{\partial y_2} - \frac{\partial x_1}{\partial y_2} \frac{\partial x_2}{\partial y_1} \right|.$$

Eine Aufspaltung des Integrals in einen Term, der mit der Bestimmungsgleichung für die stationäre Frontlösung verschwindet, und einen Term, der als nichtlokaler Wechselwirkungsterm in die Frontdynamik eingeht, ist jedoch nicht so einfach wie im vorher behandelten Spezialfall möglich.

Die Schwierigkeit liegt im Wesentlichen darin, dass sich die neuen Koordinaten in ihrer allgemeineren Form nicht mehr als kleine Abweichungen von den alten Koordinaten darstellen lassen. Die Möglichkeit, die Frontlösung u_0 oder die Greensche Funktion \mathcal{G} ausgehend von den alten Koordinaten zu entwickeln, bietet sich daher nicht in der Weise an, wie im Spezialfall des vorherigen Abschnitts. Ansätze für eine solche Entwicklung sollte eine Betrachtung des Grenzfalles verschwindender Krümmung liefern. In diesem Grenzfall entspricht die Koordinatentransformation einer Translation mit anschließender Drehung des Koordinatensystems. Für eine solche Transformation gilt:

$$\begin{aligned} |\mathbf{x}(\mathbf{y}, t) - \tilde{\mathbf{x}}(\tilde{\mathbf{y}}, t)| &= |\mathbf{y} - \tilde{\mathbf{y}}|, \\ \Rightarrow \mathcal{G}(|\mathbf{x}(\mathbf{y}, t) - \tilde{\mathbf{x}}(\tilde{\mathbf{y}}, t)|) &= \mathcal{G}(|\mathbf{y} - \tilde{\mathbf{y}}|), \end{aligned}$$

sowie

$$|\det \mathcal{J}| = 1.$$

Geht man im Grenzfall verschwindender Krümmung wieder von einem Ansatz der Form

$$u(\mathbf{x}(\mathbf{y}, t)) = u_0(y_1)$$

aus, so verschwindet der komplette Integralterm

$$\int d\tilde{\mathbf{y}} |\det \mathcal{J}| \mathcal{G}(\mathbf{x}(\mathbf{y}, t) - \tilde{\mathbf{x}}(\tilde{\mathbf{y}}, t))u(\tilde{\mathbf{x}}(\tilde{\mathbf{y}}, t)) = \int d\tilde{\mathbf{y}} \mathcal{G}(|\mathbf{y} - \tilde{\mathbf{y}}|)u(\tilde{\mathbf{x}}(\tilde{\mathbf{y}}, t))$$

als Teil der Bestimmungsgleichung für die stationäre Frontlösung. Dies ist verständlich, da im Fall einer planaren Front in gedrehten karthesischen Koordinaten keinerlei Frontdynamik entstehen sollte. Zu untersuchen bleibt nun, wie ausgehend von den Eigenschaften des planaren Grenzfalles eine Entwicklung durchgeführt werden kann, welche die Betrachtung schwacher Krümmung mit einschließt. Diese Fragestellung scheint ein interessanter Anknüpfungspunkt an die vorliegende Arbeit zu sein.

Schlussbetrachtungen

In dieser Arbeit wurde die Frontdynamik in bistabilen Reaktions-Diffusions-Systemen mittels einer Koordinatentransformation in lokal-orthogonale Koordinaten behandelt. Motiviert wurden diese Betrachtungen durch Experimente, in denen die Bildung labyrinthartiger Strukturen in chemischen Systemen nachgewiesen wurde [5] [6].

Beim Zeldovich-Modell konnte, ausgehend von der analytisch bestimmbaren Frontlösung im Fall einer planaren Front, eine störungstheoretische Betrachtung vorgenommen werden. Als Parameter dieser Betrachtung bot sich der Tensor $G_{ij} - \delta_{ij}$ an, welcher im planaren Fall verschwindet. Unter Vernachlässigung sämtlicher Ordnungen dieses Parameters ließ sich das Ergebnis des bereits von H.A. Siddiqui [9] behandelten Spezialfalls reproduzieren. Zudem gelang die Herleitung einer Evolutionsgleichung für die zur Front senkrecht verlaufende Koordinate y_1 . Aussagen über die zeitliche Entwicklung von y_2 ließen sich nicht treffen.

Die störungstheoretische Analyse erster Ordnung lieferte keine neuen Ergebnisse, bestätigte aber die bereits gewonnene Evolutionsgleichung für y_1 . Das wesentliche Ergebnis dieser Arbeit ist die durch Rücktransformation gewonnene Evolutionsgleichung (3.19) für den Frontverlauf.

Hier bieten sich nun mehrere Anknüpfungspunkte: Zunächst wäre es wichtig zu überprüfen, inwieweit das gewonnene Ergebnis ein adäquates Mittel zur Beschreibung der Evolution schwach gekrümmter Fronten darstellt. Hierzu müsste die erhaltene Gleichung für verschiedene Anfangsbedingungen numerisch gelöst und die Resultate mit einer direkten Simulation des Zeldovich-Modells verglichen werden.

In dieser Arbeit wurde ausschließlich der Grenzfall schwach gekrümmter Fronten betrachtet. Den wesentlichen Anknüpfungspunkt an diese Arbeit stellt damit die Einbeziehung stärkerer Krümmung dar. Da die in dieser Arbeit angestellte störungstheoretische Betrachtung sowohl in nullter als auch in erster Ordnung zum selben Ergebnis führt, wäre es hierzu zunächst hilfreich, zu überprüfen, inwieweit das erhaltene Ergebnis im Fall stärkerer Krümmung an Gültigkeit verliert. Hierzu bietet es sich an, analytisch die störungstheoretische Betrachtung in höheren Ordnungen fortzusetzen. Es kann jedoch auch in numerischen Simulationen überprüft werden, inwieweit die Evolutionsgleichung (3.19) zur Beschreibung stärker gekrümmter Fronten geeignet ist.

Im letzten Kapitel dieser Arbeit wurden erste Ansätze eines ähnlichen Verfahrens im FitzHugh-Nagumo-Modell präsentiert. Im Grenzfall des schnellen Inhibitors stellte die auftretende nichtlokale Wechselwirkung einen neuen Aspekt dar, der in die Betrachtungen einbezogen werden muss.

Im von H.A. Siddiqui beim Zeldovich-Modell verwendeten Spezialfall der Koordinatentransformation in einer Koordinate ließ sich eine Evolutionsgleichung für das FitzHugh-Nagumo-Modell herleiten. Diese enthält einen nichtlokalen Wechselwirkungsterm, der

qualitativ große Ähnlichkeit zu der nichtlokalen Wechselwirkung im Ergebnis von Goldstein et al. aufweist. Die allgemeinere Form der Koordinatentransformation führte zu den bereits in Abschnitt 4.3 beschriebenen Schwierigkeiten. Es bleibt zu untersuchen, wie eine Frontdynamik in diesem Fall abgeleitet werden kann.

Zudem ist natürlich auch im FitzHugh-Nagumo-Modell eine Einbeziehung stärkerer Krümmung in die Betrachtung erstrebenswert. Werden die in dieser Arbeit vorgestellten Methoden auf die stark gekrümmten Fronten labyrinthartiger Strukturen übertragen, muss auch geprüft werden, inwieweit die Koordinatentransformation in lokal-orthogonale Koordinaten in solchen Systemen möglich ist. Bei der Definition lokal-orthogonaler Koordinaten auf stark gekrümmten Fronten wird man mit den in Abschnitt 3.1 beschriebenen formalen Schwierigkeiten konfrontiert. Ob diese vernachlässigbar bleiben, oder zu Problemen bei der Betrachtung des Systems führen, muss geprüft werden.

In der vorliegenden Arbeit haben sich lokal-orthogonale Koordinaten als sehr nützlich bei der Beschreibung der Frontdynamik erwiesen. Sie bieten einen anschaulichen und leicht verständlichen Zugang zur Betrachtung gekrümmter Fronten, der sich in den vorangegangenen Betrachtungen auch als methodisch sinnvoll herausgestellt hat. Die weitere Verwendung lokal-orthogonaler Koordinaten zur Beschreibung von Frontdynamik erscheint daher als sehr vielversprechend.

Literaturverzeichnis

- [1] A. N. Zaikin, A. M. Zhabotinsky. Concentration wave propagation in two-dimensional liquid-phase self-oscillating system. *Nature*, 225:535–537, Februar 1970.
- [2] Vladimir K. Vanag, Irving R. Epstein. Pattern formation in a tunable medium: The belousov-zhabotinsky reaction in an aerosol or microemulsion. *Phys. Rev. Lett.*, 87:228301, November 2001.
- [3] Hermann Haken. *Synergetik, eine Einführung: Nichtgleichgewichts-Phasenübergänge und Selbstorganisation in Physik, Chemie und Biologie*. Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, Tokyo, 1983.
- [4] Alan M. Turing. The chemical basis of morphogenesis. *Phil. Trans. R. Soc. Lond. B*, 237:37–72, August 1952.
- [5] J. Lee Kyoung, W. D. McCormick, Qi Ouyang, Harry L. Swinney. Pattern formation by interacting chemical fronts. *Science*, 261:192–194, Juli 1993.
- [6] Kyoung J. Lee, Harry L. Swinney. Lamellar structures and self-replicating spots in a reaction-diffusion system. *Phys. Rev. E*, 51:1899–1915, März 1995.
- [7] Raymond E. Goldstein, David J. Muraki, Dean M. Petrich. Interface proliferation and the growth of labyrinths in a reaction-diffusion system. *Phys. Rev. E*, 53:3933–3957, April 1996.
- [8] Richard FitzHugh. Impulses and physiological states in theoretical models of nerve membrane. *Biophysical Journal*, 1:445–466, Juli 1961.
- [9] Hira Affan Siddiqui. *Spatio-Temporal Patterns in Systems far from Equilibrium*. Promotion, Münster, 2011.
- [10] Paul C. Fife. *Mathematical Aspects of Reacting and Diffusing Systems*, volume 28 of *Lecture Notes in Biomathematics*. Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1979.
- [11] Stephan Stellmach. *Geophysikalische Kontinuumsmechanik*. Vorlesungsskript, Münster, 2010.
- [12] Adolf Fick. Über Diffusion. *Poggendorf's Annalen der Physik*, 94:59–86, 1855.
- [13] John Argyris, Gunter Faust, Maria Haase, Rudolf Friedrich. *Die Erforschung des Chaos*. Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, 2010.
- [14] William Strieder, Rutherford Aris. *Variational Methods Applied to Problems of Diffusion and Reaction*, volume 24 of *Springer Tracts in Natural Philosophy*. Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1973.
- [15] Albert Einstein. Über die von der molekularkinetischen Theorie der Wärme gefor-

- derte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen. *Annalen der Physik*, 17:549–560, 1905.
- [16] Svetlana V. Gurevich. *Lateral self-organization in nonlinear transport systems described by reaction-diffusion equations*. Promotion, Münster, 2006.
- [17] V. Castets, E. Dulos, J. Boissonade, P. De Kepper. Experimental evidence of a sustained standing turing-type nonequilibrium chemical pattern. *Phys. Rev. Lett.*, 64:2953–2956, Juni 1990.
- [18] Qi Ouyang, Harry L. Swinney. Transition from a uniform state to hexagonal and striped turing patterns. *Nature*, 352:610–612, August 1991.
- [19] Wim van Saarloos. Front propagation into unstable states. *Physics Reports*, 386:29–222, August 2003.
- [20] Lew Dawidowitsch Landau, Jewgeni Michailowitsch Lifschitz. *Lehrbuch der Theoretischen Physik Band 3: Quantenmechanik*. Akademie Verlag, Berlin, 1971.
- [21] I.N. Bronstein, K.A. Semendjajew, G. Musiol, H. Mühlig. *Taschenbuch der Mathematik*. Verlag Harri Deutsch, Frankfurt am Main, 2008.
- [22] Walter Greiner. *Klassische Mechanik I: Kinematik und Dynamik der Punktteilchen, Relativität*. Verlag Harri Deutsch, Frankfurt am Main, 2003.
- [23] J.D. Murray. *Mathematical Biology*. Biomathematics Texts. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1989.

Hiermit erkläre ich, die vorliegende Arbeit selbstständig verfasst, sowie keine außer den angegebenen Quellen und Hilfsmitteln verwendet zu haben.

Münster, den 25. Januar 2012.