

Johanna Jakob

**Von passiven zu aktiven  
Allen-Cahn-Modellen**

September 2018





## BACHELORARBEIT

# Von passiven zu aktiven Allen-Cahn-Modellen

JOHANNA JAKOB

Erstprüfer: Prof. Dr. Uwe Thiele  
Zweitprüferin: Priv-Doz. Dr. Svetlana Gurevich

*Institut für Theoretische Physik  
Westfälische Wilhelms-Universität Münster*

6. September 2018



# Inhaltsverzeichnis

<b>1 Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2 Theorie</b>	<b>5</b>
2.1 Nichtlinearität . . . . .	5
2.2 Numerische Methoden . . . . .	11
<b>3 Analytische Betrachtung</b>	<b>17</b>
3.1 Aktives Allen-Cahn-Modell . . . . .	17
3.2 Ermittlung der Fixpunkte . . . . .	18
3.3 Lineare Stabilitätsanalyse . . . . .	18
3.4 Untersuchung der Dispersionsrelation . . . . .	20
<b>4 Kontinuierung mit <i>auto07p</i></b>	<b>29</b>
4.1 Anwendung auf das Allen-Cahn-Modell . . . . .	29
4.2 Kontinuierung mit $\mu = 0$ . . . . .	32
4.3 Kontinuierung mit $\mu \neq 0$ . . . . .	34
<b>5 Zeitsimulation in der direkten Numerik</b>	<b>39</b>
5.1 Ruhende Zustände . . . . .	39
5.2 Bewegte Zustände . . . . .	40
<b>6 Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>45</b>
<b>A Anhang</b>	<b>47</b>
<b>B Literaturverzeichnis</b>	<b>55</b>



# 1 Einleitung

Kontinuierliche Modelle aktiver Medien werden häufig verwendet, um kollektive Bewegung zu modellieren. Diese tritt auf, wenn große Gruppen interagierender Einzelteile sich kollektiv auf einer deutlich größeren Skala als ihrer eigenen Größe bewegen. Solches Verhalten tritt sowohl in der Natur als auch in künstlichen Systemen auf. Einige Beispiele aus biologischen Systemen sind Schafherden, Fisch- und Vogelschwärme [1] oder auch Bakterien- und Zellkolonien [2, 3, 4]. In Abb. 1.1 sind mit einer Schafherde und einem Fischschwarm zwei der Beispiele abgebildet. Beispiele für Systeme mit künstlichem Antrieb sind geschüttelte polare Körner [5], selbst angetriebene Tropfen [6] oder Rollkolloide [7].

Das aktive Modell, welches hier untersucht wird, beschreibt unter anderem lokalisierte Strukturen. Dabei handelt es sich um lokale räumliche Anordnungen im betrachteten Medium, welche sich vom restlichen Bereich abheben und über einen gewissen Zeitraum bestehen bleiben. In einigen Zusammenhängen werden diese Strukturen auch Solitonen genannt. Beispiele sind etwa Strukturen in magnetischen Fluiden [8] (siehe Abb. 1.2(a)) und beim Kristallwachstum [9]. Auch ausgedehnte Muster wie Fell- bzw. Hautzeichnungen von Tieren [10], Vegetationsmuster [11] sowie von Wind und Wasser verursachte Ablagerungen im Sand [12] werden von aktiven Modellen beschrieben. In Abb. 1.2(b) ist dazu ein Beispiel abgebildet.

Eines der zur Beschreibung von lokalisierten Strukturen nutzbaren aktiven Modelle ist das aktive Allen-Cahn-Modell. Dieses entsteht aus dem passiven Allen-Cahn-Modell durch das Hinzufügen einer weiteren Gleichung für den aktiven Antrieb. Das passive Modell beruht auf der Allen-Cahn-Gleichung, welche eine wichtige Modellgleichung der nichtlinearen Physik darstellt und von Allen und Cahn eingeführt wurde [13]. Mit dieser Gleichung kann beispielsweise die Dynamik einer Magnetisierung beschrieben werden [14]. Dabei wird für die zu beschreibende Größe ein Ordnungsparameterfeld  $\phi(x, t)$  definiert, dessen zeitliche Änderung unter dem Einfluss verschiedener Parameter, wie zum Beispiel dem chemischen Potential  $\mu$ , betrachtet wird.

Eine Erweiterung des Modells um eine zweite Gleichung ermöglicht die Be-

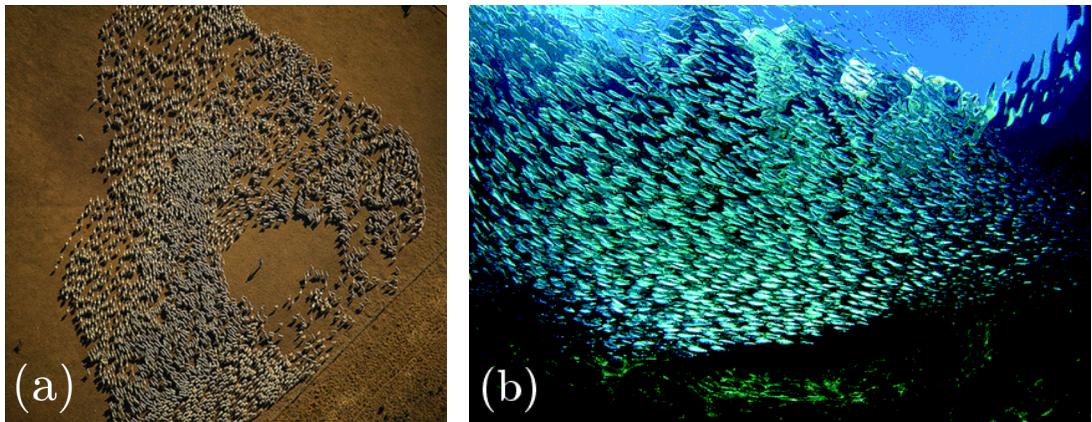


Abbildung 1.1: Dargestellt sind Beispiele für kollektive Bewegung in der Natur. (a) Eine Schafherde meidet den Schäfer<sup>1</sup>. (b) Fische in einem Schwarm schwimmen in geordneter Polarisation<sup>2</sup>.

schreibung aktiver Materie [15]. Dazu wird mit der Polarisation  $P$  ein weiteres Ordnungsparameterfeld eingeführt, das für einen aktiven Antrieb sorgt [16]. Dem Feld  $\phi$  wird durch Kopplung der beiden Felder eine Richtung und eine Stärke des aktiven Antriebs zugeordnet. In [17] wird auf einen Vergleich eines Ferromagneten mit sich bewegenden Schwärmen zurückgegriffen, um mit einer Gleichung zur Beschreibung einer Magnetisierung kollektive Bewegung beschreiben zu können. Wie auch die Spins der Eisenatome in einem Ferromagneten orientieren sich die Individuen eines Schwärms an ihren nächsten Nachbarn. Anstelle von Spins tragen die Individuen in diesem Zusammenhang allerdings Geschwindigkeiten, die laufend an die Geschwindigkeiten der Nachbarn angepasst werden. Die Allen-Cahn-Gleichung beschreibt dabei jedoch keine diskreten Individuen, sondern wie in der Fluidodynamik ein Kontinuum.

Das aktive Allen-Cahn-Modell besitzt unterschiedliche lokalisierte Lösungen, welche danach unterschieden werden können, ob sie sich fortbewegen oder nicht. Die zeitlich konstanten lokalisierten Strukturen werden ruhende Zustände genannt, die sich fortbewegenden lokalisierten Strukturen bewegte Zustände. Das Auffinden der bewegten Zustände sowie der Übergang zwischen ruhenden und bewegten Zuständen sind für diese Arbeit von Interesse. Da es sich bei der Allen-Cahn-Gleichung um eine nichtlineare Gleichung handelt, ist eine rein analytische Betrachtung des Modells nicht möglich. Stattdessen kommen numerische Methoden zum Einsatz, wie die direkte Zeitsimulation und die Kontinuierung. Letztere wird

---

<sup>1</sup>entnommen aus [18]

<sup>2</sup>entnommen aus [19]

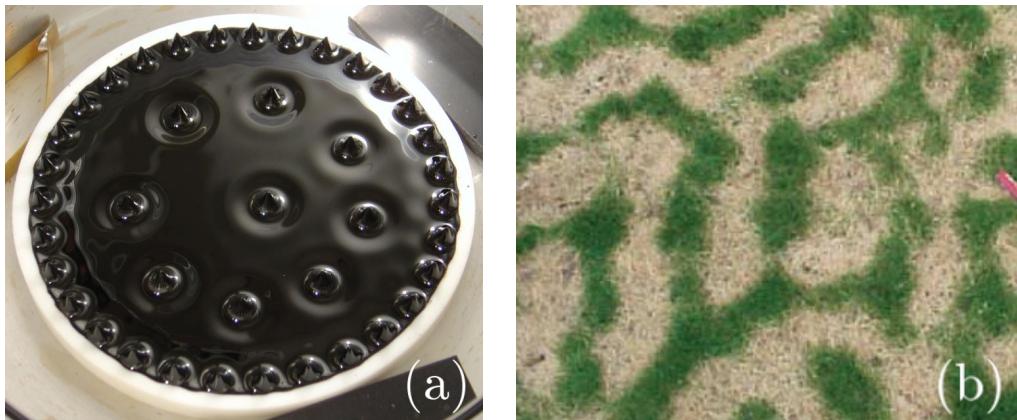


Abbildung 1.2: Abgebildet sind Beispiele für lokalisierte Strukturen und ausgedehnte Muster. (a) Durch das Anlegen eines Magnetfelds entstehen in einem magnetischen Fluid neun Solitonen<sup>3</sup>. (b) Grasvegetation im nördlichen Negev (Israel) bildet aufgrund begrenzter Wasserversorgung zweidimensionale lokalisierte Strukturen aus<sup>4</sup>.

verwendet, um ruhende und bewegte Zustände durch den Parameterraum zu verfolgen.

Dazu werden in Kapitel 2 theoretische Vorüberlegungen getroffen, welche zum Verständnis der weiteren Kapitel benötigt werden. Anschließend wird in Kapitel 3 zunächst das in dieser Arbeit betrachtete Modell eingeführt und die homogenen stationären Lösungen hinsichtlich der linearen Stabilität untersucht. In Kapitel 4 werden die Ergebnisse der Kontinuierung mit dem Programm *auto07p* präsentiert. Die gefundenen lokalisierten Zustände des Modells werden schließlich in Kapitel 5 mit einer Zeitsimulation untersucht, um unter anderem die Geschwindigkeit der bewegten Zustände zu bestimmen. Abschließend gibt Kapitel 6 eine Zusammenfassung und einen Ausblick.

---

<sup>3</sup>entnommen aus [8]

<sup>4</sup>entnommen aus [11]



## 2 Theorie

### 2.1 Nichtlinearität

Eine nichtlineare Funktion  $f$  zeichnet sich dadurch aus, dass die Eigenschaft der Proportionalität nicht erfüllt ist, es gilt also

$$f(ax + bx) \neq f(ax) + f(bx). \quad (2.1)$$

Eine Verdopplung der Eingangsgröße führt bei einer nichtlinearen Funktion daher nicht zu einer Verdopplung der Ausgangsgröße. Ein System aus  $n$  Differentialgleichungen

$$\dot{x}_n = f_n(x_1, \dots, x_n) \quad (2.2)$$

ist dann linear, wenn die  $f_n$  linear in den  $x_i$  sind. Eine Nichtlinearität in einer Gleichung sorgt dafür, dass die Gleichung analytisch schwer oder unmöglich zu lösen ist, da das Superpositionsprinzip nicht anwendbar ist und somit jede Gleichung einen Einzelfall darstellt. In den nächsten Abschnitten werden daher erste Herangehensweisen an ein nichtlineares Problem dargelegt und am Beispielproblem

$$\dot{x} = x - x^3 \quad (2.3)$$

erläutert.

#### 2.1.1 Fixpunkte

Eine Möglichkeit eine nichtlineare Gleichung erster Ordnung  $\dot{x} = f(x)$  zu untersuchen besteht darin, sie als überdämpftes mechanisches Problem zu diskutieren und dazu ein Potential zu definieren, in dem sich ein mechanisches Teilchen bewegt. Das Potential  $V(x)$  wird durch

$$f(x) = -\frac{dV}{dx} \quad (2.4)$$

bestimmt, das Minuszeichen ist hierbei eine Konvention aus der Mechanik. In der

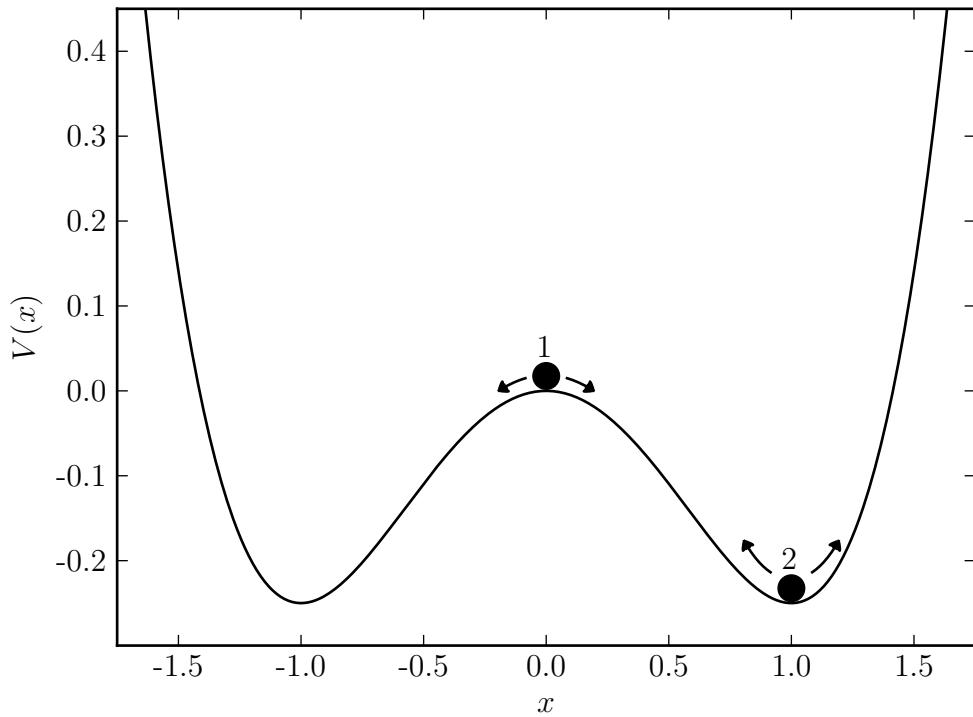


Abbildung 2.1: Im Beispieldpotential aus Gleichung (2.5) werden zwei Teilchen platziert, welche durch die schwarzen Punkte dargestellt werden. Wird Teilchen 1 minimal ausgelenkt, so bewegt es sich in einen der beiden benachbarten Fixpunkte. Teilchen 2 hingegen verbleibt bei geringer Auslenkung im Fixpunkt. Bei genügend großer Auslenkung kann Teilchen 2 in den instabilen Fixpunkt übergehen oder bei noch stärkerer Auslenkung den nächsten Fixpunkt anstreben.

Potentialdarstellung können Fixpunkte und ihre Stabilität schnell erkannt werden, da sie den Extrema des mechanischen Potentials entsprechen. Liegt das Teilchen auf einem der Extrempunkte, entfernt es sich ohne Auslenkung nicht von diesen Punkten. Die Stabilität eines solchen Punktes kann durch ein kleines Auslenken des Teilchens untersucht werden. Kehrt es trotz Auslenkung in seine ursprüngliche Position zurück, ist der Fixpunkt stabil. Wird die Auslenkung immer größer und das Teilchen kehrt nicht an die Ausgangsposition zurück, ist der Fixpunkt instabil. In der Potentialdarstellung werden instabile Fixpunkte durch Maxima repräsentiert, stabile Fixpunkte dagegen durch Minima. Die Extrema des Potentials sind durch die Nullstellen seiner Ableitung gegeben, welche wegen Gleichung (2.4) gerade den Nullstellen der ursprünglichen Funktion  $f(x)$  in Gleichung (2.2) entsprechen.

Aus dem in Gleichung (2.3) definierten System ergibt sich mit Gleichung (2.4)

durch Integration das Potential

$$V(x) = \frac{1}{4}x^4 - \frac{1}{2}x^2, \quad (2.5)$$

welches in Abb. 2.1 gegen  $x$  aufgetragen ist. Die beliebig zu wählende Integrationskonstante wird dabei zu Null gewählt. Die Punkte in der Abbildung symbolisieren Teilchen, welche im Potential platziert werden. Da Teilchen 1 bei einer kleinen Auslenkung nach links oder nach rechts hinunterrutschen würde, beschreibt  $x = 0$  einen instabilen Fixpunkt. Teilchen 2 würde bei einer kleinen Auslenkung in seine ursprüngliche Position zurückkehren, befindet sich bei  $x = 1$  also in einem stabilen Fixpunkt.

### 2.1.2 Lineare Stabilitätsanalyse

Um die Überlegungen aus dem vorigen Abschnitt zu quantifizieren, kann eine lineare Stabilitätsanalyse durchgeführt werden [20]. Diese geht von den aus der Bedingung  $f(x) = 0$  erhaltenen Fixpunkten  $x^*$  aus und untersucht diese auf ihre Stabilität. Es sei

$$\varepsilon(t) = x(t) - x^* \quad (2.6)$$

eine kleine Störung des Fixpunktes. Um zu untersuchen, ob die Störung wächst oder abfällt, wird die zeitliche Ableitung

$$\dot{\varepsilon} = \frac{d}{dt}(x - x^*) = \dot{x} \quad (2.7)$$

betrachtet. Da  $x^*$  ein Fixpunkt ist und somit konstant, entspricht dies

$$\dot{\varepsilon} = f(x) = f(\varepsilon + x^*). \quad (2.8)$$

Diese nichtlineare Gleichung wird nun linearisiert. Eine Taylorentwicklung um den Fixpunkt ergibt

$$f(\varepsilon + x^*) = f(x^*) + f'(x^*)(x - x^*) + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \quad (2.9a)$$

$$= f(x^*) + \varepsilon f'(x^*) + \mathcal{O}(\varepsilon^2). \quad (2.9b)$$

Da  $x^*$  ein Fixpunkt ist, gilt  $f(x^*) = 0$ . Unter der Voraussetzung, dass  $f'(x^*) \neq 0$  und  $\varepsilon$  hinreichend klein ist, können die Terme quadratischer und höherer Ordnung

$\mathcal{O}(\varepsilon^2)$  vernachlässigt werden, sodass sich schließlich

$$\dot{\varepsilon} = \varepsilon f'(x^*) \quad (2.10)$$

ergibt. Diese lineare Gleichung beschreibt nun die Änderungsrate der Störung. Ist  $f'(x^*) > 0$ , wächst die Störung exponentiell, ist  $f'(x^*) < 0$ , schrumpft sie. Aus Gleichung (2.10) wird deutlich, dass die Steigung  $f'(x^*)$  dabei das Maß für die Wachstums- bzw. Zerfallsrate ist. Deshalb kann mit dieser Größe die Stabilität des Fixpunktes quantifiziert werden. Ist die Störung zu groß, wird die lineare Analyse ungenau oder sogar inkorrekt. Dies kann mit Abb. 2.1 erklärt werden. Wird der Fixpunkt bei  $x = 1$  einer Störung ausgesetzt, die über  $x = 0$  hinausgeht, bewegt sich das System zum Fixpunkt bei  $x = -1$  und  $x^* = 1$  erscheint instabil.

Mit dem zuvor definierten Beispielsystem ergeben sich aus

$$f(x) = 0 = x - x^3 \quad (2.11)$$

zunächst die Fixpunkte

$$x_1 = 0 \text{ und } x_{2,3} = \pm 1. \quad (2.12)$$

Mit der Ableitung

$$f'(x) = 1 - 3x^2 \quad (2.13)$$

wird die Stabilität der Fixpunkte bestimmt. Dabei werden die Werte

$$f'(x_1) = 1 \text{ und } f'(x_2) = f'(x_3) = -2 \quad (2.14)$$

erhalten. Der Fixpunkt  $x_1$  ist somit instabil, die beiden anderen Fixpunkte sind stabil. Dieses Ergebnis deckt sich mit der Betrachtung des Potentials in Abb. 2.1.

### 2.1.3 Bifurkationen

Komplexe Systeme besitzen oft Parameterabhängigkeiten. Durch variierende Parameter kann sich das Verhalten des Systems qualitativ verändern. Beispielsweise können Fixpunkte ihre Stabilität wechseln, entstehen oder verschwinden. Eine solche qualitative Änderung wird Bifurkation genannt. Die Orte im Parameterraum, an denen eine Änderung auftritt, sind die Bifurkationspunkte. Wird der Parameterraum der entsprechenden Lösungen in einem Diagramm aufgetragen, wird dieses Bifurkationsdiagramm genannt. Dabei werden stabile Lösungen häufig als

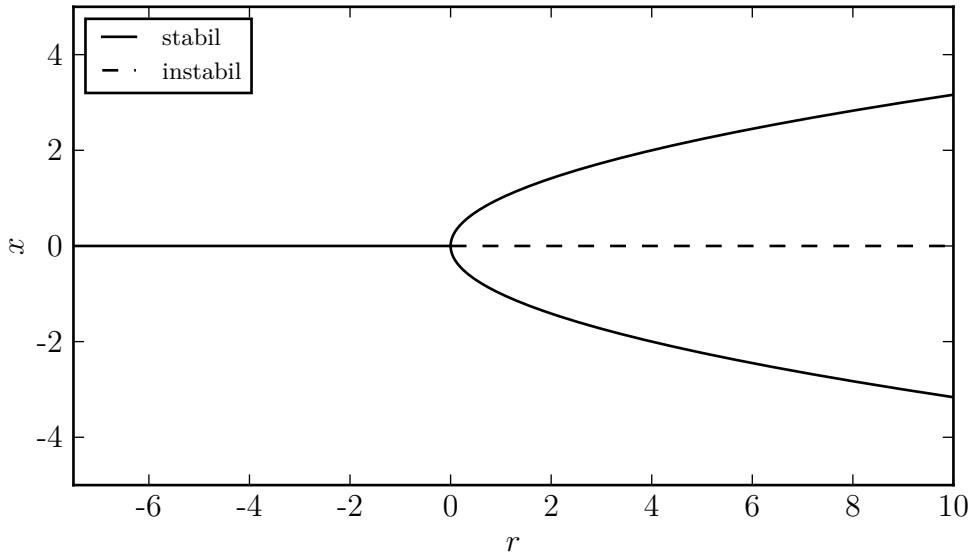


Abbildung 2.2: Dargestellt ist das Bifurkationsdiagramm zu Gleichung (2.15). Auf der horizontalen Achse ist der Parameter  $r$  aufgetragen, auf der vertikalen Achse  $Re(x)$ . Die Lösungäste entsprechen den Fixpunkten aus Gleichung (2.16). Die stabilen Lösungen sind als durchgezogene Linien dargestellt, die instabilen als gestrichelte. Für  $r < 0$  werden die Fixpunkte  $x_2$  und  $x_3$  imaginär, weshalb erst im Bifurkationspunkt bei  $r = 0$  die beiden instabilen Lösungäste abzweigen. Diese Art der Bifurkation wird Pitchfork-Bifurkation genannt.

durchgezogene Linie dargestellt, instabile Lösungen hingegen gestrichelt.

### Pitchfork-Bifurkation

Das bisherige Beispielsystem wird zur Demonstration eines Bifurkationspunktes leicht abgeändert. Der lineare Term aus Gleichung (2.3) erhält dazu einen zusätzlichen Parameter  $r$ , welcher sowohl positiv als auch negativ sein kann. Das System lautet somit

$$\dot{x} = rx - x^3, \quad (2.15)$$

sodass sich die Fixpunkte zu

$$x_1 = 0 \text{ und } x_{2,3} = \pm\sqrt{r} \quad (2.16)$$

ändern. Die Ableitung aus Gleichung (2.13) ändert sich zu

$$f'(x) = r - 3x^2, \quad (2.17)$$

sodass ihre Auswertung

$$f'(x_1) = r \text{ und } f'(x_2) = f'(x_3) = -2r \quad (2.18)$$

ergibt. Damit ist die Stabilität der Fixpunkte vom Parameter  $r$  abhängig. Die Fixpunkte werden nun gegen  $r$  in einem Bifurkationsdiagramm aufgetragen (Abb. 2.2). Die Linien der einzelnen Fixpunkte werden dabei als Lösungsast bezeichnet, die Punkte, an denen solche Äste aufeinandertreffen, sind die Bifurkationspunkte. In einem Bifurkationsdiagramm werden stabile Lösungsäste meist durch durchgezogene Linien symbolisiert, instabile Lösungsäste durch gestrichelte. Die in Abb. 2.2 dargestellte Bifurkation wird Pitchfork-Bifurkation genannt, Gleichung (2.15) ist die dazugehörige Normalform.

### Hopf-Bifurkation

Eine weitere wichtige Bifurkation ist die Hopf-Bifurkation, welche die Änderung der Stabilität eines Fixpunktes beschreibt [20]. Diese tritt nur in mindestens zweidimensionalen Systemen auf. Bei der Linearisierung eines zweidimensionalen Systems zur Untersuchung der Stabilität wird statt einer einzelnen Ableitung eine zweidimensionale Jacobi-Matrix erhalten, deren Eigenwerte  $\lambda_1, \lambda_2$  für die Stabilität eines Fixpunkts ausschlaggebend sind. Nur wenn für beide Eigenwerte  $\text{Re}(\lambda) < 0$  gilt, ist der Fixpunkt stabil. Kreuzen die Eigenwerte die imaginäre Achse, wird der Realteil positiv und führt zu einer Änderung der Stabilität. Da die Eigenwerte aus einer quadratischen Gleichung mit reellen Koeffizienten erhalten werden, gibt es für die Eigenwerte eines stabilen Fixpunkts zwei mögliche Muster. Entweder sind beide rein reell und negativ oder sie sind komplex konjugiert zueinander. Ist ersteres der Fall, überqueren sie die imaginäre Achse nacheinander. Dies führt beispielsweise zu einer zweidimensionalen Entsprechung der zuvor diskutierten Pitchfork-Bifurkation. Bei komplex konjugierten Eigenwerten kreuzen beide die imaginäre Achse gleichzeitig. Dieser Prozess ist charakteristisch für eine Hopf-Bifurkation. Ein System erreicht seinen Fixpunkt über eine exponentiell gedämpfte Oszillation mit einer Zerfallsrate, welche vom Parameter  $r$  abhängt. Diese Zerfallsrate kann unter Variation von  $r$  immer kleiner werden und schließlich an einem kritischen Wert  $r_c$  in eine Wachstumsrate übergehen, wodurch der Fixpunkt seine Stabilität verliert. Geht der frühere Fixpunkt dann in einen sinusoidalen Grenzzyklus über, hat das System eine superkritische Hopf-Bifurkation durchlaufen. Die Normalform

einer Hopf-Bifurkation ist in Polarkoordinaten durch

$$\dot{\eta} = r\eta - \eta^3 \quad (2.19a)$$

$$\dot{\theta} = \omega + b\eta^2 \quad (2.19b)$$

gegeben. Der Parameter  $r$  ist wie schon in Gleichung (2.15) für die Stabilität des Fixpunkts bei  $\eta = 0$  verantwortlich. Um die Eigenwerte zu untersuchen, wird das System in kartesische Koordinaten  $x = \eta \cos \theta$  und  $y = \eta \sin \theta$  transformiert, wodurch

$$\dot{x} = rx - \omega y + \mathcal{O}(x^2, y^2) \quad (2.20a)$$

$$\dot{y} = \omega x + ry + \mathcal{O}(x^2, y^2) \quad (2.20b)$$

erhalten wird. Aus dieser Notation lässt sich die Jacobi-Matrix  $J$

$$J = \begin{pmatrix} r & -\omega \\ \omega & r \end{pmatrix} \quad (2.21)$$

leicht ablesen. Die Matrix  $J$  hat die komplex konjugierten Eigenwerte

$$\lambda_{\pm} = r \pm i\omega, \quad (2.22)$$

welche gleichzeitig von links nach rechts die imaginäre Achse kreuzen, wenn  $r$  von negativen zu positiven Werten anwächst. Dies entspricht der oben getroffenen Definition einer Hopf-Bifurkation.

Die weiteren grundlegenden Bifurkationen werden durch ähnlich einfache Systeme wie die beiden untersuchten Normalformen erzeugt, hier aber nicht weiter dargelegt.

## 2.2 Numerische Methoden

Nichtlineare Probleme lassen sich häufig nur schwierig analytisch behandeln. Alternativ werden numerische Methoden verwendet, mit deren Hilfe auch die Zeitentwicklung analytisch weniger zugänglicher Systeme betrachtet werden kann. In den nächsten Absätzen werden mögliche numerische Methoden vorgestellt und erläutert.

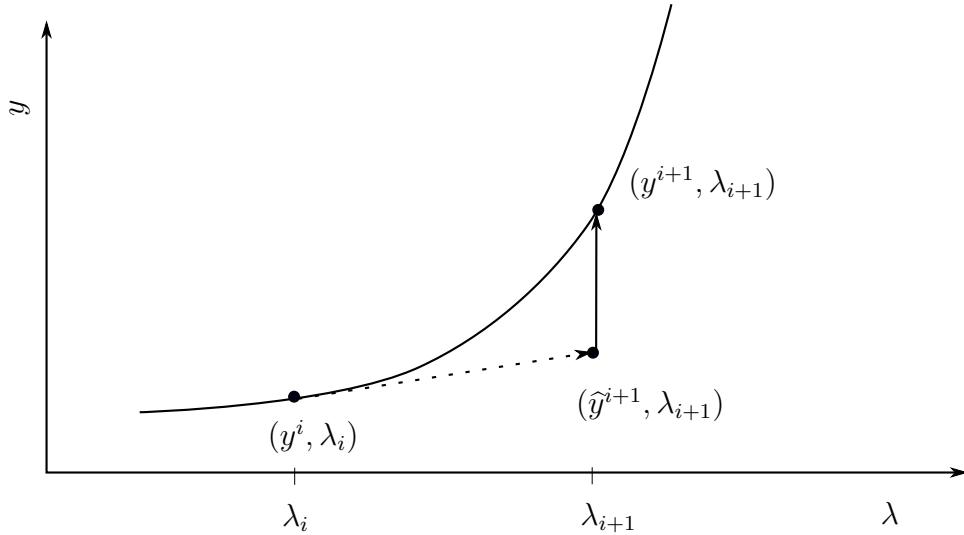


Abbildung 2.3: Eine durch eine Tangente (gestrichelter Pfeil) getroffene Vorhersage für den nächsten Punkt auf dem Lösungsast  $(\hat{y}^{i+1}, \lambda_{i+1})$  wird durch ein Korrekturverfahren (durchgezogener Pfeil) an die tatsächliche Lösung  $(y^{i+1}, \lambda_{i+1})$  angepasst.<sup>5</sup>

### 2.2.1 Kontinuierung

Kontinuierung beschreibt ein Verfahren, anhand dessen nichtlineare Differentialgleichungen numerisch analysiert werden können. Dabei wird eine Lösung eines nichtlinearen Gleichungssystems betrachtet, welches von dem Parameter  $\lambda$  abhängt. Um den Lösungsast im Parameterraum zu verfolgen, wird ein Vorhersage-Korrektur-Verfahren angewandt, welches in Abb. 2.3 schematisch dargestellt ist. Von einem Punkt  $(y^i, \lambda_i)$  auf dem Lösungsast ausgehend wird eine Tangente an diesen Punkt angelegt. Mit einer Schrittweite  $\Delta\lambda$  und der Tangente wird nun näherungsweise der nächste Punkt des Lösungsastes  $(\hat{y}^{i+1}, \lambda_{i+1})$  vorhergesagt. Die vorhergesagte Lösung wird dann durch das Newton-Verfahren bis auf eine gewünschte Genauigkeit an die tatsächliche Lösung  $(y^{i+1}, \lambda_{i+1})$  angepasst. Diese Implementierung der Kontinuierung ist nicht in der Lage, den Lösungsast durch eine Faltung zu verfolgen, da das Newton-Verfahren bei festgehaltenen Parametern nach Lösungen sucht. Deshalb wird die sogenannte Bogenlängen-Kontinuierung verwendet. Für diese wird die Bogenlänge  $s$  als neuer Parameter definiert. Dazu wird eine zusätzliche Bedingung eingeführt, um das Problem für den Parameter  $s$  zu lösen.

<sup>5</sup>entnommen aus [21]

Diese wird aus der lokalen Näherung der Bogenlänge

$$|\Delta y|^2 + (\Delta \lambda)^2 = (\Delta s)^2 \quad (2.23)$$

gewonnen [21]. Weitere Informationen zur Kontinuierung sind in [22, 23, 24] zu finden.

### 2.2.2 Runge-Kutta-Verfahren

Das Runge-Kutta-Verfahren ist ein Verfahren numerischer Integration zur Lösung von Anfangswertproblemen, die analytisch nicht oder nur sehr schwer zu lösen sind. Zunächst wird hier das sogenannte Euler-Verfahren beschrieben, um die grundlegende Idee zu verdeutlichen.

Ausgangspunkt bei beiden Verfahren ist ein Anfangswertproblem

$$\dot{x} = f(x) \text{ mit } x_0 = x(t_0), \quad (2.24)$$

welches die zeitliche Ableitung von  $x$  beschreibt. Die Steigung  $f(x_0)$  an der Stelle  $x_0$  ist damit bekannt. Von  $f(x_0)$  wird nun näherungsweise auf den Funktionswert  $x(t_0 + \Delta t)$  geschlossen. Dazu wird eine Taylorentwicklung vorgenommen, welche nach der ersten Ordnung abgebrochen wird. Damit kann durch

$$x(t_0 + \Delta t) = x(t_0) + \dot{x}(t_0)\Delta t \quad (2.25a)$$

$$= x(t_0) + f(x(t_0))\Delta t \quad (2.25b)$$

der neue Funktionswert nach einer verstrichenen Zeit von  $\Delta t$  errechnet werden. Damit die durch die Taylorentwicklung getroffene Annahme einer konstanten Steigung gerechtfertigt ist, wird der Zeitschritt  $\Delta t$  klein gewählt. Vom berechneten Funktionswert aus kann über eine erneute Bestimmung der Steigung die Berechnung fortgesetzt werden. Die Rekursionsformel zur Bestimmung des nächsten Schrittes lautet beim Euler-Verfahren somit

$$x_{n+1} = x_n + f(x_n)\Delta t. \quad (2.26)$$

Da die Annahme einer über ein Intervall konstanten Steigung eine Näherung ist, entstehen bei jeder Iteration Fehler.

Beim Euler-Verfahren wird die Steigung nur am ersten Punkt des betrachteten

Zeitintervalls ausgewertet. Das Runge-Kutta-Verfahren verbessert die Berechnung, indem an weiteren Punkten innerhalb des Intervalls durch erneute Auswertung von  $f$  die Steigung ermittelt wird und zur Bestimmung des neuen Funktionswerts der gewichtete Mittelwert verwendet wird. Dabei können theoretisch beliebig viele Stützstellen gewählt werden. Mit jeder Funktionsauswertung steigt jedoch der für eine Iteration benötigte Rechenaufwand. Ein angemessenes Verhältnis zwischen Genauigkeit der Rechnung und Rechenaufwand bietet eine Anzahl von vier Stützstellen. Diese Anzahl wird beim Runge-Kutta-4-Verfahren erreicht. Die  $k_i$  sind dabei die Stützstellen, welche durch

$$k_1 = f(x_n) \Delta t \quad (2.27a)$$

$$k_2 = f\left(x_n + \frac{k_1}{2}\right) \Delta t \quad (2.27b)$$

$$k_3 = f\left(x_n + \frac{k_2}{2}\right) \Delta t \quad (2.27c)$$

$$k_4 = f(x_n + k_3) \Delta t \quad (2.27d)$$

gegeben sind [20]. Mit dem vorigen Wert  $x_n$  wird der nächste Wert dann aus dem gewichteten Mittelwert durch

$$x_{n+1} = x_n + \frac{1}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \quad (2.28)$$

berechnet.

Dieses Verfahren kann auch auf ein System aus zwei Differentialgleichungen angewandt werden. Dazu werden jeweils für beide Ordnungsfelder die  $k_i$  bestimmt, mit denen der nächste Zeitschritt errechnet werden kann.

### 2.2.3 Pseudospektralverfahren

Während zuvor ein Verfahren zur Analyse gewöhnlicher Differentialgleichungen vorgestellt wurde, werden mit dem Pseudospektralverfahren partielle Differentialgleichungen untersucht. Dieses nutzt zur Berechnung von räumlichen Ableitungen das spektrale Ableiten aus. Die dafür benötigte Fouriertransformation  $\mathcal{F}$  der Funktion  $f(x)$  ist durch

$$\mathcal{F}[f(x)] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{-ikx} dx \quad (2.29)$$

definiert, ihre inverse Transformation durch

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{F}[f(x)] e^{ixk} dk. \quad (2.30)$$

Für die Bestimmung der räumlichen Ableitungen wird ausgenutzt, dass mit partieller Integration und einer absolut integrabilen Funktion [25]

$$\mathcal{F}[f'(x)] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f'(x) e^{-ikx} dx \quad (2.31a)$$

$$= \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2\pi}} f(x) e^{-ikx} \Big|_{x=-\infty}^{+\infty}}_{=0} + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} ik f(x) e^{-ikx} dx \quad (2.31b)$$

$$= ik \mathcal{F}[f(x)] \quad (2.31c)$$

gilt. Eine Ableitung im Realraum entspricht also einer Multiplikation der transformierten mit  $ik$  im Fourierraum. Das spektrale Ableiten ist jedoch nur bei linearen Problemen sinnvoll, da eine bei Nichtlinearitäten auftretende Multiplikation im Realraum zu einer Faltung im Fourierraum führt und umgekehrt. Eine Faltung  $f * g$  zweier Funktionen  $f(x)$  und  $g(x)$  ist definiert durch

$$f * g = \int_{u=-\infty}^{+\infty} f(u) g(x-u) du \quad (2.32)$$

und verursacht durch das Integral einen hohen zusätzlichen Rechenaufwand ([25]). Um dies zu vermeiden, wird beim Pseudospektralverfahren die Linearität der Fouriertransformation ausgenutzt. Dazu werden nur die Terme transformiert, welche eine Ableitung beinhalten. Die Ableitung wird nach Gleichung (2.31) ausgerechnet und die transformierten Terme daraufhin nach Gleichung (2.30) zurücktransformiert. Anschließend werden die Terme, welche keine Ableitung beinhalten, ohne Transformation zu den übrigen Termen addiert, woher auch der Name Pseudo stammt.



### 3 Analytische Betrachtung

#### 3.1 Aktives Allen-Cahn-Modell

Das untersuchte aktive System besteht aus den kinetischen Gleichungen für die Ordnungsparameterfelder  $\phi(x, t)$  und  $P(x, t)$

$$\partial_t \phi(x, t) = \partial_{xx} \phi - \phi^3 + \phi - v_0 \partial_x P - \mu \quad (3.1a)$$

$$\partial_t P(x, t) = D_T \partial_{xx} P - D_r P - v_0 \partial_x \phi. \quad (3.1b)$$

Das Feld  $\phi$  kann je nach Kontext verschiedene Bedeutungen haben. So kann  $\phi$  beispielsweise eine Dichte, eine Magnetisierung oder eine Konzentration beschreiben. Das Feld  $P$  repräsentiert eine Polarisierung, welche im Modell den aktiven Antrieb darstellt. Sowohl  $D_T$  als auch  $D_r$  sind Diffusionskonstanten. Da negative Diffusionskonstanten unphysikalisch sind, werden für  $D_T$  und  $D_r$  nur positive Werte gewählt. Die beiden Terme

$$-v_0 \partial_x P \quad \text{und} \quad -v_0 \partial_x \phi$$

aus Gleichung (3.1) sind die Kopplungsterme. Die Stärke der Kopplung wird dabei durch die in beiden Termen vorhandene Kopplungskonstante  $v_0$  reguliert. Die Konstante  $\mu$  steht für ein optionales chemisches Potential. Zur Vereinfachung in der folgenden analytischen Betrachtung wird  $\mu = 0$  gewählt. Ein ähnliches System wie Gleichung (3.1) wird in [26] betrachtet. Für den Fall  $v_0 = 0$  ergibt sich aus Gleichung (3.1b) die Allen-Cahn-Gleichung. Ist weiterhin  $\mu = 0$  und  $\partial_t \phi(x, t) = 0$ , ergibt sich durch die Umbenennung  $x \rightarrow t$  die newtonscche Bewegungsgleichung

$$\ddot{x} = -\frac{dV}{dt}, \quad (3.2)$$

mit dem mechanischen Potential  $V$ , welches in Abschnitt 2.1.1 betrachtet wird.

Um das System und die folgenden Rechnungen übersichtlicher darzustellen, wird Gleichung (3.1) in Vektordarstellung notiert. Die erste Komponente des Vektors  $\vec{u}$  beschreibt dabei das Ordnungsparameterfeld  $\phi$ , die zweite die Polarisierung  $P$ ,

sodass folgende Gleichung erhalten wird:

$$\partial_t \vec{u} = \partial_t \begin{pmatrix} \phi \\ P \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \partial_{xx} - \phi^2 + 1 & -v_0 \partial_x \\ -v_0 \partial_x & D_T \partial_{xx} - D_r \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi \\ P \end{pmatrix}. \quad (3.3)$$

### 3.2 Ermittlung der Fixpunkte

Um das System (3.3) zu untersuchen, werden zunächst die homogenen, stationären Zustände (Fixpunkte) ermittelt, d.h. die Zustände, für die sowohl die räumlichen als auch die zeitlichen Ableitungen verschwinden. Mit dieser Bedingung wird Gleichung (3.3) zu

$$0 = \phi - \phi^3 \quad (3.4a)$$

$$0 = -D_r P, \quad (3.4b)$$

woraus sich in Vektorschreibweise die drei Fixpunkte

$$\vec{u}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{u}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \vec{u}_3 = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

ergeben.

### 3.3 Lineare Stabilitätsanalyse

Zur Ermittlung der Stabilität der Fixpunkte wird analog zu Abschnitt 2.1.2 eine kleine Störung auf das System im Fixpunkt addiert und analysiert, ob diese anwächst oder schrumpft. Da der lineare Term nicht verschwindet, reicht es aus, Terme zu betrachten, welche linear in der Störung sind. Um das System zu linearisieren, wird in Gleichung (3.1)

$$\vec{u} = \begin{pmatrix} \phi_0 + \varepsilon \phi_1 \\ P_0 + \varepsilon P_1 \end{pmatrix} \quad (3.6)$$

eingesetzt.  $\phi_0$  und  $P_0$  sind die oben bereits ermittelten Fixpunkte, welche hier um die Störung  $\phi_1(x, t)$  und  $P_1(x, t)$  ergänzt werden.  $\varepsilon$  ist ein Kleinheitsparameter, welcher sicherstellt, dass das System einer genügend kleinen Störung ausgesetzt

wird. Die erste Gleichung des Systems wird damit zu

$$\partial_t \phi_0 + \varepsilon \partial_t \phi_1 = \partial_{xx}(\phi_0 + \varepsilon \phi_1) + \phi_0 + \varepsilon \phi_1 - (\phi_0 + \varepsilon \phi_1)^3 - v_0 \partial_x(P_0 + \varepsilon P_1), \quad (3.7)$$

die zweite zu

$$\partial_t P_0 + \varepsilon \partial_t P_1 = D_T \partial_{xx}(P_0 + \varepsilon P_1) - D_r(P_0 + \varepsilon P_1) - v_0 \partial_x(\phi_0 + \varepsilon \phi_1). \quad (3.8)$$

Da sowohl  $\phi_0$  als auch  $P_0$  Fixpunkte sind, verschwinden in den obigen beiden Gleichungen die räumlichen und zeitlichen Ableitungen an diesen Punkten. Unter Berücksichtigung der Bedingung Gleichung (3.4) für die Fixpunkte verschwinden weitere Terme. In beiden Gleichungen werden nun nur die Terme, welche linear in  $\varepsilon$  sind, betrachtet. Terme höherer Ordnung in  $\varepsilon$  werden vernachlässigt, da  $\varepsilon$  als hinreichend klein angenommen wird. Aus den berücksichtigten Termen wird das linearisierte Gleichungssystem

$$\partial_t \phi_1 = \partial_{xx} \phi_1 + \phi_1 - 3\phi_0^2 \phi_1 - v_0 \partial_x P_1 \quad (3.9a)$$

$$\partial_t P_1 = D_T \partial_{xx} P_1 - D_r P_1 - v_0 \partial_x \phi_1. \quad (3.9b)$$

Auch hier wird nun die Matrixdarstellung verwendet. Der Vektor

$$\vec{u}_1 = \begin{pmatrix} \phi_1 \\ P_1 \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

beschreibt die Störung, also gilt

$$\partial_t \vec{u}_1 = \begin{pmatrix} \partial_{xx} + 1 - 3\phi_0^2 & -v_0 \partial_x \\ -v_0 \partial_x & D_T \partial_{xx} - D_r \end{pmatrix} \vec{u}_1. \quad (3.11)$$

Die Störung wird nun spezifiziert und ersetzt. Dazu wird die periodische Störung

$$\vec{u}_1 = \vec{v} e^{\lambda t + iqx} \quad (3.12)$$

gewählt. Der Vektor  $\vec{v}$  sei die konstante Amplitude der Störung.  $\text{Re}(\lambda)$  beschreibt die Wachstumsrate der Störung.  $\lambda$  kann sowohl komplex als auch reell sein. Für komplexe  $\lambda$  liegt eine zeitliche Oszillation der Störung vor. Entscheidend für die Stabilität des Fixpunktes ist  $\text{Re}(\lambda)$ , welcher ein zeitliches Anwachsen oder Abklingen der Störung beschreibt. Der zweite Summand des Exponenten sorgt für die

räumliche Periodizität der Störung, welche die Wellenzahl  $q$  besitzt. Wird nun  $\vec{u}_1$  aus Gleichung (3.12) in Gleichung (3.11) eingesetzt und die räumlichen Ableitungen angewandt ( $\vec{v}$  konstant), so ergibt sich nach Kürzen der Exponentialfunktion das Eigenwertproblem

$$\lambda \vec{v} = \begin{pmatrix} -q^2 + 1 - 3\phi_0^2 & -iv_0q \\ -iv_0q & -D_T q^2 - D_r \end{pmatrix} \vec{v} =: A \cdot \vec{v} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \vec{v}, \quad (3.13)$$

zu dessen übersichtlicher Notation die Matrix  $A$  definiert wurde. Die Eigenwerte  $\lambda$  von  $A$  sind gegeben durch

$$\lambda_{\pm} = \frac{1}{2} \left( \text{Sp}(A) \pm \sqrt{(\text{Sp}(A))^2 - 4 \det(A)} \right). \quad (3.14)$$

Die daraus erhaltenen Dispersionsrelationen  $\lambda(q)$  werden im Folgenden untersucht. Sind alle  $\text{Re}(\lambda)$  negativ, ist der betrachtete Fixpunkt linear stabil, da die in Gleichung (3.12) definierte Störung exponentiell abfällt. Ist dagegen mindestens ein  $\text{Re}(\lambda)$  positiv, wächst die Störung in der Zeit exponentiell an und der Fixpunkt ist linear instabil. Wie in Gleichung (3.5) zu sehen, besitzt das betrachtete System drei homogene Fixpunkte. Diese liegen bei  $P_0 = 0$  und  $\phi_0 = 1, -1$  und  $0$ . Da in Matrix  $A$  die Größe  $\phi_0$  nur quadratisch eingeht, können  $\phi_0 = 1$  und  $\phi_0 = -1$  gemeinsam betrachtet werden, sodass sich nur zwei verschiedene Fälle ergeben.

### 3.4 Untersuchung der Dispersionsrelation

Aus Gleichung (3.14) ergibt sich mit Matrix  $A$  die allgemeine Dispersionsrelation

$$\lambda_{\pm} = \frac{1}{2} \left[ - \left( q^2(1 + D_T) + D_r + 3\phi_0^2 - 1 \right) \right. \\ \left. \pm \sqrt{(q^2(1 + D_T) + D_r + 3\phi_0^2 - 1)^2 - 4(v_0^2 q^2 + (q^2 + 3\phi_0^2 - 1)(D_T q^2 + D_r))} \right], \quad (3.15)$$

welche nun für die beiden Fälle  $\phi_0 = \pm 1$  und  $\phi_0 = 0$  untersucht wird.

### 3.4.1 Fixpunkte $\phi_0 = \pm 1$

In Gleichung (3.15) wird zunächst  $\phi_0 = \pm 1$  eingesetzt. Damit ergibt sich

$$\lambda_{\pm} = \frac{1}{2} \left[ - \left( q^2(1 + D_T) + 2 + D_r \right) \pm \sqrt{\left( q^2(1 + D_T) + 2 + D_r \right)^2 - 4(q^4 D_T + q^2(2D_T + D_r) + 2D_r) - 4v_0^2 q^2} \right], \quad (3.16)$$

dies lässt sich zu

$$\lambda_{\pm} = -q^2 \frac{1 + D_T}{2} - \frac{D_r}{2} - 1 \pm \frac{1}{2} \sqrt{\left( q^2(D_T - 1) + D_r - 2 \right)^2 - 4v_0^2 q^2} \quad (3.17)$$

vereinfachen. Von Interesse ist nun, unter welchen Bedingungen der Realteil von  $\lambda$  positiv wird. Für  $D_T, D_r > 0$  gilt  $\text{Re}(\lambda) < 0$ . Der Term  $4v_0^2 q^2$  ist positiv, somit kann die Diskriminante in Gleichung (3.17) negativ werden. In diesem Fall wird  $\lambda_{\pm}$  komplex und es gilt  $\text{Re}(\lambda_+) < 0$ . In die Diskriminante geht  $v_0$  negativ quadratisch ein. Ein von Null verschiedenes  $v_0$  lässt die Diskriminante also kleiner werden. Um zu überprüfen, ob für eine beliebige Wahl der Parameter die Diskriminante groß genug werden kann, sodass  $\text{Re}(\lambda) > 0$ , wird daher  $v_0$  gleich Null gesetzt. Die so erhaltene Gleichung für  $\lambda_+$  lautet

$$\lambda_+ = -q^2 \frac{1 + D_T}{2} - \frac{D_r}{2} + \left| q^2(D_T - 1) + D_r - 2 \right|. \quad (3.18)$$

Eine Fallunterscheidung liefert

$$\lambda_+^+ = -q^2 \frac{1 + D_T}{2} - \frac{D_r}{2} + q^2(D_T - 1) + D_r - 2 \quad (3.19a)$$

$$\lambda_+^- = -q^2 \frac{1 + D_T}{2} - \frac{D_r}{2} - q^2(D_T - 1) - D_r + 2. \quad (3.19b)$$

Beides lässt sich vereinfachen zu

$$\lambda_+^+ = -q^2 - 2 < 0 \quad (3.20a)$$

$$\text{bzw. } \lambda_+^- = -\frac{D_T}{2} q^2 - D_r < 0. \quad (3.20b)$$

Daraus folgt, dass es für die Fixpunkte  $\phi_0 = \pm 1$  keinen Eigenwert mit nicht-negativem Realteil gibt, diese Fixpunkte also für jedes  $q$  und  $v_0$  stabil sind.

### 3.4.2 Fixpunkt $\phi_0 = 0$

Durch Einsetzen des Fixpunkts  $\phi_0 = 0$  in Gleichung (3.15) ergibt sich

$$\begin{aligned} \lambda_{\pm} = & \frac{1}{2} \left( -q^2 + 1 - D_T q^2 - D_r \right. \\ & \left. \pm \sqrt{(-q^2 + 1 - D_T q^2 - D_r)^2 - 4(v_0^2 q^2 + (1 - q^2)(-D_T q^2 - D_r))} \right). \end{aligned} \quad (3.21)$$

Diese Dispersionsrelation ist für  $q = 0$  für beide Lösungen  $v_0$ -unabhängig, mit  $\lambda_+ = 1$  bzw.  $\lambda_- = -D_r$ . Demnach wächst die Störung für  $q = 0$  an und der Fixpunkt  $\phi_0 = 0$  ist für  $q = 0$  instabil. Um zu untersuchen, ob dies auch für  $q \neq 0$  gilt, werden die Nullstellen der Dispersionsrelation untersucht. Für das Verhalten der Nullstellen ist relevant, wie sich die Diskriminante verhält, da die Lösungen durch diese komplex werden können. Wird die Diskriminante Null, ergibt sich eine Lösung, welche für jede Parameterkombination reell bleibt. Daraus leitet sich mit Gleichung (3.21) die Bedingung

$$4(v_0^2 q^2 + (1 - q^2)(-D_T q^2 - D_r)) = (-q^2 + 1 - D_T q^2 - D_r)^2 \quad (3.22)$$

ab. In den Matrixelementen aus Gleichung (3.13) ausgedrückt ist dies

$$(a + d)^2 = 4(ad - bc). \quad (3.23)$$

Damit folgt

$$a^2 + d^2 + 2ad = 4ad - 4bc \quad (3.24a)$$

$$a^2 + d^2 - 2ad = -4bc \quad (3.24b)$$

$$-4bc = (a - d)^2, \quad (3.24c)$$

und durch Einsetzen von Gleichung (3.13)

$$4v_0^2 q^2 = (1 - q^2 + D_T q^2 + D_r)^2 \quad (3.25a)$$

$$\pm 2v_0 q = q(D_T - 1) + D_r + 1. \quad (3.25b)$$

Die sich ergebende quadratische Gleichung

$$q^2 \mp \frac{2v_0}{D_T - 1}q + \frac{D_r + 1}{D_T - 1} = 0$$

erhält dabei durch den  $\pm$ -Term vier Nullstellen, welche durch

$$q_{a,b,c,d} = \pm \frac{v_0}{1 - D_T} \pm \sqrt{\left(\frac{v_0}{D_T - 1}\right)^2 + \frac{D_r + 1}{1 - D_T}} \quad (3.26)$$

beschrieben werden. Diese Lösungen sind um Null symmetrisch, daher ist das Verhalten für positive und negative  $q$  gleich und kann somit durch den Betrag von  $q$  beschrieben werden.

Jede Über- bzw. Unterschreitung der Nullstellen aus Gleichung (3.26) markiert eine Änderung zwischen einem imaginären oder reellen Wurzelterm. Mit den vier Lösungen aus Gleichung (3.26) ergeben sich daraus Intervalle, an deren Grenzen es Übergänge zwischen komplexen und rein reellen  $\lambda$  gibt. Weiter oben wurde bereits betrachtet, welchen Wert  $\lambda$  für  $q = 0$  annimmt. Da dieser Wert für alle Parameter reell ist, sind die Werte für kleine  $|q|$  bis zur ersten Nullstelle der Diskriminante

$$|q_a| = \left| -\frac{v_0}{1 - D_T} + \sqrt{\left(\frac{v_0}{D_T - 1}\right)^2 + \frac{D_r + 1}{1 - D_T}} \right| \quad (3.27)$$

ebenfalls rein reell. Damit wird für  $|q| < |q_a|$  die Diskriminante positiv und der Imaginärteil Null. An der Nullstelle  $q_a$  wechselt das Vorzeichen der Diskriminante, für  $|q_a| < |q| < |q_b|$  wird  $\lambda$  daher komplex. Für  $q_b$  gilt dabei

$$|q_b| = \left| \frac{v_0}{1 - D_T} + \sqrt{\left(\frac{v_0}{D_T - 1}\right)^2 + \frac{D_r + 1}{1 - D_T}} \right|. \quad (3.28)$$

Wird  $|q_b| < |q|$ , wechselt das Vorzeichen der Diskriminante erneut, sodass  $\lambda$  wieder rein reell wird.

Mit den Parameterwerten

$$v_0 = 5, \quad D_T = 0.1 \text{ und } D_r = 0.05 \quad (3.29)$$

gilt für  $|q_a| = 0.104$  und  $|q_b| = 11.215$ . In Abb. 3.1 ist für das Beispiel aus (3.29) die Dispersionsrelation  $\lambda$  gegen  $q$  aufgetragen. Die grün gepunktete Linie und die rot gestrichelte Linie stellen dabei den Imaginärteil der beiden Eigenwerte  $\lambda_+$  und

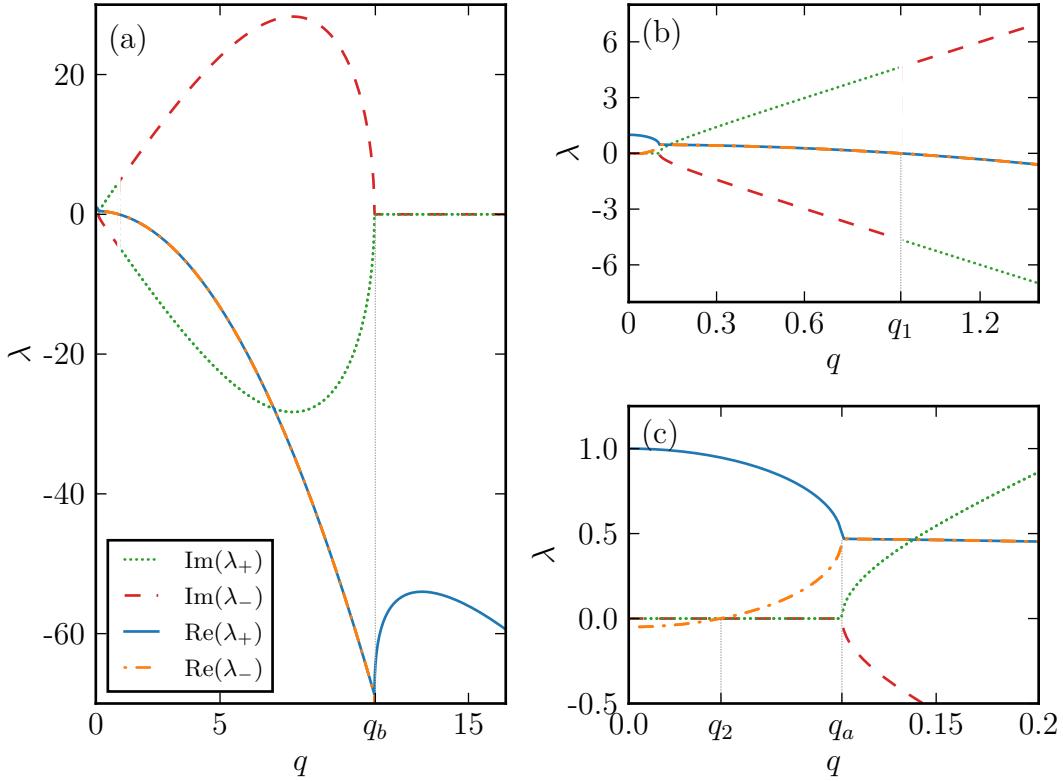


Abbildung 3.1: In Grafik (a) sind Imaginär- und Realteil beider Lösungen der Dispersionsrelation aus Gleichung (3.14) für den Fixpunkt  $\phi_0 = 0$  dargestellt. Dazu ist  $\lambda$  gegen  $q$  aufgetragen. Da die Dispersionsrelation symmetrisch ist, werden nur positive Werte von  $q$  abgebildet. In (b) und (c) sind Ausschnitte der gleichen Grafik dargestellt. Zur Visualisierung werden die Parameter aus Gleichung (3.29) gewählt. Die blaue, durchgezogene Linie entspricht  $\text{Re}(\lambda_+)$ , die gelbe, punkt-gestrichelte Linie  $\text{Re}(\lambda_-)$ . Die Imaginärteile von  $\lambda_+$  und  $\lambda_-$  werden durch die grüne gepunktete sowie die rote, gestrichelte Linie dargestellt. Für große  $q$  sind beide Realteile negativ und kreuzen, wie in (b) zu sehen ist, bei  $q_1 = \pm 0.929$  die Null. Damit ist der Fixpunkt für  $q > q_1$  stabil, nach Gleichung (3.31) ist diese Stabilitätsgrenze  $v_0$ -unabhängig. Die Realteile von  $\lambda$  stimmen im Intervall zwischen  $q_a$  und  $q_b$  überein, da in Gleichung (3.14) die Diskriminante negativ wird und die Wurzel damit imaginär. Für  $q < q_a$  gilt dies nicht mehr, sodass in (c) eine Aufspaltung der beiden Realteile zu erkennen ist.  $\text{Re}(\lambda_-)$  kreuzt bei  $q_2 = \pm 4.477 \times 10^{-2}$  erneut die Null. Der Bereich  $q < q_2$  ist somit nur einfach instabil, während der Bereich  $q_2 < q < q_1$  doppelt instabil ist. Für die Bereiche, in denen die Realteile nicht übereinander liegen, sind beide Imaginärteile Null. Damit haben die Imaginärteile nur zwischen  $q_b = \pm 11.215$  und  $q_a = \pm 0.104$  einen von Null verschiedenen Wert.

$\lambda_-$  dar. An diesen ist zu erkennen, dass der Imaginärteil nur im oben genannten Abschnitt von Null verschieden ist. Die blau durchgezogene Linie und die gelb punkt-gestrichelte Linie beschreiben den Realteil der beiden  $\lambda$ . Diese liegen in den Intervallen mit von Null verschiedenen Imaginärteil übereinander.

In Abb. 3.2(a) und 3.2(b) sind  $q_a$  und  $q_b$  gegen  $v_0$  bzw.  $D_r$  aufgetragen. Als grüne, durchgezogene Linie ist dabei  $q_b$  gegeben, die violette, gestrichelte Linie gibt  $q_a$ . Die schwarz gestrichelte Linie in Abb. 3.2(b) stellt den Verlauf von  $q_a$  gegen  $D_r$  dar, die blaue, durchgezogene den von  $q_b$ . Dabei ist zu erkennen, dass ein Verändern von  $D_r$  eine lineare Änderung der Wellenzahlen  $q_a$  und  $q_b$  bewirkt. Eine Änderung von  $v_0$  erzeugt bei  $q_a$  zunächst ein lineares Abfallen, welches für positive  $v_0$  in eine abfallende Wurzelfunktion übergeht und schließlich gegen Null läuft. Für  $q_b$  hat die Änderung einen gespiegelten Effekt.

Für den Fall eines komplexen  $\lambda$ , also im Intervall  $|q_a| < |q| < |q_b|$ , wird der Realteil von  $\lambda$ , wie in Gleichung (3.14) zu erkennen, nur durch die Spur der Matrix  $A$  bestimmt. Wird unter dieser Bedingung  $\lambda$  gleich Null gesetzt, folgt daraus

$$0 = \frac{1}{2} \left( -q^2 + 1 - D_T q^2 - D_r \right). \quad (3.30)$$

Nach  $q$  aufgelöst ergibt sich daraus der Wert

$$q_1 = \pm \sqrt{\frac{1 - D_r}{1 + D_T}}. \quad (3.31)$$

mit einem von  $v_0$  unabhängigen Nulldurchgang der beiden Eigenwerte. Mit der bereits verwendeten Parameterwahl (3.29) ist damit  $q_1 = \pm 0.929$ . In Abb. 3.1(b) ist der Nulldurchgang der übereinanderliegenden blauen, durchgezogenen und der gelben, punkt-gestrichelten Linie zu sehen. Da hier beide Eigenwerte das Vorzeichen wechseln, wird  $q_1$  als eine Stabilitätsgrenze ausgemacht. Für  $q > q_1$  ist der Fixpunkt stabil, für  $q < q_1$  instabil. Bei Betrachtung der Imaginärteile in Abb. 3.1(b) wird deutlich, dass es sich hier um ein Paar komplex konjugierter Eigenwerte handelt, welche gleichzeitig die imaginäre Achse überqueren. Damit liegt bei  $q_1$  eine Hopf-Bifurkation vor.

Für Werte von  $q$ , die außerhalb des Intervalls  $|q_a| < |q| < |q_b|$  liegen, ist die Diskriminante positiv und  $\lambda$  damit rein reell. Auch für diesen Fall wird  $\lambda$  gleich Null gesetzt und untersucht, wie das entsprechende  $q$  von den anderen Parametern abhängt. In diesem Fall ist relevant, dass Gleichung (3.14) zwei Lösungen hat. Für die negative Lösung ist aus dieser Gleichung schnell zu erkennen, dass  $\lambda$  Null wird,

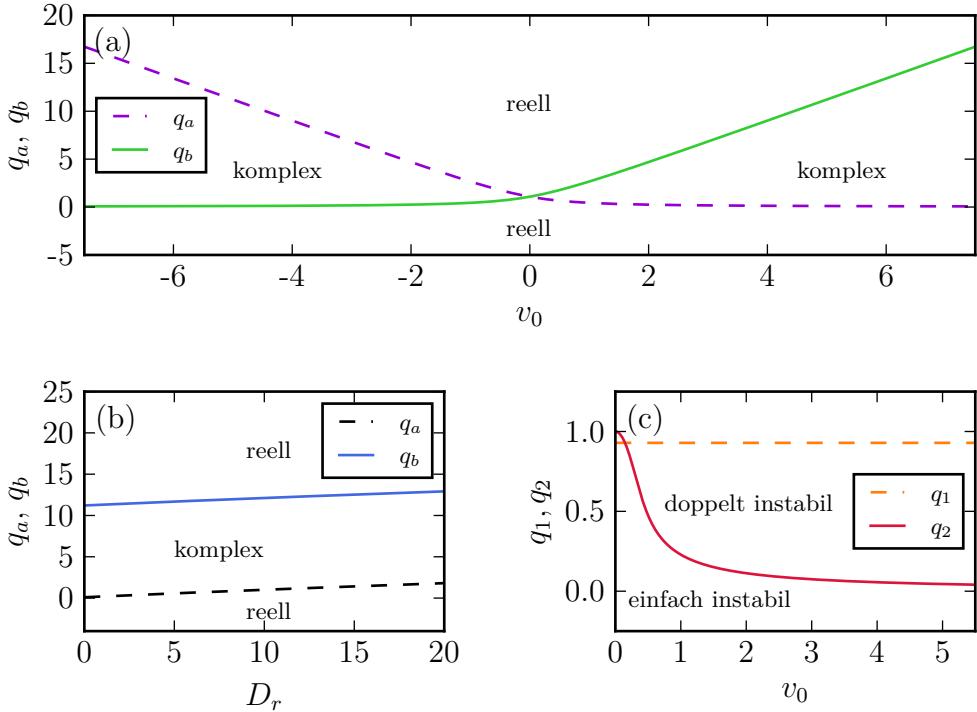


Abbildung 3.2: Die Grafik zeigt, wie  $q_a$ ,  $q_b$  und  $q_2$  sich in Abhängigkeit von  $v_0$  bzw.  $D_r$  verhalten. In (a) und (b) dargestellt sind die Intervallgrenzen  $q_a$  und  $q_b$  des komplexen Bereichs der Eigenwerte. Es treten nur im Intervall  $|q_a| < |q| < |q_b|$  komplexe Eigenwerte auf. Diese Grenzen sind in Abhängigkeit der Parameter  $v_0$  und  $D_r$  aufgetragen. Die grüne, durchgezogene und die violette, gestrichelte Linie in (a) entsprechen  $q_b$  und  $q_a$ . Der Verlauf von  $q_a$  und  $q_b$  ist dabei gespiegelt. Um die Null herum entsteht bei beiden eine Änderung der Steigung, damit wird durch eine Änderung von  $v_0$  die Größe des komplexen Intervalls verändert. Ohne Kopplung existiert kein komplexer Eigenwert, da  $q_a$  und  $q_b$  sich bei  $v_0 = 0$  kreuzen. In (b) sind  $q_a$  und  $q_b$  gegen  $D_r$  aufgetragen. Die blaue, durchgezogene Linie entspricht  $q_b$ , die schwarze, gestrichelte Linie  $q_a$ . Dabei ist ein linearer Zusammenhang zu erkennen. Bei einer Änderung von  $D_r$  ändert sich die Größe des komplexen Intervalls nicht, es verschiebt sich lediglich. Zur Verdeutlichung der Intervalle ist in den Abbildungen beschriftet, welche Parameterbereiche komplex und welche reell sind. (c) Mit einer durchgezogenen Linie abgebildet ist die positive reelle Lösung aus Gleichung (3.35) für die Nullstelle von  $\text{Re}(\lambda_-)$ , welche gegen  $v_0$  aufgetragen ist. Da die Lösung um die Null symmetrisch ist, ist nur  $v_0 > 0$  gezeigt. Zum Vergleich ist mit der gelben, gestrichelten Linie  $q_1$  aufgetragen, welches mit  $v_0$  unverändert bleibt.  $q_2$  nähert sich für größer werdende  $v_0$  der Null an. Da  $q_2$  die Stelle bezeichnet, an welcher der negative Eigenwert das Vorzeichen wechselt, liegt hier eine Stabilitätsgrenze. Für  $q < q_2$  ändert sich die Stabilität von doppelt instabil zu einfach instabil. Die entsprechenden Bereiche sind in der Abbildung eingetragen.

wenn die Determinante Null ist. Aus  $\det(A) = 0$  ergibt sich

$$-v_0^2 q^2 = (1 - q^2)(-D_T q^2 - D_r). \quad (3.32)$$

Um obige Gleichung nach  $q$  umzustellen, wird  $u = q^2$  substituiert:

$$u^2 = u\left(1 - \frac{v_0^2}{D_T} - \frac{D_r}{D_T}\right) + \frac{D_r}{D_T} \quad (3.33)$$

$$\Rightarrow u_{\pm} = -\frac{1}{2} \left( \frac{v_0^2 + D_r}{D_T} - 1 \right) \pm \sqrt{\frac{1}{4} \left( \frac{v_0^2 + D_r}{D_T} - 1 \right)^2 + \frac{D_r}{D_T}}. \quad (3.34)$$

Durch Resubstitution ergeben sich dadurch die vier Lösungen

$$q_{2,3}^{\pm} = \pm\sqrt{u_{1,2}}. \quad (3.35)$$

Mit der Parameterwahl (3.29) wird  $u_2$  negativ, sodass zwei der vier Lösungen von  $q$  imaginär werden. Die beiden reellen Lösungen betragen

$$\pm q_2 = \pm 4.477 \times 10^{-2}.$$

Da hier nur einer der beiden Eigenwerte das Vorzeichen wechselt, bleibt der Fixpunkt auch für  $q < q_2$  instabil. Dadurch, dass einer der Eigenwerte negativ wird, wechselt die Stabilität allerdings von doppelt instabil zu einfach instabil. Die Nullstellen von  $\lambda_-$  sind in Abb. 3.1(c) auf der gelben, punkt-gestrichelten Linie zu sehen, welche im Bereich  $q < q_a$  von der blauen, durchgezogenen Linie abweicht. Weiterhin ist das Verhalten der beiden Nullstellen bei einer Änderung von  $v_0$  in Abb. 3.2(c) dargestellt. Dazu sind die beiden Lösungen gegen  $v_0$  aufgetragen. Die rote, durchgezogene Linie entspricht der positiven Lösung, die gelbe, gestrichelte der negativen. Zu erkennen ist, dass das Intervall zwischen beiden Nullstellen mit steigendem  $v_0$  immer kleiner wird. Damit geht auch  $q_2$  für große  $v_0$  gegen Null, wodurch der einfach instabile Bereich für ausreichend große  $v_0$  verschwindet.

Für die Lösung von Gleichung (3.14) mit positivem Vorzeichen vor der Wurzel wird die Rechnung, um sie übersichtlicher zu gestalten, zunächst wieder mit den Matrixelementen  $a$ ,  $b$ ,  $c$ , und  $d$  durchgeführt. Damit wird

$$\lambda_+ = 0 = \frac{1}{2} \left( a + d + \sqrt{(a + d)^2 - 4(ad - bc)} \right), \quad (3.36a)$$

$$\text{bzw. } 0 = a + d + \sqrt{(a - d)^2 + 4bc}. \quad (3.36b)$$

Nach Einsetzen der Matrixelemente entsteht daraus

$$q^2(1 + D_T) + D_r - 1 = \sqrt{(q^2(D_T - 1) + D_r + 1)^2 - 4v_0^2q^2}. \quad (3.37)$$

Unter der Voraussetzung, dass der Wurzelterm reell ist, wird die rechte Seite der Gleichung positiv. Damit die Gleichung erfüllt ist, muss also auch die linke Seite positiv werden. Deshalb wird die linke Seite von Gleichung (3.37) Null gesetzt und nach  $q$  umgestellt. Damit die linke Seite der Gleichung positiv wird, muss für  $q$  also gelten, dass

$$|q_1| > \sqrt{\frac{1 - D_r}{1 + D_T}}. \quad (3.38)$$

Wie für Gleichung (3.31) erläutert, ist  $q_1$  der Grenzwert für einen nicht verschwindenden Imaginärteil. Damit wird der hier betrachtete Fall, dass der Wurzelterm rein reell ist, nicht mehr erfüllt. Daraus folgt, dass es innerhalb der hier untersuchten Intervalle, nämlich  $|q| < |q_a|$  und  $|q| > |q_b|$ , kein  $q$  gibt, für das  $\lambda_+ = 0$  gilt.

Der Fixpunkt  $\phi_0 = 0$  verhält sich damit komplizierter als die zuvor untersuchten Fixpunkte  $\phi_0 = \pm 1$ . Abhängig von der Wellenzahl  $q$  der Störung verändert sich die Stabilität. Für kleine  $q$  zeigt der Fixpunkt ein instabiles Verhalten, dabei ist zwischen einem einfach und einem doppelt instabilen Intervall zu unterscheiden. Für  $q < q_2$  ist der Fixpunkt einfach instabil, für  $q_2 < q < q_1$  doppelt instabil. Mit Überschreiten der durch eine Hopf-Bifurkation gegebenen Stabilitätsgrenze  $q > q_1$  wird der Fixpunkt stabil. Diese Grenze ist unabhängig von der Stärke der Kopplung, hängt jedoch von der Wahl der Diffusionskonstanten  $D_r$  und  $D_T$  ab.

## 4 Kontinuierung mit *auto07p*

### 4.1 Anwendung auf das Allen-Cahn-Modell

Die in Abschnitt 2.2.1 vorgestellte Kontinuierung wird mit dem Programm *auto07p* durchgeführt [24, 27]. Um das aktive Allen-Cahn-Modell mit *auto07p* untersuchen zu können, muss dieses in ein System aus gewöhnlichen Differentialgleichungen umgeschrieben werden. Da bewegte Zustände beschrieben werden sollen, wird zuvor eine Transformation in ein mitbewegtes Bezugssystem vorgenommen. Die dafür verwendete Transformation lautet

$$\phi(x, t) \rightarrow \phi(\xi) \quad (4.1)$$

mit der neu eingeführten, dimensionslosen Variable  $\xi = \frac{x-ct}{L}$ . Die zeitliche sowie die räumliche Ableitung werden dadurch zu

$$\partial_t \rightarrow -\frac{c}{L} \partial_\xi \quad \text{und} \quad \partial_x \rightarrow \frac{1}{L} \partial_\xi \quad (4.2)$$

transformiert. Die Konstante  $c$  beschreibt die Geschwindigkeitsdifferenz, mit der sich das mitbewegte System im Vergleich zum starren Bezugssystem verhält. Die Systemgröße  $L$  wird eingeführt, um das System zu entdimensionalisieren. Dies ist nötig, da *auto07p* auf einem dimensionslosen Intervall von 0 bis 1 rechnet, welches durch die Systemgröße  $L$  entsprechend skaliert wird. Die beschriebene Transformation wird in Gleichung (3.1) eingesetzt. Werden alle Terme auf die rechte Seite gebracht, ergibt sich daraus das transformierte System

$$0 = \frac{1}{L^2} \partial_{\xi\xi} \phi - \phi^3 + \phi + \frac{v_0}{L} \partial_\xi P + \frac{c}{L} \partial_\xi \phi - \mu \quad (4.3a)$$

$$0 = \frac{D_T}{L^2} \partial_{\xi\xi} P - D_r P + \frac{v_0}{L} \partial_\xi \phi + \frac{c}{L} \partial_\xi P. \quad (4.3b)$$

Um ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen zu erhalten, werden die neuen

Variablen

$$U_1 = \phi, \quad (4.4a)$$

$$U_2 = \frac{1}{L} \partial_\xi \phi, \quad (4.4b)$$

$$U_3 = P, \quad (4.4c)$$

$$\text{und } U_4 = \frac{1}{L} \partial_\xi P. \quad (4.4d)$$

eingeführt. Die vier Variablen werden in Gleichung (4.3) eingesetzt und das System aus gewöhnlichen Differentialgleichungen

$$\partial_\xi U_1 = L U_2 \quad (4.5a)$$

$$\partial_\xi U_2 = L (U_1^3 - U_1 - v_0 U_4 - c U_2 + \mu) \quad (4.5b)$$

$$\partial_\xi U_3 = L U_4 \quad (4.5c)$$

$$\partial_\xi U_4 = \frac{L}{D_T} (D_r U_3 - v_0 U_2 - c U_4) \quad (4.5d)$$

erhalten, welches in *auto07p* implementiert wird. Zusätzlich werden periodische Randbedingungen der Form

$$U_i(0) = U_i(1) \quad (4.6)$$

mit  $i = 1, 2, 3, 4$  verwendet. Die Translationssymmetrie der Lösungen wird durch eine integrale Nebenbedingung gebrochen [27].

Für die Zahl  $N$  der Kontinuierungsparameter in *auto07p* gilt  $N = N_{\text{BC}} + N_{\text{INT}} - N_{\text{DIM}} + 1$ . Dabei ist  $N_{\text{BC}}$  die Anzahl der Randbedingungen,  $N_{\text{INT}}$  die Anzahl der integralen Nebenbedingungen und  $N_{\text{DIM}}$  die Anzahl der Dimensionen des Modells, womit für die Anzahl der Kontinuierungsparameter  $N = 2$  erhalten wird. Bei jeder in *auto07p* gestarteten Rechnung werden deshalb jeweils zwei Parameter spezifiziert, in denen kontinuiert wird.

Um einen Ausgangspunkt für die Kontinuierung zu finden, wird die linearisierte homogene Lösung mit der kritischen Wellenzahl gestört. Dazu wird  $v_0 = 0$  sowie  $c = 0$  gewählt. So entstehen die Differentialgleichungen

$$\partial_t \phi = \frac{1}{L^2} \partial_{\xi\xi} \phi + \phi - \phi^3 - \mu \quad (4.7a)$$

$$\partial_t P = \frac{D_T}{L^2} \partial_{xx} P - D_r P. \quad (4.7b)$$

Das chemische Potential  $\mu$  wird festgelegt durch die Wahl von  $\phi_0$ . Wird ein homogener, stationärer Zustand betrachtet, entsteht die Bedingung

$$\phi_0 - \phi_0^3 - \mu = 0, \quad (4.8)$$

aus welcher zu einem gegebenen  $\phi_0$  das zugehörige  $\mu$  abgeleitet werden kann. Werden die Gleichungen (Gleichung (4.7)) im Anschluss linearisiert und  $\phi_0$  dabei in Abhängigkeit von  $\mu$  notiert, lautet Gleichung (4.7a)

$$\partial_t \phi = \frac{1}{L^2} \partial_{\xi\xi} \phi + \phi - 3\phi_0(\mu)^2. \quad (4.9)$$

Das linearisierte System wird nun mit dem Ansatz

$$\vec{u} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{\lambda t - iq\xi} \quad (4.10)$$

gelöst, womit die Gleichung

$$\lambda = -\frac{q^2}{L^2} + 1 - 3\phi_0^2 \quad (4.11)$$

erhalten wird. Um den von der homogenen Lösung abgehenden Ast zu erreichen, wird durch die Bedingung  $\lambda = 0$  der Punkt gesucht, an dem sich die Stabilität der Lösungen ändert. Dies entspricht dem Punkt, an dem der Ast der lokalisierten Lösungen vom Ast der homogenen Lösungen abzweigt. Deshalb wird dieser als Startpunkt genutzt. Das zu diesem Punkt gehörende  $L$  wird dadurch ermittelt, dass Gleichung (4.11) Null gesetzt und nach  $L$  umgestellt wird. Damit ergibt sich

$$L = \frac{q}{\sqrt{1 - 3\phi_0^2}}. \quad (4.12)$$

Die Frequenz  $q$  aus dieser Gleichung ist die kritische Wellenzahl und hängt über den Ausdruck

$$q = \frac{2\pi n}{L_\xi} \quad (4.13)$$

mit der Systemgröße  $L_\xi$  von *auto07p* zusammen, für die  $L_\xi = 1$  gilt. Wird die erste

Mode ( $n = 1$ ) betrachtet, ergibt sich so die kritische Systemgröße

$$L = \frac{2\pi}{\sqrt{1 - 3\phi_0^2}}. \quad (4.14)$$

Damit der lokalisierte Zustand entstehen kann, wird auf den homogenen Zustand  $\phi_0$  eine Störung in Form eines Sinus mit einer kleinen Amplitude addiert. Diese hat die Frequenz  $q$ , damit die periodischen Randbedingungen eingehalten werden. Der Anfangswert, bei welchem der lokalisierte Ast anregt werden kann, lautet damit

$$\phi = \phi_0 + 0.001 \sin(q\xi). \quad (4.15)$$

Als Lösungsmaß wird für die Kontinuierung die  $L_2$ -Norm verwendet. Diese kann sowohl aus allen  $U_k$  mit  $k = 1, 2, 3, 4$  gebildet werden als auch nur aus  $U_1$ .  $L_2(U_k)$  ist definiert durch

$$L_2(U_k) = \sqrt{\int_0^1 \sum_{k=1}^{N_{\text{DIM}}} U_k(x)^2 dx}, \quad (4.16)$$

und wird für die Kontinuierung in  $L$  als Lösungsmaß verwendet. Für die Kontinuierung in  $v_0$  wird dagegen die  $L_2$ -Norm von  $U_1$  als Lösungsmaß gebraucht. Diese ist definiert durch

$$L_2(U_1) = \sqrt{\int_0^1 U_1(x)^2 dx}. \quad (4.17)$$

Das Einsetzen der Bewegung wird in der Kontinuierung in  $v_0$  durch die Bedingung

$$||\partial_x P|| - ||\partial_x \phi|| = 0 \quad (4.18)$$

markiert [28], welche als Lösungsmaß der Routine in *auto07p* definiert wird. Wechselt das Maß das Vorzeichen, so kann von diesem Bifurkationspunkt auf den Ast der bewegten Lösungen gewechselt werden.

## 4.2 Kontinuierung mit $\mu = 0$

Zunächst werden die Parameter aus Abschnitt 3.4 zum Starten der Kontinuierung verwendet. Es wird in der Systemgröße mit  $v_0 = 0$  und  $\mu = 0$  kontinuiert, als Startwert wird  $L = 2\pi$  gewählt. Damit gilt  $\phi_0 = 0$ . Als Anfangswert wird nach Gleichung (4.15)

$$\phi = 0.001 \sin(2\pi\xi) \quad (4.19)$$

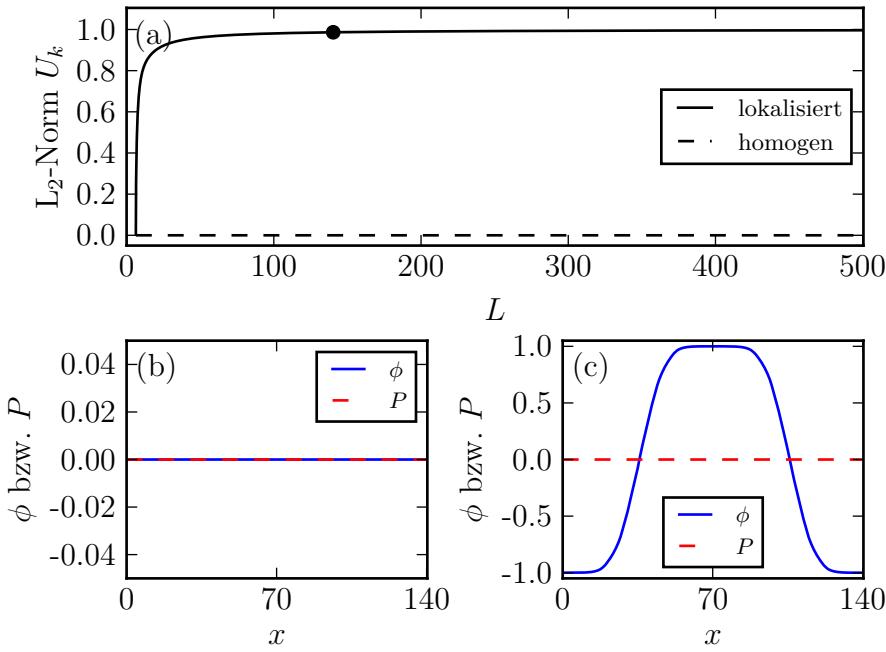


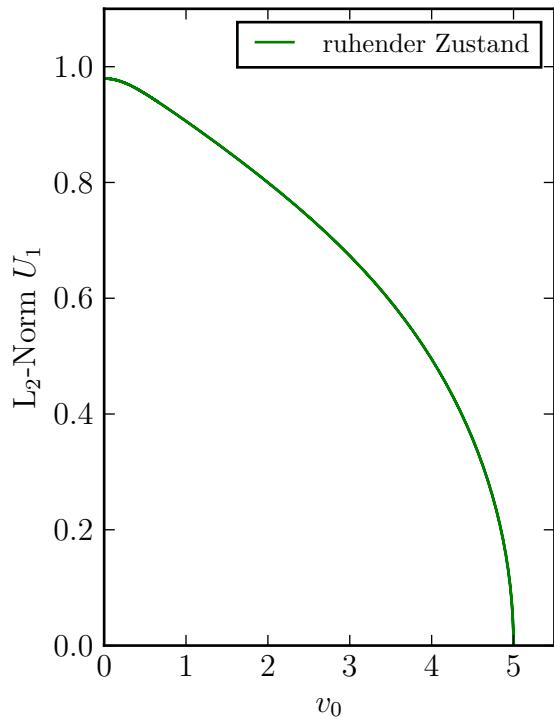
Abbildung 4.1: (a) Abgebildet ist die Kontinuierung in der Systemgröße  $L$  bei  $v_0 = 0$  für  $\mu = 0$ . Dafür ist die Systemgröße gegen die  $L_2$ -Norm aufgetragen, welche in Gleichung (4.16) definiert ist. Die durchgezogene Linie ist der Ast der lokalisierten Lösungen, die gestrichelte Linie der Ast der homogenen Lösungen. Die Kontinuierung des Astes der lokalisierten Lösungen startet bei  $L = 2\pi$  und läuft bis  $L = 500$ . Der schwarze Punkt markiert die Systemgröße, mit der die nächste Rechnung durchgeführt wird. In (b) ist die Lösung des homogenen Astes abgebildet, es gilt  $\phi = P = 0$ . (c) zeigt die Lösung des lokalisierter Ast bei der in (a) markierten Systemgröße. Da  $v_0 = 0$  ist, gilt für die Polarisation sowohl in (b) als auch in (c)  $P = 0$ .

gewählt, als Lösungsmaß wird die  $L_2$ -Norm  $L_2(U_k)$  verwendet.

#### 4.2.1 Kontinuierung in der Systemgröße

Die erste Rechnung ist eine Kontinuierung in der Systemgröße. In Abb. 4.1(a) ist diese Kontinuierung abgebildet. Die gestrichelte Linie stellt den Ast der homogenen Lösungen dar, die durchgezogene den der lokalisierten. Die Norm steigt während der Kontinuierung des Ast der lokalisierten Lösungen zuerst schnell stark an, in diesem Bereich werden die lokalisierten Zustände ausgebildet. Für große  $L$  ändert sich die Norm nur sehr schwach. In Abb. 4.1(b) und (c) sind zwei Lösungen abgebildet. Die homogene Lösung in (b) weist keine Strukturen auf, diese sind in (c) bei einer Systemgröße von  $L = 140.34$  bereits deutlich zu erkennen. Da bei

Abbildung 4.2: Abgebildet ist die Kontinuierung in der Kopplungskonstante mit positiven  $v_0$ . Dazu ist der Ast der ruhenden Lösungen aufgetragen. Ein Ast der bewegten Zustände lässt sich in *auto07p* nicht bestimmen. Es fällt auf, dass der Ast der ruhenden Lösungen bei  $v_0 = 5$  endet. Dies ist auf die Wahl der Systemgröße zurückzuführen, welche nach Gleichung (4.12) passend zu  $q_2(v_0 = 5)$  gewählt wurde.



dieser Kontinuierung  $v_0 = 0$  gilt und der Anfangswert  $P = 0$  ist, ist bei beiden Lösungen keine Polarisation vorhanden.

### 4.2.2 Kontinuierung in $v_0$

Als Startpunkt für die nächste Rechnung wird die Systemgröße, die zur in Abschnitt 3.4 bestimmten Wellenzahl  $q_2(v_0 = 5)$  gehört, gewählt. Für die Systemgröße ergibt sich nach Gleichung (4.12) somit  $L = 140.34$ . Mit diesem  $L$  wird in der Kopplungskonstante  $v_0$  kontinuiert. Diese Rechnung ist in Abb. 4.2 mit dem Lösungsmaß aus Gleichung (4.17) abgebildet. Der Ast der ruhenden Lösungen endet bei  $v_0 = 5$ , dies wird durch die Wahl von  $L$  begründet und bestätigt die Berechnung des Bifurkationspunktes  $q_2$  aus Abschnitt 3.4. Anschließend wird versucht, anhand der Bedingung zum Einsetzen der Bewegung aus Gleichung (4.18) den Ast der bewegten Zustände zu erreichen. Obwohl die Bedingung erfüllt ist, gelingt es nicht, auf den Ast bewegter Lösungen zu wechseln.

## 4.3 Kontinuierung mit $\mu \neq 0$

Um das Einsetzen der Bewegung in *auto07p* zu berechnen, wird abweichend von Abschnitt 3.4  $\mu \neq 0$  gewählt. Dazu muss nach Gleichung (4.8) auch  $\phi_0 \neq 0$  sein.

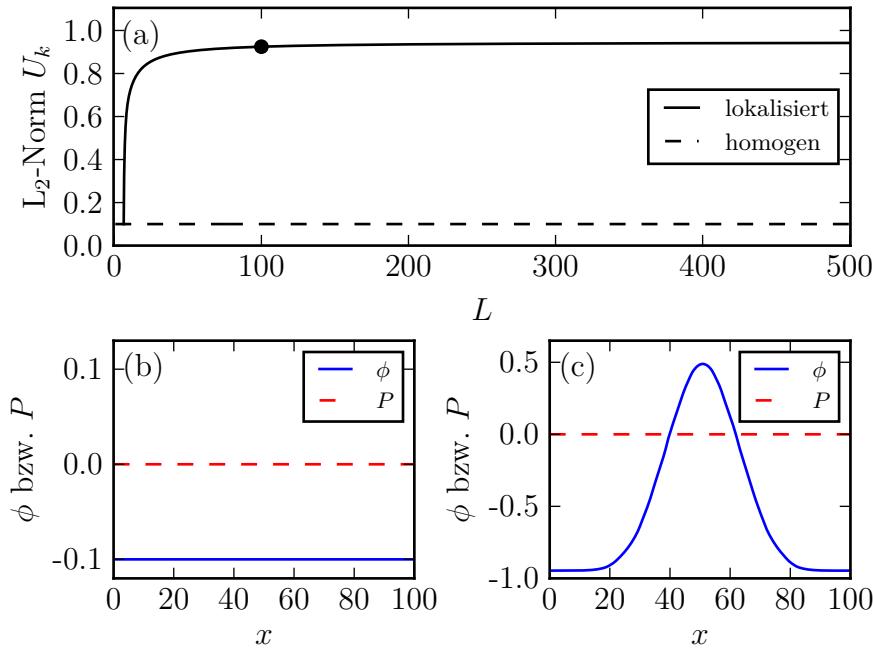


Abbildung 4.3: (a) Abgebildet ist die Kontinuierung in der Systemgröße  $L$  bei  $v_0 = 0$  für  $\mu = 0.099$ . Dafür ist die Systemgröße gegen die L<sub>2</sub>-Norm aufgetragen, welche in Gleichung (4.16) definiert ist. Die durchgezogene Linie ist der Ast der lokalisierteren Lösungen, die gestrichelte Linie der Ast der homogenen Lösungen. Die Kontinuierung des Astes der lokalisierteren Lösungen startet bei  $L = 6.3796$  und läuft bis  $L = 500$ . In der Abbildung ist mit einem schwarzen Punkt die Systemgröße  $L = 100$  markiert, mit dieser Systemgröße werden die weiteren Rechnungen durchgeführt. In (b) ist die Lösung des homogenen Ast dargestellt, in (c) die lokale Lösung bei der markierten Systemgröße  $L = 100$ .

Damit wird das chemische Potential aus Gleichung (3.1) nun als von Null verschiedenen betrachtet. Der konstante Term in der ersten Gleichung des Systems hat ein Verkippen des Potentials zur Folge, da der konstante Term durch die Integration linear wird und somit die Minima gegeneinander verschiebt. Dieses Vorgehen ist notwendig, um das Einsetzen der Bewegung in *auto07p* zu detektieren. Die Parameter werden wie in Abschnitt 4.2 definiert, abweichend davon wird nur  $\phi_0 = 0.1$  gewählt. Für den Anfangswert  $\phi$  ergibt sich damit nach Gleichung (4.15)

$$\phi = 0.1 + 0.001 \sin(2\pi\xi) \quad (4.20)$$

und mit Gleichung (4.14)  $L = 6.3796$ , für das chemische Potential gilt mit Gleichung (4.8) somit  $\mu = 0.099$ .

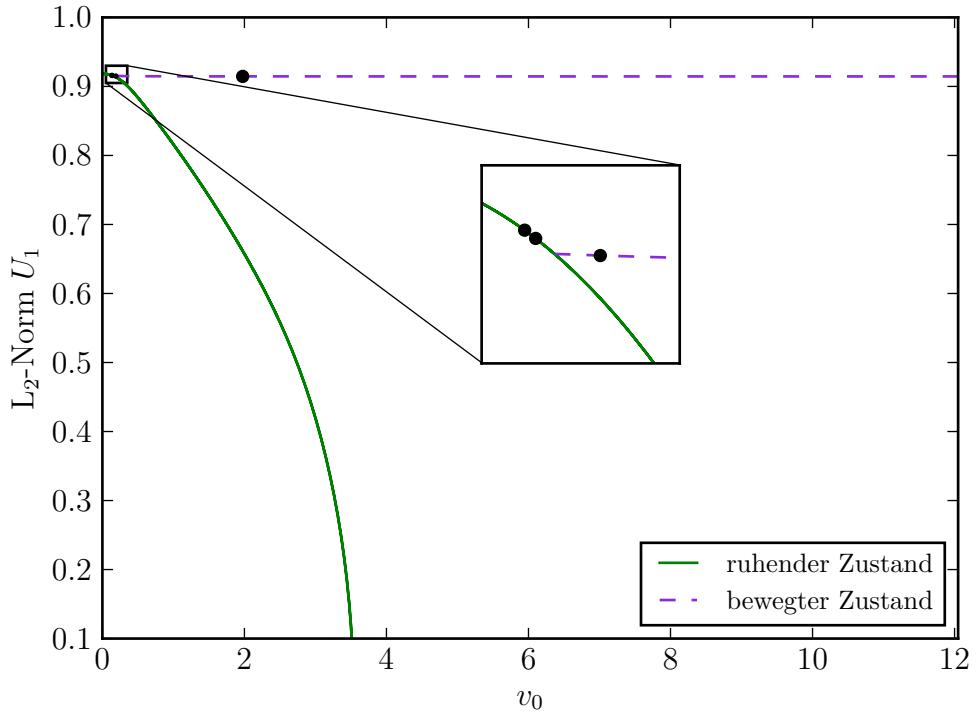


Abbildung 4.4: Abgebildet ist die Kontinuierung in der Kopplungskonstante  $v_0$ . Dafür ist  $v_0$  gegen die  $L_2$ -Norm  $U(1)$  aufgetragen, welche in Gleichung (4.17) definiert ist. Da sich das System symmetrisch für  $v_0$  verhält, ist nur der Teil mit positiver Kopplungskonstante abgebildet. Die schnell abfallende, grüne, durchgezogene Linie ist der ruhende Zustand, die langsam abfallende, violette, gestrichelte Linie stellt den bewegten Zustand dar. Die schwarzen Punkte stellen die  $v_0$  dar, die später in der direkten Numerik (in Kapitel 5) untersucht werden.

### 4.3.1 Kontinuierung in der Systemgröße

Zunächst wird wieder in der Systemgröße kontinuiert. Dafür wird als freier Kontinuierungsparameter die Systemgröße  $L$  verwendet, als zweiter Parameter die Geschwindigkeit des mitbewegten Bezugssystems  $c$ . Das Ergebnis der Kontinuierung ist in Abb. 4.3(a) dargestellt. Dabei ist die  $L_2$ -Norm der  $U_k$  ( $k = 1, 2, 3, 4$ ) aus Gleichung (4.16) gegen die Systemgröße  $L$  aufgetragen. Der homogene Zustand ist in der Abbildung als gestrichelte Linie dargestellt, der abzweigende lokaliserte Zustand als durchgezogene Linie. Vom homogenen Zustand startend steigt die Norm zunächst stark an, mit steigender Systemgröße flacht die Steigung immer mehr ab, bis die Norm nahezu konstant bleibt. Das ist drauf zurückzuführen, dass

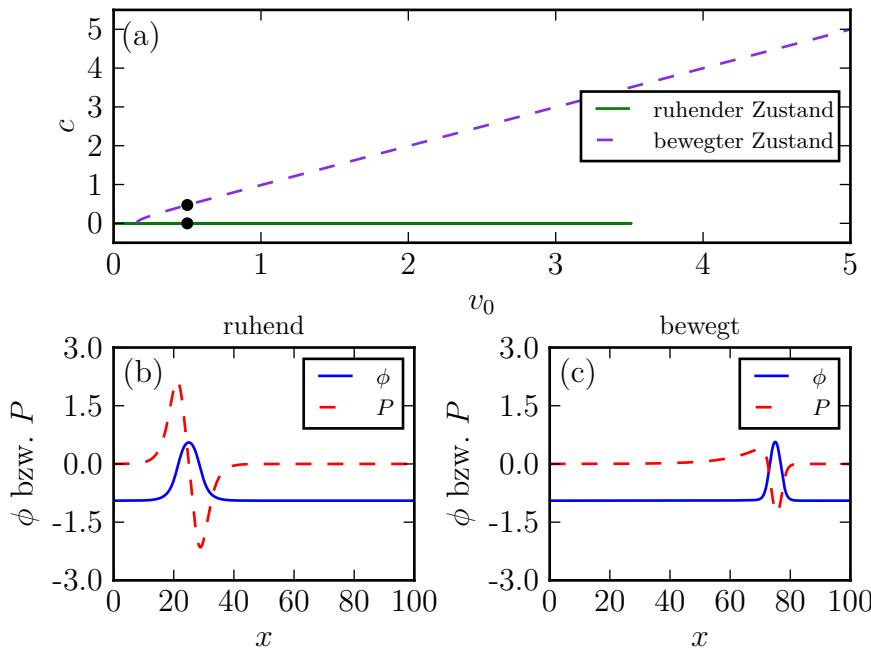


Abbildung 4.5: (a) Abgebildet ist die Kontinuierung aus Abb. 4.4, hier ist jedoch die Geschwindigkeit  $c$  gegen  $v_0$  aufgetragen. Die grüne, durchgezogene Linie entspricht den ruhenden lokalisierten Zuständen, die violette, gestrichelte den bewegten Zuständen. Der Ast der bewegten Lösungen steigt linear mit  $v_0$  an. An der Stelle, an der der violette Ast vom grünen Ast abzweigt, setzt die Bewegung des lokalisierten Zustands ein. In (b) und (c) sind eine ruhende und eine bewegte Lösung abgebildet. Die blaue, durchgezogene Linie ist  $\phi$ , die rote, gestrichelte  $P$ . Beide Lösungen liegen bei  $v_0 = 5$ , die Punkte der Lösungsästen sind in (a) schwarz markiert.

vom homogenen Zustand ausgehend mit der Kontinuierung in  $L$  zunächst schnell ein lokalisierter Zustand angenommen wird, welcher sich für große  $L$  nicht mehr stark verändert. Für weitere Rechnungen wird  $L = 100$  gewählt, der entsprechende Punkt ist in Abb. 4.3 markiert.

### 4.3.2 Kontinuierung in $v_0$

Von der Lösung bei  $L = 100$  ausgehend, wird nun als freier Kontinuierungspараметer  $v_0$  gewählt. Der zweite Parameter ist auch hier die Geschwindigkeit  $c$ . Ausgehend von  $v_0 = 0$  wird nun  $v_0$  variiert und der Lösungsast untersucht. Auf diesem Ast bleibt  $c$  zunächst Null, es handelt sich daher um ruhende Zustände. Dabei ergibt sich die in Abb. 4.4 dargestellte grüne, durchgezogene Linie.

Im Gegensatz zu Abb. 4.3 ist hier nur die  $L_2$ -Norm von  $U_1$  gegen die Kopplung  $v_0$  dargestellt. Die Norm aus Gleichung (4.17) ist in Abb. 4.4 gegen  $v_0$  aufgetragen. Vom Lösungsast der ruhenden Zustände ausgehend, wird nun der Punkt gesucht, an dem der Ast bewegter Lösungen abzweigt. Dieser wird nach Gleichung (4.18) durch einen Vorzeichenwechsel markiert. Am Punkt des Vorzeichenwechsels wird zum Auffinden der Lösung erneut eine Kontinuierung in  $v_0$  gestartet, dabei wird ein Astwechsel vorgenommen. In der Kontinuierung mit  $\mu \neq 0$  konnte der Ast bewegter Lösungen gefunden werden. In Abb. 4.5 ist der Ast bewegter Lösungen violett und gestrichelt dargestellt, dazu ist die Geschwindigkeit  $c$  gegen  $v_0$  aufgetragen. In dieser Darstellung ist ein linearer Zusammenhang zwischen  $c$  und  $v_0$  zu erkennen. Da die grüne Linie für große  $v_0$  verschwindet, kann es ab einer gewissen Stärke der Kopplung nur noch bewegte lokalisierte Zustände sowie homogene Zustände geben. Diese sind in Abb. 4.4 und 4.5 jedoch nicht eingetragen, da die Geschwindigkeit  $c$  für diese Zustände nicht definiert ist.

## 5 Zeitsimulation in der direkten Numerik

Mit *auto07p* wurden mehrere Lösungssäste im mitbewegten System untersucht. In diesem Abschnitt soll nun für verschiedene solcher Lösungen die direkte Zeitsimulation im ruhenden System betrachtet werden. Die Implementierung erfolgt in Python. Die Zeitsimulation verwendet dabei das in Abschnitt 2.2.2 vorgestellte Runge-Kutta-4-Verfahren, sowie zur Bestimmung der räumlichen Ableitungen das in Abschnitt 2.2.3 vorgestellte Pseudospektralverfahren. Für die Fouriertransformationen gibt es in Python eine Bibliothek mit Routinen, aus welcher die *fast fourier transformation* (FFT) verwendet wird.

Mit der Zeitsimulation werden für verschiedene  $v_0$  sowohl ruhende als auch bewegte Zustände untersucht. Dafür werden zwei Lösungen auf dem ruhenden Ast und zwei Lösungen auf dem bewegten Ast betrachtet. Als Anfangswert werden dabei mit dem Matlab-Paket pde2path bestimmte Lösungen verwendet, da die so bestimmten Lösungen im Gegensatz zu den Lösungen aus *auto07p* äquidistante Werte besitzen, welche für die Zeitsimulation benötigt werden. Die verwendeten Lösungen besitzen die gleichen Parametereinstellungen und haben die gleiche Struktur.  $D_T$  und  $D_r$  haben die aus (3.29) bekannten Werte,  $v_0$  dagegen wird für die verschiedenen Rechnungen variiert.

### 5.1 Ruhende Zustände

Im Rahmen der direkten Numerik werden zwei stationäre Zustände untersucht. Diese unterscheiden sich durch die Werte von  $v_0$ , welche

$$v_0 = 0.13257 \text{ und } v_0 = 0.14090$$

betragen. Beide untersuchten Zustände verharren in der Zeitsimulation wie erwartet auf der Stelle. Die Zustände verlieren bei einer ausreichend langen Laufzeit (ca.  $t = 10$ ) ihre Stationarität, was jedoch nicht auf einen physikalischen Effekt zurückzuführen ist, sondern auf die numerischen Ungenauigkeiten. Diese entstehen bei der Verwendung des Runge-Kutta-Verfahrens, welches wie in Abschnitt 2.2.2

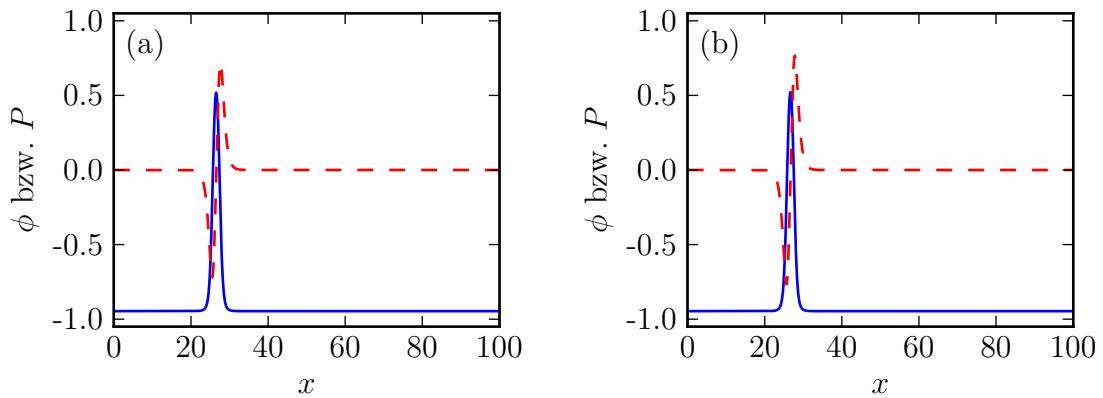


Abbildung 5.1: Dargestellt sind die Anfangswerte, die in die Zeitsimulation eingelesen werden zum Zeitpunkt  $t = 0$ . Die blaue, durchgezogene Linie ist das Feld  $\phi$ , die rote, gestrichelte Linie ist die Polarisation  $P$ . Abb. (a) stellt  $v_0 = 0.13257$  dar, auf Abb. (b) ist  $v_0 = 0.14090$  abgebildet. Da es sich hier um ruhende Zustände handelt, ändern sich die Zustände mit der Zeit zunächst nicht, sodass die folgenden Bilder der Simulation für  $t > 0$  den dargestellten entsprechen.

erläutert bei jedem Zeitschritt eine Näherung trifft. Über viele Zeitschritte hinweg summieren die Fehler der Näherung sich auf, bis der Zustand nicht mehr stabil ist. Die beiden betrachteten Zustände sind in Abb. 5.1 abgebildet. Auf der  $x$ -Achse ist der Ort  $x$  aufgetragen, auf der  $y$ -Achse das Feld  $\phi$  bzw. die Polarisation  $P$ . Die blaue, durchgezogene Linie stellt  $\phi$  dar, die rote, gestrichelte Linie  $P$ .

## 5.2 Bewegte Zustände

Auch die bewegten Zustände werden anhand zwei verschiedener Werte von  $v_0$ ,

$$v_0 = 0.18987 \text{ und } v_0 = 1.97503,$$

untersucht. Wie bei den ruhenden Zuständen zerlaufen auch diese etwa ab  $t = 10$ . Die Zustände zu den beiden oben genannten Werten von  $v_0$  sind in Abb. 5.2 abgebildet. Dort ist zu erkennen, dass die Zustände sich mit einer konstanten Geschwindigkeit  $c$  nach rechts bewegen, dies allerdings mit einer deutlich unterschiedlichen Geschwindigkeit. Um diese Geschwindigkeit zu bestimmen, wird auf der abfallenden Flanke ein Wert von ungefähr  $\phi = -0.75$  gewählt und zu jedem ausgegebenen Zeitschritt die zugehörige Systemgröße ermittelt. Da die Geschwindigkeit konstant

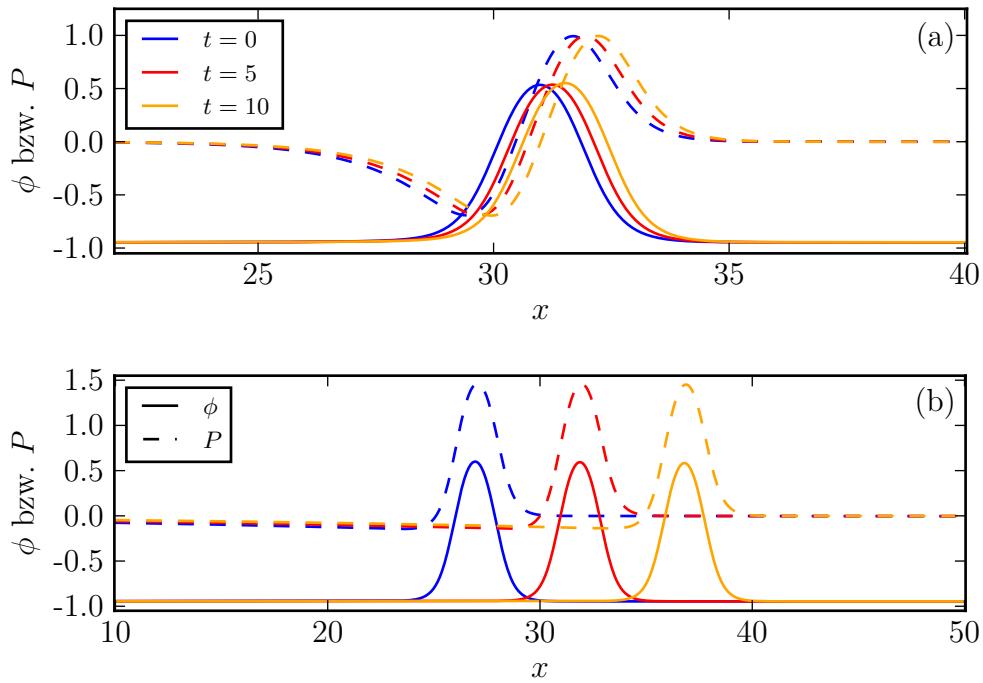


Abbildung 5.2: Der bewegte Zustand bei  $v_0 = 0.189\ 87$  ist in (a) dargestellt, der bei  $v_0 = 1.975\ 03$  in (b). Abgebildet ist jeweils nur ein Ausschnitt des Systems der Größe  $L = 100$ . In beiden Darstellungen sind die Zustände für die drei ausgewählten Zeiten  $t = 0$ ,  $t = 5$  und  $t = 10$  abgebildet. Aufgetragen sind jeweils  $\phi$  und  $P$  gegen den Ort  $x$ . Die durchgezogenen Linien stellen  $\phi$  dar, die gestrichelten Linien sind  $P$ . Die Zeiten steigen in der Reihenfolge  $t = 0$ ,  $5$ ,  $10$  auf der  $x$ -Achse von links nach rechts an. Dabei liegt zwischen den drei abgebildeten Zeiten des jeweiligen  $v_0$  die gleiche Entfernung. Daran ist die konstante Geschwindigkeit zu erkennen. Außerdem ist zu erkennen, dass die Geschwindigkeit für den größeren Wert von  $v_0$  höher ist.

ist, ergibt sich daraus der lineare Zusammenhang

$$x = c \cdot t + x_0 \quad (5.1)$$

zwischen Zeitschritt  $t$  und Ort  $x$  mit einem Startwert von  $x_0$ . Durch eine lineare Anpassung nach der Methode der kleinsten Quadrate mit der `scipy`-Bibliothek aus Python wird die Steigung  $c$  ermittelt, welche die Geschwindigkeit des bewegten Zustands beschreibt. Beide Fit-Geraden sind in Abb. 5.3 dargestellt, es wurden die Geschwindigkeiten  $c = 0.106\ 36 \pm 0.001\ 41$  und  $c = 1.966\ 29 \pm 0.000\ 43$  errechnet. Die Unsicherheiten entsprechen der Standardabweichung und werden ebenfalls von `scipy` berechnet. In Abb. 5.3(a) ist der lineare Zusammenhang weniger deut-

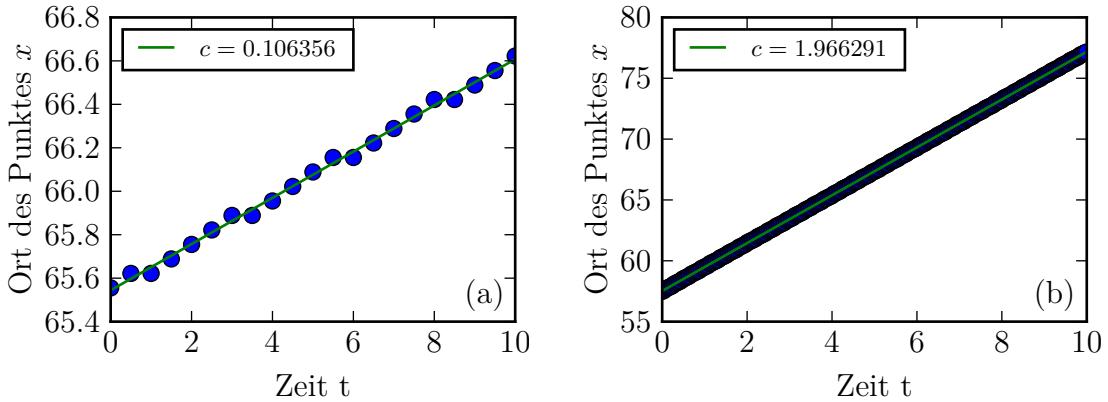


Abbildung 5.3: Auf den Abbildungen ist für  $v_0 = 0.18987$  und  $v_0 = 1.97503$  die Zeit  $t$  gegen den Ort des bei  $\phi \approx -0.75$  fixierten Punktes auf der abfallenden Flanke aufgetragen. Die Daten zeigen dabei einen deutlichen linearen Zusammenhang. Durch einen linearen Fit nach Gleichung (5.1) wird die Steigung ermittelt, welche der Geschwindigkeit des bewegten Zustands entspricht. Für  $v_0 = 0.18987$  gilt  $c = 0.106356 \pm 0.001410$ , für  $v_0 = 1.97503$  gilt  $c = 1.966291 \pm 0.000430$ .

lich als in (b), außerdem wurde eine größere Schrittweite gewählt. Das ist darauf zurückzuführen, dass sich der Zustand in (a) sehr viel langsamer bewegt als der in (b). Eine kleinere Schrittweite würde aufgrund der Diskretisierung dazu führen, dass sich Zustand (a) über mehrere Zeitschritte nicht verändert, wie es ansatzweise auch bei der gewählten Schrittweite zu erkennen ist.

Die durch die direkte Numerik bestimmten Geschwindigkeiten werden für beide  $v_0$  mit den von *auto07p* errechneten Geschwindigkeiten verglichen. Diese entsprechen dem in Gleichung (4.2) eingeführten Parameter  $c$ , welcher die Geschwindigkeit des für die Implementierung in *auto07p* benötigten mitbewegten Bezugssystems beschreibt. In der Gegenüberstellung in Tabelle 5.1 wird deutlich, dass bei  $v_0 = 0.18987$  beide Methoden zur Berechnung von  $c$  im Rahmen der Unsicherheit die gleichen Ergebnisse liefern. Für  $v_0 = 1.97503$  stimmen die beiden Methoden

Tabelle 5.1: Die Tabelle stellt für beide  $v_0$  die Ergebnisse der Zeitsimulation und der Kontinuierung gegenüber. Die aus der Zeitsimulation errechnete Geschwindigkeit wird  $c_{\text{Zeit}}$  genannt, die mit *auto07p* ermittelte Geschwindigkeit  $c_{\text{auto}}$ . Die Fehler entsprechen der ausgegebenen Unsicherheit der Fitparameter.

$v_0$	$c_{\text{Zeit}}$	$c_{\text{auto}}$
0.18987	$0.10636 \pm 0.00141$	0.10675
1.97503	$1.96629 \pm 0.00043$	1.96757

auch im Unsicherheitsintervall nicht überein. Die relative Abweichung der beiden Geschwindigkeiten liegt dabei jedoch in der Größenordnung  $10^{-4}$ , weshalb die beiden Methoden auch hier eine gute Übereinstimmung aufweisen.



## 6 Zusammenfassung und Ausblick

Zusammengefasst wurden lokalisierte Zustände eines aktiven, eindimensionalen Allen-Cahn-Modells betrachtet. Dafür wurde zunächst ein einfaches Modell aufgestellt, welches aus zwei verkoppelten kinetischen Gleichungen für die Ordnungsparameterfelder  $\phi$  und  $P$  besteht. Mit dem Parameter  $\mu = 0$  wurden für das Modell dann die räumlich homogenen Fixpunkte ermittelt. Die gefundenen Fixpunkte bei  $P = 0$  und  $\phi = 0, \pm 1$  wurden anschließend mit einer linearen Stabilitätsanalyse auf ihre Stabilität in Abhängigkeit von verschiedenen Parametern geprüft. Dabei ergab sich, dass die beiden Fixpunkte  $\phi = \pm 1$  unter der Voraussetzung positiver Diffusionskonstanten  $D_r$  und  $D_T$  unabhängig von der Stärke der Kopplung stets stabil sind. Der Fixpunkt bei  $\phi = 0$  weist ein komplexeres Verhalten auf. In Abhängigkeit der Wellenzahl der Störung ist dieser entweder stabil oder instabil, wobei als Stabilitätsgrenze  $q_1$  aus Gleichung (3.31) ausgemacht werden konnte. Diese Stabilitätsgrenze liegt in Form einer Hopf-Bifurkation vor. Für  $q > q_1$  ist der Fixpunkt dabei stabil. Für das Modell wurde nun die Technik der Kontinuierung verwendet, um ruhende und bewegte Lösungsäste zu identifizieren. Bei einer Systemgröße von  $L = 100$  wurde durch eine Kontinuierung in  $v_0$  der Punkt des Einsetzens der Bewegung gefunden. Aus dem Bifurkationsdiagramm lässt sich ableiten, dass bei einer starken Kopplung keine ruhenden lokalisierten Zustände existieren. Für große  $v_0$  gibt es entweder bewegte lokalisierte Zustände oder homogene, nichtlokalierte Zustände.

Weiterhin wurden einzelne Lösungen auf den Ästen mit direkter Numerik in der Zeitsimulation betrachtet. Dabei wurden die beiden ruhenden Zustände bei  $v_0 = 0.140\,90$  und  $v_0 = 0.132\,57$  und die bewegten Zustände bei  $v_0 = 0.189\,87$  und  $v_0 = 1.975\,03$  untersucht. Bei der Durchführung der Zeitsimulation zeigte sich, dass die lokalisierten Zustände bei einer langen Laufzeit der Simulation zu zerlaufen beginnen. Dieser Effekt wird auf numerische Unsicherheiten zurückgeführt und trat erst ausreichend spät ein, um sowohl ruhende als auch bewegte Zustände betrachten zu können. Für beide bewegten Zustände wurde ein Punkt an der Front des Zustands verfolgt und gegen die Zeit aufgetragen. An den sich ergebenden linearen Zusammenhang wurde mit einem Fit eine Gerade an-

gepasst. Deren Steigung entspricht der Geschwindigkeit des bewegten Zustands, für  $v_0 = 0.189\,87$  wurde  $c = 0.106\,356 \pm 0.001\,410$  ermittelt, für  $v_0 = 1.975\,03$  wurde  $c = 1.966\,291 \pm 0.000\,430$  ausgerechnet. Die Geschwindigkeiten wurden mit den durch *auto07p* berechneten Geschwindigkeiten verglichen, dabei wurde eine hohe Übereinstimmung erreicht. Beim Erstellen der Startwerte für die direkte Numerik wurde auf pde2path zurückgegriffen, da die Ergebnisse aus *auto07p* keine äquidistanten Werte aufweisen, wie sie für die Zeitsimulation benötigt werden. Es steht damit noch aus, die Simulation so anzupassen, dass direkt die Lösungen aus *auto07p* verwendet werden können.

Es bleibt weiterhin zu untersuchen, wie sich  $c$  und  $v_0$  zueinander verhalten. Die bisherigen Ergebnisse lassen vermuten, dass  $v_0$  und  $c$  proportional zueinander sind, jedoch sind zwei untersuchte Zustände nicht ausreichend für eine abschließende Bewertung. Weiterhin kann untersucht werden, wie das Modell auf Veränderungen der Diffusionskonstanten  $D_r$  und  $D_T$  reagiert, insbesondere in Anbetracht dessen, dass die gefundene Stabilitätsgrenze aus Gleichung (3.31) imaginär wird, falls  $D_r > 1$  wird. Für die Hopf-Bifurkation bei  $q_1$  kann des Weiteren geprüft werden, ob sie superkritisch oder subkritisch ist. Zusätzlich kann mit *auto07p* eine Kontinuierung in der Hopf-Bifurkation vorgenommen werden. Außerdem ist eine Erweiterung der bereits durchgeführten linearen Stabilitätsanalyse auf  $\mu \neq 0$  sinnvoll, um ein tieferes Verständnis für das mit *auto07p* zum Auffinden der bewegten Zustände letztendlich verwendete Modell zu erlangen. In einem weitergehenden Schritt kann das Modell auf zwei Dimensionen erweitert werden, um auch hier lokalisierte Zustände zu untersuchen.

## A Anhang

Im Anhang wird der Quellcode der numerischen Berechnungen festgehalten. Weiterhin wird ein kurzes Tutorial zur den in *auto07p* durchgeföhrten Rechnungen gegeben.

### Tutorial zur Kontinuierung mit *auto07p*

**Fortran-File** beschreibt die Datei, aus welcher die Problemstellung ausgelesen wird (aac.f90):

```

SUBROUTINE FUNC(NDIM,U,ICP,PAR,IJAC,F,DFDU,DFDP)
!
----- ----

IMPLICIT NONE
INTEGER, INTENT(IN) :: NDIM, IJAC, ICP(*)
DOUBLE PRECISION, INTENT(IN) :: U(NDIM), PAR(*)
DOUBLE PRECISION, INTENT(OUT) :: F(NDIM), DFDU(NDIM,*), DFDP(NDIM,*)
DOUBLE PRECISION mu,D_T,D_r,v0,EPs,Fp,Fphi,LL,TPI,c
DOUBLE PRECISION PHI,PHIx,P,Px

PHI = U(1)
PHIx = U(2)
P = U(3)
Px= U(4)

TPI = 8.0*ATAN(1.0)
EPs = PAR(1)
mu=PAR(2)
D_T=PAR(3)
D_r=PAR(4)
v0=PAR(5)
LL=PAR(6)
c=PAR(7)

Fp = D_r*P
Fphi=-PHI+PHI**3

!ODE system -----
F(1) = LL*PHIx - EPs * (FPHI - mu)
F(2) = LL*(Fphi +mu -v0*Px - c*PHIx)
F(3) = LL*(Px)
F(4) = LL/D_T*(-c*Px-Fp-v0*PHIx)

```

```

END SUBROUTINE FUNC

SUBROUTINE STPNT(NDIM,U,PAR,T)
!----- -----

IMPLICIT NONE
INTEGER, INTENT(IN) :: NDIM
DOUBLE PRECISION, INTENT(INOUT) :: U(NDIM), PAR(*)
DOUBLE PRECISION, INTENT(IN) :: T
DOUBLE PRECISION mu,D_T,D_r,v0,EPs,Fp,Fphi,LL,
DOUBLE PRECISION FPHIO,FPHIPHIO,c,AMPL,PHIMEAN

TPI = 8.0*ATAN(1.0)
PHIMEAN = 0.1
FPHIO = -PHIMEAN + PHIMEAN**3.0
mu = FPHIO
FPHIPHIO = -1. + 3.0*PHIMEAN**2.0
LL = TPI/SQRT(-FPHIPHIO)

PAR(1) = 0.0 ! EPs
PAR(2) = mu
PAR(3)=0.1 !D_T
PAR(4)=-0.05 !D_r
PAR(5)=0.0 !v0
PAR(6) = LL
PAR(7)=0 !c
PAR(9) = 0.0 ! ENERGY
PAR(11) = 1.0 ! INTERNAL auto07p PERIOD

! INITIAL SMALL AMPLITUDE SINUSOIDAL PROFILE
AMPL = 0.001
U(1) = PHIMEAN + AMPL*SIN(TPI*T)
U(2) = AMPL*TPI*COS(TPI*T)
U(3) = 0.0
U(4) = 0.0

END SUBROUTINE STPNT

SUBROUTINE BCND(NDIM,PAR,ICP,NBC,U0,U1,FB,IJAC,DBC)
!----- -----

IMPLICIT NONE
INTEGER, INTENT(IN) :: NDIM, ICP(*), NBC, IJAC
DOUBLE PRECISION, INTENT(IN) :: PAR(*), U0(NDIM), U1(NDIM)
DOUBLE PRECISION, INTENT(OUT) :: FB(NBC)
DOUBLE PRECISION, INTENT(INOUT) :: DBC(NBC,*)

! PERIODIC BOUNDARY CONDITIONS
FB(1)=U0(1)-U1(1)
FB(2)=U0(2)-U1(2)
FB(3)=U0(3)-U1(3)
FB(4)=U0(4)-U1(4)

END SUBROUTINE BCND

```

```

SUBROUTINE ICND(NDIM,PAR,ICP,NINT,U,UOLD,UDOT,UPOLD,FI,IJAC,DINT)
! -----
IMPLICIT NONE
INTEGER, INTENT(IN) :: NDIM, ICP(*), NINT, IJAC
DOUBLE PRECISION, INTENT(IN) :: PAR(*)
DOUBLE PRECISION, INTENT(IN) :: U(NDIM),UOLD(NDIM),UDOT(NDIM),UPOLD(NDIM)
DOUBLE PRECISION, INTENT(OUT) :: FI(NINT)
DOUBLE PRECISION, INTENT(INOUT) :: DINT(NINT,*)
DOUBLE PRECISION PHIMEAN,FF,FF0,PHI,PHIX,KAPPA,AA,BB

! integral pinning condition to break Translationssym. of homogeneous substrate
FI(1) = U(1)*UPOLD(1)

END SUBROUTINE ICND

DOUBLE PRECISION FUNCTION GETU2(U,NDX,NTST,NCOL)
! -----
INTEGER, INTENT(IN) :: NDX,NCOL,NTST
DOUBLE PRECISION, INTENT(IN) :: U(NDX,0:NCOL*NTST)

GETU2 = U(2,0)

END FUNCTION GETU2

SUBROUTINE PVLS(NDIM,U,PAR)
! -----
IMPLICIT NONE
INTEGER, INTENT(IN) :: NDIM
DOUBLE PRECISION, INTENT(IN) :: U(NDIM)
DOUBLE PRECISION, INTENT(INOUT) :: PAR(*)

DOUBLE PRECISION, EXTERNAL :: GETP,GETU2
INTEGER NDX,NCOL,NTST
DOUBLE PRECISION PHIMEAN

! -----
! NOTE :
! Parameters set in this subroutine should be considered as ``solution
! measures'' and be used for output purposes only.
! They should never be used as 'true' continuation parameters.

PHIMEAN = PAR(1)
PAR(41)=(GETP('NRM',2,U))**2-(GETP('NRM',4,U))**2
PAR(42)=(GETP('NRM',1,U))**2-(GETP('NRM',3,U))**2

END SUBROUTINE PVLS

SUBROUTINE FOPT
END SUBROUTINE FOPT

```

**c.-Files** legen Kontinuierungsparameter und Konstanten wie Schrittweite fest.  
 Erste Rechnung: Kontinuierung in  $L$ , Ast der lokalisierten Zustände, dazu Aufruf und Speichern von **c.aac.1** über

```
@@R aac 1
```

```
@sv d1
```

```
NDIM = 4, IPS = 4, IRS = 0, ILP = 0
ICP = [6,41,42]
NTST= 2000, NCOL= 4, IAD = 3, ISP = 0, ISW = 1, IPLT= 0, NBC= 4, NINT= 0
NMX= 5000, NPR= 1000, MXBF= 1, IID = 2, ITMX= 8, ITNW= 5, NWTN= 3, JAC= 0
EPSL= 1e-06, EPSU = 1e-06, EPSS = 1e-04
DS = 0.001, DSMIN= 1e-15, DSMAX= 0.1, IADS= 1
NPAR = 50, THL = {}, THU = {}
UZR = {6: [25.0, 30.35.0, 50.0,100.0], -6: 0}
```

Zweite Rechnung: Kontinuierung in  $L$ , Ast der homogenen Zustände, für diese Rechnung in .f90-Datei  $U(1) = \text{PHIMEAN}$ ,  $U(2) = 0$  ändern, dann Aufruf und Speichern von **c.aac.1** mit  $\text{NINT} = 0$  über

```
@@R aac 1
```

```
@sv homogen
```

```
NDIM = 4, IPS = 4, IRS = 0, ILP = 0
ICP = [6,7,41,42]
NTST= 2000, NCOL= 4, IAD = 3, ISP = 0, ISW = 1, IPLT= 0, NBC= 4, NINT= 1
NMX= 5000, NPR= 1000, MXBF= 1, IID = 2, ITMX= 8, ITNW= 5, NWTN= 3, JAC= 0
EPSL= 1e-06, EPSU = 1e-06, EPSS = 1e-04
DS = 0.001, DSMIN= 1e-15, DSMAX= 0.1, IADS= 1
NPAR = 50, THL = {}, THU = {}
UZR = {6: [25.0, 30.35.0, 50.0,100.0], -6: 500}
```

Die ersten beiden Rechnungen erzeugen Abb. 4.3(a), Abb. 4.1(a) wird analog erzeugt mit angepassten Parametern in .f90-Datei

Dritte Rechnung: Kontinuierung in  $v_0$  bei  $L = 100$ , ruhende Zustände, dazu Aufruf und Speichern von **c.aac.2** mit Start von **LAB6** ( $\text{IRS} = 6$ ) aus **d1** über

```
@@R aac 2 d1
```

```
@sv d2
```

```
NDIM = 4, IPS = 4, IRS = 6, ILP = 0
ICP = [5,7, 41,42]
NTST= 200, NCOL= 4, IAD = 3, ISP = 1, ISW = 1, IPLT= 9, NBC= 4, NINT= 1
NMX= 3000, NPR= 500, MXBF= 1, IID = 2, ITMX= 8, ITNW= 5, NWTN= 3, JAC= 0
EPSL= 1e-08, EPSU = 1e-08, EPSS = 1e-05
DS = 0.001, DSMIN= 1e-15, DSMAX= 0.01, IADS= 1
NPAR = 50, THL = {}, THU = {}
UZR = {5:[0.05,0.1,0.13257,0.14090,0.18987,0.25,0.5],42: [0.0], 41: [0.0]}
```

Die dritte Rechnung erzeugt den Ast ruhender Zustände aus Abb. 4.4 und mit angepassten Parametern analog Abb. 4.2

Vierte Rechnung: Kontinuierung in  $v_0$  bei  $L = 100$ , bewegte Zustände, dazu Aufruf und Speichern von `c.aac.3` mit Start von LAB15 (`IRS=15`) aus `d2`, Astwechsel initiieren durch `ISW=-1` über

```
NDIM = 4, IPS = 4, IRS = 15, ILP = 0
ICP = [5,7, 41,42]
NTST= 200, NCOL= 4, IAD = 3, ISP = 1, ISW = -1, IPLT= 9, NBC= 4, NINT= 1
NMX= 2000, NPR= 200, MXBF= 1, IID = 2, ITMX= 8, ITNW= 5, NWTN= 3, JAC= 0
EPSL= 1e-08, EPSU = 1e-08, EPSS = 1e-05
DS = 0.001, DSMIN= 1e-15, DSMAX= 0.01, IAADS= 1
NPAR = 50, THL = {}, THU = {}
UZR = {5:[0.05,0.1,0.25,0.5,1.97503],42: [0.0], 41: [0.0]}
```

Die vierte Rechnung bestimmt den Ast bewegter Zustände aus Abb. 4.4

## Zeitsimulation mit Python

Es wurden verschiedene Zeitsimulationen durchgeführt, diese beruhen alle auf dem abgedruckten Quellcode und weisen nur Änderungen der Dateinamen, Konstanten und Arten der Speicherung auf.

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

Lx = 2. # Phys. Laenge des Systems in der Eingabe
L = 100. # Phys. Laenge des Systems in der Ausgabe
Nx = 4096 # Anzahl Diskretisierungspunkte in x-Richtung

x = np.arange(Nx) * 1.*Lx/Nx
kx = np.fft.fftfreq(Nx,Lx/(Nx*2.0*np.pi))
ksquare = kx*kx

##### Konstanten #####
c0 = 0
AMPL = 0.01
v_0 = 1.97503
mu = 0.099
D_T = 0.1
D_r = 0.05

exit()
t = 0.0
h = 1e-4
T_End = 50
N_t = int(T_End / h)
timestepper = "RK4"
plotEveryNth = 1000

##### Anfangsbedingungen #####
```

```

c = 1.0*np.arange(Nx, dtype=complex)
p = 0.0*np.arange(Nx, dtype=complex)

filename_c = 'phi_mov_v0_197503_EV1'
filename_p = 'pol_mov_v0_197503_EV1'
art_anfbed= 'datei_txt'
label = 40

if (art_anfbed == 'random'):
    c = (np.random.random((Nx))-0.5)*0.03 +c0

elif (art_anfbed == 'datei_npy'):
    c = np.load('U1_LAB%3i.npy'%(label))
    x = Lx*np.load('t_LAB%3i.npy'%(label))
    p = np.load('U3_LAB%3i.npy'%(label))
    Nx=len(x)
    kx = np.fft.fftfreq(Nx,Lx/(Nx*2.0*np.pi))
    ksquare = kx*kx

elif (art_anfbed == 'datei_txt'):
    c = np.loadtxt(filename_c)
    p = np.loadtxt(filename_p)
    Nx=len(c)
    x = np.arange(Nx) * 1.*Lx/Nx #x-Array
    kx = np.fft.fftfreq(Nx,Lx/(Nx*2.0*np.pi))
    ksquare = kx*kx

else:
    c=0*c

##### Pseudospektral+RungeKutta#####
def rhs(c,p,t):
    ck = np.fft.fft(c)
    pk = np.fft.fft(p)
    result_ck = -ksquare/L**2.*ck - np.fft.fft(np.fft.ifft(ck)**3)-v_0*1j*kx/L*pk

    rhs_p = np.fft.ifft(-D_T*ksquare/L**2.*pk - v_0*1.0j*kx/L*ck) - D_r*p
    rhs_c = np.fft.ifft(result_ck) + c + mu
    return rhs_c, rhs_p

def RK4(c,p,t,h):
    k1c, k1p = rhs(c,p,t)
    k2c, k2p = rhs(c+h/2.0*k1c, p+h/2.0*k1p, t+h/2.0)
    k3c, k3p = rhs(c+h/2.0*k2c, p+h/2.0*k2p, t+h/2.0)
    k4c, k4p = rhs(c+h*k3c, p+h*k3p, t+h)

    c_new = c+h/6.0*(k1c + 2.0*k2c + 2.0*k3c + k4c)
    p_new = p+h/6.0*(k1p + 2.0*k2p + 2.0*k3p + k4p)
    return c_new, p_new

##### Speichern der Ergebnisse#####
for i in xrange(N_t):
    if(timestepper == "RK4"):
```

```
t = i*h
c, p = RK4(c,p,t,h)
error = 0.0
if(i % plotEveryNth == 0):
    print("Step%04d,t=%f,error=%f,new_h=%f"%(i,t,error,h))
    plt.xlabel('x')  #p[i]=0
    plt.ylabel('c(x)')
    plt.title(r"AC_with_N_x=%3i,t=%3.1f,c_0=%2.4f,v_0=%1.5f"%(Nx,t,c0,v_0))
    plt.plot(x,c.real, 'ob')
    plt.plot(x,p.real, 'ob')
    plt.axis([x.min(), x.max(), -1.05, 1.05])
    filename = "Allen-Cahn-1D-%04d.png" % (i/plotEveryNth)
    plt.savefig(filename)
    plt.close()
```



## B Literaturverzeichnis

- [1] Sumpter, D. J. T.: *Collective Animal Behavior*. Princeton University Press, 2010.
- [2] Peruani, F., J. Starruß, V. Jakovljevic, L. Søgaard-Andersen, A. Deutsch und M. Bär: *Collective Motion and Nonequilibrium Cluster Formation in Colonies of Gliding Bacteria*. Phys. Rev. Lett., 108:098102, Feb 2012.
- [3] Szabó, B., G. J. Szöllösi, B. Gönci, Zs. Jurányi, D. Selmeczi und T. Vicsek: *Phase transition in the collective migration of tissue cells: Experiment and model*. Phys. Rev. E, 74:061908, Dec 2006.
- [4] Sepúlveda, N., L. Petitjean, O. Cochet, E. Grasland-Mongrain, P. Silberzan und V. Hakim: *Collective Cell Motion in an Epithelial Sheet Can Be Quantitatively Described by a Stochastic Interacting Particle Model*. PLOS Computational Biology, 9:1–12, 2013.
- [5] Deseigne, J., O. Dauchot und H. Chaté: *Collective Motion of Vibrated Polar Disks*. Phys. Rev. Lett., 105:098001, Aug 2010.
- [6] Thutupalli, S., R. Seemann und S. Herminghaus: *Swarming behavior of simple model squirmers*. New Journal of Physics, 13:073021, 2011.
- [7] Bricard, A., J. B. Caussin, N. Desreumaux, O. Dauchot und D. Bartolo: *Emergence of macroscopic directed motion in populations of motile colloids*. Nature, 503:95–98, November 2013.
- [8] Richter, R. und I. V. Barashenkov: *Two-Dimensional Solitons on the Surface of Magnetic Fluids*. Phys. Rev. Lett., 94:184503, May 2005.
- [9] Langer, J. S.: *Instabilities and pattern formation in crystal growth*. Rev. Mod. Phys., 52:1–28, Jan 1980.
- [10] Kondo, S. und T. Miura: *Reaction-Diffusion Model as a Framework for Understanding Biological Pattern Formation*. Science, 329:1616–1620, 2010.

- [11] Meron, E., E. Gilad, J. von Hardenberg, M. Shachak und Y. Zarmi: *Vegetation patterns along a rainfall gradient*. Chaos, Solitons & Fractals, 19:367 – 376, 2004. Fractals in Geophysics.
- [12] Balmforth, N.J., A. Provenzale und J.A. Whitehead: *The Language of Pattern and Form*, Seiten 3–33. Springer Berlin Heidelberg, 2001.
- [13] Langer, J. S.: *An introduction to the kinetics of first-order phase transitions*. In: Godrèche, C. (Herausgeber): *Solids far from Equilibrium*, Seiten 297–363. Cambridge University Press, 1992.
- [14] Godrèche, C.: *Solids Far from Equilibrium*. Collection Aléa-Saclay: Monographs and Texts in Statistical Physics. Cambridge University Press, 1991.
- [15] Menzel, A. M., T. Ohta und H. Löwen: *Active crystals and their stability*. Phys. Rev. E, 89:022301, Feb 2014.
- [16] Wittkowski, R., H. Löwen und H. R. Brand: *Derivation of a three-dimensional phase-field-crystal model for liquid crystals from density functional theory*. Phys. Rev. E, 82:031708, Sep 2010.
- [17] Toner, J., Y. Tu und S. Ramaswamy: *Hydrodynamics and phases of flocks*. Annals of Physics, 318:170 – 244, 2005. Special Issue.
- [18] Chen, Y. und T. Kolokolnikov: *A minimal model of predator–swarm interactions*. Journal of The Royal Society Interface, 11, 2014.
- [19] Marchetti, M. C., J. F. Joanny, S. Ramaswamy, T. B. Liverpool, J. Prost, M. Rao und R. A. Simha: *Hydrodynamics of soft active matter*. Rev. Mod. Phys., 85:1143–1189, Jul 2013.
- [20] Strogatz, S.H.: *Nonlinear Dynamics And Chaos*. Studies in nonlinearity. Perseus Book Publishing L.L.C., 2007.
- [21] Stegemerten, F.: *Front motion in Allen-Cahn-type equations*. Masterarbeit, 2018.
- [22] Seydel, R.U.: *Practical Bifurcation and Stability Analysis*. Interdisciplinary Applied Mathematics. Springer New York, 2009.

- [23] Engelnkemper, S., S.V. Gurevich, H. Uecker, D. Wetzel und U. Thiele: *Computational Modeling of Bifurcations and Instabilities in Fluid Mechanics*, Kapitel Continuation for thin film hydrodynamics and related scalar problems, Seiten 459–501. Computational Methods in Applied Sciences, vol 50. Springer, 2018. doi: 10.1007/978-3-319-91494-7\_13.
- [24] Doedel, E. J., A. R. Champneys, F. Dercole, T. Fairgrieve, Y. Kuznetsov, B. Oldeman, R. Paffenroth, B. Sandstede, X. Wang und C. Zhang: *AUTO-07P: Continuation and Bifurcation Software for Ordinary Differential Equations*, 2012.
- [25] Kammler, D. W.: *A first course in Fourier analysis*. 2nd revised ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2nd revised ed. Auflage, 2007.
- [26] Solon, A. P. und J. Tailleur: *Flocking with discrete symmetry: The two-dimensional active Ising model*. Phys. Rev. E, 92:042119, 2015.
- [27] Thiele, U., O. Kamps und S. Gurevich: *Münsteranian Torturials on Nonlinear Science*. 2014.
- [28] Ophaus, L., S.V. Gurevich und U. Thiele: *Resting and Traveling Localized States in an Active Phase-Field-Crystal Model*. Phys. Rev. E, 98:022608, 2018.



## **Plagiatsklärung**

Hiermit versichere ich, dass die vorliegende Arbeit mit dem Titel „Von passiven zu aktiven Allen-Cahn-Modellen“ selbstständig verfasst worden ist, dass keine anderen Quellen und Hilfsmittel als die angegebenen benutzt worden sind und dass die Stellen der Arbeit, die anderen Werken – auch elektronischen Medien – dem Wortlaut oder Sinn nach entnommen wurden, auf jeden Fall unter Angabe der Quelle als Entlehnung kenntlich gemacht worden sind.

Münster, den 06.09.2018

---

Johanna Jakob

Ich erkläre mich mit einem Abgleich der Arbeit mit anderen Texten zwecks Auffindung von Übereinstimmungen sowie mit einer zu diesem Zweck vorzunehmenden Speicherung der Arbeit in einer Datenbank einverstanden.

Münster, den 06.09.2018

---

Johanna Jakob