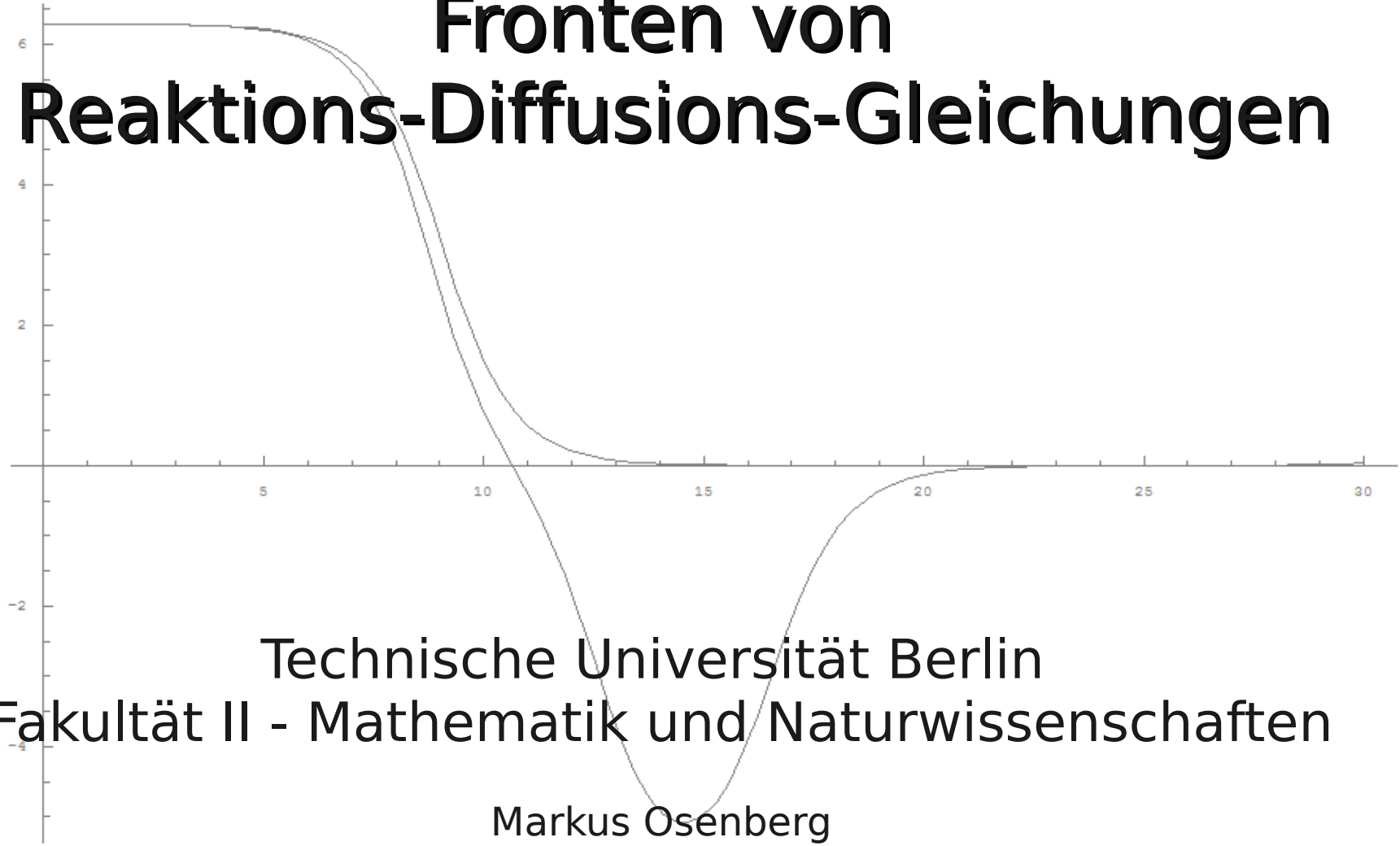




Fronten von Reaktions-Diffusions-Gleichungen



Technische Universität Berlin
Fakultät II - Mathematik und Naturwissenschaften

Markus Osenberg
Magnus Happach

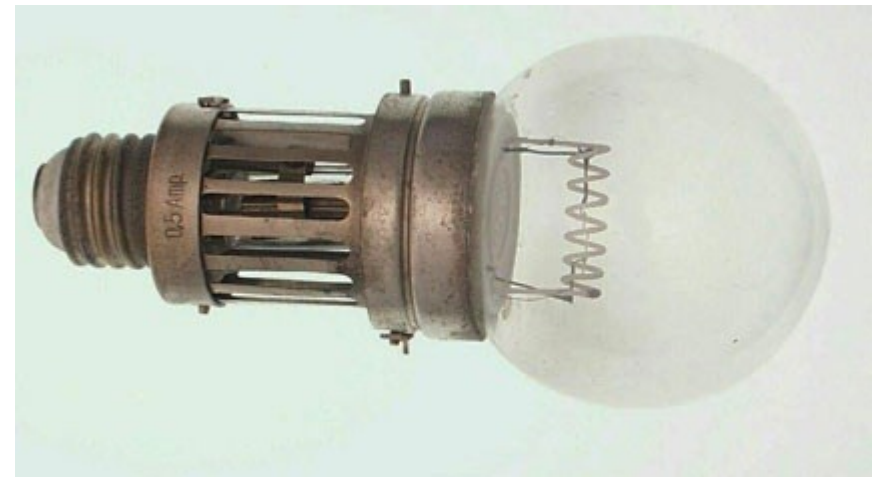


- **Motivation**
 - Nernstlampe
 - Eisendraht in Wasserstoff
- **Das Schlögl-Modell**
 - Front zwischen zwei stabilen Zuständen
 - Front zwischen einem stabilen und einem instabilen Zustand
- **Ausblick**
- **Zusammenfassung**



Nernstlampe

- 1897 vom Physikochemiker Prof. Walther Nernst erfunden
- Leuchtmittel ist ein Ionenleiter (ab 600°C) aus
 - Zirkon(IV)-oxid
 - dotiert mit Yttrium(III)-oxid





Nernstlampe



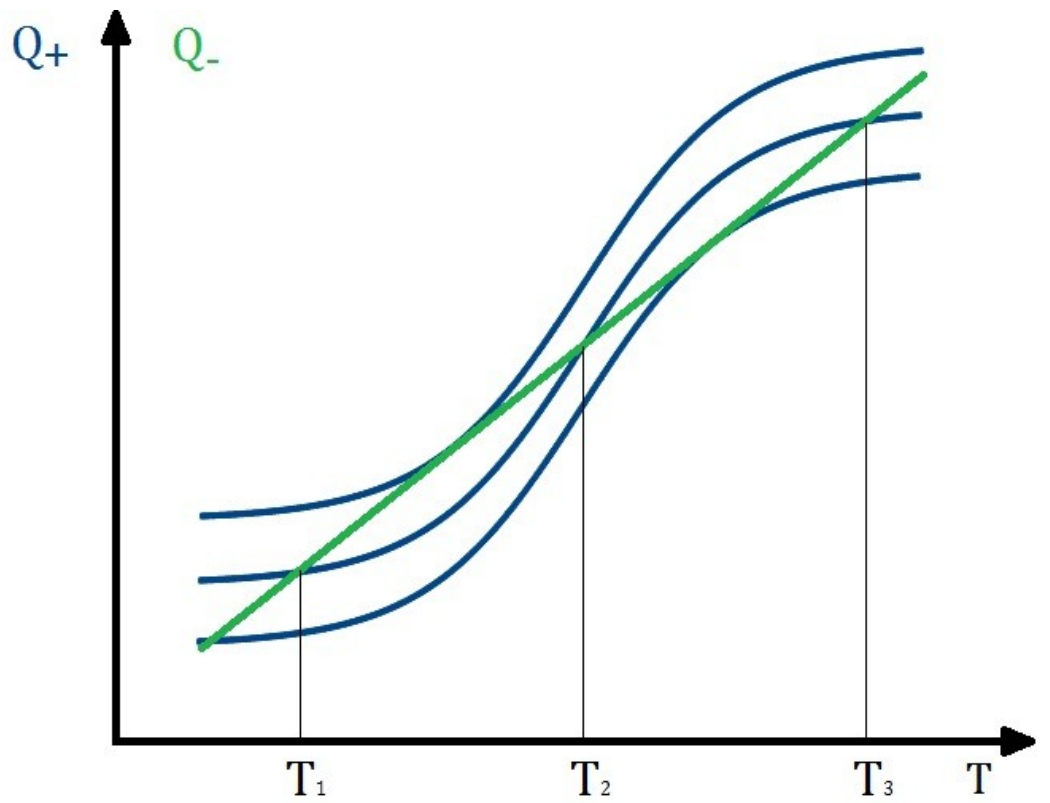
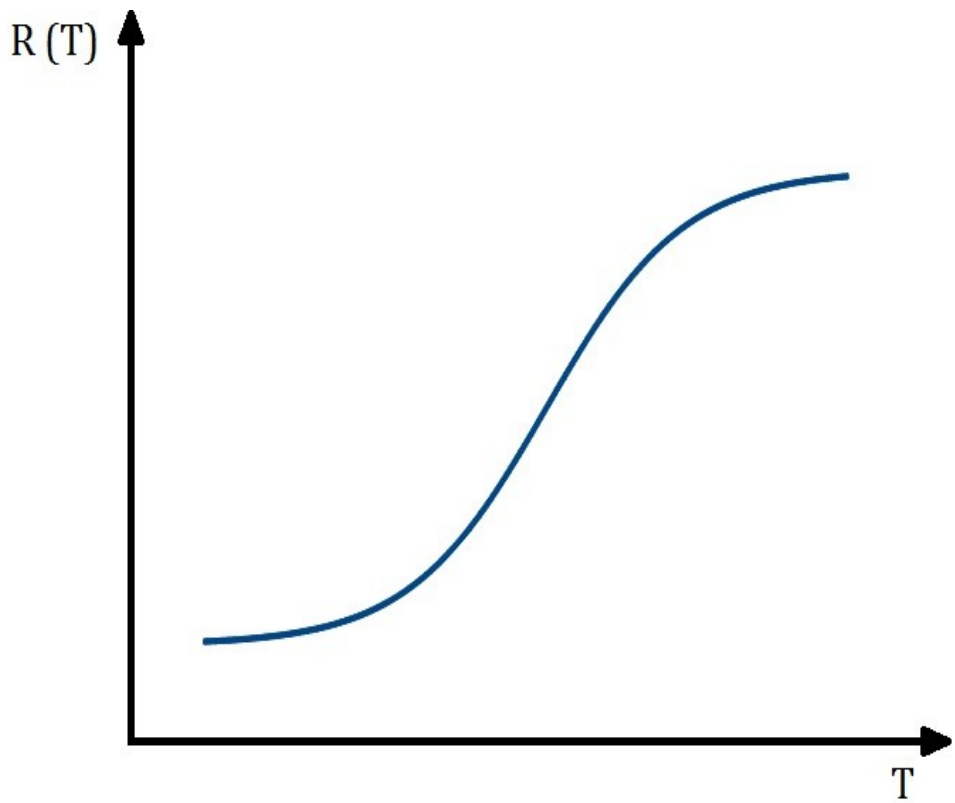


Eisendraht im Wasserstoff

$$C \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + Q_+(T) - Q_-(T) \text{ mit}$$

$$Q_+(T) = I^2 R(T)$$

$$Q_-(T) = \delta \cdot (T - T_0)$$

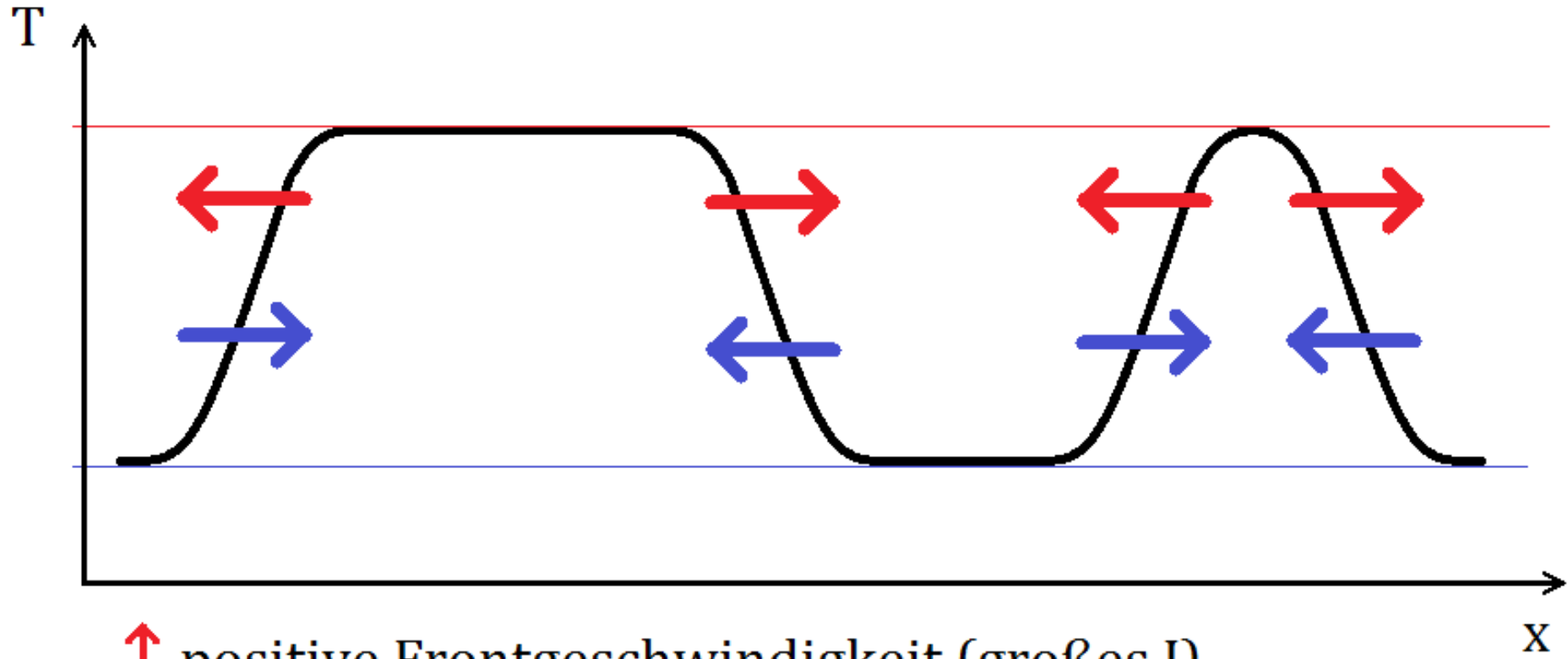




- In einem Strombereich entstehen 3 Schnittpunkte zwischen Q_+ und Q_-
- Die Schnittpunkte bei T_1 und T_3 sind stabil der bei T_2 nicht
- Es können sich also Wellenfronten zwischen den beiden stabilen Zuständen ausbilden
- Für genau ein I_{Kr} bewegen sich diese Fronten nicht, je weiter wir uns von I_{Kr} entfernen desto schneller werden diese



Eisendraht im Wasserstoff



↑ positive Frontgeschwindigkeit (großes I)

↑ negative Frontgeschwindigkeit (kleines I)



- Wird hingegen die Spannung konstant gehalten, so stellt sich ein I_{Kr} ein.

$$I = U \left(\int_{\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} R(T(x)) dx \right)^{-1}$$

- Die Fronten wandern nun so lange, bis sich der „richtige“ Widerstand eingestellt hat und die Fronten stehen bleiben.

$$I = \frac{U}{2(R_1 L_1 + R_3 L_3)}$$



Motivation

$$\partial_t u = D \partial_x^2 u + R(u)$$

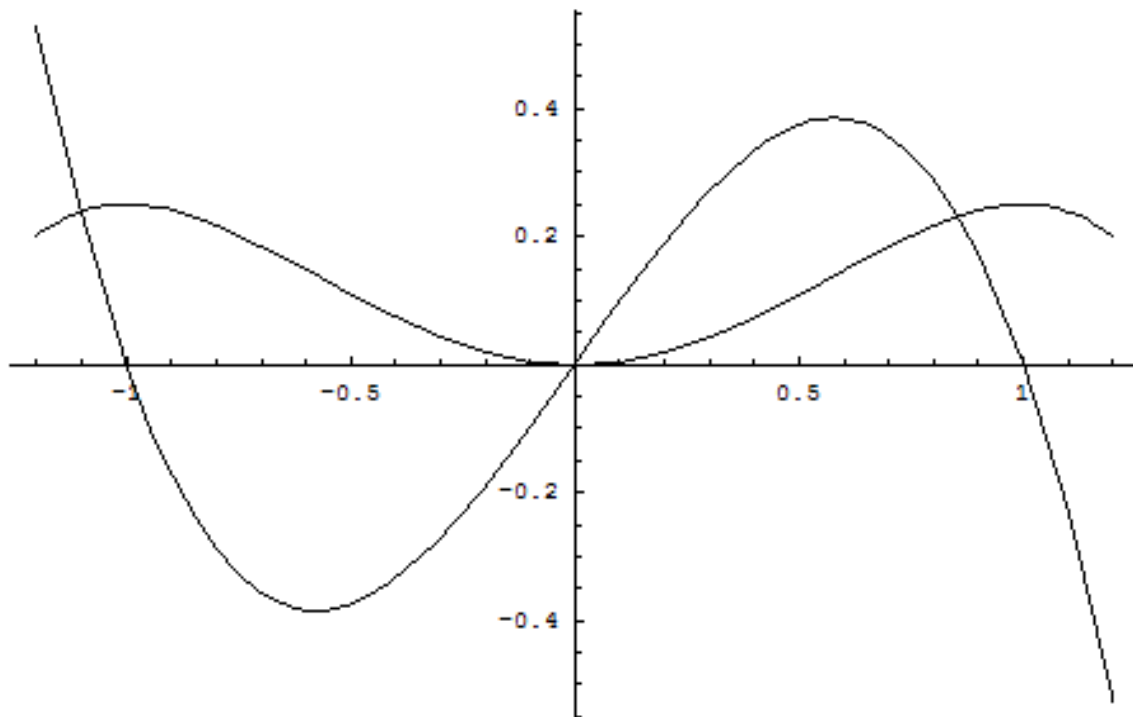
- Reaktions-Diffusions-Gleichungen sind im Allgemeinen nur schwer lösbar.
- Wie z.B. im Vortrag zu Tumoren zu sehen wahr, reicht es allerdings oft aus, nur die Reaktionsfronten zu betrachten.
- Ziel sind Aussagen über z.B. Geschwindigkeit, Form, und Stabilität
- Sowohl die Mechanik als auch die Quantenmechanik helfen bei der Lösung



Das Schlögl-Modell

- Das Schlögl-Modell beschreibt das Phänomen mit 3 Fixpunkten (2 stabil, 1 instabil)

$$R(u) = -k(u - u_1)(u - u_2)(u - u_3)$$



$$\partial_t u = D \partial_x^2 u + R(u)$$

$$R(u) = \frac{dV(u)}{du}$$



- Wie schnell ist die Wellenfront?
- Übergang in mitlaufendes Koordinatensystem

$$\partial_t u = D \partial_x^2 u + \frac{dV(u)}{du} \quad u_v(x - vt) = u_v(\xi_v)$$

$$D \frac{d^2 u_v}{d\xi_v^2} = -v \frac{du_v}{d\xi_v} - \frac{dV(u_v)}{du_v}$$

- Diese Formel ist aus der Mechanik bekannt, wobei die Frontgeschwindigkeit durch die Reibung dargestellt wird



Mechanisches Analogon





Analytische Lösung

- Für die Frontlösung muss gelten:

$$\begin{aligned} \lim_{\xi_v \rightarrow \infty} u_v(\xi_v) &= u_1 \\ \lim_{\xi_v \rightarrow -\infty} u_v(\xi_v) &= u_3 \end{aligned} \quad \Rightarrow \quad \frac{du_v}{d\xi_v} = \sqrt{\frac{k}{2D}} (u_v - u_1)(u_v - u_3)$$

- Mit den Randbedingungen eingesetzt erhält man die Geschwindigkeit (bzw. Reibung) und die Frontlösung

$$v = \sqrt{\frac{Dk}{2}} (u_1 + u_3 - 2u_2)$$

$$u_v(\xi_v) = \frac{1}{2} \left(u_1 + u_3 + (u_1 - u_3) \tanh \left(\frac{1}{2} \sqrt{\frac{k}{2D}} (u_3 - u_1) \xi_v \right) \right)$$



Analytische Lösung





Stabilitätsanalyse

- Nun wird eine lineare Stabilitätsanalyse durchgeführt:

$$u_v(\xi_v, t) = u_v(\xi_v, t) + \eta(\xi_v, t)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = v \frac{\partial \eta}{\partial \xi_v} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + R'(u_v)\eta + \mathcal{O}(\eta^2)$$

- Wir erhalten mit diesem Ansatz eine bekannte Gleichung:

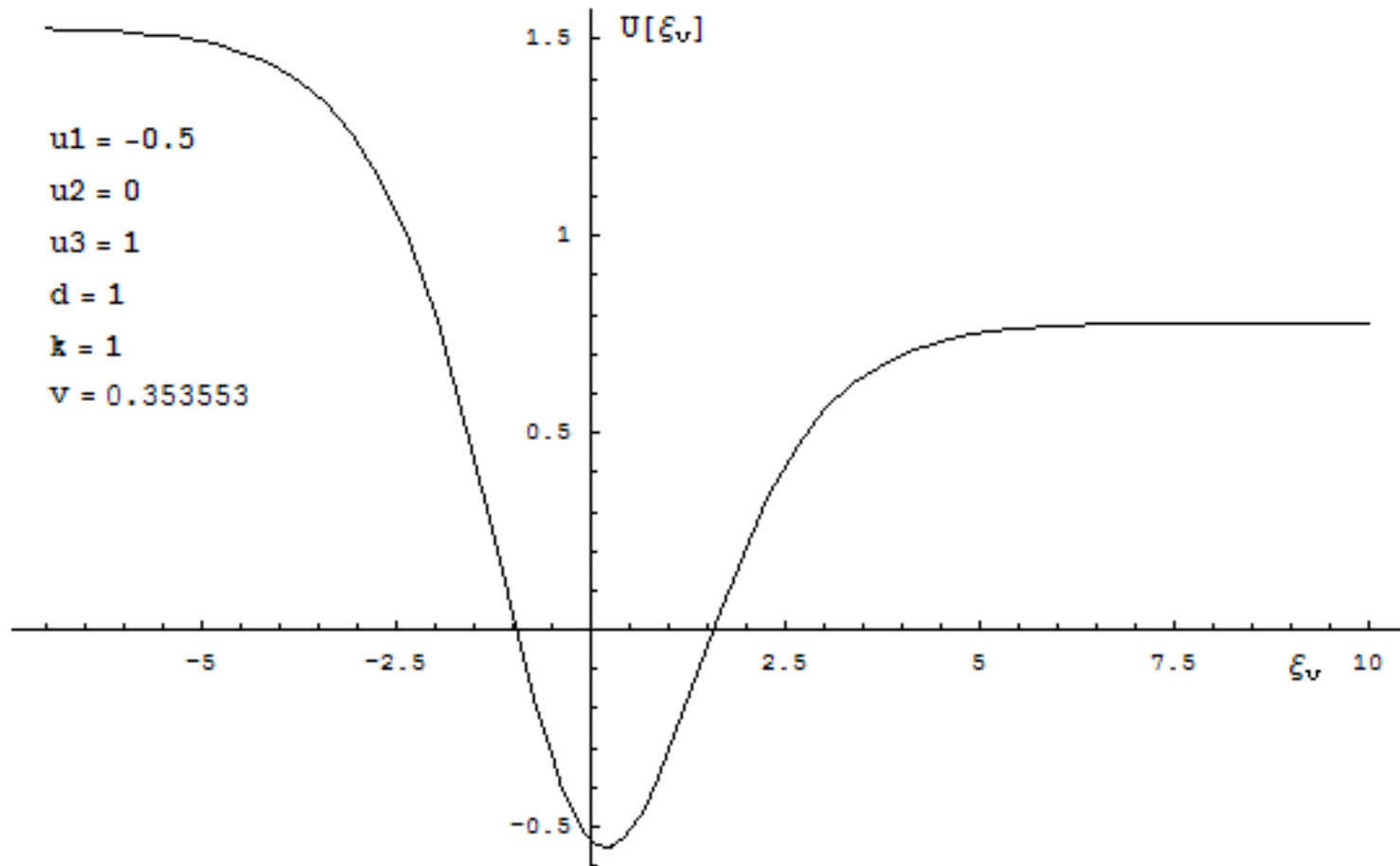
$$\eta(\xi_v, t) = e^{-Et} e^{-v\xi_v/2} \psi_E(\xi_v)$$

$$\Rightarrow \left[-\frac{\partial^2}{\partial \xi_v^2} + \underbrace{\left(\frac{v^2}{4} - R'(u_v) \right)}_{U(\xi_v)} \right] \psi_E(\xi_v) = E\psi_E(\xi_v)$$

- Dies entspricht der Schrödingergleichung mit $\hbar^2/m = 1$.



- Das Potential der Schrödingergleichung sieht dann wie folgt aus:





Stabilitätsanalyse

- Aus der Schrödungsgleichung kann nun über die Quantenmechanik 3 Fälle abgeleitet werden
 - Es existiert eine stabile Mode (Grundzustand) mit

$$E = 0$$
 - Es existiert ein kontinuierliches Spektrum von Eigenmoden mit

$$E \geq U(\infty) = (v^2/4 + |R'(0)|) > 0$$
 - Für spezielle R existieren diskrete Eigenmoden z.B. eine Zusammensetzung aus unterschiedlichen Cosinus
- Die Frontlösung ist Translationsinvariant, die Grundzustandsmode entspricht genau der Verschiebung der Front, die Stabilität bleibt also erhalten
- Alle anderen Moden relaxieren exponentiell schnell.



Reaktions-Diffusionsgleichung:

$$\dot{\varphi}(x, t) = \varphi''(x, t) + f(\varphi)$$

Koordinatentransformation:

$$y = x - v \cdot t$$

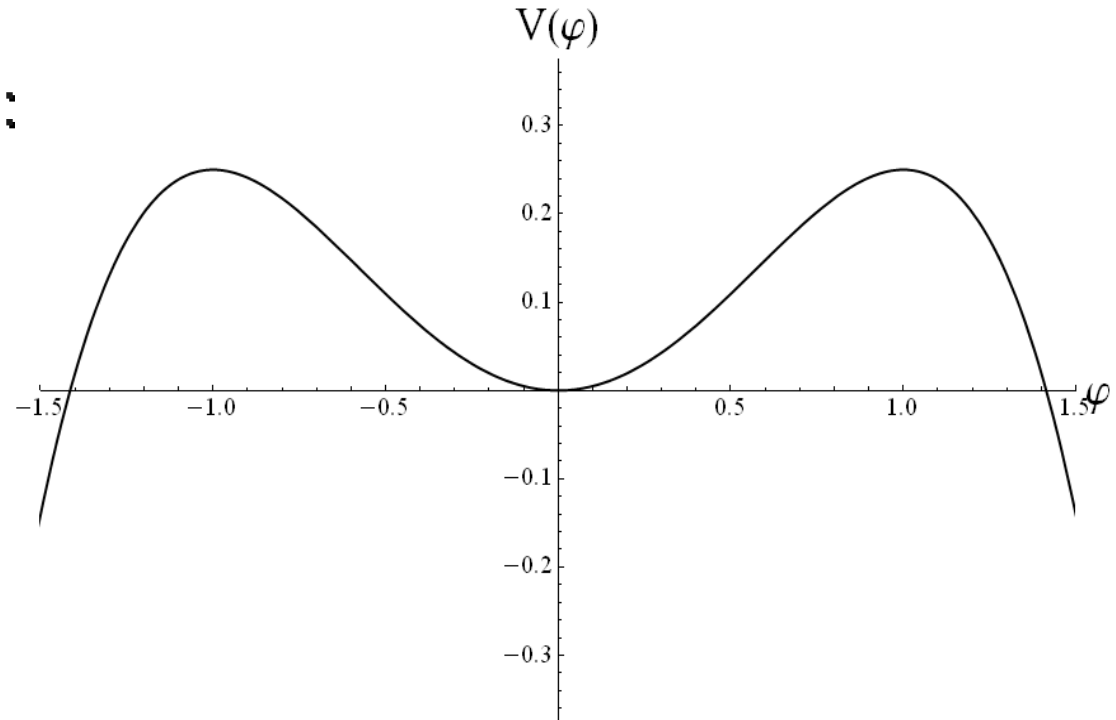
gewöhnliche DGL:

$$\varphi_v''(y) = \frac{\delta V(\varphi)}{\delta \varphi} - v \cdot \varphi_v'(y)$$



Das Potential $V(\varphi)$ sei:

$$V(\varphi) = \frac{\varphi^2}{2} - \frac{\varphi^4}{4}$$



- bei $t = -\infty$ startet das Teilchen bei $\varphi = 1$ mit infinitesimaler Geschwindigkeit
- bei $t = \infty$ wird das Teilchen zur Ruhe kommen, wenn „Reibung v “ nicht Null ist.



Amplitudenbetrachtung

Kugel in Potential

Amplitude





Kugel in Potential

Phasenraum



Die Extrema des Potentials werden zu Fixpunkten des Phasenraums

Welche Lösungen sind stabil gegen Störungen? $v_{kr} = 2\sqrt{v''(0)} = 2$
 —► lineare Stabilitätsanalyse



Ansatz: $\varphi(x, t) = \varphi_v(x - vt) + \epsilon_v(x, t)$

lineare ϵ -Näherung:

$$\dot{\epsilon} = \epsilon'' + f(\varphi_v + \epsilon_v) - f(\varphi_v) \approx \epsilon'' + f'(\varphi_v) \epsilon_v$$

in einem mit v bewegten Koordinatensystem: $\dot{\epsilon} \rightarrow \dot{\epsilon} - v \cdot \epsilon'$

$$\dot{\epsilon}_v(x, t) = v \cdot \epsilon'_v(x, t) + \epsilon''_v(x, t) + f'(\varphi_v(x)) \cdot \epsilon_v(x, t)$$

wobei $f'(\varphi_v(x)) = V''(\varphi_v(x))$



Grenzwertbetrachtung: $x \rightarrow \infty$ strebt $V''(\varphi_v(x)) \rightarrow V''(0) = \frac{v_c^2}{4} = 1$

damit erhält man eine lineare PDGL mit konstanten Koeffizienten

$$\dot{\epsilon}_v(x, t) = v \cdot \epsilon'_v(x, t) + \epsilon''_v(x, t) + \epsilon_v(x, t)$$

Der Lösungsansatz $\epsilon_v \sim e^{i \cdot K \cdot x} e^{\lambda \cdot t}$

führt in der Grenzwertbetrachtung auf

$$\lambda = i \cdot K \cdot v - k^2 + 1 \Leftrightarrow K(\lambda) = \frac{i \cdot v}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{4 - v^2 - 4 \cdot \lambda}$$



$$\Re(\lambda) = 1 - \frac{\nu^2}{4} - q^2$$



Für $\nu < 2$ sind die um $\varphi = 0$ oszillierenden Lösungen instabil.

Für $\nu = 2$ ist die Lösung marginal stabil.

Sind dann alle Lösungen mit $\nu > 2$ stabil?

—► Betrachtung des Störterms in den höheren Ableitungen

$$\dot{\epsilon}_\nu(x, t) = \nu \cdot \epsilon'_\nu(x, t) + \epsilon''_\nu(x, t) + f'(\varphi_\nu(x)) \cdot \epsilon_\nu(x, t) + \frac{1}{2} \cdot f''(\varphi_\nu) \cdot \epsilon_\nu^2 + \dots$$

$$\dot{\epsilon}_\nu(x, t) = L_\nu \cdot \epsilon_\nu(x, t) - 3 \cdot \varphi_\nu(x) \cdot \epsilon_\nu^2(x, t)$$

mit dem linearen Operator
$$L_\nu = \nu \frac{\delta}{\delta x} + \frac{\delta^2}{\delta x^2} + 1 - 3 \cdot \varphi_\nu^2(x)$$

Entwickeln von ϵ_v nach den Eigenfunktionen von L_v

$$L_v u_n^v(x) = \lambda_n^v u_n^v(x)$$

$$\epsilon_v(x, t) = \sum_n a_n(t) u_n^v(x)$$

so folgt aus der Entwicklung des Störterms:

$$\sum_n a_n u_n^v = \sum_n a_n \lambda_n^v u_n^v - 3 \varphi_v(x) \epsilon_v^2 + \dots$$

Durch Multiplikation mit der Eigenfunktion \tilde{u}_n^v des adjungierten Operators \tilde{L}_v und einer Integration nach x erhält man:

$$\dot{a}_n = \lambda_n^v a_n - 3 \int_{-\infty}^{\infty} dx \tilde{u}_n^v \varphi_v(x) \epsilon_v^2 + O(a_n^3)$$

Betrachtung der Translationsmode $u_0^v(x) = \varphi_v'(x)$ mit $\lambda_0^v = 0$

$$-\dot{a}_0(t) = 3 \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{vx} \varphi_v'(x) \varphi_v(x) \epsilon_v^2(x, t)$$

Für $\epsilon_v \neq 0$ und $\varphi_v > 0, \varphi_v' < 0$ für $v > 2$ ist das Integral negativ. Daher werden alle Wellenfronten mit $v > 2$ abgebremst. Folglich sind diese nicht stabil gegen Störung.



- Hat der Reaktionsterm mehr als 3 Fixpunkte existieren im Fall (stabil zu stabil) weitere langsamere diskrete Frontgeschwindigkeiten, welche ebenfalls in die schnellste Lösung relaxieren
- Das Fischer-Kolmogorov-Modell ist neben dem Schlögl-Modell ein weiteres Modell für einen Reaktionsterm
- Es beschreibt 2 Fixpunkte (einen stabilen und einen instabilen)
- $R(u) = u(1 - u)$
- Ähnlich wie im Schlögl-Modell diskutiert, ist für die Entstehung einer stabilen Frontlösung eine Mindestgeschwindigkeit dieser Front notwendig.
- $v_{Kr} = 2\sqrt{V''(0)}$



Zusammenfassung

- **Schlögl-Modell analytisch lösbar**
 - Hilfe durch Mechanik und Quantenmechanik
- **Schlögl-Modell kann Übergänge von stabilen zu stabilen Zuständen beschreiben**
 - Mit einer stabilen Frontlösung
- **Schlögl-Modell kann Übergänge von stabilen zu instabilen Zuständen beschreiben**
 - $v > v_{kr}$ Wellenfronten ist nicht stabil
 - $v = v_{kr}$ Wellenfront ist marginal stabil
 - $v < v_{kr}$ Wellenfronten sind nicht stabil



Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit.



- Wim van Saarloos, *Three basic issues concerning interface dynamics in nonequilibrium pattern formation* Instituut-Lorentz, Leiden University (Submitted on 23 Jan 1998)
- A. Allroth, *Partielle Differentialgleichungen: Dynamische Stabilitätsanalyse*, Institut für Festkörperforschung, Kernforschungsanlage Jülich
- Peter Grauel, Dissertation: *Das Ag/Peroxoldisulfatsystem: Grenzfläche und raumzeitliche Dynamik*, FU-Berlin, Mai 1999
- J. Löber¹, M. Bär², H. Engel¹, *Propagation Of Waves In Periodic-Heterogeneous Bistable Systems*, 1 TU-Berlin, 2 PTB, (Submitted on 21 Mar 2012)
- H.-J. Qaudbeck-Seeger, E. Diemann, *Facetten einer Wissenschaft, Chemie aus ungewöhnlichen Perspektiven*, WILEY-VCH Verlag 2004 Weinheim Seite 145
- <http://www.landesstelle.de/index.php/objekte-des-monats-einzeln/items/gluehlampe.html> (10.07.2012)