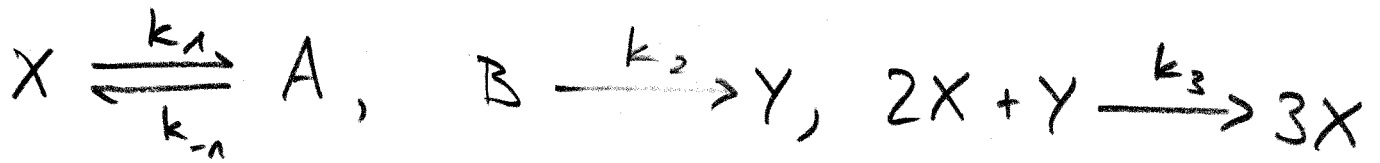


Schnackenberg Modell (1979)

- einfaches (hypothetisches) Modell für einen chemischen Oszillator



Reaktionsgleichungen für Zwischenprodukte:

$$(i) \quad \frac{d}{dt} x(t) = k_{-1} a - k_1 x + k_3 x^2 y$$

$$(ii) \quad \frac{d}{dt} y(t) = k_2 b - k_3 x^2 y$$

Dimensionslose Form:

$$t = t_c s \quad x(t) = x_c X(t/t_c)$$

$$y(t) = y_c \Psi(t/t_c)$$

$$(i) \rightarrow \frac{x_c}{t_c} X'(s) = k_{-1} a - k_1 x_c X + k_3 x_c^2 y_c X^2 \Psi$$

$$X'(s) = \underbrace{\frac{k_{-1} t_c}{x_c} a}_{=: \tilde{a}} - \underbrace{k_1 t_c}_{=1} X + \underbrace{k_3 x_c y_c t_c}_{=1} X^2 \Psi$$

$$(ii) \rightarrow \frac{y_c}{t_c} \Psi'(s) = k_2 b - k_3 x_c^2 y_c X^2 \Psi$$

$$\Psi'(s) = \underbrace{\frac{k_2 t_c}{y_c} b}_{=: \tilde{b}} - \underbrace{k_3 t_c x_c^2}_{=1} X^2 \Psi$$

Zu lösen:

$$k_1 t_c = 1, \quad k_3 x_c y_c t_c = 1, \quad k_3 t_c x_c^2 = 1$$

$$\textcircled{1} \rightarrow t_c = \frac{1}{k_1}$$

$$\textcircled{3} \rightarrow x_c = \sqrt{\frac{1}{k_3 t_c}} = \sqrt{\frac{k_1}{k_3}}$$

$$\textcircled{2} \rightarrow y_c = \frac{1}{t_c x_c k_3} = \frac{k_1}{k_3} \sqrt{\frac{k_3}{k_1}} = \sqrt{\frac{k_3}{k_1}}$$

Damit:

$$\dot{x} = \tilde{a} - x + x^2 \psi$$

$$\dot{y} = \tilde{b} - x^2 \psi$$

Benutze ab jetzt die Bezeichnungen

$$x := \tilde{x} \quad y := \tilde{y} \quad a := \tilde{a} \quad b := \tilde{b}$$

$$\rightarrow \dot{\tilde{x}} = a - \tilde{x} + \tilde{x}^2 \tilde{y}$$

$$\dot{\tilde{y}} = b - \tilde{x}^2 \tilde{y}$$

Fixpunkt:

$$0 = a - x + x^2 y$$

$$0 = b - x^2 y$$

$$\rightarrow x^* = a + b \quad y^* = \frac{b}{(a+b)^2}$$

Charakterisierung der FPs:

Jacobimatrix:

$$J(x, y) = \begin{bmatrix} -1 + 2xy & x^2 \\ -2xy & -x^2 \end{bmatrix}$$

$$P(\lambda) = \det(J - \lambda \mathbb{1}) = \lambda^2 + (1 + x^2 - 2xy)\lambda + x^2$$

$$\lambda_{1/2} = -\frac{1 + x^2 - 2xy}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{1 + x^2 - 2xy}{2}\right)^2 - x^2}$$

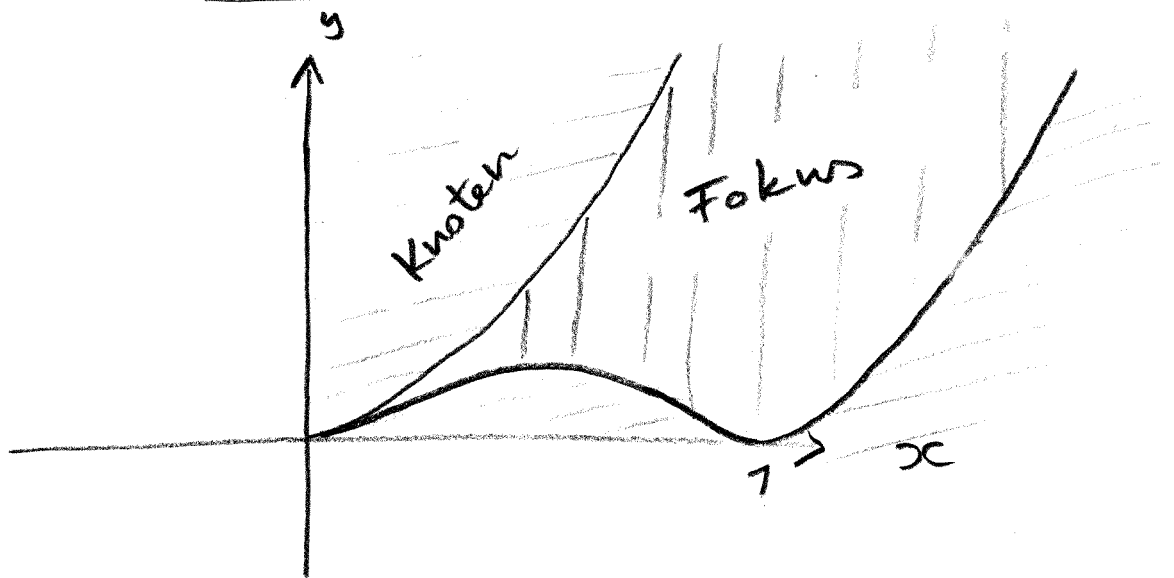
$$\sqrt{\dots} = \frac{1}{4} \sqrt{(1 + x^2 - 2xy)^2 - 4x^2}$$

$\stackrel{!}{=} 0$ Grenze zw. Fokus / Knoten

$$(1 + x^2)^2 - x^2 - 4x(1 + x^2)y + 4x^2 y^2 = 0$$

$$y^2 - \frac{1 + x^2}{x} y + \frac{(1 + x^2)^2 - x^2}{4x^2} = 0$$

$$y_{1/2} = \frac{1+x^2 \pm 2x}{2x}$$



Stabilität:

$$\lambda_{1/2} = - \underbrace{\frac{1+x^2-2xy}{2}}_{\textcircled{1}} \pm \sqrt{\underbrace{\left(\frac{1+x^2-2xy}{2}\right)^2 - x^2}_{\textcircled{2}}}$$

Wenn $\textcircled{2}$ reell ist, dann ist es betragsmäßig kleiner als $\textcircled{1}$. Also entscheidet nur $\textcircled{1}$ über Stabilität.

$$\textcircled{1} = 0 \rightarrow 1+x^2-2xy = 0$$

mit $y^* = \frac{b}{(a+b)^2}$ $x^* = a+b$ \rightarrow $\left. \begin{array}{l} y = \frac{1+x^2}{2x} \\ > \text{instabil} \\ < \text{stabil} \end{array} \right\}$ liegt im Bereich des Fokus \rightarrow Hopf-Bif.

$$\rightarrow \frac{b}{(a+b)^2} = \frac{1+(a+b)^2}{2(a+b)}$$

$$\frac{b}{a+b} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}(a+b)^2$$

$$b = \frac{1}{2}(a+b) + \frac{1}{2}(a+b)^3$$

→ $\boxed{b-a = (a+b)^3}$ Bedingung
für Hopfb.

> instabiler FP

< stabiler FP

Nullklinen:

$$\dot{x} = a - x + x^2 y$$

$$\dot{y} = b - x^2 y$$

$$\dot{x} = 0 \leadsto y = \frac{x - a}{x^2}$$

x -Nullkline

$$\dot{y} = 0 \leadsto y = \frac{b}{x^2}$$

y -Nullkline

Auf x -Nullkline ist $\dot{x} = 0$

Auf y - " " ist $\dot{y} = 0$

Auf den Nullklinen verlaufen die Trajektorien im Phasenraum horizontal bzw. vertikal. Schnittpunkte der Nullklinen sind FP.

```
In[66]:= fx = a - x + x^2 y;  
fy = b - x^2 y;
```

```
In[69]:= (*Phaseportrait*)  
(*Nullklinen*)  
nully[x_] = y /. Flatten[Solve[fy == 0, y]];  
nullx[x_] = y /. Flatten[Solve[fx == 0, y]];
```

```
In[72]:= (*vor der Hopf*)
```

```
In[150]:= tfinal = 20;
```

```
In[222]:= pars = {a -> 0.1, b -> 0.8};
```

```
In[223]:= b - a /. pars
```

```
Out[223]= 0.7
```

```
In[224]:= (a + b) ^ 3 /. pars
```

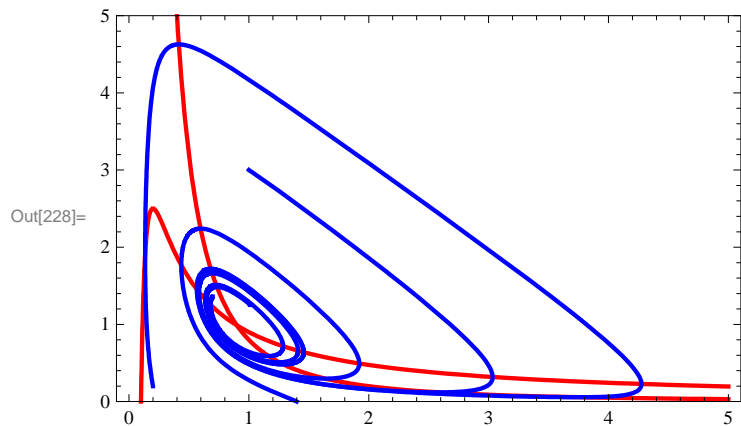
```
Out[224]= 0.729
```

```
In[225]:= traj[{x0_, y0_}] := NDSolve[Evaluate[  
  {  
    x'[t] == a - x[t] + x[t]^2 y[t],  
    y'[t] == b - x[t]^2 y[t],  
    x[0] == x0, y[0] == y0  
  } /. pars], {x[t], y[t]}, {t, 0, tfinal}]
```

```
In[226]:= pl = Map[(ParametricPlot[Evaluate[{x[t], y[t]} /. traj[#]], {t, 0, tfinal},  
  PlotStyle -> {Blue, Thick}] &), {{0.2, 0.2}, {1.0, 3.0}, {1.4, 0.002}}];
```

```
In[227]:= nullpl =  
  Plot[{nully[x], nullx[x]} /. pars, {x, 0, 5}, PlotStyle -> {Red, Thick}, PlotRange -> {0, 5}];
```

```
In[228]:= Show[nullpl, pl, PlotRange -> {{0, 5}, {0, 5}}, Frame -> True]
```



```
(*Nach der Hopf*)
```

```
In[229]:= pars = {a -> 0.1, b -> 0.6};
```

```
In[230]:= b - a /. pars
```

```
Out[230]= 0.5
```

```
In[231]:= (a + b) ^ 3 /. pars
```

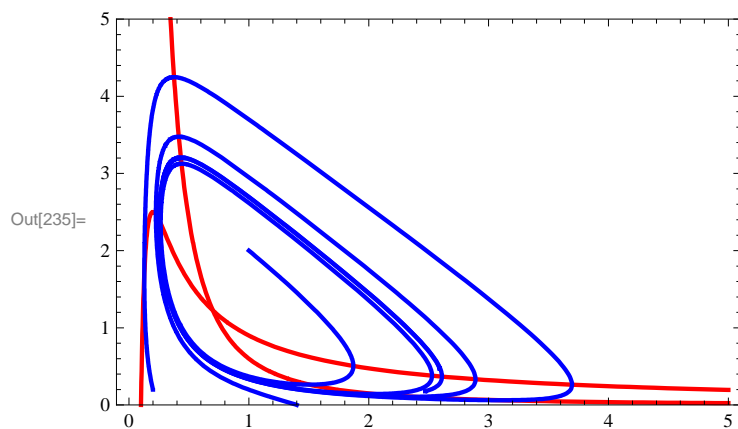
```
Out[231]= 0.343
```

```
In[232]:= traj[{x0_, y0_}] := NDSolve[Evaluate[
  {
    x'[t] == a - x[t] + x[t]^2 y[t],
    y'[t] == b - x[t]^2 y[t],
    x[0] == x0, y[0] == y0
  } /. pars], {x[t], y[t]}, {t, 0, tfinal}]
```

```
In[233]:= pl = Map[(ParametricPlot[Evaluate[{x[t], y[t]} /. traj[#]], {t, 0, tfinal},
  PlotStyle -> {Blue, Thick}] &), {{0.2, 0.2}, {1.0, 2.0}, {1.4, 0.002}}];
```

```
In[234]:= nullpl =
  Plot[{nullx[x], nullx[x]} /. pars, {x, 0, 5}, PlotStyle -> {Red, Thick}, PlotRange -> {0, 5}];
```

```
In[235]:= Show[nullpl, pl, PlotRange -> {{0, 5}, {0, 5}}, Frame -> True]
```



Hinweise zum 5. Zettel

3.) (i) Gleichungen (Reaktionsteil)
um HSS linearisieren

(ii) Ansatz

$$\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \frac{A}{\varphi} e^{i k \pi + \lambda(k) t}$$

bel. Vektor

einsetzen

(iv) Charakteristische Gl. aus
Determinante

(v) $\lambda \rightarrow 0$ nach b auflösen

minimum von $b(k)$ finden
und diskutieren

4) Kurven einzeichnen für
verschiedene Verhältnisse von
 D_u / D_v .