Übungen zu Computational Physics Blatt 5

Michael Bestehorn SoSe 2019

Aufgabe 8: Partielle Differentialgleichungen, der Brusselator

Der diffusive Brusselator[1], ein Modell für räumlich inhomogene chemische Oszillationen, besteht aus den beiden Ratengleichungen

$$\begin{aligned} \dot{n}_1 &= a - (1+b)n_1 + n_1^2 n_2 + D\Delta n_1 \\ \dot{n}_2 &= b n_1 - n_1^2 n_2 + \Delta n_2 \ . \end{aligned} \tag{1}$$

Normalerweise wird (1) in zwei räumlichen Dimensionen untersucht. Die Variablen $n_i(x, y, t)$ beschreiben dann die Konzentration von bestimmten an einer Nichtgleichgewichtsreaktion beteiligten Reaktanten, a und b sind fest eingestellte Kontrollparameter.

a) Instabilitäten. Wie lautet die stationäre homogene Lösung n_i^0? Untersuchen Sie deren Stabilität mittels linearer Stabilitätsanalyse und dem Ansatz

$$n_i = n_i^0 + u_i(x) \exp(\lambda t) \tag{2}$$

Lösen Sie das lineare DGL-System mit dem Modenansatz

$$u_i(x) = v_i \exp(ikx) \tag{3}$$

Was erhalten Sie für das Spektrum $\lambda(k)$? Im Folgenden soll a fest sein und b als Kontrollparameter dienen.

b) Hopf-Mode. Der Eigenwert am kritischen Punkt $b = b_c^H$ lautet

$$\lambda = \pm i\omega$$

Was ergibt sich für $b_c^H(k)$ und $\omega(k)$? Wie sieht die räumliche Struktur in der Nähe der Schwelle aus?

c) Turing-Mode. Bei der Turing-Mode handelt es sich um eine monotone Instabilität, die zu räumlicher Strukturbildung führt. Es gilt

$$\lambda = 0$$

an der Schwelle. Berechnen Sie $b_c^T(k)$. Was für Strukturen erwarten Sie hier knapp oberhalb der Schwelle?

---

[1] zunächst ohne Diffusionsterme von Lefever und Prigogine an der Freien Universität Brüssel entwickelt (1968). Ilya Prigogine 1917 (Moskau) – 2003 (Brüssel), Nobelpreis f. Chemie 1977 "for his contributions to non-equilibrium thermodynamics, particularly the theory of dissipative structures", aus /www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/1977/ .

d) Kodimension-Zwei-Punkt. Skizzieren Sie $b_c^{T,H}(k^{T,H})$ aus Teil b) und c) als Funktion von a. Hierbei bezeichnet $k^{T,H}$ denjenigen k-Wert welcher zum entsprechenden Minimum der Funktion $b_c^{T,H}(k)$ gehört. Am Kodimension-Zwei-Punkt (a_{CD2}, b_{CD2}) im Parameterraum (a, b) werden beide Moden bei gleichem $b_c^T(k^T) = b_c^H(k^H) = b_{CD2}$ instabil. Wie lautet a_{CD2}? Skizzieren Sie im (a, b)-Raum ein Phasendiagramm. Unterscheiden Sie dabei die Bereiche

Homogen (räumlich und zeitl.) – Turing – Hopf

e) Numerische Lösungen. Untersuchen Sie das System (1) numerisch in 2D mittels FTCS in den drei Parameterbereichen

1. Hopf-Region ($a < a_{CD2}$)
2. Turing-Region ($a > a_{CD2}$)
3. am Kodimension-Zwei-Punkt ($a = a_{CD2}$)

jeweils knapp oberhalb der Schwelle $(b-b_c)/b_c \ll 1$. Wählen Sie für alle Rechnungen $D = 1/2$.

Verwenden Sie periodische Randbedingungen:

$$n_i(0, y, t) = n_i(L, y, t), \qquad n_i(x, 0, t) = n_i(x, L, t)$$

und wählen Sie L so groß, dass für 2.) genügend kritische Wellenlängen in das Gebiet passen.