Analysis und Numerik zur Evolution von zweidimensionalen Mustern, mit Anwendung in der Biologie

Bachelorarbeit

vorgelegt von
Lucas Heitele

an der

Universität Konstanz

Mathematisch- Naturwissenschaftliche Sektion
Fachbereich Mathematik und Statistik

Gutachter: Herr Prof. Dr. H. Freistühler

Konstanz, 28. April 2016

Konstanzer Online-Publikations-System (KOPS)
URL: http://nbn-resolving.de/urn:nbn:de:bsz:352-0-372634

Kurzzusammenfassung

In der folgenden Arbeit wird der Musterbildungsprozess bestimmter Reaktions-Diffusions-Systeme in zweidimensionalen Gebieten untersucht. Muster entwickeln sich hier aus kleinen Störungen um einen diffusionsbedingt instabilen Gleichgewichtszustand in Form einer heterogenen, stationären Lösung. Mittels einer Stabilitätsuntersuchung des um die Ruhelage linearisierten Systems werden allgemeine Anforderungen an die Parameter des Systems bestimmt, damit eine solche diffusionsbedingte Instabilität auftreten kann und sich räumliche Muster bilden können. Des Weiteren werden verschiedene Verfahren vorgestellt, die sich zur numerischen Lösung der Reaktions-Diffusions-Systeme eignen. Anschließend wird einer der vielen Anwendungsbereiche dieser Systeme in der Biologie vorgestellt. Als möglicher Mechanismus für die Musterbildung auf Tierfellen werden an einigen Beispielen Gemeinsamkeiten des qualitativen Verhaltens der durch das System erzeugbaren und der in der Natur auftretenden Muster aufgezeigt.

Inhaltsverzeichnis

Kurzzusammenfassung . . . . . **III**

Inhaltsverzeichnis . . . . . **V**

Abbildungsverzeichnis . . . . . **VII**

Symbolverzeichnis . . . . . **XI**

1 Einleitung **1**

2 Analysis zur Evolution zweidimensionaler Muster **3**
2.1 Der Turing-Mechanismus 3
2.2 Definition der grundlegenden Begriffe 6
2.3 Lineare Stabilitätsuntersuchung 7
2.3.1 Diffusionsbedingte Instabilität in endlichen Gebieten 8
2.3.2 Diffusionsbedingte Instabilität in unendlichen Gebieten 15
2.4 Analyse des Schnakenberg-Modells in rechteckigen Gebieten 16
2.4.1 Der Turing-Raum 16
2.4.2 Eigenfunktionen in rechteckigen Gebieten 20
2.4.3 Trapping-Region für das Schnakenberg-Modell 21
2.4.4 Muster in rechteckigen Gebieten 23

3 Numerische Verfahren zur Simulation zweidimensionaler Muster . **28**
3.1 Ortsdiskretisierung des Laplace-Operators 29
3.1.1 Für ein rechteckiges Gebiet 29
3.1.2 Für ein Kreisring-Segment 32
3.2 Zeitdiskretisierung 34
3.2.1 Das Explizite Euler-Verfahren 35
3.2.2 Die Implizit-Explizit-Verfahren (IMEX) 36
3.3 Das Alternating-Direction-Implicit-Verfahren (ADI) 37
3.4 Simulationsergebnisse 39

4 Anwendung in der Biologie: Musterbildung auf Fellen von Säugetieren **42**
4.1 Musterung von Schwanz und Beinen 42
4.2 Musterung des Rumpfs 46
4.3 Anomalien 50
4.4 2-Phasen-Modell für Leoparden- und Jaguarmuster 52

5 Fazit und Ausblick **58**

Anhang A: MATLAB®-Codes . . . . . **XIII**

Anhang B: Inhalt der beigelegten CD-ROM . . . . . **XXVII**

Literaturverzeichnis . . . . . **XXIX**

Abbildungsverzeichnis

1 Nullklinen des entdimensionalisierten Schnakenberg-Modells. $g(u,v) = 0$, $b = 1$ (durchgezogen), $f(u,v) = 0$, $a = 0.2$ (gestrichelt) und $f(u,v) = 0$,$a = -0.2$ (gepunktet) [*Eigene Abbildung in Anlehnung an [16], S.79, Figure 2.2*] 5

2 **a)** Typischer Verlauf von $h(k^2)$ für $d < d_c$ (durchgezogen), $d = d_c$ (gestrichelt) und $d > d_c$ (gepunktet). **b)** Typischer Verlauf von $\lambda(k^2)$ für $d < d_c$ (durchgezogen), $d = d_c$ (gestrichelt) und $d > d_c$ (gepunktet). [*Eigene Abbildung in Anlehnung an [16], S.86, Figure 2.5*] 13

3 Turing-Raum als eingeschlossene Fläche zwischen den Kurven s_1 (blau) und s_3 für $d = 15$ (strichpunktiert), $d = 20$ (gestrichelt), $d = 100$ (durchgezogen) und für $d \to \infty$ (gepunktet). [*Eigene Abbildung in Anlehnung an [16], S.108, Figure 2.12*] 19

4 Trapping-Region (durch A, B, C, D, E, F eingeschlossene Menge G) für das Schnakenberg-Modell mit $a = 0.2$ und $b = 2$. Nullklinen $g(u,v) = 0$ (durchgezogen) und $f(u,v) = 0$ (gestrichelt). Die Pfeile geben die Richtung der Trajektorien auf ∂G an. [*Eigene Abbildung*] . 23

5 Dispersionsrelation $\lambda(k^2)$ mit $(\pi/p)^2$ als einzige instabile Wellenzahl [*Eigene Abbildung in Anlehnung an [16], S.94, Figure 2.7*] 24

6 **a)** Zeitliche Entwicklung der Mode mit $n = 1, m = 0$ (links) aus kleinen, räumlichen Störungen aus der homogenen Ruhelage u_0 (links) in einem rechteckigen Gebiet. **b)** Darstellung der Mode aus a), wobei der schwarze Bereich die Werte über dem Gleichgewicht u_0 und der hellgraue Bereich Werte darunter symbolisieren. [*Eigene Abbildung in Anlehnung an [16], S.94, Figure 2.7*] 25

7 Mode mit $n = 2, m = 0$, die durch Verdopplung der Gebietsbreite in der Situation aus Abb.6 instabil wird. [*Eigene Abbildung*] 25

8 **a)**Räumliche Moden in einem rechteckigen Gebiet zu verschiedenen Wellenzahlen **b)** Das durch Überlagerung der zwei darüber abgebildeten Moden aus a) resultierende Muster [*Eigene Abbildungen*] 26

9 Beispiel für ein äquidistantes Gitter $B_{\Delta x, \Delta y}$ mit $M = 10$ und $N = 5$, wobei $\bullet$ innere Gitterpunkte und $\circ$ Rand-Gitterpunkte darstellen [*Eigene Abbildung*] 29

10 Beispiel für ein Gitter $B_{\Delta r, \Delta \varphi}$ mit $M = 5$ und $N = 8$, wobei $\bullet$ innere Gitterpunkte und $\circ$ Rand-Gitterpunkte darstellen [*Eigene Abbildung*] 32

11 Simulation (2-SBDF) des Schnakenberg-Modells ($a = -0.3$, $b = 1.53$, $d = 5$) im rechteckigen Gebiet $B = (0,2) \times (0,1)$ und Gitter mit $M = 200, N = 100$ **a)** $\gamma = 50, \Delta t = 0.005$ **b)** $\gamma = 3000, \Delta t = 0.0001$ [*Eigene Abbildung*] 39

12 Simulation des Schnakenberg-Modells ($a = -0.3, b = 1.53, d = 5$) im rechteckigen Gebiet $B = (0,2) \times (0,1)$ und Gitter mit $M = 200, N = 100$ **a)** Explizites Euler-Verfahren $\gamma = 50, \Delta t = 1 \cdot 10^{-6}$(links), $\gamma = 3000, \Delta t = 1 \cdot 10^{-6}$ (rechts) **b)** ADI-Verfahren $\gamma = 50, \Delta t = 0.001$ (links), $\gamma = 3000, \Delta t = 0.0001$ (rechts) [*Eigene Abbildung*] 40

13 Simulation (2-SBDF) des Schnakenberg-Modells ($a = -0.3$, $b = 1.53$, $d = 4.54$, $\gamma = 107$) im rechteckigen Gebiet $B = (0,2) \times (0,1)$ und einem Gitter mit $M = 200$, $N = 100$, sowie $\Delta t = 0.001$ nach 5000 Iterationen (Isolierte Mode zur Simulation eines Streifenmusters) [*Eigene Abbildung*] 41

14 Vertreter der Überfamilie der Katzenartigen. Von links nach rechts: Ginsterkatze (Genetta), Leopard (Panthera pardus), Gepard (Acinonyx jubatus) [*Quellen: vignette3.wikia.nocookie.net (10.04.2016), duden.de (10.04.2016), pixabay.com (10.04.2016)*] 42

15 Fellmusterung auf dem Schwanz verschiedener Vertreter der Katzenartigen. **a)** Ginsterkatze **b)** Leopard **c)** Jaguar **d)** Gepard [*Abbildungen aus [16], S.147, Figure 3.2*] 43

16 Schnakenberg $a = -0.3, b = 1.53, d = 5$ **a)** $\gamma = 45, r_0 = 0.1, r_1 = 0.16, s = 5$ **b)** $\gamma = 450, r_0 = 0.02, r_1 = 0.19, s = 4$ **c)** $\gamma = 450, r_0 = 0.04, r_1 = 0.32, s = 4$ ($u < u_0$ schwarz) [*Eigene Abbildung in Anlehnung an [16], S.147, Figure 3.2*] 45

17 **a)** Burchell-Zebra (Equus quogga burchelli) **b)** Grevy-Zebra (Equus grevy) **c)** Skizze eines Burchell-Zebra-Embryos zum Zeitpunkt der Bildung des Vormusters (12 Tage, links) und der Einfluss des Wachstums auf das Muster (rechts). **d)** Skizze eines Grevy-Zebra-Embryos zum Zeitpunkt der Bildung des Vormusters (5 Wochen). [*Quellen: a) en.wikipedia.org (10.04.2016) b) upload.wikimedia.org (10.04.2016) c),d) [16], S.149, Figure 3.3*] 47

18 **a)** Netzgiraffe (Giraffa camelopardalis reticulata) **b)** Simulation Schnakenberg ($a = -0.3$, $b = 1.53$, $d = 5\gamma = 1000$, Grenzkonzentration $u_g = u_0 = 1.5$. **c)** Parameter wie in b) mit $u_g = 1.2$. [*Quellen: a) giraffeworlds.com (10.04.2016), b),c) Eigene Abbildungen in Anlehnung an [16], S.150, Figure 3.5*] 48

19 Simulation Schnakenberg ($a = -0.3$, $b = 1.53$, $d = 5$) **(i)** $\gamma = 0.3$ **(ii)** $\gamma = 2$ **(iii)** $\gamma = 25$ **(iv)** $\gamma = 50$ **(v)** $\gamma = 150$ **(vi)** $\gamma = 1000$ **(vii)** $\gamma = 1.5 \cdot 10^4$ **(viii)** $\gamma = 5 \cdot 10^5$ [*Eigene Abbildungen in Anlehnung an [16], S.151, Figure 3.6*] 49

20 **a)** Honigdachs (Mallivora caoensis) **b)** Südlicher Tamandua (Tamandua tetradactyla) [*Quellen: a) dkfindout.com (10.04.2016), b) posterlounge.de (10.04.2016)*] 50

21 Fellmuster-Anomalien **a)** Burchell-Zebra **b)** Gepard (Acinonyx jubatus rex) [*Quellen: a) wildlifeextra.com (10.04.2016), b) quora.com (10.04.2016), c) c2.staticflickr.com (10.04.2016)*] 51

22 Fellmuster Leopard **(i)** kurz nach der Geburt (Punkte), **(ii)** nach wenigen Wochen (Ringe) und**(iii)** beim ausgewachsenen Tier (Rosetten). [*Quellen: (i) dailymail.co.uk (10.04.2016), (ii) zooborns.com (10.04.2016), (iii) upload.wikimedia.org (10.04.2016)*] 52

23 Fellmuster Jaguar **(i)** einige Tage nach der Geburt (Punkte), **(ii)** nach wenigen Wochen (unregelmäßige Ringe) und **(iii)** beim ausgewachsenen Tier (kleine Punkte, eingeschlossen in unregelmäßig gebrochenen Polygonen). [*Quellen: (i) kotv.images.worldnow.com (10.04.2016), (ii) de.pinterest.com (10.04.2016), (iii) flickr.com (10.04.2016)*] 53
24 Turing-Raum (gefärbte Fläche) des 2-Phasen-Modells für $d = 2.22$ und zulässiger Punkt $(a, b) = (0.899, -0.91)$ $(+)$. [*Eigene Abbildung in Anlehnung an [12], S.5, FIG. 5*] 54
25 Simulation 2-Phasen-Modell **(i)** $a = 0.899, b = -0.91, d = 2.22, \gamma = 0.37$, $r_1 = 2$, $r_2 = 3.5$ **(ii)** aus (i) durch Erhöhung von r_1 auf 7. **(iii)** aus (ii) durch Erhöhung von γ auf 1 und anschließender Stabilisierung durch Erhöhung von d auf 6.67. [*Eigene Abbildung in Anlehnung an [12], S.4, FIG. 3 und FIG. 4*] 55
26 Simulation 2-Phasen-Modell **(i)** aus Abb.25 (i) durch Erhöhung von r_2 auf 7 und längeres Halten der Parameter. **(ii)** aus (i) durch Erhöhen von γ auf 1.2 und anschließender Stabilisierung des Musters durch Erhöhung von d auf 6.67. [*Eigene Abbildung in Anlehnung an [12], S.5, FIG. 7*] 56

Symbolverzeichnis

(AB)	offene Verbindungslinie der Punkte $A \in \mathbb{R}^n$ und $B \in \mathbb{R}^n$	22
$\approx$	ist ungefähr gleich	13
$\bar{B}$	Abschluss der Menge B	29
Δu	Laplace-Operator	3
$\det(A)$	Determinante der Matrix A	10
$\equiv$	ist identisch	6
$\lVert \cdot \rVert$	Euklidische Norm auf $\mathbb{R}^2$	6
$\mathcal{O}(f)$	Landau-Symbol	9
I_n	$n \times n$-Einheitsmatrix	9
∂B	Rand der Menge B	7
$\mathbb{R}_{>0}$	positive reelle Zahlen	10
$\mathrm{Re}(x)$	Realteil von x	10
$\sim$	ist proportional zu	9
$\mathrm{tr}(A)$	Spur der Matrix A	10
$\vec{\nabla} u$	Gradient	7
$\vec{a} \cdot \vec{b}$	Standardskalarprodukt der Vektoren $\vec{a}$ und $\vec{b}$	7

1 Einleitung

In der Natur sind Muster so vielfältig wie nützlich. So dienen die Streifen des Zebras nach aktuellem Kenntnisstand als natürlicher Schutz gegen die Tsetsefliege, die nachweislich gestreifte Flächen meidet, die Punkte des Gepards zur Tarnung und die Muster auf dem Gefieder vieler Vögel zur Balz. Die Frage nach dem „Warum“ stellt sich im Alltag wohl deutlich öfter als die Frage nach dem „Wie“. Das mag daran liegen, dass sich die Frage nach dem Zweck bestimmter Muster oft intuitiver beantworten lässt, als die nach deren Entstehung. Dennoch ist der Prozess der Musterbildung aus biologischer Sicht sehr wichtig und wird vor allem im Bereich der Entwicklungsbiologie intensiv erforscht. Allgemein bekannt ist, dass Fellfärbungen durch Pigmentzellen namens Melanozyten initiiert werden. Diese liegen in der unteren Schicht der Epidermis und produzieren Pigmente, sogenannte Melanine, die in die Haarzellen abgegeben werden. Bei Säugetieren treten nur zwei Typen von Melaninen auf: Eines, das für die schwarz-bräunliche und eines, das für die gelblich-rötliche Färbung des Haars verantwortlich ist. Heute wird davon ausgegangen, dass die Melaninproduktion der Melanozyten von der lokalen Konzentration bestimmter chemischer Aktivatoren und Inhibitoren abhängt [14]. Diese Theorie ist auf den britischen Mathematiker A. M. Turing zurückzuführen. Bekannt wurde Turing unter anderem durch die Entschlüsselung der Chiffriermaschine Enigma, die im Zweiten Weltkrieg zur Verschlüsselung des Nachrichtenverkehrs des deutschen Militärs verwendet wurde. Des Weiteren bildete er mit der Entwicklung des Rechnermodells der Turingmaschine eines der Fundamente der theoretischen Informatik [4]. Im Jahr 1952 veröffentlichte Turing eine Arbeit mit dem Titel „*The Chemical Basis of Morphogenesis*“ [25], in der er eine Theorie vorstellt, nach welcher die biologische Form- und Musterbildung einem „Vormuster“ in Form eines Konzentrationsmusters gewisser chemischer Stoffe, die er Morphogene nannte, unterliegt. Erst im Jahr 2006 wurde ein erstes Beispiel für solche Morphogene gefunden. Ein Freiburger Forschungsteam [20] des Max-Planck Instituts für Immunbiologie identifizierte die Proteine, welche die räumliche Verteilung der Haare von Mäusen regulieren. Mit diesen konnten sie Turings Theorie experimentell bestätigen.

Nach Turings Theorie können Morphogene miteinander reagieren und durch Zellen diffundieren. Mit einem mathematischen Modell zeigte er dann, dass, falls diese Morphogene auf bestimmte Art und Weise miteinander reagieren und diffundieren, aus einer anfänglich homogenen Verteilung der beiden Morphogene aus kleinen räumlichen Störungen heterogene, stationäre Konzentrationsmuster entstehen können [6].

Mathematisch lässt sich die Situation folgendermaßen formulieren: Es werden zwei chemische Stoffe in einem Reaktions-Diffusions-System betrachtet. Ohne Diffusion gehen die zwei Stoffe in einen homogenen, stationären Zustand über. Aus diesem Gleichgewichtszustand kann sich dann durch eine sogenannte diffusionsbedingte Instabilität des Gleichgewichtszustands ein räumliches Muster in Form eines inhomogenen Gleichgewichts entwickeln. Das heißt, die homogene Ruhelage des Systems wird unter Hinzunahme von Diffusion instabil. Turings Idee war unter anderem deshalb so innovativ, da Diffusion hierbei als destabilisierender Prozess anstatt als wie normalerweise rein stabilisierender Prozess betrachtet wird.

Um einen Eindruck davon zu erhalten, wie ein solches System Muster erzeugen

kann, zieht der britische Mathematiker J. D. Murray [16] die folgende bildliche, wenn auch unrealistische Analogie heran:

Auf einem Feld mit trockenem Gras befindet sich eine große Anzahl an Heuschrecken, die bei hohen Umgebungstemperaturen anfangen können zu schwitzen und dabei Feuchtigkeit erzeugen. Das Gras wird nun an einem Punkt angezündet und die Flammen beginnen sich langsam auszubreiten. Die Heuschrecken können hier als Inhibitor und die Flammen als Aktivator gesehen werden. Gäben die Heuschrecken keine Feuchtigkeit ab, so würde das Gras einfach komplett abbrennen. Das Resultat wäre ein einheitlich verbranntes Gebiet. Wird nun angenommen, dass die Heuschrecken, sobald sich ihre Umgebungstemperatur hinreichend erhöht, so viel Feuchtigkeit erzeugen, dass das Feuer das befeuchtete Gras nicht mehr entzünden kann. Die Situation ist dann die Folgende: Das Feuer beginnt, sich mit einer gewissen Geschwindigkeit auszubreiten. Wenn die Heuschrecken fühlen, dass die Flammenfront näher kommt, bewegen sie sich schnell von dieser weg und erzeugen dabei genug Feuchtigkeit, um die Flammen daran zu hindern, sich auf dieses feuchte Gebiet auszubreiten. Somit begrenzt sich das verbrannte Gebiet auf einen endlichen Bereich. Dieser hängt von der Ausbreitungsgeschwindigkeit des Feuers und der Heuschrecken sowie von den verschiedenen Reaktionsparametern ab. Liegen nun anstatt nur einer einzigen viele zufällig auf dem Feld verteilte „Anfangsfeuer“ vor, so ist zu sehen, wie dieser Prozess zu einer räumlich heterogenen stationären Verteilung von verbrannten und nicht-verbrannten Regionen im Feld führt, da um jedes Feuer das obige Szenario stattfindet. Wenn sich die Heuschrecken mit geringerer oder gleicher Geschwindigkeit wie die Flammen ausbreiten würden, könnte sich kein solch ein Muster entwickeln.

Murray untersuchte den Turing-Mechanismus und dessen Anwendungsmöglichkeiten in verschiedensten Bereichen der Biologie sehr intensiv. Die folgende Arbeit orientiert sich stark am zweiten und dritten Kapitel von J. D. Murrays Buch „*Mathematical Biology II: Spatial Models and Biomedical Applications*“ [16]. Diese beschäftigen sich mit einer genaueren Analyse des Mechanismus und vergleichen die erzeugbaren Muster mit Fellmustern von Säugetieren. Die Frage, die sich zunächst stellt, ist: Unter welchen Voraussetzungen können sich durch solch einen Mechanismus überhaupt Muster entwickeln und welche Muster können erzeugt werden? Da die auftretenden Reaktions-Diffusions-Systeme im Allgemeinen nicht analytisch lösbar sind, ist es sinnvoll, die Lösungen numerisch zu approximieren. Turings Grundidee hinter diesem Mechanismus regt die Frage nach der Anwendbarkeit des Modells bezüglich des Musterbildungsprozesses in der Biologie an. Sind alle Tierfellmuster mit diesem einen Mechanismus erzeugbar? Ist die Idee dieses Mechanismus als Erzeuger dieses Vormusters vereinbar mit wissenschaftlich bekannten Erkenntnissen und Beobachtungen in diesem Bereich der Biologie?

2 Analysis zur Evolution zweidimensionaler Muster

Dieses Kapitel der Arbeit orientiert sich an Kapitel 2 von J. D. Murrays Buch „*Mathematical Biology II*„[16]. Es werden verschiedene Reaktionsterme für den Turing-Mechanismus vorgestellt, mit denen generell Muster entstehen können. Durch eine Linearisierung des Reaktions-Diffusions-Systems um die homogene Ruhelage werden die Bedingungen an die Parameter bestimmt, die für eine diffusionsbedingte Instabilität der Ruhelage erfüllt sein müssen. In einfachen rechteckigen Gebieten werden dann die in der Lösung des linearisierten Systems enthaltenen räumlichen Moden bestimmt. Mit diesen lässt sich dann ein erster qualitativer Eindruck der entstehenden Muster gewinnen.

2.1 Der Turing-Mechanismus

In dieser Arbeit werden Mechanismen mit zwei chemischen Spezies A und B in einem Reaktions-Diffusions-System der Form

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t} &= F(A,B) + D_A \Delta A, \\ \frac{\mathrm{d}B}{\mathrm{d}t} &= G(A,B) + D_B \Delta B, \end{aligned} \tag{2.1}$$

betrachtet. $A(\vec{r},t)$ bzw. $B(\vec{r},t)$ bezeichnet dabei die Konzentration des Stoffes A bzw. B am Ort $\vec{r}$ zum Zeitpunkt t. F und G sind nichtlineare Reaktionsterme und D_A, D_B die Diffusionskoeffizienten.

Für diese Reaktionsterme gibt es verschiedene Ansätze. Es werden nun verschiedene Reaktionsterme vorgestellt, die trotz ihrer unterschiedlichen chemischen Motivation und Herkunft äquivalent bezüglich ihrer Interpretation im Sinne des Aktivator-Inhibitor Prozesses sind und unter bestimmten Voraussetzungen in der Lage sind, Muster zu erzeugen.

Das Schnakenberg-Modell

Der deutsche Physiker J. Schnakenberg [19] entwarf 1979 im Rahmen einer Untersuchung von chemischen Oszillatoren (chemische Reaktionen mit oszillierender Reaktionsgeschwindigkeit) die Reaktionsterme

$$\begin{aligned} F(A,B) &= k_1 - k_2 A + k_3 A^2 B, \\ G(A,B) &= k_4 - k_3 A^2 B. \end{aligned} \tag{2.2}$$

mit Konstanten $k_1, \ldots, k_4$. Hier wird A autokatalytisch vom $k_3 A^2 B$-Term in F erzeugt.

Das System aus (2.1) kann immer entdimensionalisiert werden. Für das Schnakenberg-Modell wird nun beispielhaft eine solche Entdimensionalisierung durchgeführt. Dafür

wird eine Längenskala L eingeführt. Mit den Transformationen

$$\begin{aligned} u &:= A\sqrt{\frac{k_3}{k_2}}, \quad v := B\sqrt{\frac{k_3}{k_2}}, \quad t^* := \frac{D_A t}{L^2}, \quad x^* := \frac{x}{L}, \\ d &:= \frac{D_B}{D_A}, \quad a := \frac{k_1}{k_2}\sqrt{\frac{k_3}{k_2}}, \quad b := \frac{k_4}{k_2}\sqrt{\frac{k_3}{k_2}}, \quad \gamma := \frac{L^2 k_2}{D_A} \end{aligned} \tag{2.3}$$

lässt sich das Schnakenberg-Modell schreiben als

$$\begin{aligned} u_t &= \gamma f(u,v) + \Delta u, \\ v_t &= \gamma g(u,v) + d\Delta v, \end{aligned} \tag{2.4}$$

mit

$$f(u,v) = a - u + u^2 v \text{ und } g(u,v) = b - u^2 v. \tag{2.5}$$

Die Sternchen wurden in der Notation der Einfachheit halber weggelassen.

Die dimensionslose Form des Systems bringt einige Vorteile mit sich. So ermöglichen die dimensionslosen Parameter γ und d eine umfassendere biologische Interpretation. Auch für die Darstellung des Turing-Raumes – der Parameterraum, in dem sich für ein System Muster bilden können – ist die dimensionslose Form von Vorteil. Dieser lässt sich dann übersichtlich im (γ, d)-Raum darstellen.

Der Parameter γ kann auf verschiedene Art und Weise interpretiert werden. In dieser Arbeit wird er jedoch hauptsächlich als Maß für die Größe des zugrundeliegenden Gebiets verstanden. Denn durch die Integration der Längenskala L in (2.3) ist γ für zweidimensionale Gebiete proportional zur Gebietsfläche. Damit lässt sich eine Änderung der Größe des Gebiets einfach durch eine Änderung des Parameters γ realisieren.

Das Gierer-Meinhardt-Modell

Ein weiteres Modell ist der im Jahr 1972 von den deutschen Physikern A. Gierer und H. Meinhardt [8] entwickelte Aktivator-Inhibitor-Mechanismus mit den Reaktionstermen

$$\begin{aligned} F(A,B) &= k_1 - k_2 A + \frac{k_3 A^2}{B}, \\ G(A,B) &= k_4 A^2 - k_5 B, \end{aligned} \tag{2.6}$$

wobei A der Aktivator und B der Inhibitor ist. Der $k_3 A^2/B$-Term wirkt wieder autokatalytisch.

Analog wie beim Schnakenberg-Modell, führt eine Entdimensionalisierung zu dem System (2.4) mit den Reaktionstermen

$$f(u,v) = a - bu + \frac{u^2}{v} \text{ und } g(u,v) = u^2 - v. \tag{2.7}$$

Für dieses Modell kann eine Hemmung des Aktivators hinzugefügt werden. Dann ergibt sich für f und g die Form

$$f(u,v) = a - bu + \frac{u^2}{v(1+ku^2)}, \quad g(u,v) = u^2 - v, \tag{2.8}$$

wobei k ein Maß für die Hemmung ist.

Das Thomas-Modell

Das empirische Substrat-Inhibitionssystem, das von D. Thomas [23] 1975 experimentell untersucht wurde, besitzt eine Reaktionskinetik der Form

$$\begin{aligned} F(A,B) &= k_1 - k_2 A - H(A,B), \\ G(A,B) &= k_3 - k_4 B - H(A,B), \\ H(A,B) &= \frac{k_5 AB}{k_6 + k_7 A + k_8 A^2}. \end{aligned} \tag{2.9}$$

Hier bezeichnet A bzw. B die Konzentration des Substrats Sauerstoff bzw. des Enzyms Uricase. Die Hemmung des Substrats A wird im H-Term durch $k_8 A^2$ beschrieben. Da die H-Terme negativ sind, führen sie zu einer Reduzierung von A und B, wobei die Reduktionsrate für große A gehemmt wird.

Eine Entdimensionalisierung führt zu den Reaktionstermen

$$\begin{aligned} f(u,v) = a - u - h(u,v) \text{ und } g(u,v) = \alpha(b-v) - h(u,v) \\ \text{mit} \qquad h(u,v) = \frac{\rho u v}{1 + u + K u^2} \end{aligned} \tag{2.10}$$

und positiven Parametern a, b, α, ρ und K.

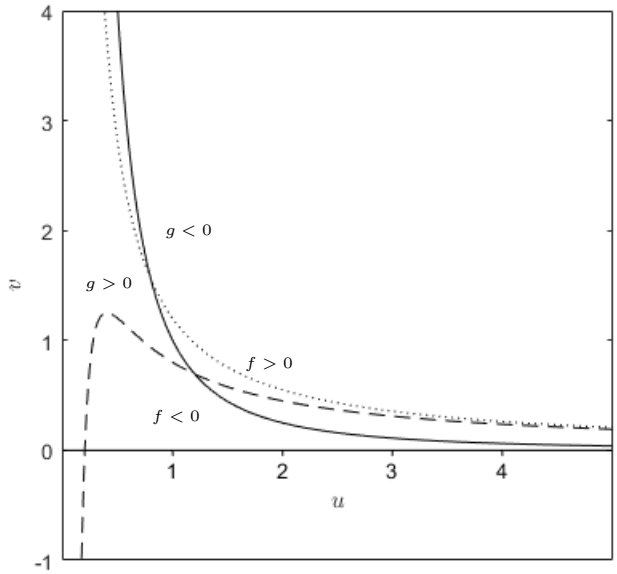


Abb. 1: Nullklinen des entdimensionalisierten Schnakenberg-Modells. $g(u,v) = 0$, $b = 1$ (durchgezogen), $f(u,v) = 0$, $a = 0.2$ (gestrichelt) und $f(u,v) = 0$,$a = -0.2$ (gepunktet) [*Eigene Abbildung in Anlehnung an [16], S.79, Figure 2.2*]

Ob ein Reaktions-Diffusions-System (2.4) Muster erzeugen kann hängt entscheidend von den Reaktionstermen f und g, sowie von den Parametern γ und d ab. Der Verlauf der Nullklinen der Reaktionsterme, also die zwei Kurven im (u, v)-Raum mit $f(u, v) = 0$ bzw. $g(u, v) = 0$ liefern dafür wesentliche Anfangsinformationen. Für die Reaktionsterme des Schnakenberg-Modells (2.5) sind in Abb.1 zwei typische Verläufe der Nullklinen abgebildet. In dieser Arbeit werden nur Reaktionsterme betrachtet, für die genau ein Schnittpunkt der beiden Nullklinen im ersten Quadranten des (u, v)-Raumes existiert.

Vor einer genaueren Untersuchung des Systems aus (2.1) werden nun einige grundlegende Definitionen und Begriffe eingeführt.

2.2 Definition der grundlegenden Begriffe

Definition 1 Eine Lösung (u^*, v^*) eines Systems von (partiellen) Differentialgleichungen der Form

$$\begin{aligned} F(t, \vec{x}, u, v, u_t, \Delta u) &= 0 \\ G(t, \vec{x}, u, v, v_t, \Delta v) &= 0 \end{aligned} \tag{2.11}$$

heißt *Gleichgewicht* (oder *Ruhelage*), falls $u_t^* \equiv v_t^* \equiv 0$.
Ein Gleichgewicht heißt *homogen*, falls es zusätzlich räumlich konstant ist. Andernfalls heißt das Gleichgewicht *heterogen*.

Ruhelagen sind also die zeitlich konstanten Lösungen und homogene Ruhelagen sind räumlich und zeitlich konstante Lösungen des Systems (2.11).

Definition 2 [5] Ein Gleichgewicht $\vec{w}_0 \in \mathbb{R}^2$ eines Systems linearer Differentialgleichungen der Form

$$\vec{w}_t = A\vec{w} + \vec{b} \tag{2.12}$$

mit $A \in \mathbb{R}^{2\times 2}$, $\vec{b} \in \mathbb{R}^2$ heißt *stabil*, falls für alle $\varepsilon > 0$ ein $\delta > 0$ existiert, sodass für alle Lösungen $\vec{w}$ von (2.12) mit $\|\vec{w}_0 - \vec{w}(0)\| < \delta$ bereits $\|\vec{w}_0 - \vec{w}(t)\| < \varepsilon$ für alle $t > 0$ gilt.
Eine Ruhelage heißt *instabil*, falls sie nicht stabil ist.

Eine Ruhelage ist also stabil, falls eine kleine Störung um diese auch klein bleibt.

Definition 3 [5] Ein Gleichgewicht $\vec{w}_0$ von (2.12) heißt *asymptotisch stabil*, falls es stabil ist und ein $\delta > 0$ existiert, sodass für alle Lösungen $\vec{w}$ mit $\|\vec{w}_0 - \vec{w}(0)\| < \delta$ bereits $\lim_{t\to\infty} \|\vec{w}_0 - \vec{w}(t)\| = 0$ gilt.

Eine Ruhelage ist also asymptotisch stabil, falls eine kleine Störung um diese für $t \to \infty$ gegen 0 geht.

Definition 4 Für ein homogenes Gleichgewicht (u^*, v^*) von (2.4) heißt das (lineare) Differentialgleichungssystem

$$\vec{w}_t = \gamma A \vec{w} + D \Delta \vec{w} \tag{2.13}$$

mit

$$A := \begin{pmatrix} f_u(u^*, v^*) & f_v(u^*, v^*) \\ g_u(u^*, v^*) & g_v(u^*, v^*) \end{pmatrix}, \; D := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & d \end{pmatrix} \text{ und } \vec{w} := \begin{pmatrix} u - u^* \\ v - v^* \end{pmatrix}$$

die *Linearisierung* von (2.4) um (u^*, v^*).

Eine genauere Herleitung der Linearisierung von (2.4) wird im nächsten Kapitel durchgeführt.

Definition 5: Ein homogenes Gleichgewicht $(u^*, v^*) \in \mathbb{R}^2$ von (2.4) heißt *linear stabil*, falls $\vec{w}_0 = \vec{0}$ ein stabiles Gleichgewicht der Linearisierung um (u^*, v^*) ist.

2.3 Lineare Stabilitätsuntersuchung

Damit ein Reaktions-Diffusions-System räumliche Muster erzeugen kann, muss dessen homogene Ruhelage eine diffusionsbedingte Instabilität aufweisen. Ein Gleichgewicht heißt diffusionsbedingt instabil, falls es ohne Diffusion stabil, aber instabil unter Hinzunahme von Diffusion ist. Es werden in diesem Abschnitt die notwendigen und hinreichenden Bedingungen für diffusionsbedingte Instabilität eines Gleichgewichtszustands für das allgemeine System (2.4) bestimmt. Dazu wird das System um ein homogenes Gleichgewicht linearisiert und durch eine Stabiliätsuntersuchung die entsprechenden Bedingungen für die diffusionsbedingte Instabilität bestimmt.

Um das Problem mathematisch korrekt zu formulieren, werden Rand- und Anfangsbedingungen benötigt. Damit die entstehenden Muster selbstorganisiert und nicht direkte Konsequenz der Randbedingungen sind, werden Nullfluss-Randbedingungen gewählt. Diese implizieren, dass es keinen externen Einfluss auf die entstehenden Muster gibt. Das Problem ist in einem Gebiet B definiert durch

$$u_t = \gamma f(u, v) + \Delta u, \quad v_t = \gamma g(u, v) + d \Delta v, \tag{2.14}$$

$$\left(\vec{n} \cdot \vec{\nabla}\right) \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = 0, \text{ für } \vec{r} \in \partial B, \quad u(\vec{r}, 0), v(\vec{r}, 0) \text{ gegeben.} \tag{2.15}$$

Dabei bezeichnet ∂B den abgeschlossene Rand von B und $\vec{n}$ den Normalenvektor senkrecht auf ∂B.

Es werden im Folgenden zwei Fälle betrachtet. Der erste Fall behandelt das obige System in einem endlichen Gebiet B. Im zweite Fall hingegen wird B als unendliches Gebiet angenommen.

2.3.1 Diffusionsbedingte Instabilität in endlichen Gebieten

Es müssen zunächst die homogenen Ruhelagen von (2.14) bestimmt werden. Dafür wird das folgende Lemma herangezogen:

Lemma 6 Ein Vektor $(u^*, v^*) \in \mathbb{R}^2$ ist genau dann ein homogenes Gleichgewicht von (2.14), wenn $f(u^*, v^*) = g(u^*, v^*) = 0$ gilt.

Beweis: Es gelten die Äquivalenzen

$$\begin{aligned} &(u^*, v^*) \text{ ist homogene Ruhelage von (2.14)} \\ \Leftrightarrow\ &(u^*, v^*) \text{ ist (räumlich und zeitlich) konstante Lösung von (2.14)} \\ \Leftrightarrow\ &u^*, v^* \text{ konstant mit } 0 = \gamma\, f(u^*, v^*) \text{ und } 0 = \gamma\, g(u^*, v^*) \\ \Leftrightarrow\ &u^*, v^* \text{ konstant mit } f(u^*, v^*) = g(u^*, v^*) = 0 \end{aligned} \tag{2.16}$$

Wie in Abschnitt 2.1 bereits erwähnt wurde, wird für die Reaktionsterme f und g angenommen, dass genau ein Schnittpunkt im ersten Quadranten des (u, v)-Raumes existiert. Das heißt, es gibt genau ein Tupel (u_0, v_0) mit $u_0, v_0 \geq 0$ und $f(u_0, v_0) = g(u_0, v_0) = 0$. Da u und v Konzentrationen darstellen, sind auch nur positive Werte für u und v relevant und damit auch nur die homogene Ruhelage (u_0, v_0) von (2.14) mit $u_0, v_0 \geq 0$.

Es bezeichnet im Folgenden (u_0, v_0) die homogene Ruhelage von (2.14), also die eindeutige positive Lösung von

$$f(u, v) = 0, \quad g(u, v) = 0. \tag{2.17}$$

Bemerkung: Da die Reaktionsterme f und g nicht linear sind, ist die Lösung von (2.17) nicht immer einfach zu bestimmen. Mit numerischen Verfahren wie dem Newtonverfahren lässt sich die Lösung jedoch gut approximieren – sofern eine gute Schätzung für die Lösung bekannt ist. Diese Schätzung lässt sich mit der graphischen Darstellung der Nullklinen des Systems (vgl. Abb.1) vornehmen. Die abgelesene Schnittstelle der Nullklinen im ersten Quadranten des (u, v)-Raumes lässt sich dann als Startpunkt für das Newtonverfahren verwenden.

Damit die homogene Ruhelage (u_0, v_0) diffusionsbedingt instabil werden kann, muss sie stabil sein, falls das System keine Diffusion beinhaltet. Das diffusionslose System zu (2.14) hat dann die Form

$$u_t = \gamma f(u, v), \quad v_t = \gamma g(u, v). \tag{2.18}$$

Es werden nun die Bedingungen an das System bestimmt, damit (u_0, v_0) als Ruhelage des diffusionslosen Systems (2.18) linear stabil ist. Dafür wird zuerst eine Linearisierung um (u_0, v_0) durchgeführt.

Es bezeichne $\vec{w}$ den Störungsvektor, der definiert ist als

$$\vec{w} := \begin{pmatrix} u - u_0 \\ v - v_0 \end{pmatrix}. \tag{2.19}$$

Dieser genügt dann der der Differentialgleichung

$$\vec{w}_t = \begin{pmatrix} u_t \\ v_t \end{pmatrix} = \gamma \begin{pmatrix} f(u,v) \\ g(u,v) \end{pmatrix}.$$

Eine Taylor-Entwicklung um $\vec{0}$ führt zu der Gleichung

$$\begin{aligned} \vec{w}_t &= \gamma \underbrace{\begin{pmatrix} f(u_0,v_0) \\ g(u_0,v_0) \end{pmatrix}}_{=\vec{0}} + \gamma \underbrace{\begin{pmatrix} f_u(u_0,v_0) & f_v(u_0,v_0) \\ g_u(u_0,v_0) & g_v(u_0,v_0) \end{pmatrix}}_{=:A} \underbrace{\begin{pmatrix} u-u_0 \\ v-v_0 \end{pmatrix}}_{=\vec{w}} + \mathcal{O}\left(\left\| \begin{pmatrix} u-u_0 \\ v-v_0 \end{pmatrix} \right\|^2 \right) \\ &= \gamma A \vec{w} + \mathcal{O}(\|\vec{w}\|^2). \end{aligned}$$

Da für die Stabilitätsuntersuchung sehr kleine Störungen um die Ruhelage – also $\vec{w}$ mit $\|\vec{w}\|$ sehr klein – betrachtet werden, können die quadratischen Terme $\|\vec{w}\|^2$ in der obigen Gleichung vernachlässigt werden. Damit ergibt sich das um die Ruhelage (u_0, v_0) linearisierte System

$$\vec{w}_t = \gamma A \vec{w}, \tag{2.20}$$

Notation: Im weiteren Verlauf werden die partiellen Ableitungen von f und g immer am homogenen Gleichgewicht (u_0, v_0) ausgewertet. Das heißt f_u bezeichnet zum Beispiel $f_u(u_0, v_0)$.

Ein Separationsansatz $\vec{w}(\vec{r}, t) = \vec{c}\, R(\vec{r}) \exp(\lambda t)$ mit $\vec{c} \in \mathbb{R}^2 \backslash \{\vec{0}\}$ und $R : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, $R \not\equiv 0$ führt eingesetzt in (2.20) zu dem Eigenwertproblem

$$\lambda \vec{c}\, R(\vec{r}) \exp(\lambda t) = A \vec{c}\, R(\vec{r}) \exp(\lambda t) \quad \Leftrightarrow \quad (A - \lambda \mathrm{I}_2)\vec{c} = 0.$$

Somit muss λ Eigenwert von A und $\vec{c}$ein Eigenvektor zu λ sein.
Für die Lösungen $\vec{w}$ von (2.20) gilt also eine Proportionalität bezüglich t der Form

$$\vec{w} \sim \vec{c} \exp(\lambda t), \tag{2.21}$$

mit einem Eigenvektor $\vec{c}$ zum Eigenwert λ von A. Für die weitere Stabilitätsuntersuchung ist folgender Satz wichtig:

Lemma 7 Eine Ruhelage von (2.20) ist asymptotisch stabil, falls $\mathrm{Re}(\lambda) < 0$ für alle Eigenwerte $\lambda \in \mathbb{C}$ der Matrix A gilt und instabil, falls $\mathrm{Re}(\lambda) > 0$ für mindestens einen Eigenwert λ von A gilt.

Beweis:

Der Beweis wird hier nicht weiter ausgeführt, ist aber zum Beispiel im Buch von L. Grüne und O. Junge [9] (S. 104) zu finden. Der wesentliche Punkt ist jedoch, dass für Lösungen $\vec{w}$ von (2.20) wegen (2.21) bereits

$$\lim_{t\to\infty} \|\vec{w}\| = \lim_{t\to\infty} C|\exp(\lambda t)| = \lim_{t\to\infty} C \exp(\mathrm{Re}(\lambda) t) = \begin{cases} 0, & \text{falls } \mathrm{Re}(\lambda) < 0 \\ \infty, & \text{falls } \mathrm{Re}(\lambda) > 0 \end{cases},$$

mit einem $C \in \mathbb{R}_{>0}$ gilt. Damit gilt $\vec{w} \to \vec{0}\,(t \to \infty)$ für alle Lösungen $\vec{w}$ von (2.20), falls $\mathrm{Re}(\lambda) < 0$ für alle Eigenwerte λ von A und $\|\vec{w}\| \to \infty\,(t \to \infty)$ für gewisse Lösungen $\vec{w}$ von (2.20), falls ein Eigenwert λ von A existiert mit $\mathrm{Re}(\lambda) > 0$.

Gilt für alle Eigenwerte λ von A aus (2.20) $\mathrm{Re}(\lambda) < 0$, so ist (u_0, v_0) also ein linear stabiles Gleichgewicht von (2.20). Die Eigenwerte von A sind die Nullstellen des charakteristischen Polynoms von A, also die Lösungen von

$$\begin{aligned} \det(\gamma A - x\mathrm{I}_2) &= \det \begin{pmatrix} \gamma f_u - \lambda & \gamma f_v \\ \gamma g_u & \gamma g_v - \lambda \end{pmatrix} = 0 \\ \Rightarrow \lambda^2 - \gamma(f_u + g_v)\lambda + \gamma^2(f_u g_v - f_v g_u) &= 0. \end{aligned} \tag{2.22}$$

Die Lösungen von (2.22) und damit die Eigenwerte von A sind gegeben durch

$$\begin{aligned} \lambda_{1,2} &= \frac{1}{2}\gamma \left[(f_u + g_v) \pm \sqrt{(f_u + g_v)^2 - 4(f_u g_v - f_v g_u)}\right] \\ &= \frac{1}{2}\gamma \left(\mathrm{tr}(A) \pm \sqrt{\mathrm{tr}(A)^2 - 4\det(A)}\right). \end{aligned} \tag{2.23}$$

Mit den Bedingungen

$$\mathrm{tr}(A) < 0, \quad \det(A) > 0 \tag{2.24}$$

folgt $\mathrm{tr}(A)^2 - 4\det(A) < \mathrm{tr}(A)^2$ und damit gilt

$$\begin{aligned} \mathrm{Re}(\lambda_{1,2}) &= \frac{1}{2}\gamma \left(\mathrm{tr}(A) \pm \sqrt{\mathrm{tr}(A)^2 - 4\det(A)}\right) < 0 && \text{für } \mathrm{tr}(A)^2 \geq 4\det(A) \text{ und} \\ \mathrm{Re}(\lambda_{1,2}) &= \frac{1}{2}\gamma\,\mathrm{tr}(A) < 0 && \text{für } \mathrm{tr}(A)^2 < 4\det(A). \end{aligned}$$

Damit ist nach Lemma 7 die Ruhelage linear stabil, falls die zwei Bedingungen aus (2.24) erfüllt sind.

Bemerkung: Da das homogene Gleichgewicht (u_0, v_0) abhängig von den Parametern der Reaktionsterme f und g ist, stellen die Ungleichungen in (2.24) bestimmte Anforderungen an diese Parameter.

Es wird nun das System in (2.14) mit Diffusion betrachtet und ebenfalls um das Gleichgewicht (u_0, v_0) linearisiert. Da der Laplace-Operator bereits linear ist, führt die Linearisierung analog wie im Fall ohne Diffusion zum System

$$\vec{w}_t = \gamma A\vec{w} + D\Delta\vec{w} \quad \text{mit} \quad D = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & d \end{pmatrix}. \tag{2.25}$$

Mit einem Separationsansatz der Form $\vec{w}(\vec{r}, t) = \vec{c}W(\vec{r})T(t)$ mit $\vec{c} \in \mathbb{R}^2 \backslash \{\vec{0}\}$ konstant eingesetzt in (2.25) ergibt sich für $T(t) \neq 0$, $W(\vec{r}) \neq 0$

$$\begin{aligned} \vec{c}WT' &= \gamma A\vec{c}WT + D\vec{c}T\Delta W \\ \Rightarrow \quad \vec{c}\frac{T'}{T} &= \gamma A\vec{c} + D\vec{c}\frac{\Delta W}{W}. \end{aligned} \tag{2.26}$$

Da diese Gleichheit für alle $(\vec{r}, t)$ gelten muss und die linke Seite der unteren Gleichung in (2.26) nur von t und die rechte Seite nur von $\vec{r}$ abhängig ist, folgt bereits, dass beide Seiten konstant sein müssen. Dies führt zu einem räumlichen und einem zeitlichen Eigenwertproblem der Form

$$\begin{aligned} &\text{(i)} \qquad \frac{\Delta W}{W} = -k^2 && \Rightarrow \quad \Delta W + k^2 W = 0 \\ &\text{(ii)} \qquad \vec{c}_k \frac{T'}{T} = (\gamma A - k^2 D)\vec{c}_k && \Rightarrow \quad \vec{c}_k T' = (\gamma A - k^2 D)\vec{c}_k T. \end{aligned} \tag{2.27}$$

Zu (i): Unter Hinzunahme der Randbedingungen aus (2.15) muss W das räumliche Rand-Eigenwert-Problem

$$\Delta W + k^2 W = 0, \qquad (\vec{n} \cdot \vec{\nabla})W = 0 \text{ für } \vec{r} \in \partial B \tag{2.28}$$

mit dem räumlichen Eigenwert k lösen.

Eine Lösung von (2.28) ist also eine Eigenfunktion W_k – auch *räumliche Mode* genannt – des negativen Laplace-Operators zum Eigenwert k^2, die die Nullfluss-Randbedingung aus (2.28) erfüllt.

Zu (ii): Der Ansatz $T(t) = \exp(\lambda t)$, eingesetzt in (2.27) (ii) und Kürzen von $\exp(\lambda t)$ führt zu

$$\vec{c}_k \lambda = (\gamma A - k^2 D)\vec{c}_k \quad \Rightarrow \quad (\gamma A - k^2 D - \lambda \mathrm{I}_2)\vec{c}_k = 0. \tag{2.29}$$

Für jede Wellenzahl k ist also

$$\vec{w}_k(\vec{r}, t) := \vec{c}_k \exp(\lambda t) W_k(\vec{r}) \tag{2.30}$$

eine Lösung von (2.25) mit den Nullfluss-Randbedingungen aus (2.15). Wegen der Linearität des Systems ist auch jede Linearkombination

$$\vec{w}(\vec{r}, t) = \sum_k a_k \vec{w}_k(\vec{r}, t) = \sum_k a_k \vec{c}_k \exp(\lambda t) W_k(\vec{r}) \tag{2.31}$$

über alle Wellenzahlen k Lösung von (2.25). Nun können die Koeffizienten a_k durch eine Fourierreihen-Entwicklung so gewählt werden, dass

$$\sum_k a_k \vec{c}_k w_k(\vec{r}) = \begin{pmatrix} u(\vec{r}, 0) - u_0 \\ v(\vec{r}, 0) - v_0 \end{pmatrix} \tag{2.32}$$

gilt und damit die Anfangsbedingungen erfüllt sind.

Es muss noch sichergestellt werden, dass nichttriviale Lösungen von (2.29) existieren. Für λ muss also

$$\det(\gamma A - k^2 D - \lambda I) = 0$$

gelten. Mit A und D aus (2.20) und (2.25) sind die Eigenwerte $\lambda(k^2)$ als Funktionen in Abhängigkeit der Wellenzahl k gegeben als die Nullstellen von

$$\begin{aligned} \lambda^2 + \lambda(k^2(1+d) - \gamma \operatorname{tr}(A)) + h(k^2) = 0 \\ \text{mit } h(k^2) = dk^4 - \gamma(df_u + g_v)k^2 + \gamma^2 \det(A). \end{aligned} \tag{2.33}$$

Die Ruhelage (u_0, v_0) ist linear stabil, falls beide Lösungen von (2.33) einen negativen Realteil $\mathrm{Re}(\lambda) < 0$ haben. Es wurden bereits die Bedingungen bestimmt, mit denen (u_0, v_0) als Ruhelage des diffusionslosen Systems (2.18) linear stabil ist. Diese entsprechen hier der Bedingung $\mathrm{Re}(k^2 = 0) < 0$. Die Gleichung (2.33) wird dann zu (2.22) und die Stabilitätsbedingung $\mathrm{Re}(\lambda) < 0$ führt zu den Bedingungen aus (2.24). Damit die Ruhelage instabil unter kleinen räumlichen Störungen ist, muss $\mathrm{Re}(\lambda(k^2)) > 0$ für mindestens ein $k \neq 0$ gelten. Dafür muss entweder der Koeffizient von λ in (2.33) negativ sein oder $h(k^2) < 0$ für mindestens ein $k \neq 0$ gelten. Da nach der ersten Bedingung aus (2.24) bereits $\mathrm{tr}(A) < 0$ und wegen $d \geq 0$ auch $k^2(1+d) > 0$ für alle $k \neq 0$ gilt, folgt für den Koeffizient von λ bereits

$$(k^2(1+d) - \gamma\,\mathrm{tr}(A)) > 0.$$

Damit kann $\mathrm{Re}(\lambda(k^2))$ für ein $k \neq 0$ nur positiv sein, falls $h(k^2) < 0$ gilt. Das folgt auch unmittelbar aus der Gestalt der Lösungen von (2.33)

$$\lambda_{1,2} = -\frac{1}{2}(k^2(1+d) - \gamma\,\mathrm{tr}(A)) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(k^2(1+d) - \gamma\,\mathrm{tr}(A))^2 - 4h(k^2)}. \tag{2.34}$$

Da nach der zweiten Bedingung aus (2.24) schon $\det(A) > 0$ gelten muss, kann $h(k^2)$ nur negativ sein, falls $(df_u + g_v) > 0$ gilt. Mit der Bedingung $(f_u + g_v) < 0$ aus (2.24) folgt damit auch, dass $d \neq 1$ gelten muss und dass f_u und g_v unterschiedliche Vorzeichen haben müssen. Es ergibt sich also die Bedingung

$$df_u + g_v > 0 \quad \Rightarrow \quad d \neq 1. \tag{2.35}$$

Für eine Reaktionskinetik mit Nullklinen wie in Abb.1 und auch für die anderen in Abschnitt 2.1 vorgestellten Modellen gilt $f_u > 0$ und $g_v < 0$ in der Ruhelage. Damit folgt mit der ersten Bedingung aus (2.24) und der zweiten Bedingung aus (2.35) bereits, dass für den Diffusionskoeffizienten-Quotienten $d < 1$ gelten muss.

Die Ungleichung (2.35) ist notwendig, aber nicht hinreichend für $\mathrm{Re}(\lambda) > 0$. Damit $h(k^2)$ für ein $k \neq 0$ negativ ist, muss das Minimum $h_{\min}$ von h negativ sein. Dieses Minimum wird nun genauer bestimmt und analysiert.

Differenzieren von $h(k^2)$ nach k^2 ergibt den kritischen Punkt k_m^2 als Nullstelle der Ableitung

$$h'(k^2) = 2dk^2 - \gamma(df_u + g_v) = 0 \quad \Rightarrow \quad k_m^2 = \gamma\frac{df_u + g_v}{2d}. \tag{2.36}$$

Wegen $h''(k^2) = 2d > 0$ ist h strikt konvex und damit ist k_m^2 (globale) Minimalstelle. Einsetzen von k_m^2 in h ergibt das Minimum

$$h_{\min} = \gamma^2\left(\det(A) - \frac{(df_u - g_v)^2}{4d}\right) \tag{2.37}$$

Damit wird die Bedingung $h(k^2) < 0$ für $k^2 \neq 0$ zu

$$\frac{(df_u + g_v)^2}{4d} > \det(A). \tag{2.38}$$

Am Übergang $h_{\min} = 0$ gilt $\det(A) = (df_u + g_v)^2/4d$ und es lässt sich aus (2.36) für feste Parameter der Kinetik ein kritisches d, $d_c(> 1)$ bestimmen. Dieses kritische d_c ist die positive Nullstelle

$$d_c^2 f_u^2 + 2(2f_v g_u - f_u g_v)d_c + g_v^2 = 0. \tag{2.39}$$

Für die kritische Wellenzahl k_c gilt dann mit (2.36) und (2.38)

$$k_c^2 = \gamma \frac{d_c f_u + g_v}{2d_c} = \gamma \sqrt{\frac{\det(A)}{d_c}} = \gamma \sqrt{\frac{f_u g_v - f_v g_u}{d_c}}. \tag{2.40}$$

Abb.2 a) zeigt einen typischen Verlauf von $h(k^2)$ für verschiedene d.

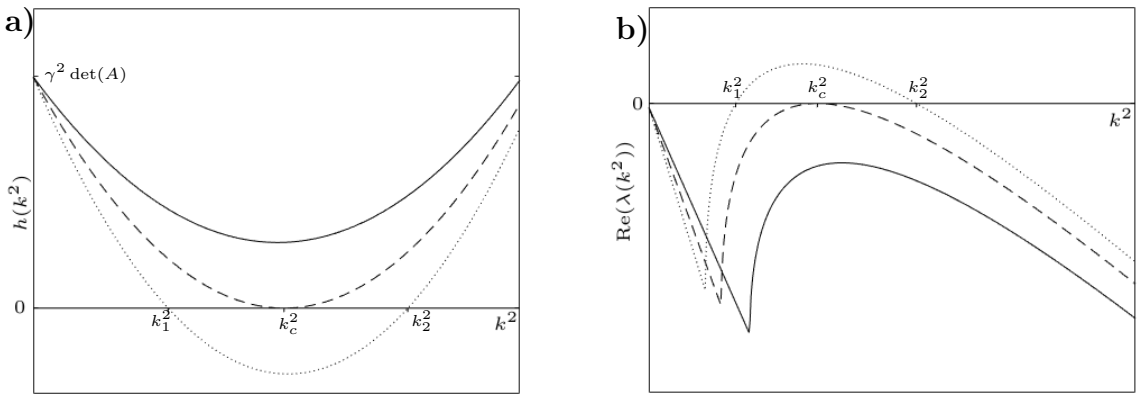


Abb. 2: a) Typischer Verlauf von $h(k^2)$ für $d < d_c$ (durchgezogen), $d = d_c$ (gestrichelt) und $d > d_c$ (gepunktet). **b)** Typischer Verlauf von $\lambda(k^2)$ für $d < d_c$ (durchgezogen), $d = d_c$ (gestrichelt) und $d > d_c$ (gepunktet). [*Eigene Abbildung in Anlehnung an [16], S.86, Figure 2.5*]

Sobald also k mit $h(k^2) < 0$ existieren, hat (2.33) eine Lösung λ, die für diese k positiv ist. Mit (2.33) sind für $d > d_c$ die Grenzen des Intervalls der instabilen Wellenzahlen $k_1^2 < k^2 < k_2^2$ (auch *Instabilitätsbereich* oder *Instabilitätsintervall*) gegeben durch die Lösungen k_1^2 und k_2^2 von $h(k^2) = 0$, also

$$\begin{aligned} k_1^2 &= \frac{\gamma}{2d}\left((df_u + g_v) - \sqrt{(df_u + g_v)^2 - 4d\det(A)}\right) < k^2 \\ &< \frac{\gamma}{2d}\left((df_u + g_v) + \sqrt{(df_u + g_v)^2 - 4d\det(A)}\right) = k_2^2. \end{aligned} \tag{2.41}$$

Die Beziehung der zeitlichen zu den räumlichen Eigenwerten $\lambda = \lambda(k^2)$ wird auch *Dispersionsrelation* genannt.

Da jede Mode mit $\mathrm{Re}(\lambda(k^2)) < 0$ der Lösung $\vec{w}$ aus (2.31) exponentiell gegen 0 geht, dominieren die Moden mit $\mathrm{Re}(\lambda(k^2)) > 0$ für wachsendes t. Das Instabilitätsintervall kann aus einem Plot wie in Abb.2 b) abgelesen oder analytisch bestimmt werden. Wegen $\mathrm{Re}(\lambda(k^2)) > 0$ für $k_1^2 < k^2 < k_2^2$ gilt dann

$$\vec{w}(\vec{r}, t) \approx \sum_{k_1}^{k_2} a_k \vec{c}_k \exp(\lambda(k^2)t) W_k(\vec{r}) \text{ für große } t. \tag{2.42}$$

Eine Analyse und eine graphische Darstellung der Dispersionsrelation ist deshalb sehr informativ, da sie unmittelbar aufzeigt welche Eigenfunktionen instabil sind und exponentiell mit der Zeit wachsen. Diese wachsenden Moden bestimmen dann die räumlichen Muster, die sich entwickeln. Es ist zu beachten, dass die Wellenzahlen bei Eigenwertproblemen in endlichen Gebieten wegen der Randbedingungen diskret sind und somit nur gewisse k im Instabilitätsbereich aus (2.41) relevant sind.

Die Schlüsselannahme ist nun, dass die Lösungen des nichtlinearen Systems im Gegensatz zu denen des linearisierten Systems beschränkt sind und sich ein sich gegebenenfalls eine Ruhelage in Form einer räumlich inhomogenen, stationären Lösung entwickelt. Dabei spielt die Existenz einer sogenannten *Trapping-Region* für die Kinetik eine große Rolle. Die Trapping-Region ist eine beschränkende Teilmenge im ersten Quadranten des (u, v)-Phasenraums um die Ruhelage (u_0, v_0). Eine Lösung des diffusionslosen Systems (2.18) kann sich aus dieser nicht hinaus bewegen, wenn sie sich einmal darin befindet. Wie eine solche Trapping-Region aussieht, wird im nächsten Kapitel am Beispiel des Schnakenberg-Modells aufgezeigt. In J. Smollers *Shock Waves and Reaction-Diffusion Equations* [22] ist ein Beweis zu finden der zeigt, dass falls es eine Trapping-Region für die Reaktionskinetik gibt, diese schon die Lösungen des Systems mit Diffusion (2.14) enthält. Somit muss bei der Analyse eines solchen Modells immer auch gezeigt werden, dass für die Reaktionskinetik eine Trapping-Region im ersten Quadranten des (u, v)-Raumes existiert.

Es werden kurz die Bedingungen für diffusionsbedingte Instabilität der Ruhelage (u_0, v_0) des Reaktions-Diffusions-Systems zusammengefasst. Nach (2.24),(2.35) und (2.38) sind diese

$$\begin{array}{llll} \text{(i)} & f_u + g_v < 0, & \text{(ii)} & f_u g_v - f_v g_u > 0, \\ \text{(iii)} & d f_u + g_v > 0, & \text{(iv)} & (d f_u + g_v)^2 - 4d(f_u g_v - f_v g_u) > 0. \end{array} \tag{2.43}$$

Aus (2.43)(i) und (2.43)(iii) folgt dann bereits, dass die Ableitungen f_u und g_v unterschiedliche Vorzeichen haben müssen. Es wurden hier lediglich Systeme betrachtet, für die $f_u > 0$ und $g_v < 0$ in der Ruhelage gilt und damit folgt aus (2.43)(i) und (2.43)(iii) bereits $d > 1$. Es gibt jedoch zwei Möglichkeiten für die Vorzeichen der Ableitungen f_v und g_u. Die einzige Einschränkung durch die Bedingung (2.43)(ii) ist $f_v g_u < 0$. Es muss also $f_v < 0$ und $g_u > 0$ oder $f_v > 0$ und $g_v < 0$ gelten. Diese zwei Fälle entsprechen qualitativ unterschiedlichen Reaktionen.

1. Fall: $f_v < 0$ und $g_u > 0$
Der Aktivator u ist hier selbstaktivierend, wohingegen der Inhibitor v nicht nur u sondern auch sich selbst hemmt. Zur Entstehung von Mustern muss der Inhibitor wegen $d = D_B/D_A > 1$ schneller diffundieren als der Aktivator.

2. Fall: $f_v > 0$ und $g_u < 0$
Hier ist v der Aktivator, der sich selbst hemmt und zur Entstehung von Mustern schneller diffundieren muss als der Inhibitor u.

Für die Kinetik des Schnakenberg-Modells gilt, wie später noch zu sehen sein wird, immer der zweite der oben genannten Fälle. Näher wird in dieser Arbeit nicht auf die Unterschiede der zwei Typen von Reaktionstermen eingegangen.

Falls die Bedingungen aus (2.43) erfüllt sind, gibt es also einen von γ abhängigen Bereich von Wellenzahlen, definiert durch (2.41), die instabil sind. Die räumlichen Muster, die anfangs exponentiell wachsen, sind diejenigen Eigenfunktionen $W_k(\vec{r})$ mit Wellenzahlen zwischen k_1 und k_2, bestimmt durch (2.41) und damit von der Gestalt (2.42). Der Parameter γ spielt hier eine entscheidende Rolle. Allgemein ist zu erwarten, dass die Parameter der Kinetik und die Diffusionskoeffizienten fest sind. In einigen Anwendungsbereichen, wie zum Beispiel in der Embryogenese, ist γ jedoch ein variabler Parameter, der die Größe bzw. die Fläche eines Embryos beschreibt. In manchen Situationen ist die Fläche eines Embryos im Verhältnis zum entstehenden Muster so groß, dass der Rand keinen Einfluss auf das Muster im Inneren des Gebiets hat. Hierfür kann das Gebiet als unendliches Gebiet betrachtet werden.

2.3.2 Diffusionsbedingte Instabilität in unendlichen Gebieten

In endlichen Gebieten ist die Menge der möglichen Wellenzahlen k diskret und hängt von den Randbedingungen ab. Hier wird kurz beschrieben, wie das Spektrum von instabilen Eigenwerten in unendlichen Gebieten bestimmt werden kann. Das ist deutlich einfacher als für endliche Gebiete, da keine Randbedingungen erfüllt werden müssen.

Es wird ein Ansatz der Form

$$\vec{w}(\vec{r},t) = \vec{c}\,\exp(\lambda t + \mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}) = \vec{c}\,\exp(\lambda\, t + \mathrm{i}\sum_{j=1}^{n} k_j r_j)$$

für das linearisierte System (2.25) betrachtet, wobei $\vec{r} = (r_1,\ldots,r_n)$ und $\vec{k} = (k_1,\ldots,k_n)$ der Wellenvektor mit Länge $k = \|\vec{k}\|$ ist. Einsetzen in (2.25) führt zu

$$\begin{aligned}
\lambda\vec{c}\,\exp(\gamma t + \mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}) =& \gamma A\vec{c}\,\exp(\lambda t + \mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}) + D\vec{c}\sum_{j=1}^{n}\frac{\partial^2}{\partial r_j^2}\exp(\lambda t + \mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}) \\
=& \left(\gamma A + D\sum_{j=1}^{n}(\mathrm{i}k_j)^2\right)\vec{c}\,\exp(\lambda t + \mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}) \\
\Rightarrow\quad & \left(\lambda \mathrm{I}_2 - \gamma A + Dk^2\right)\vec{c} = 0.
\end{aligned}$$

Da wieder nur $\vec{c} \neq \vec{0}$ von Interesse ist, muss gelten

$$\det(\lambda \mathrm{I}_2 - \gamma A + Dk^2) = 0.$$

Die Dispersionsrelation, die λ in Abhängigkeit von der Wellenzahl k liefert, ist wieder durch (2.33) gegeben. Das Intervall der Eigenwerte, für die $\mathrm{Re}(\lambda(k^2)) > 0$ gilt, ist wieder gegeben durch (2.41).

Der entscheidende Unterschied zwischen dieser Situation und der für ein endliches Gebiet ist, dass sich hier immer ein räumliches Muster entwickelt, falls in (2.41) $0 < k_1^2 < k_2^2$ gilt. Denn es ist keine Einschränkung auf eine diskrete Menge von

räumlichen Eigenwerten aus dem Eigenwertproblem (2.28) nötig. Sobald der Eigenwert zur kritischen Wellenzahl k_c aus (2.40) instabil ist, ist das Instabilitätsintervall nichtleer und es entwickelt sich ein räumliches Muster.

2.4 Analyse des Schnakenberg-Modells in rechteckigen Gebieten

In diesem Abschnitt wird am Beispiel des Schnakenberg-Modells

$$\begin{aligned} u_t =& \gamma f(u,v) + u_{xx} + u_{yy} &&= \gamma(a - u + u^2 v) + u_{xx} + u_{yy} \\ v_t =& \gamma g(u,v) + d(v_{xx} + v_{yy}) &&= \gamma(b - u^2 v) + d(v_{xx} + v_{yy}). \end{aligned} \tag{2.44}$$

eine detaillierte Analyse des musterbildenden Prozesses in rechteckigen Gebieten durchgeführt. Es wird sowohl der Turing-Raum für das Modell bestimmt als auch die in der Lösung des linearisierten Systems auftretenden Eigenfunktionen aus Abschnitt 2.3. Mit diesen Moden wird ein erster qualitativer Eindruck der entstehenden Muster gewonnen und der Einfluss des Parameters γ auf diese betrachtet.

2.4.1 Der Turing-Raum

Typische Nullklinen des Systems sind in Abb.1 abgebildet und sind definiert durch

$$\begin{aligned} f(u,v) = 0 \quad &\Rightarrow \quad v = \frac{a-u}{u^2} \\ g(u,v) = 0 \quad &\Rightarrow \quad v = \frac{b}{u^2}. \end{aligned} \tag{2.45}$$

Aus (2.45) ergibt sich die positive, homogene Ruhelage (u_0, v_0) als

$$u_0 = a + b, \quad v_0 = \frac{b}{(a+b)^2}, \quad b > 0, \quad a + b > 0. \tag{2.46}$$

In dieser Ruhelage gilt

$$\begin{aligned} &\text{(i)}\ f_u = \frac{b-a}{a+b}, && \text{(ii)}\ f_v = (a+b)^2 > 0, \\ &\text{(iii)}\ g_u = -\frac{2b}{a+b} < 0, && \text{(iv)}\ g_v = -(a+b)^2 < 0, \\ &\text{(v)}\ f_u g_v - f_v g_u = (a+b)^2 > 0. \end{aligned} \tag{2.47}$$

Es wird nun der Turing-Raum bestimmt – also der Raum der Parameter, für die die Ruhelage (2.46) des Systems diffusionsbedingt instabil sein kann.

Mit (2.46) lassen sich v_0 und b als positive, von u_0 abhängige parametrische Variablen schreiben

$$v_0 = \frac{u_0 - a}{u_0^2}, \quad b = u_0 - a. \tag{2.48}$$

Damit lassen sich dann auch die entsprechenden Ableitungen aus (2.47) schreiben als

$$\begin{aligned} f_u &= 2u_0v_0 - 1 = 1 - \frac{2a}{u_0}, \quad f_v = u_0^2, \\ g_u &= -2u_0v_0 = \frac{2(u_0 - a)}{u_0}, \quad g_v = -u_0^2. \end{aligned} \tag{2.49}$$

Die Ungleichungen aus (2.43) liefern Bedingungen an die Parameter a, b und d, die erfüllt sein müssen, damit die Ruhelage diffusionsbedingt instabil ist, und definieren damit den Turing-Raum. Diese Bedingungen werden nun mit dem Parameter u_0 ausgedrückt und damit die Randkurven des Turing-Raumes bestimmt. Mit der ersten Bedingung (2.43) (i) gilt dann

$$\begin{aligned} f_u + g_v < 0 &\Rightarrow 1 - \frac{2a}{u_0} - u_0^2 > 0 \\ &\Rightarrow a > \frac{1}{2}u_0(1 - u_0^2). \end{aligned} \tag{2.50}$$

Die Ungleichung (2.50) für a ergibt mit (2.48) die Bedingung an b:

$$b < \frac{1}{2}u_0(1 + u_0^2). \tag{2.51}$$

Die Ungleichung (2.51) definiert zusammen mit (2.50) eine Menge im (a, b)-Raum, die nach unten durch die Parameterkurve

$$s_1(u_0) := \frac{1}{2}u_0 \begin{pmatrix} 1 + u_0^2 \\ 1 - u_0^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b(u_0) \\ a(u_0) \end{pmatrix}, \; u_0 > 0 \tag{2.52}$$

beschränkt ist. Diese Parameterkurven werden nun auch für die restlichen Bedingungen bestimmt.

Die Ungleichung (2.43)(ii) lässt sich dann mit (2.49) schreiben als

$$f_u g_v - f_v g_u > 0 \Rightarrow u_0^2 > 0. \tag{2.53}$$

Wegen $u_0 > 0$ ist die obige Ungleichung immer erfüllt und stellt damit keine zusätzlichen Bedingungen an die Parameter.

Mit der dritten Bedingung (2.43) (iii) ergibt sich

$$df_u + g_v > 0 \Rightarrow a < \frac{1}{2}u_0 \left(1 - \frac{u_0^2}{d}\right). \tag{2.54}$$

Analog wie oben führt (2.54) zu der oberen Randkurve

$$s_2(u_0) := \frac{1}{2d}u_0 \begin{pmatrix} d + u_0^2 \\ d - u_0^2 \end{pmatrix}, \; u_0 > 0. \tag{2.55}$$

Die vierte Ungleichung (2.43) (iv) ergibt

$$\begin{aligned} &(df_u + g_v)^2 - 4d(f_u g_v - f_v g_u) > 0 \\ \Rightarrow &\left(u_0(d - u_0^2) - 2da\right)^2 - 4du_0^4 > 0 \\ \Rightarrow &\, 4a^2d^2 - 4adu_0(d - u_0^2)\left(u_0^2(d - u_0^2)^2 - 4u_0^4 d\right) > 0. \end{aligned} \tag{2.56}$$

Die obige Ungleichung (2.56) ist erfüllt, falls für a gilt:

$$a < \frac{1}{2}u_0\left(1 - \frac{2u_0}{\sqrt{d}} - \frac{u_0}{d}\right) \text{ oder } a > \frac{1}{2}u_0\left(1 + \frac{2u_0}{\sqrt{d}} - \frac{u_0}{d}\right). \tag{2.57}$$

Wie schon in Abschnitt 2.4.2 bemerkt wurde, folgt aus den Bedingungen (2.43)(i) und (2.43)(iii) bereits, dass f_v und g_u verschiedene Vorzeichen haben müssen und damit $d > 1$ gelten muss. Für $d > 1$ schließen sich die zweite Ungleichung aus (2.57) und (2.50) gegenseitig aus. Denn angenommen es wären beide Ungleichungen erfüllt, so führt dies mit zu dem Widerspruch

$$a > \frac{1}{2}u_0\left(1 + \frac{2u_0}{\sqrt{d}} - \frac{u_0^2}{d}\right) > \frac{1}{2}u_0\left(1 - \frac{u_0^2}{d}\right) > \frac{1}{2}u_0\left(1 - u_0^2\right) < a. \quad \lightning$$

Damit reicht es, nur die erste Ungleichung aus (2.57) zu betrachten. Diese führt zu der unteren Randkurve

$$s_3(u_0) := \frac{1}{2d}u_0\begin{pmatrix} d + 2u_0\sqrt{d} + u_0^2 \\ d - 2u_0\sqrt{d} - u_0^2 \end{pmatrix}. \tag{2.58}$$

Werden die zwei oberen Randkurven s_2 und s_3 genauer betrachtet, so gilt wegen $u_0 > 0$ bereits

$$\frac{1}{2}u_0\left(1 - \frac{2u_0}{\sqrt{d}} - \frac{u_0^2}{d}\right) < \frac{1}{2}u_0\left(1 - \frac{u_0^2}{d}\right) \tag{2.59}$$

und damit liegt die Kurve s_2 über s_3. Da beide Kurven obere Grenzen des Turing-Raums angeben, ist nur die untere der beiden – also s_3 – für die Darstellung des Turing-Raumes notwendig.

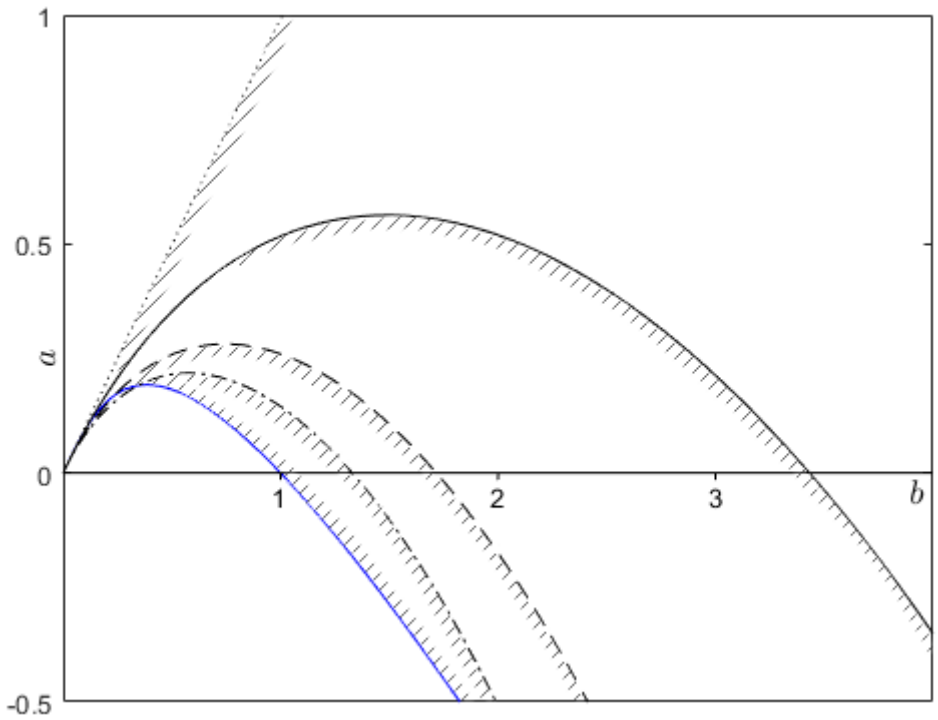


Abb. 3: Turing-Raum als eingeschlossene Fläche zwischen den Kurven s_1 (blau) und s_3 für $d = 15$ (strichpunktiert), $d = 20$ (gestrichelt), $d = 100$ (durchgezogen) und für $d \to \infty$ (gepunktet). [*Eigene Abbildung in Anlehnung an [16], S.108, Figure 2.12*]

Der Turing-Raum lässt sich als die durch die Kurven

$$s_1(u_0) = \frac{1}{2}u_0 \begin{pmatrix} 1 + u_0^2 \\ 1 - u_0^2 \end{pmatrix} \text{ und } s_3(u_0) = \frac{1}{2d}u_0 \begin{pmatrix} d + 2u_0\sqrt{d} + u_0^2 \\ d - 2u_0\sqrt{d} - u_0^2 \end{pmatrix} \tag{2.60}$$

eingeschlossene Menge im (a, b)-Raum beschreiben. Die Kurven und der dadurch definierte Turing-Raum sind in Abb.3 für verschiedene d dargestellt.

Die untere Kurve s_1 hängt nicht von d ab. Für $d \to \infty$ gilt $s_3(u_0) \to u_0\,(1, 1)^\top$, $u_0 > 0$. Damit existiert für jedes Parameterpaar (a, b) mit

$$\frac{1}{2}u_0\left(1 - u_0^2\right) < a < b \tag{2.61}$$

ein d_c so, dass jedes Parameter-Tupel (a, b) im Turing-Raum für alle $d > d_c$ liegt.

Somit lässt sich mit dieser Darstellung des Turing-Raumes nicht nur prüfen, ob ein Parameter-Tripel (a, b, d) für das Schnakenberg-Modell räumliche Muster erzeugen kann, sondern auch ein kritischer Diffusionskoeffizienten-Quotient d_c bestimmen, sodass für ein gegebenes Parameterpaar (a, b) das Tripel (a, b, d) im Turing-Raum liegt. Doch selbst wenn ein (a, b, d) im Turing-Raum liegt, heißt das noch nicht, dass sich auch ein räumliches Muster für das entsprechende Reaktions-Diffusions-System ergibt, da die Größe und die Geometrie des Gebiets, in dem der Mechanismus wirkt, noch eine entscheidende Rolle spielen.

2.4.2 Eigenfunktionen in rechteckigen Gebieten

Es wird nun das räumliche Eigenwertproblem (2.28) in dem rechteckigen Gebiet $B := (0,p) \times (0,q) \subset \mathbb{R}^2$ für $p, q > 0$ betrachtet. Dieses hat dann die Form

$$W_{xx} + W_{yy} + k^2 W = 0 \tag{2.62}$$

mit den Randbedingungen

$$\begin{aligned} W_x(0,y) = W_x(p,y) = 0 \text{ für } y \in [0,q] \\ W_y(x,0) = W_y(x,q) = 0 \text{ für } x \in [0,p]. \end{aligned} \tag{2.63}$$

Ein Separationsansatz der Form $W(x,y) = X(x)Y(y)$, eingesetzt in (2.62), führt zu den zwei Randwertproblemen von gewöhnlichen Differentialgleichungen

$$X''(x) + K_1^2 X(x) = 0, \quad X'(0) = X'(p) = 0, \tag{2.64}$$

$$Y''(y) + K_2^2 Y(y) = 0, \quad Y'(0) = Y'(q) = 0 \tag{2.65}$$

für konstante K_1, K_2 mit $K_1^2 + K_2^2 = k^2$.

Die allgemeine Lösung der Differentialgleichung aus (2.64) hat die Gestalt

$$X(x) = C_1 \sin(K_1 x) + C_2 \cos(K_1 x) \tag{2.66}$$

mit Konstanten C_1, C_2.

Mit den Randbedingungen aus (2.64) und $X'(x) = K_1 C_1 \cos(K_1 x) - K_2 C_2 \sin(K_1 x)$ folgt für $K_1, K_2 \neq 0$ bereits

$$X'(0) = K_1 C_1 = 0 \quad \Rightarrow \quad C_1 = 0 \tag{2.67}$$

und damit dann

$$X'(p) = K_1 C_2 \sin(K_1 p) = 0 \quad \Rightarrow \quad K_1 p = n\pi \tag{2.68}$$

mit $n \in \mathbb{Z}$. Es kann $C_2 = 1$ angenommen werden, da dieser Koeffizient mit in die späteren Koeffizienten der Fourierreihen-Entwicklung der Anfangsbedingungen eingeht. Analog werden die Lösungen des Randwertproblems (2.65) bestimmt. Die Lösungen von (2.64) und (2.65) haben also die Form

$$X(x) = \cos\left(\frac{n\pi}{p}x\right), \quad Y(y) = \cos\left(\frac{m\pi}{q}y\right) \tag{2.69}$$

mit $n, m \in \mathbb{Z}$. Einsetzen der Lösungen aus (2.69) in den Separationsansatz führt dann zu den Eigenfunktionen

$$W_{n,m}(x,y) = \cos\left(\frac{n\pi}{p}x\right) \cos\left(\frac{m\pi}{q}y\right) \tag{2.70}$$

und die Wellenzahlen k, gegeben durch

$$k^2 = \pi^2 \left(\frac{n^2}{p^2} + \frac{m^2}{q^2}\right) \tag{2.71}$$

mit $n, m \in \mathbb{Z}$. Wenn die Parameter im Turing-Raum liegen und es mindestens eine Wellenzahl gibt, die im Instabilitätsintervall aus (2.41) liegt, sind die dazugehörigen Eigenfunktionen instabil. Dieses Instabilitätsintervall ist mit (2.47) gegeben durch

$$\begin{aligned} \gamma L(a,b,d) = k_1^2 < k^2 = \pi^2 \left(\frac{n^2}{p^2} + \frac{m^2}{q^2} \right) < k_2^2 = \gamma M(a,b,d), \\ \text{mit} \quad L = \frac{d(b-a) - (a+b)^3 - \sqrt{(d(b-a)-(a+b)^3)^2 - 4d(a+b)^4}}{2d(a+b)} \\ \text{und } M = \frac{d(b-a) - (a+b)^3 + \sqrt{(d(b-a)-(a+b)^3)^2 - 4d(a+b)^4}}{2d(a+b)}. \end{aligned} \tag{2.72}$$

Für feste Parameter a, b, d und hinreichend kleines γ folgt mit (2.72), dass es keine zulässige Wellenzahl k und damit auch keine instabile Mode $W_{n,m}$ gibt. Das bedeutet, dass alle Moden in der Lösung $\vec{w}$ aus (2.42) exponentiell gegen Null gehen und die Ruhelage damit wieder stabil ist. Deshalb wird nun angenommen, dass γ hinreichend groß ist, sodass das Instabilitätsintervall mindestens eine mögliche Wellenzahl enthält. Die sich entwickelnde Lösung ist dann näherungsweise gegeben durch (2.42) mit (2.70) als

$$\vec{w}(x,y,t) \approx \sum_{n,m} \vec{c}_{n,m} \exp(\lambda(k^2)t) \cos\left(\frac{n\pi}{p}x\right) \cos\left(\frac{m\pi}{q}y\right), \tag{2.73}$$

wobei nur über die Paare (n, m) summiert wird, die die Ungleichung aus (2.72) erfüllen. Mit wachsendem t entsteht ein räumliches Muster, das anfangs aus den Moden in (2.73) besteht.

Diese Darstellung von $\vec{w}$ kann aber nicht für alle t gültig sein. Denn dann würde wegen der Definition von $\vec{w}$ aus (2.19) bereits $u, v \to \infty$ für $t \to \infty$ gelten. Wie in Abschnitt 2.3.1 bereits erwähnt, folgt mit der Existenz einer sogenannten Trapping-Region die Beschränktheit der Lösung. Deshalb wird nun die Existenz einer solchen Trapping-Region für das Schnakenberg-Modell an einem Beispiel gezeigt.

2.4.3 Trapping-Region für das Schnakenberg-Modell

Für die Reaktionsterme des Schnakenberg-Modells wird nun eine Trapping-Region bestimmt. Ziel ist es nun also, eine Umgebung G von (u_0, v_0) im ersten Quadranten des (u, v)-Phasenraums zu finden, sodass die Trajektorien alle ins Innere von G zeigen [15]. Das heißt, dass für jeden äußeren Normalenvektor $\vec{n}$ von ∂G bereits

$$\vec{n} \cdot (u_t, v_t) < 0 \tag{2.74}$$

gelten muss. Gilt diese Ungleichung für einen Punkt in ∂G bedeutet das, dass der „Geschwindigkeitsvektor“ (u_t, v_t) nach innen zeigt. Wenn die Ungleichung (2.74) also für alle Punkte aus ∂G erfüllt ist, bedeutet das, dass keine Trajektorie G verlassen kann, wenn sie sich einmal in G befindet. Denn falls sie den Rand von G erreicht, wird sie in Richtung (u_t, v_t), also in das Innere von G geleitet.

Um diese Menge zu bestimmen, ist es von Vorteil, die Nullklinen zu betrachten, da diese die Vorzeichenwechsel von f und g und damit die Richtungswechsel von $(u_t, v_t) = (f(u,v), g(u,v))$ aufzeigen.

Für das Schnakenberg-Modell wird also das diffusionslose System

$$\begin{aligned} u_t &= \gamma f(u,v) = \gamma(a - u + u^2 v) \\ v_t &= \gamma g(u,v) = \gamma(b - u^2 v) \end{aligned} \tag{2.75}$$

betrachtet. Wegen $f + g = (a + b) - u = u_0 - u$ ergeben sich für f und g die Beziehungen

$$\begin{aligned} f + g &< 0 \text{ für } u > u_0, \\ f + g &> 0 \text{ für } u < u_0. \end{aligned} \tag{2.76}$$

Die in Abb.4 abgebildete, durch die Punkte A, B, C, D, E, F eingeschlossene Menge ist ein Beispiel für eine solche Trapping-Region des Schnakenberg-Modells mit den Parametern $a = 0.2$, $b = 2$. Die blauen Pfeile in der Abbildung geben die Richtung des Vektors (u_t, v_t) an.

Auf der Verbindungslinie $(AB) := \{A + s(B - A) \in \mathbb{R}^2 : s \in (0,1)\}$ der Punkte A und B gilt $0 < g = u_t$ und auf der Verbindungslinie von D und E gilt $g = u_t < 0$. Damit ist die Gültigkeit der Ungleichung (2.74) klar. Da in (EF) bereits $0 < f = v_t$ gilt, ist auch hier die Gültigkeit von (2.74) klar. Die äußeren Normalenvektoren auf (BC) sind von der Form $\vec{n} = c(-1, 1)$ mit $c > 0$. Da auf (BC) bereits $f > 0$ und $g < 0$ gilt, folgt

$$\vec{n} \cdot (u_t, v_t) = c(-u_t + v_t) = c(-f + g) < 0.$$

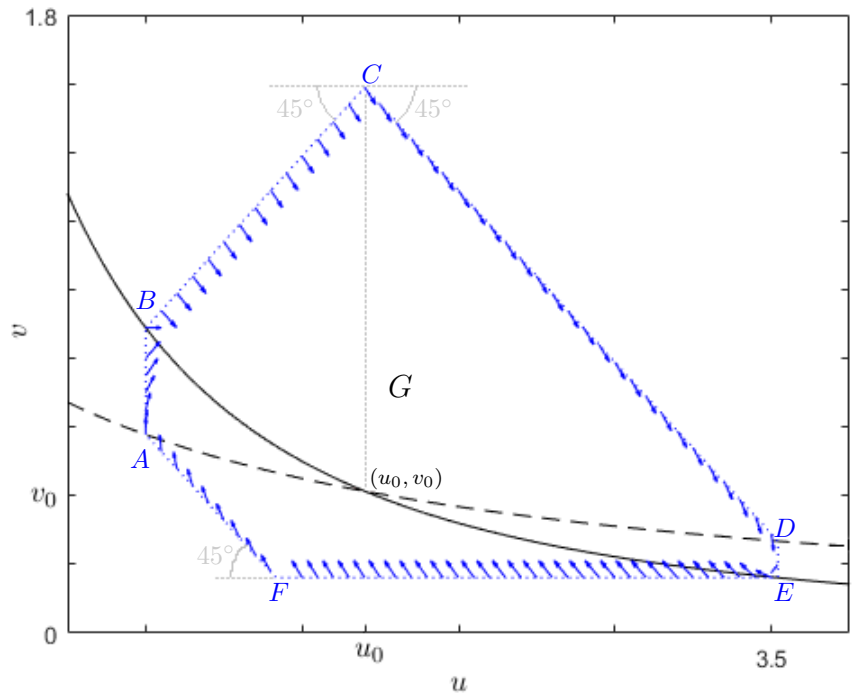


Abb. 4: Trapping-Region (durch A, B, C, D, E, F eingeschlossene Menge G) für das Schnakenberg-Modell mit $a = 0.2$ und $b = 2$. Nullklinen $g(u, v) = 0$ (durchgezogen) und $f(u, v) = 0$ (gestrichelt). Die Pfeile geben die Richtung der Trajektorien auf ∂G an. [*Eigene Abbildung*]

Für (CD) sind die Normalenvektoren von der Gestalt $\vec{n} = c(1, 1)$ mit $c > 0$. Dann gilt mit der ersten Zeile aus (2.76) und wegen $u > u_0$ bereits

$$\vec{n} \cdot (u_t, v_t) = c(u_t + v_t) = c(f + g) < 0.$$

Analog folgt die Ungleichung (2.74) mit der zweiten Zeile von (2.76) und den Normalenvektor $\vec{n} = -c(1, 1)$ auf (FA).

Die Nullklinen verlaufen für das Schnakenberg-Modell mit unterschiedlichen Parameterwerten in der Umgebung des Gleichgewichts (u_0, v_0) qualitativ immer gleich. Dadurch lässt sich immer eine Trapping-Region ähnlich wie in Abb.4 finden. Diese enthält auch die Lösungen des Systems (2.44).

2.4.4 Muster in rechteckigen Gebieten

Wie in Abschnitt 2.4.2 wird das Gebiet $B = (0, p) \times (0, q)$ betrachtet. Diesmal sei aber zudem $p > q$ und γ so, dass das Instabilitätsintervall aus (2.72) nur die kleinste Wellenzahl enthält, aber $(\pi/(2p))^2$ nicht darin enthalten ist. Die kleinste Wellenzahl ist wegen $p > q$ die mit $n = 1$, $m = 0$ (also $k^2 = (\pi/p)^2$). Die Gestalt einer solchen Dispersionsrelation für diesen Fall ist in Abb.5 dargestellt. Warum der Wert $(\pi/(2p))^2$ nicht im Instabilitätsintervall enthalten sein soll, wird später bei der Betrachtung der Muster in einem Gebiet mit doppelter Länge klar.

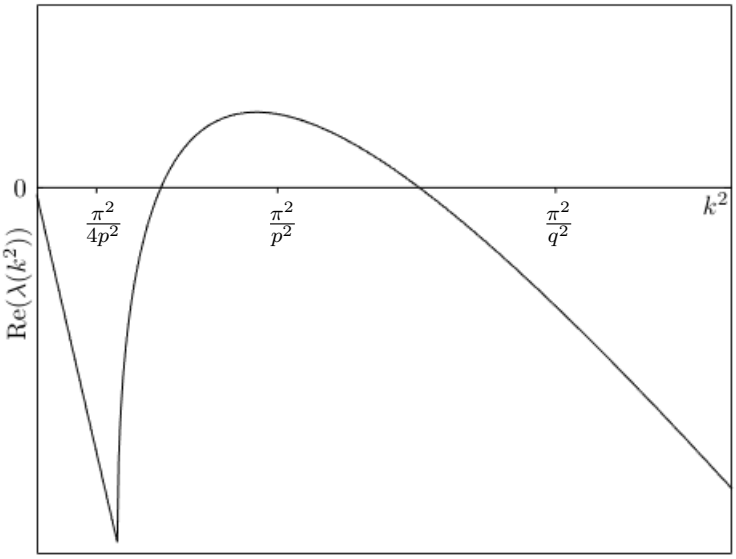


Abb. 5: Dispersionsrelation $\lambda(k^2)$ mit $(\pi/p)^2$ als einzige instabile Wellenzahl [*Eigene Abbildung in Anlehnung an [16], S.94, Figure 2.7*]

Die einzige instabile Mode ist dann $\cos(\pi x/p)$ und die exponentiell wachsende Lösung ist mit (2.73) von der Gestalt

$$\vec{w}(x,y,t) \approx \vec{c}_{1,0} \exp\left(\lambda\left(\frac{\pi^2}{p^2}\right)t\right)\cos\left(\frac{\pi}{p}x\right), \tag{2.77}$$

mit λ aus (2.34). In dieser Situation klingen alle anderen Moden exponentiell mit der Zeit ab. Der Vektor $\vec{c}_{1,0}$ kann nur aus den Anfangsbedingungen bestimmt werden. Um ein Gefühl dafür zu erhalten, was hier passiert, wird einfach $\vec{c}_{1,0} = (\varepsilon, \varepsilon)^\top$ für ein kleines $\varepsilon > 0$ gesetzt und u betrachtet. Mit (2.77) und der Definition von $\vec{w}$ aus (2.19) ergibt sich

$$u(x,y,t) \approx u_0 + \varepsilon \exp\left(\lambda\left(\frac{\pi^2}{p^2}\right)t\right)\cos\left(\frac{\pi}{p}x\right). \tag{2.78}$$

Auch hier ist die Darstellung von u nicht für alle t gültig, da diese durch eine Betrachtung des um die Ruhelage linearisierten Systems hergeleitet wurde. Für größere räumliche Abweichungen von der Ruhelage ist die Darstellung aufgrund der nichtlinearen Reaktionsterme nicht mehr zutreffend. Sie gibt jedoch sie einen qualitativen Eindruck des entstehenden Musters. Die instabile Mode aus (2.78), die sich mit wachsendem t entwickelt und damit in der Lösung dominiert, ist in Abb.6 a) dargestellt. Die Lösung entwickelt sich für $t \to \infty$ aus kleinen, räumlichen Störungen um die Ruhelage u_0. Die Darstellung in Abb.6 b) ist ein nützlicher Weg, um räumliche Muster für Reaktions-Diffusions-Systeme darzustellen. Hierbei stellt der schwarze Bereich eine Konzentration über dem Gleichgewicht und der hellgraue Bereich eine Konzentration unter dem Gleichgewicht dar. Falls nicht anders angegeben, repräsentieren die schwarzen und grauen Flächen in Abbildungen wie dieser immer die oben genannten Konzentrationen.

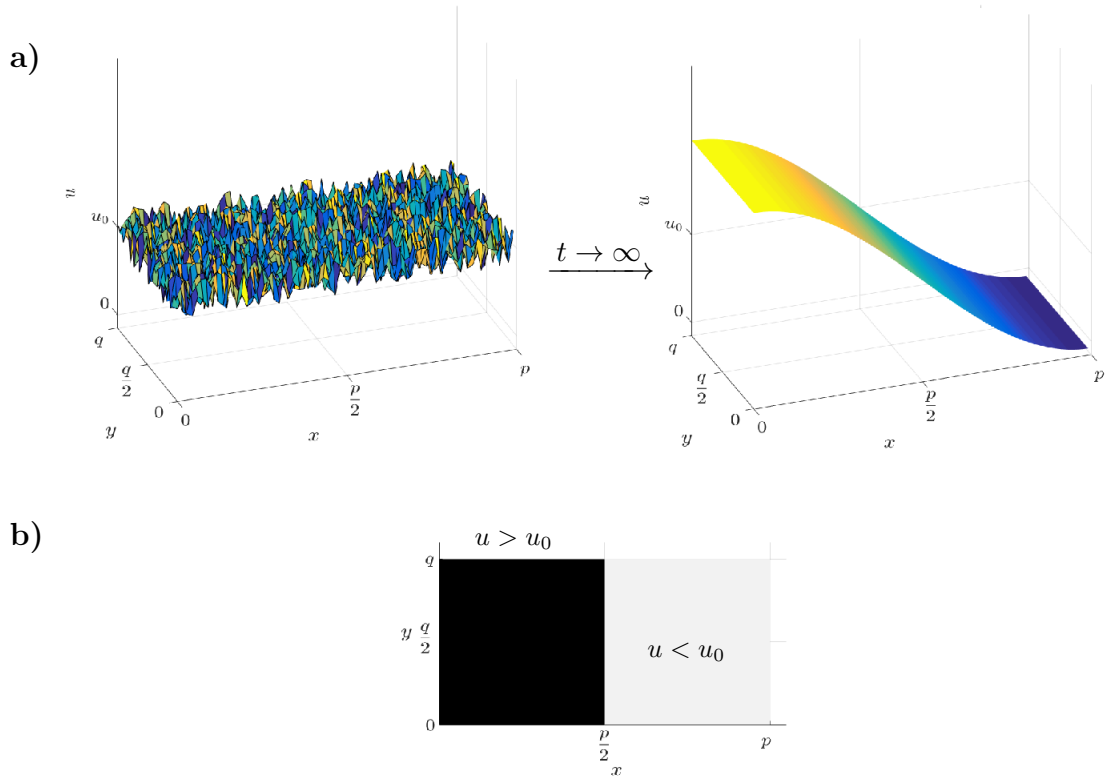


Abb. 6: **a)** Zeitliche Entwicklung der Mode mit $n = 1, m = 0$ (links) aus kleinen, räumlichen Störungen aus der homogenen Ruhelage u_0 (links) in einem rechteckigen Gebiet. **b)** Darstellung der Mode aus a), wobei der schwarze Bereich die Werte über dem Gleichgewicht u_0 und der hellgraue Bereich Werte darunter symbolisieren. [*Eigene Abbildung in Anlehnung an [16], S.94, Figure 2.7*]

Wird nun die Gebietslänge p verdoppelt auf $\tilde{p} = 2p$ und alle anderen Parameter wie oben gewählt, ändert sich die Dispersionsrelation aus Abb.6 nicht. Da γ so gewählt wurde, dass $(\pi/\tilde{p})^2$ nicht im Instabilitätsintervall enthalten ist, ist wieder nur die Wellenzahl $(\pi/p)^2$ instabil. Dies ist in dieser Situation die Wellenzahl mit $n = 2, m = 0$.

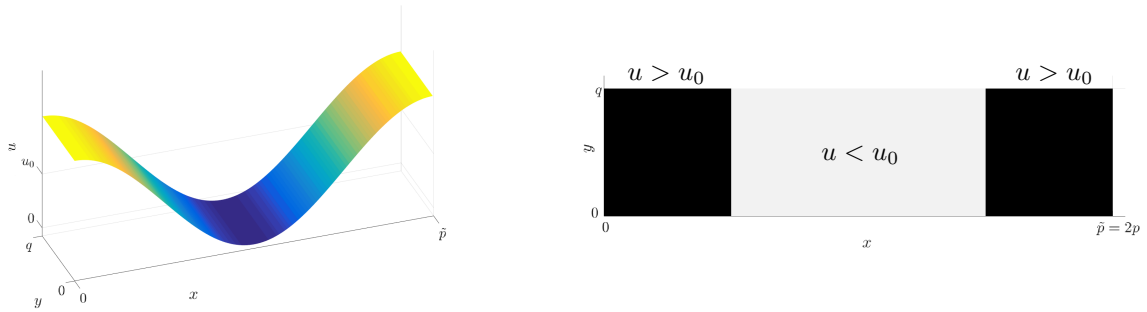


Abb. 7: Mode mit $n = 2, m = 0$, die durch Verdopplung der Gebietsbreite in der Situation aus Abb.6 instabil wird. [*Eigene Abbildung*]

Damit ist auch die dominierende Mode $\cos(2\pi/px)$ und das entstehende Muster wie in Abb.7 dargestellt. Es entwickeln sich also drei Streifen anstatt der zwei Streifen im nur halb so langen Gebiet. Allgemein folgt für diese Situation, dass eine Vergrößerung der Gebietslänge von p auf np mit $n \in \mathbb{N}$ die Entwicklung eines Streifenmusters mit $n+1$ Streifen zur Folge hat.

Das Vervierfachen des Gebiets durch Verdopplung von Breite und Länge ist äquivalent zu einer Verdopplung der Längenskala L aus (2.3) und damit zu einer Vervierfachung von γ. Damit lässt sich diese Situation auf zwei Arten realisieren: Entweder durch eine Erhöhung von γ oder durch eine Erhöhung von p und q. Diese Situation lässt sich jedoch im Allgemeinen nicht so einfach darstellen wie die vorherige. Denn außer der Wellenzahl für $n = 2$ und $m = 0$ können – abhängig von der durch p und q bzw. γ gegebenen Geometrie des Gebiets – eventuell auch andere Wellenzahlen im zulässigen Bereich aus (2.73) liegen. In Abb.8 a) sind typische zweidimensionale Muster abgebildet, die sich durch Isolation gewisser Wellenzahlen entwickeln können.

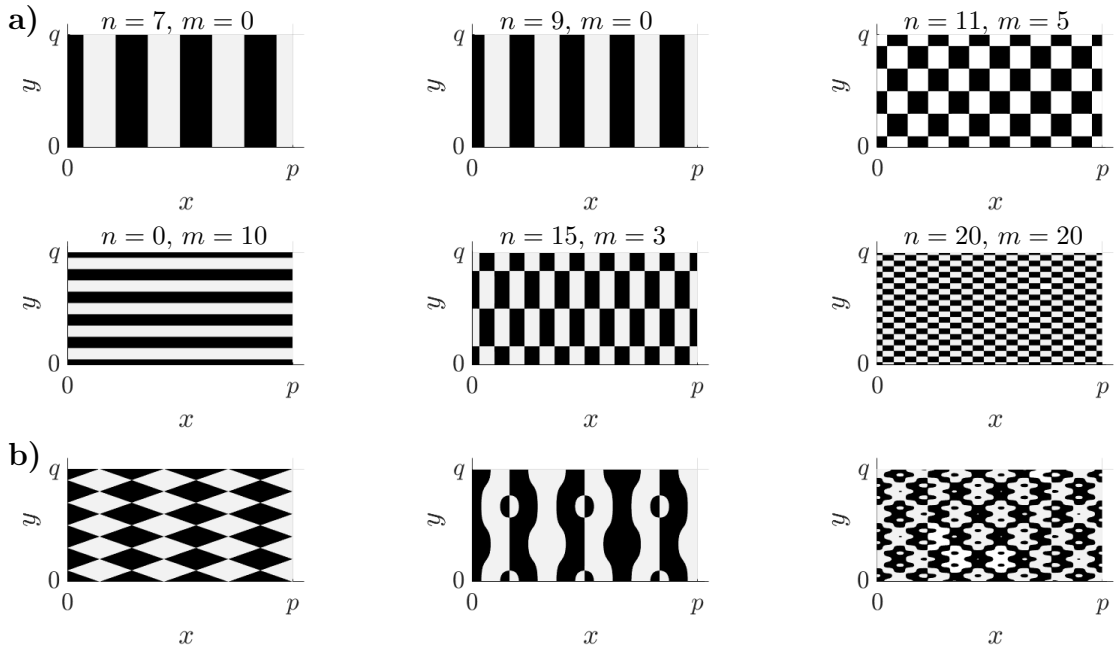


Abb. 8: a) Räumliche Moden in einem rechteckigen Gebiet zu verschiedenen Wellenzahlen **b)** Das durch Überlagerung der zwei darüber abgebildeten Moden aus a) resultierende Muster [*Eigene Abbildungen*]

Wenn also mehrere Wellenzahlen im Instabilitätsbereich liegen, kommt es nach (2.73) zu einer Überlagerung dieser einzelnen Moden. In Abb.8 b) ist jeweils das Resultat einer Überlagerung der zwei darüber abgebildeten Moden aus a) zu sehen. Diese oder ähnliche Muster können also aus der obigen Situation durch eine Vergrößerung von γ und die dadurch in den Instabilitätsbereich rutschenden Wellenzahlen entstehen.

Insgesamt liefern diese Ergebnisse ein Verständnis dafür, wie sich eine Änderung der Größe des Gebiets auf die sich bildenden Muster auswirkt. Durch eine Vergröße-

rung des Gebiets werden höhere Wellenzahlen instabil und es kommt eventuell zu Überlagerungen verschiedener Moden. Dadurch gewinnt das Muster an Komplexität. So können sich durch eine Vergrößerung des Gebiets aus einfachen Streifenmustern, wie in Abb.6,Abb.7 oder Abb.8 a) komplexere Muster als das in Abb.8 b) bilden. Die hier bestimmten Eigenfunktionen sind unabhängig von den gewählten Reaktionstermen. Diese spielen erst bei der Bestimmung des Instabilitätsintervalls und der Isolation einzelner Moden eine Rolle.

3 Numerische Verfahren zur Simulation zweidimensionaler Muster

Da die Lösungen der Systeme analytisch im Allgemeinen nicht bestimmbar sind, werden in diesem Kapitel einige Verfahren vorgestellt, die zur Bestimmung einer numerischen Lösung herangezogen werden können. Dabei wird unter anderem die sogenannte Linienmethode verwendet. Hierbei wird in einem ersten Schritt eine Diskretisierung der Ortsvariablen vorgenommen, wohingegen die Zeitvariable zunächst kontinuierlich bleibt. Die Ortsdiskretisierung erfolgt mit der Finite-Differenzen-Methode, mit welcher der Laplace-Operator durch bestimmte Differenzenquotienten approximiert wird. Das entstehende System wird dann mit einem Verfahren zur Lösung von Anfangswertproblemen gelöst.

Es wird das allgemeine System der Form

$$u_t = \gamma f(u,v) + \Delta u, \quad v_t = \gamma g(u,v) + d\Delta v \tag{3.1}$$

in zwei verschiedenen zweidimensionalen Gebieten $B \subseteq \mathbb{R}^2$ in einem Zeitintervall $[0, t_{\text{end}}]$ betrachtet. Zuerst werden die schon im letzten Kapitel untersuchten, rechteckigen Gebiete der Form

$$B = (0,p) \times (0,q) \subset \mathbb{R}^2 \tag{3.2}$$

mit $q, p > 0$ herangezogen. Für diese Gebiete werden wie in Kapitel 2.3 Nullfluss-Randbedingungen gewählt, d. h.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x}\begin{pmatrix} u(0,y,t) \\ v(0,y,t) \end{pmatrix} &= \frac{\partial}{\partial x}\begin{pmatrix} u(p,y,t) \\ v(p,y,t) \end{pmatrix} = \vec{0}, \text{ für } (y,t) \in [0,q] \times [0,t_{\text{end}}] \\ \text{und } \frac{\partial}{\partial y}\begin{pmatrix} u(x,0,t) \\ v(x,0,t) \end{pmatrix} &= \frac{\partial}{\partial y}\begin{pmatrix} u(x,q,t) \\ v(x,q,t) \end{pmatrix} = \vec{0}, \text{ für } (x,t) \in [0,p] \times [0,t_{\text{end}}]. \end{aligned} \tag{3.3}$$

Das zweite Gebiet ist ein Kreisring-Segment mit innerem Radius $R_0 > 0$, äußerem Radius $R_1 > R_0$ und dem Winkel $\alpha \in (0, 2\pi)$. In ebenen Polarkoordinaten (r, φ) hat B die Form

$$B = (R_0, R_1) \times (0, \alpha) \subset \mathbb{R}^2. \tag{3.4}$$

Hier werden nicht am kompletten Rand des Gebiets Nullfluss-Randbedingungen gewählt, da das Gebiet als Mantelfläche eines Kegelstumpfs geschlossen in φ, also periodisch sein soll. Für $r \in \{R_0, R_1\}$ werden die Nullfluss-Randbedingungen behalten. Es ergeben sich also die Randbedingungen

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial r}\begin{pmatrix} u(R_0,\varphi,t) \\ v(R_0,\varphi,t) \end{pmatrix} &= \frac{\partial}{\partial r}\begin{pmatrix} u(R_1,\varphi,t) \\ v(R_1,\varphi,t) \end{pmatrix} = \vec{0}, && \text{für } (\varphi,t) \in [0,\alpha] \times [0,t_{\text{end}}] \\ \text{und } \begin{pmatrix} u(r,0,t) \\ v(r,0,t) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} u(r,\alpha,t) \\ v(r,\alpha,t) \end{pmatrix}, && \text{für } (r,t) \in [R_0,R_1] \times [0,t_{\text{end}}]. \end{aligned} \tag{3.5}$$

Die Diskretisierungen werden im Folgenden lediglich für u aus (3.1) durchgeführt. Für v lassen sich diese aber völlig analog durchführen.

3.1 Ortsdiskretisierung des Laplace-Operators

In der Notation dieses Abschnitts wird die Zeitvariable t der Einfachheit halber weggelassen, da hier nur die Ortsvariablen diskretisiert werden und die Zeitvariable vorerst kontinuierlich bleibt.

3.1.1 Für ein rechteckiges Gebiet

Zunächst wird der Abschluss $\bar{B}$ des Gebiets B mit einem äquidistanten Gitter überzogen. Mit den Schrittweiten

$$\Delta x = \frac{p}{M},\ \Delta y = \frac{q}{N}$$

in x- bzw. y-Richtung für $M, N \in \mathbb{N}$ wird das Gitter durch

$$B_{\Delta x,\Delta y} := \left\{(i\Delta x, j\Delta y) \in \bar{B} : i \in \{0,\dots,M\}, j \in \{0,\dots,N\}\right\}$$

definiert. Die Gitterpunkte von $B_{\Delta x,\Delta y}$, die auf dem Rand des Gebiets B liegen, werden Rand-Gitterpunkte genannt und sind gegeben durch

$$\partial B_{\Delta x,\Delta y} := \partial B \cap B_{\Delta x,\Delta y} = \{(i\Delta x, j\Delta y) : i \in \{0, M\}, j \in \{0, N\}\}\,.$$

Die inneren Gitterpunkte sind gegeben durch

$$B^{\circ}_{\Delta x,\Delta y} := \{(i\Delta x, j\Delta y) \in B : i \in \{1,\dots,M-1\}, j \in \{1,\dots,N-1\}\}\,.$$

Insgesamt ergibt dies ein Gitter wie in Abb.9 mit $(M+1)(N+1)$ Gitterpunkten.

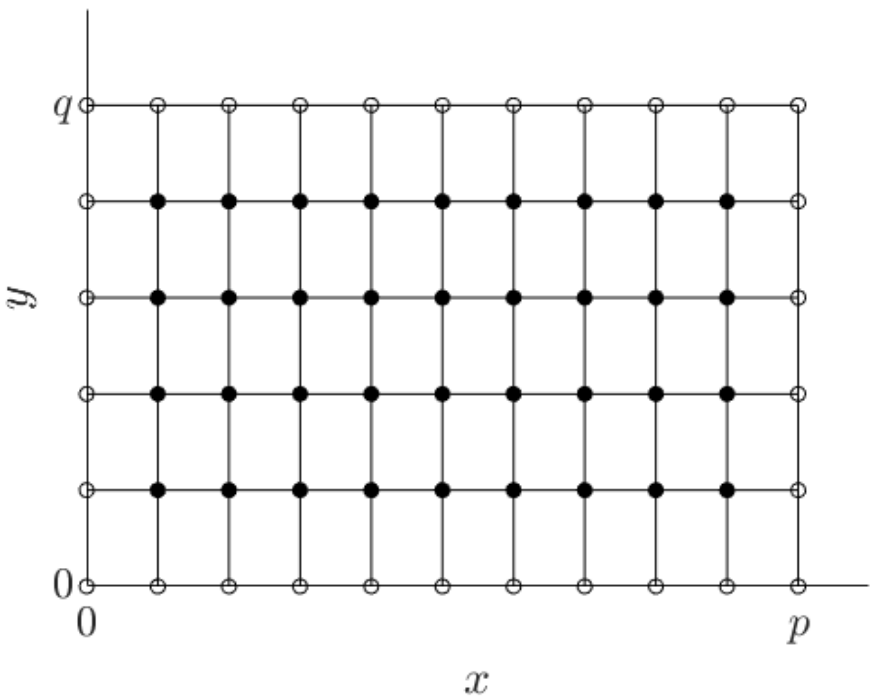


Abb. 9: Beispiel für ein äquidistantes Gitter $B_{\Delta x,\Delta y}$ mit $M = 10$ und $N = 5$, wobei $\bullet$ innere Gitterpunkte und $\circ$ Rand-Gitterpunkte darstellen [*Eigene Abbildung*]

Für ein hinreichend glattes $w : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ gilt mit Taylor um $h > 0$ in x (und in y analog):

$$\begin{aligned} &w(x \pm h, y) = w(x,y) \pm w_x(x,y)h + \frac{1}{2}w_{xx}(x,y)h^2 \pm \frac{1}{6}w_{xxx}(x,y)h^3 + \mathcal{O}(h^4) \\ \Rightarrow\ &\frac{w(x+h,y) - 2w(x,y) + w(x-h,y)}{h^2} = w_{xx}(x,y) + \mathcal{O}(h^2). \end{aligned}$$

Damit folgt die Approximation für die zweiten partiellen Ableitungen nach den Ortsvariablen

$$\begin{aligned} w_{xx}(x,y) &\approx \frac{w(x+h,y) - 2w(x,y) + w(x-h,y)}{h^2} \\ w_{yy}(x,y) &\approx \frac{w(x,y+h) - 2w(x,y) + w(x,y-h)}{h^2} \end{aligned} \tag{3.6}$$

Für den Laplace-Operator in (3.1) gilt dann mit (3.6) und $h = \Delta x$, bzw. $h = \Delta y$:

$$\begin{aligned} \Delta u(x,y) = u_{xx}(x,y) + u_{yy}(x,y) \approx &\frac{u(x+\Delta x,y) - 2u(x,y) + u(x-\Delta x,y)}{(\Delta x)^2} \\ &+ \frac{u(x,y+\Delta y) - 2u(x,y) + u(x,y-\Delta y)}{(\Delta y)^2}. \end{aligned} \tag{3.7}$$

Die Gleichung (3.7) liefert eine Approximation $(\Delta u)_{i,j}$ von $\Delta u(i\Delta x, j\Delta y)$. Mit der Schreibweise $u_{i,j} = u(i\Delta x, j\Delta y)$ lässt sich (3.7) auf $B^\circ_{\Delta x,\Delta y}$ schreiben als

$$(\Delta u)_{i,j} = \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{(\Delta x)^2} + \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{(\Delta y)^2}. \tag{3.8}$$

Für die Rand-Gitterpunkte $\partial B_{\Delta x,\Delta y}$ treten in (3.8) die Ausdrücke $u_{-1,j}, u_{M+1,j}$, $j = 1,\dots,N$ bzw. $u_{i,-1}, u_{i,N+1}$, $i = 1,\dots,M$ auf. Die Funktion u müsste also auf Punkten außerhalb des Gitters ausgewertet werden. Diese sogenannten *Ghost-Punkte* [24] werden umgangen, indem die Nullfluss-Randbedingungen aus (3.3) mit eingebracht werden.

Dafür wird zunächst wieder für hinreichend glattes $w : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ mit Taylor um $h > 0$ in x entwickelt (und analog für y). Dies führt zu

$$\begin{aligned} &w(x \pm h, y) = w(x,y) \pm w_x(x,y)h + \mathcal{O}(h^2) \\ \Rightarrow\ &w_x(x,y) = \begin{cases} \frac{w(x+h,y)-w(x,y)}{h} + \mathcal{O}(h) & \text{(rechtsseitiger Differenzenquotient)} \\ \frac{w(x,y)-w(x-h,y)}{h} + \mathcal{O}(h) & \text{(linksseitiger Differenzenquotient)} \end{cases} \end{aligned} \tag{3.9}$$

Mit den Nullfluss-Randbedingungen aus (3.3) gilt $u_x(0,y) = u_x(p,y) = 0$ für $y \in [0,q]$ und $u_y(x,0) = u_y(x,q) = 0$ für $x \in [0,p]$. Mit dem linksseitigen Differenzenquotienten aus (3.9) mit $h = \Delta x$ für u folgt für die Ghost-Punkte:

$$0 = u_x(0, j\Delta y) \approx \frac{u_{0,j} - u_{-1,j}}{\Delta x} \quad \rightsquigarrow \quad u_{0,j} = u_{-1,j},\ j = 0,\dots,N \tag{3.10}$$

und mit dem rechtsseitigen Differenzenquotienten aus (3.9) entsprechend:

$$0 = u_x(p, j\Delta y) \approx \frac{u_{M+1,j} - u_{M,j}}{\Delta x} \rightsquigarrow u_{M,j} = u_{M+1,j},\ j = 0, \dots, N. \tag{3.11}$$

Mit den entsprechenden Differenzenquotienten folgt analog auch für y:

$$u_{i,0} = u_{i,-1} \text{ und } u_{i,N} = u_{i,N+1},\ i = 0, \dots, M. \tag{3.12}$$

Damit ergibt sich für die Approximation aus (3.7) des Laplace-Operators an den Eckpunkten $(\Delta u)_{0,0}, (\Delta u)_{0,N}, (\Delta u)_{M,N}$ und $(\Delta u)_{M,0}$, mit (3.10), (3.11) und (3.12):

$$\begin{aligned}
(\Delta u)_{0,0} &= \frac{u_{1,0} - u_{0,0}}{(\Delta x)^2} + \frac{u_{0,1} - u_{0,0}}{(\Delta y)^2} \\
(\Delta u)_{0,N} &= \frac{u_{1,N} - u_{0,N}}{(\Delta x)^2} + \frac{u_{0,N-1} - u_{0,N}}{(\Delta y)^2} \\
(\Delta u)_{M,N} &= \frac{u_{M-1,N} - u_{M,N}}{(\Delta x)^2} + \frac{u_{M,N-1} - u_{M,N}}{(\Delta y)^2} \\
(\Delta u)_{M,0} &= \frac{u_{M-1,0} - u_{M,0}}{(\Delta x)^2} + \frac{u_{M,1} - u_{M,0}}{(\Delta y)^2}.
\end{aligned} \tag{3.13}$$

Für die restlichen Randpunkte folgt analog:

$$\begin{aligned}
(\Delta u)_{0,j} &= \frac{u_{1,j} - u_{0,j}}{(\Delta x)^2} + \frac{u_{0,j+1} - 2u_{0,j} + u_{0,j-1}}{(\Delta y)^2}, && j = 1, \dots, N-1 \\
(\Delta u)_{M,j} &= \frac{u_{M-1,j} - u_{M,j}}{(\Delta x)^2} + \frac{u_{M,j+1} - 2u_{M,j} + u_{M,j-1}}{(\Delta y)^2}, && j = 1, \dots, N-1 \\
(\Delta u)_{i,0} &= \frac{u_{i+1,0} - 2u_{i,0} + u_{i-1,0}}{(\Delta x)^2} + \frac{u_{i,1} - u_{i,0}}{(\Delta y)^2}, && i = 1, \dots, M-1 \\
(\Delta u)_{i,N} &= \frac{u_{i+1,N} - 2u_{i,N} + u_{i-1,N}}{(\Delta x)^2} + \frac{u_{i,N-1} - u_{i,N}}{(\Delta y)^2}, && i = 1, \dots, M-1.
\end{aligned} \tag{3.14}$$

Sei nun $\vec{U} := \left(\vec{u}^0, \dots, \vec{u}^N\right)^\top$ mit $\vec{u}^j := (u_{0,j}, \dots, u_{M,j})^\top \in \mathbb{R}^{M+1}$, $h_1 := \frac{1}{(\Delta x)^2}$, $h_2 := \frac{1}{(\Delta y)^2}$ und $C, D, E, H_2 \in \mathbb{R}^{(M+1)\times(M+1)}$ mit

$$C := h_1 \begin{pmatrix}
-1 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\
1 & -2 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\
0 & 1 & -2 & \dots & 0 & 0 & 0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\
0 & 0 & 0 & \dots & -2 & 1 & 0 \\
0 & 0 & 0 & \dots & 1 & -2 & 1 \\
0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & -1
\end{pmatrix}, \tag{3.15}$$

$$H_2 := h_2 \mathrm{I}_{M+1},\ D := -H_2 \text{ und } E := -2H_2.$$

Insgesamt lassen sich die Gleichungen (3.7),(3.13) und (3.14) schreiben als

$$\begin{pmatrix} (\vec{\Delta u})^0 \\ (\vec{\Delta u})^1 \\ (\vec{\Delta u})^2 \\ \vdots \\ (\vec{\Delta u})^{N-2} \\ (\vec{\Delta u})^{N-1} \\ (\vec{\Delta u})^N \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} C+D & H_2 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ H_2 & C+E & H_2 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & H_2 & C+E & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & C+E & H_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & H_2 & C+E & H_2 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & H_2 & C+D \end{pmatrix}}_{=:A \in \mathbb{R}^{((M+1)(N+1))\times((M+1)(N+1))}} \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} \vec{u}^0 \\ \vec{u}^1 \\ \vec{u}^2 \\ \vdots \\ \vec{u}^{N-2} \\ \vec{u}^{N-1} \\ \vec{u}^N \end{pmatrix}}_{=\vec{U}} \tag{3.16}$$

mit $(\vec{\Delta u})^j := ((\Delta u)_{0,j}, \dots, (\Delta u)_{M,j})^\top \in \mathbb{R}^{M+1}$.

3.1.2 Für ein Kreisring-Segment

Analog, wie in Abschnitt 3.1.1, wird für das Gebiet B aus (3.4) ein äquidistantes Gitter über $\bar{B}$ gelegt. Dieses ist definiert als

$$B_{\Delta r,\Delta\varphi} := \{(R_0 + i\Delta r, j\Delta\varphi) : i \in \{0,\dots,M\}, j \in \{0,\dots,N\}\}$$

mit den Schrittweiten

$$\Delta r = \frac{R_1 - R_0}{M}, \ \Delta\varphi = \frac{\alpha}{N}. \tag{3.17}$$

Es sei auch hier die Menge der Rand-Gitterpunkte $\partial B_{\Delta r,\Delta\varphi} := \partial B \cap B_{\Delta r,\Delta\varphi}$ und die Menge der inneren Gitterpunkte $B^\circ_{\Delta r,\Delta\varphi} := B_{\Delta r,\Delta\varphi} \backslash \partial B_{\Delta r,\Delta\varphi}$. Es ergibt sich ein Gitter wie in Abb.10 mit $(M+1)(N+1)$ Gitterpunkten.

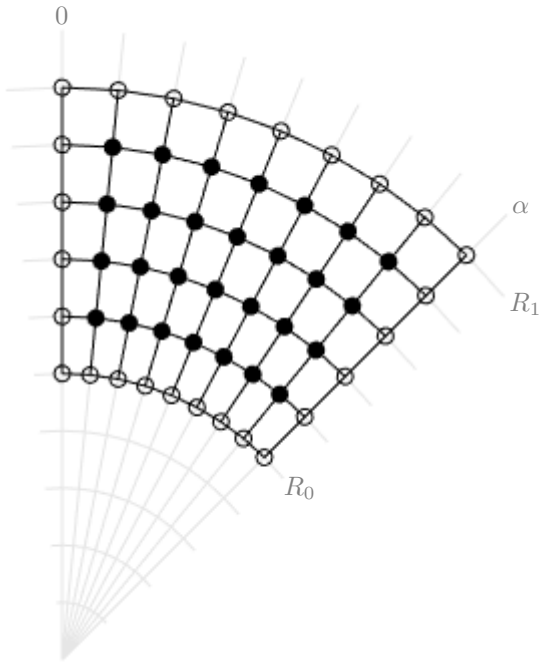


Abb. 10: Beispiel für ein Gitter $B_{\Delta r,\Delta\varphi}$ mit $M = 5$ und $N = 8$, wobei • innere Gitterpunkte und ∘ Rand-Gitterpunkte darstellen [*Eigene Abbildung*]

Der Laplace-Operator in ebenen Polarkoordinaten lautet:

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \tag{3.18}$$

Analog wie in Abschnitt 3.1.1 liefern die entsprechenden Differenzenquotienten mit der Schreibweise $u_{i,j} = u(r_i, j\Delta\varphi), r_i := R_0 + i\Delta r$ die Approximation $(\Delta u)_{i,j}$ von $\Delta u(r_i, j\Delta\varphi)$ auf $B^\circ_{\Delta r,\Delta\varphi}$ als

$$(\Delta u)_{i,j} = \frac{u_{i-1,j} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j}}{(\Delta r)^2} + \frac{1}{r_i}\frac{u_{i-1,j} - u_{i+1,j}}{2\Delta r} + \frac{1}{r_i^2}\frac{u_{i,j-1} - 2u_{i,j} + u_{i,j+1}}{(\Delta\varphi)^2}, \tag{3.19}$$

für $i \in \{1, \ldots, M-1\}$, $j \in \{1, \ldots, N-1\}$.

Da an den Rändern mit $\varphi = 0$ und $\varphi = \alpha$ die periodischen Randbedingungen aus (3.5) gewählt wurden, werden die Ghost-Punkte gesetzt als $u_{i,N+1} = u_{i,0}$ und $u_{i,-1} = u_{i,N}$ für $i \in \{0, \ldots, M\}$. Damit folgt für diese Randpunkte

$$\begin{aligned}
(\Delta u)_{i,0} &= \frac{u_{i-1,0} - 2u_{i,0} + u_{i+1,0}}{(\Delta r)^2} + \frac{1}{r_i}\frac{u_{i-1,0} - u_{i+1,0}}{2\Delta r} + \frac{1}{r_i^2}\frac{u_{i,N} - 2u_{i,0} + u_{i,1}}{(\Delta\varphi)^2}, \\
(\Delta u)_{i,N} &= \frac{u_{i-1,N} - 2u_{i,N} + u_{i+1,N}}{(\Delta r)^2} + \frac{1}{r_i}\frac{u_{i-1,N} - u_{i+1,N}}{2\Delta r} + \frac{1}{r_i^2}\frac{u_{i,N-1} - 2u_{i,N} + u_{i,0}}{(\Delta\varphi)^2},
\end{aligned} \tag{3.20}$$

für $i \in \{1, \ldots, M-1\}$.

Für die Randpunkte mit $r = R_0$ und $r = R_1$ folgt mit den Nullfluss-Randbedingungen analog wie in Abschnitt 3.1.1:

$$\begin{aligned}
(\Delta u)_{0,j} &= \frac{u_{1,j} - u_{0,j}}{(\Delta r)^2} + \frac{1}{R_0}\frac{u_{0,j} - u_{1,j}}{2\Delta r} + \frac{1}{R_0^2}\frac{u_{0,j-1} - 2u_{0,j} + u_{0,j+1}}{(\Delta\varphi)^2}, \\
(\Delta u)_{M,j} &= \frac{u_{M-1,j} - u_{M,j}}{(\Delta r)^2} + \frac{1}{R_1}\frac{u_{M-1,j} - u_{M,j}}{2\Delta r} + \frac{1}{R_1^2}\frac{u_{M,j-1} - 2u_{M,j} + u_{M,j+1}}{(\Delta\varphi)^2},
\end{aligned} \tag{3.21}$$

für $j \in \{1, \ldots, N-1\}$.

Für die Eckpunkte ergibt sich entsprechend

$$\begin{aligned}
(\Delta u)_{0,0} &= \frac{u_{1,0} - u_{0,0}}{(\Delta r)^2} + \frac{1}{R_0}\frac{u_{0,0} - u_{1,0}}{2\Delta r} + \frac{1}{R_0^2}\frac{u_{0,N} - 2u_{0,0} + u_{0,1}}{(\Delta\varphi)^2}, \\
(\Delta u)_{0,N} &= \frac{u_{0,0} - u_{0,N}}{(\Delta r)^2} + \frac{1}{R_0}\frac{u_{0,N} - u_{1,N}}{2\Delta r} + \frac{1}{R_0^2}\frac{u_{0,N-1} - 2u_{0,N} + u_{0,0}}{(\Delta\varphi)^2}, \\
(\Delta u)_{M,N} &= \frac{u_{M-1,N} - u_{M,N}}{(\Delta r)^2} + \frac{1}{R_1}\frac{u_{M-1,N} - u_{M,N}}{2\Delta r} + \frac{1}{R_1^2}\frac{u_{M,N-1} + 2u_{M,N} + u_{M,0}}{(\Delta\varphi)^2}, \\
(\Delta u)_{M,0} &= \frac{u_{M-1,0} - u_{M,0}}{(\Delta r)^2} + \frac{1}{R_1}\frac{u_{M-1,0} - u_{M,0}}{2\Delta r} + \frac{1}{R_1^2}\frac{u_{M,N} - 2u_{M,0} + u_{M,1}}{(\Delta\varphi)^2}.
\end{aligned} \tag{3.22}$$

Es sei nun $\vec{U}$ wie in (3.15), $h_1 := \frac{1}{(\Delta r)^2}$, $h_2 := \frac{1}{(\Delta\varphi)^2}$ und $R, C, D, H_2 \in \mathbb{R}^{(M+1)\times(M+1)}$ mit

$$
\begin{aligned}
R &:= \begin{pmatrix}
\frac{1}{R_0^2} & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\
0 & \frac{1}{r_1^2} & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & \frac{1}{r_2^2} & \dots & 0 & 0 & 0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\
0 & 0 & 0 & \dots & \frac{1}{r_{M-2}^2} & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \frac{1}{r_{M-1}^2} & 0 \\
0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \frac{1}{R_1^2}
\end{pmatrix}, \\
C &:= h_1 \begin{pmatrix}
-\left(1-\frac{\Delta r}{2R_0}\right) & 1-\frac{\Delta r}{2R_0} & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\
1+\frac{\Delta r}{2r_1} & -2 & 1-\frac{\Delta r}{2r_1} & \dots & 0 & 0 & 0 \\
0 & 1+\frac{\Delta r}{2r_2} & -2 & \dots & 0 & 0 & 0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\
0 & 0 & 0 & \dots & -2 & 1-\frac{\Delta r}{2r_{M-2}} & 0 \\
0 & 0 & 0 & \dots & 1+\frac{\Delta r}{2r_{M-1}} & -2 & 1-\frac{\Delta r}{2r_{M-1}} \\
0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1+\frac{\Delta r}{2R_1} & -\left(1+\frac{\Delta r}{2R_1}\right)
\end{pmatrix},
\end{aligned}
\tag{3.23}
$$

$D := -2h_2 R$, $H_2 := h_2 R$.

Die Approximation des Laplace-Operators auf dem Gitter $B_{\Delta r,\Delta\varphi}$ kann dann mit (3.23) und $(\vec{\Delta u})^j$ aus (3.16) geschrieben werden als das Matrix-Vektor-Produkt

$$
\begin{pmatrix}
(\vec{\Delta u})^0 \\
(\vec{\Delta u})^1 \\
(\vec{\Delta u})^2 \\
\vdots \\
(\vec{\Delta u})^{N-2} \\
(\vec{\Delta u})^{N-1} \\
(\vec{\Delta u})^N
\end{pmatrix}
=
\underbrace{\begin{pmatrix}
C+D & H_2 & 0 & \dots & 0 & 0 & H_2 \\
H_2 & C+D & H_2 & \dots & 0 & 0 & 0 \\
0 & H_2 & C+D & \dots & 0 & 0 & 0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\
0 & 0 & 0 & \dots & C+D & H_2 & 0 \\
0 & 0 & 0 & \dots & H_2 & C+D & H_2 \\
H_2 & 0 & 0 & \dots & 0 & H_2 & C+D
\end{pmatrix}}_{=:\, A \in \mathbb{R}^{((M+1)(N+1))\times((M+1)(N+1))}} \cdot \vec{U}. \tag{3.24}
$$

3.2 Zeitdiskretisierung

Bei der Zeitdiskretisierung werden die zeitlichen Ableitungen, ähnlich wie in Abschnitt 3.1, durch geeignete Differenzenquotienten ersetzt. Das führt zu Approximationen $(u_t)_{i,j}^k$ von $u_t(i\Delta x, j\Delta y, k\Delta t)$ mit Ortsschrittweiten Δx, Δy wie in Abschnitt 3.1.1 und die Zeitschrittweite Δt für $T \in \mathbb{N}$ definiert als

$$\Delta t = \frac{t_{\text{end}}}{T}.$$

Analog lässt sich das für die Schrittweiten $\Delta r, \Delta\varphi$ des Kreisring-Segments aus Abschnitt 3.1.2 formulieren.

Mit der Schreibweise und den Ergebnissen aus Kapitel 3.1, lässt sich dann insgesamt für $k \in \{0, \dots, T\}$ schreiben

$$\underbrace{\begin{pmatrix} (u_t)^k_{0,0} \\ (u_t)^k_{1,0} \\ \vdots \\ (u_t)^k_{M-1,N} \\ (u_t)^k_{M,N} \end{pmatrix}}_{=:(\vec{u_t})^k \in \mathbb{R}^{(M+1)(N+1)}} = \gamma \underbrace{\begin{pmatrix} f(u^k_{0,0}, v^k_{0,0}) \\ f(u^k_{1,0}, v^k_{1,0}) \\ \vdots \\ f(u^k_{M-1,N}, v^k_{M-1,N}) \\ f(u^k_{M,N}, v^k_{M,N}) \end{pmatrix}}_{=:\vec{F}^k \in \mathbb{R}^{(M+1)(N+1)}} + A \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} u^k_{0,0} \\ u^k_{1,0} \\ \vdots \\ u^k_{M-1,N} \\ u^k_{M,N} \end{pmatrix}}_{=:\vec{U}^k \in \mathbb{R}^{(M+1)(N+1)}}. \tag{3.25}$$

Die Randbedingungen sind bereits in der Matrix A aus (3.16) und (3.24) enthalten. Als Anfangswerte werden zufällige, kleine Störungen um die Ruhelage gewählt, aus diesen sich dann das Muster entwickelt. Die Anfangswerte $u^0_{i,j}$ bzw. $v^0_{i,j}$, $i = 1, \dots, M$, $j = 1, \dots, N$ werden also zum Beispiel für kleines $\varepsilon > 0$ als gleichverteilte Zufallswerte aus $[u_0 - \varepsilon, u_0 + \varepsilon]$ bzw. $[u_0 - \varepsilon, u_0 + \varepsilon]$ gewählt.

Es werden nun verschiedene Verfahren vorgestellt, die unterschiedliche Ansätze zur Zeitdiskretisierung verwenden.

3.2.1 Das Explizite Euler-Verfahren

Die Idee des expliziten Euler-Verfahrens besteht darin, die zeitlichen Ableitungen in (3.25) durch linksseitige Differenzenquotienten zu approximieren.

Für hinreichend glattes $w : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ folgt mit Taylor um $h > 0$:

$$w(t + h) = w(t) + w_t(t)h + \mathcal{O}(h^2) \tag{3.26}$$

und damit

$$\frac{w(t + h) - w(t)}{h} = w_t(t) + \mathcal{O}(h). \tag{3.27}$$

Für u folgt dann mit $h = \Delta t$:

$$(u_t)^k_{i,j} = \frac{u^{k+1}_{i,j} - u^k_{i,j}}{\Delta t}.$$

Mit dieser Approximation und mit (3.25) ergibt sich das System

$$\frac{1}{\Delta t}\left(\vec{U}^{k+1} - \vec{U}^k\right) = \gamma \vec{F}^k + A \cdot \vec{U}^k$$

und damit die Verfahrensvorschrift des expliziten Euler-Verfahren

$$\vec{U}^{k+1} = \vec{U}^k + \Delta t \left(\gamma \vec{F}^k + A \cdot \vec{U}^k\right). \tag{3.28}$$

Der Rechenaufwand ist hier gering, da in jedem Schritt lediglich ein Matrix-Vektor-Produkt und zwei Summen von Vektoren berechnet werden müssen. Damit das

Verfahren konvergiert, muss jedoch die Schrittweite Δt je nach Wahl von $\Delta x, \Delta y$ hinreichend klein gewählt werden. Die notwendige Schrittweite Δt sinkt mit der Verkleinerung der Ortsschrittweiten Δx und Δy. Das heißt also, dass für ein feineres Ortsgitter deutlich mehr Zeitschritte benötigt werden, um die Lösung in einem gegebenen Zeitintervall zu simulieren. Um dieses Problem zu umgehen, können sogenannte Implizit-Explizit-Verfahren herangezogen werden, die bessere Stabilitätseigenschaften mit sich bringen.

3.2.2 Die Implizit-Explizit-Verfahren (IMEX)

Bei den IMEX-Verfahren [18] wird der Laplace-Operator implizit gelöst, wohingegen der nichtlineare Reaktionsterm explizit behandelt wird. Für die folgenden zwei Beispiele werden sogenannte BDF-Verfahren (backward differentiation formula) [2] erster bzw. zweiter Ordnung zur impliziten Lösung des Laplace-Operators verwendet.

Das 1-SBDF-Verfahren

Das einfachste Beispiel ist das 1-SBDF (First Oder Semi-implicit Backward Differentation Formula) [18]. Hier führt, ähnlich wie beim expliziten Euler-Verfahren, eine Approximation $(u_t)_{i,j}^{k+1}$ von $u_t(i\Delta x, j\Delta y, (k+1)\Delta t)$ mit den linksseitigen Differenzenquotienten zu

$$(u_t)_{i,j}^{k+1} = \frac{1}{\Delta t}(u_{i,j}^{k+1} - u_{i,j}^{k}), \tag{3.29}$$

für $i = 0, \ldots, M$, $j = 0, \ldots, N$, $k = 0, \ldots, T-1$. Damit ergibt sich

$$\vec{U}^{k+1} - \vec{U}^{k} = \Delta t(A \cdot \vec{U}^{k+1} + \vec{F}^{k+1}). \tag{3.30}$$

Für den nichtlinearen Reaktionsterm wird hier einfach der Vektor $\vec{F}^k$ des letzten Zeitschritts verwendet. Damit ergibt sich die Verfahrensvorschrift des 1-SBDF-Verfahrens in diesem Fall mit (3.30) als

$$\vec{U}^{k+1} = \vec{U}^{k} + \Delta t \left(\gamma \vec{F}^{k} + A \cdot \vec{U}^{k+1}\right). \tag{3.31}$$

Die Gleichung (3.31) kann nun als lineares Gleichungssystem mit den Unbekannten $u_{i,j}^{k+1}$ geschrieben werden:

$$\left(\mathrm{I}_{(M+1)(N+1)} - \Delta t\, A\right) \vec{U}^{k+1} = \vec{U}^{k} + \Delta t \gamma \vec{F}^{k}. \tag{3.32}$$

Hier muss also für jeden Zeitschritt ein Gleichungssystem mit $(M+1)(N+1)$ Gleichungen für die Unbekannten $u_{i,j}^{k+1}$ gelöst werden. Dabei ist jedoch zu beachten, dass die Matrix des Gleichungssystems nur dünn besetzt ist und sich der Rechenaufwand dadurch verringert.

Das 2-SBDF-Verfahren

Als implizites Verfahren wird für das 2-SBDF-Verfahren (Second Order Semi-implicit Backward Differentiation Formula) [18] das BDF-Verfahren [2] zweiter Ordnung verwendet und der Reaktionsterm $\vec{F}^{k+1}$ wird durch $2\vec{F}^k - \vec{F}^{k-1}$ approximiert. Das Verfahren hat demnach die Gestalt

$$3\vec{U}^{k+1} - 4\vec{U}^k + \vec{U}^{k-1} = 2\Delta t \left(A \cdot \vec{U}^{k+1} + 2\vec{F}^k - \vec{F}^{k-1} \right) \tag{3.33}$$

und lässt sich schreiben als

$$(3\mathrm{I}_{(M+1)(N+1)} - 2\Delta t A)\vec{U}^{k+1} = 4\vec{U}^k - \vec{U}^{k-1} + 2\Delta t \left(2\vec{F}^k - \vec{F}^{k-1} \right). \tag{3.34}$$

Da sich das Verfahren auf Werte des vorletzten Zeitschritts bezieht, kann der erste Schritt ($k = 0$) nicht mit diesem Verfahren durchgeführt werden. Dieser kann beispielsweise mit dem 1-SBDF (vgl. (3.32)) oder dem expliziten Euler-Verfahren (vgl. (3.28)) berechnet werden.

Weitere IMEX-Verfahren und genauere Stabilitätseigenschaften finden sich in S. J. Ruuths Paper [18].

3.3 Das Alternating-Direction-Implicit-Verfahren (ADI)

Die Idee hinter dem von Peaceman und Rachford [17] entwickelten ADI-Verfahren ist es, das zweidimensionale Problem in zwei eindimensionale Probleme zu zerlegen, ohne dabei die Stabilität des Verfahrens einzuschränken. Hierbei wird jeder Zeitschritt in zwei Teilschritte zerlegt und der Laplace-Operator im ersten Halbschritt implizit in x-Richtung und im zweiten implizit in y-Richtung gelöst. Die implizit und explizit behandelte Richtung wird nach jedem ganzen Schritt vertauscht. Die folgende Herleitung der Verfahrensvorschrift ist an Kapitel 2 von J. Lis und Y.-T. Chens Buch [11] angelehnt. Die Reaktionsterme werden hier jeweils explizit behandelt. Es wird hier also eine andere Ortsdiskretisierung des Laplace-Operators verwendet als zuvor.

Eine Approximation der zeitlichen Ableitung, wie in (3.29), von u an der Stelle $(k+1/2)\Delta t$ und die implizite Behandlung des Laplace-Operators in x-Richtung und explizite in y-Richtung führt dann zu

$$\frac{u_{i,j}^{k+\frac{1}{2}} - u_{i,j}^k}{\frac{1}{2}\Delta t} = \frac{u_{i+1,j}^{k+\frac{1}{2}} - 2u_{i,j}^{k+\frac{1}{2}} + u_{i-1,j}^{k+\frac{1}{2}}}{(\Delta x)^2} + \frac{u_{i,j+1}^k - 2u_{i,j}^k + u_{i,j-1}^k}{(\Delta y)^2} + \gamma f(u_{i,j}^k, v_{i,j}^k), \tag{3.35}$$

für $i = 1, \ldots, M$, $j = 1, \ldots, N$ und $k = 0, \ldots, T-1$.

Analog führt ein weiterer Halbschritt mit impliziter Behandlung des Laplace-Operators in y-Richtung und expliziter in x-Richtung auf

$$\frac{u_{i,j}^{k+1} - u_{i,j}^{k+\frac{1}{2}}}{\frac{1}{2}\Delta t} = \frac{u_{i+1,j}^{k+\frac{1}{2}} - 2u_{i,j}^{k+\frac{1}{2}} + u_{i-1,j}^{k+\frac{1}{2}}}{(\Delta x)^2} + \frac{u_{i,j+1}^{k+1} - 2u_{i,j}^{k+1} + u_{i,j-1}^{k+1}}{(\Delta y)^2} + \gamma f(u_{i,j}^{k+\frac{1}{2}}, v_{i,j}^{k+\frac{1}{2}}). \tag{3.36}$$

Die Eck- und Randpunkte werden analog wie in (3.13) und (3.14) bestimmt.

Es sei nun C, D, E, H_2 wie in (3.15) und $A_1, A_2 \in \mathbb{R}^{(M+1)(N+1)\times(M+1)(N+1)}$ mit

$$
\begin{aligned}
A_1 &:= \begin{pmatrix} C & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & C & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & C & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & C & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & C & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & C \end{pmatrix}, \\
A_2 &:= \begin{pmatrix} D & H_2 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ H_2 & E & H_2 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & H_2 & E & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & E & H_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & H_2 & E & H_2 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & H_2 & D \end{pmatrix}.
\end{aligned}
\tag{3.37}
$$

Dann lassen sich (3.35) und (3.36) unter Hinzunahme der entsprechenden Rand- und Eckpunkte und mit $\vec{F}^k$ und $\vec{U}^k$ wie in (3.25) schreiben als

$$
\begin{aligned}
\vec{U}^{k+\frac{1}{2}} &= \vec{U}^k \;+\; \frac{1}{2}\Delta t \left(A_1 \cdot \vec{U}^{k+\frac{1}{2}} + A_2 \cdot \vec{U}^k + \gamma \vec{F}^k \right) \\
\vec{U}^{k+1} &= \vec{U}^{k+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2}\Delta t \left(A_1 \cdot \vec{U}^{k+\frac{1}{2}} + A_2 \cdot \vec{U}^{k+1} + \gamma \vec{F}^{k+\frac{1}{2}} \right).
\end{aligned}
\tag{3.38}
$$

Die Gleichungen aus (3.38) können umgeschrieben werden zu

$$
\begin{aligned}
\left(\mathrm{I}_{(M+1)(N+1)} - \frac{1}{2}\Delta t\, A_1 \right) \vec{U}^{k+\frac{1}{2}} &= \left(\mathrm{I}_{(M+1)(N+1)} + \frac{1}{2}\Delta t\, A_2 \right) \vec{U}^k \;+\; \frac{1}{2}\Delta t\, \gamma \vec{F}^k \\
\left(\mathrm{I}_{(M+1)(N+1)} - \frac{1}{2}\Delta t\, A_2 \right) \vec{U}^{k+1} &= \left(\mathrm{I}_{(M+1)(N+1)} + \frac{1}{2}\Delta t\, A_1 \right) \vec{U}^{k+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2}\Delta t\, \gamma \vec{F}^{k+\frac{1}{2}}.
\end{aligned}
\tag{3.39}
$$

In (3.39) muss jeweils ein Gleichungssystem mit $(M+1)(N+1)$ Gleichungen und Unbekannten $u_{i,j}^{k+\frac{1}{2}}$ bzw. $u_{i,j}^{k+1}$ gelöst werden. Auch hier sind die Matrizen auf der linken Seite der Gleichungssystems (3.39) dünn besetzt.

3.4 Simulationsergebnisse

In diesem Abschnitt werden die vorgestellten numerischen Verfahren miteinander verglichen. Dafür werden unter anderem mit MATLAB® erstellte Simulationen des Schnakenberg-Modells herangezogen. Die entsprechenden MATLAB®-Codes sind in Anhang A und auf der beigelegten CD-ROM zu finden.

Für die folgenden Simulationen in diesen Abschnitt wurden jeweils die gleichen Parameterwerte

$$a = -0.3, \quad b = 1.53, \quad d = 5 \tag{3.40}$$

des Schnakenberg-Modells verwendet und ein rechteckiges Gebiet $B = (0, 2) \times (0, 1)$, mit einem 200×100-Gitter gewählt. Als Anfangswerte wurden für jede Simulation jeweils die zwei gleichen Vektoren mit (gleichverteilten) Zufallswerten aus $(u_0 - 0.01, u_0 + 0.01)$ bzw. aus $(v_0 - 0.01, v_0 + 0.01)$ – also kleinen räumlichen Störungen um die Ruhelage – verwendet.

Für die Implementation der Verfahren und die Simulation der Muster wäre es praktisch zu wissen, wann sich die Muster so weit stabilisiert haben, dass sie sich qualitativ nicht mehr erkennbar ändern. Für das Schnakenberg-Modell ist in (2.4) zu erkennen, dass die Längenskala in t integriert ist, bzw. dass sich die Skalierung der Zeit antiproportional zu γ verhält. Demnach ist es sinnvoll die Simulation für kleinere γ in einem größeren Zeitintervall durchzuführen. In Abb.11 wird dieser Einfluss von γ auf die Zeitskala des Systems deutlich. In der Simulation aus Abb.11 a) mit $\gamma = 50$ stabilisiert sich das Muster ungefähr bei $t = 4$, wohingegen das Muster aus b) für $\gamma = 3000$ schon bei $t = 1$ stabil ist.

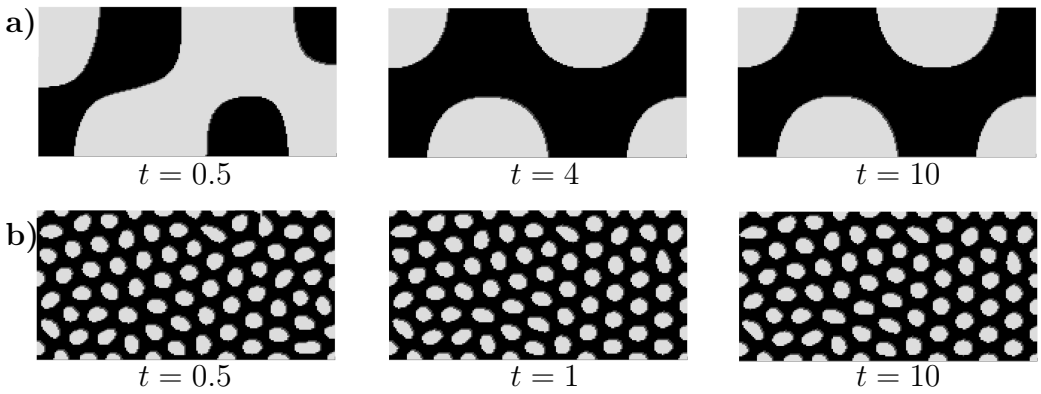


Abb. 11: Simulation (2-SBDF) des Schnakenberg-Modells ($a = -0.3$, $b = 1.53$, $d = 5$) im rechteckigen Gebiet $B = (0, 2) \times (0, 1)$ und Gitter mit $M = 200, N = 100$ **a)** $\gamma = 50, \Delta t = 0.005$ **b)** $\gamma = 3000, \Delta t = 0.0001$ [*Eigene Abbildung*]

Mit dem expliziten Euler-Verfahren wird eine deutlich kleinere Zeitschrittweite Δt als für das 2-SBDF-Verfahren oder das ADI-Verfahren benötigt. Ein Iterationsschritt des 2-SBDF-Verfahrens ist deutlich rechenaufwändiger als für das explizite Euler-Verfahren, da bei jedem Schritt ein großes lineares Gleichungssystem gelöst werden muss. Die Rechenzeit ist für das 2-SBDF-Verfahren in vielen Situationen trotzdem geringer. Für das 2-SBDF-Verfahren benötigt es zur Simulation des Musters aus

Abb.11 a) bis $t = 4$ nur 800 Schritte und beim expliziten Euler-Verfahren (Abb.12 a)) ganze $4 \cdot 10^6$ Schritte. Dabei wurde versucht, die Zeitschrittweite so groß wie möglich zu wählen.

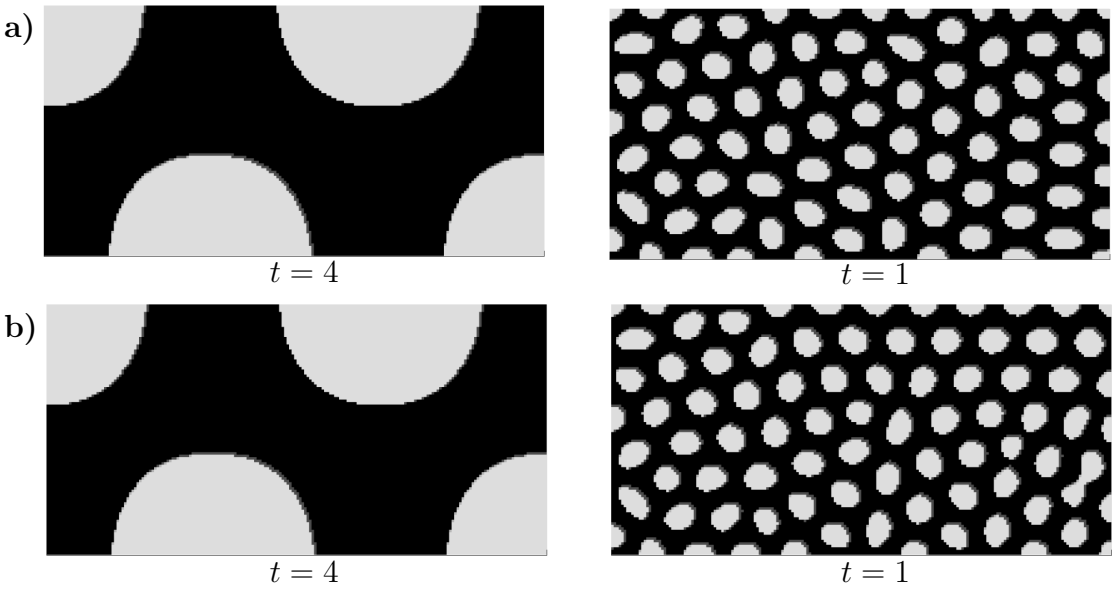


Abb. 12: Simulation des Schnakenberg-Modells ($a = -0.3, b = 1.53, d = 5$) im rechteckigen Gebiet $B = (0, 2) \times (0, 1)$ und Gitter mit $M = 200, N = 100$ **a)** Explizites Euler-Verfahren $\gamma = 50, \Delta t = 1 \cdot 10^{-6}$(links), $\gamma = 3000, \Delta t = 1 \cdot 10^{-6}$ (rechts) **b)** ADI-Verfahren $\gamma = 50, \Delta t = 0.001$ (links), $\gamma = 3000, \Delta t = 0.0001$ (rechts) [*Eigene Abbildung*]

Obwohl das 2-SBDF Verfahren theoretisch uneingeschränkt stabil ist, führen zu große Zeitschrittweiten dennoch zu falschen Ergebnissen oder zur Divergenz des Verfahrens. Die maximale Schrittweite, die noch zu einer richtigen Simulation der Muster führt, sinkt mit der Erhöhung des Parameters γ. Für die Ergebnisse der Simulationen mit den verschiedenen Verfahren lassen sich kleinere Unterschiede erkennen. Das 2-SBDF-Verfahren ist im Bezug auf die Größe der notwendigen Zeitschrittweite am günstigsten, was vor allem bei Simulationen von Vorteil ist, die in einem größeren Zeitintervall durchgeführt werden müssen, wie zum Beispiel für kleine γ.

Mit den Ergebnissen aus Kapitel 2 lässt sich das Muster derart „kontrollieren“, dass durch geeignete Wahl von γ und d einzelne Moden isoliert werden können. Mit den Parametern a und b wie in (3.40) lassen sich zum Beispiel d und γ so finden, dass nur die Wellenzahl mit $n = 5, m = 0$, also $k^2 = 25(\pi/p)^2$ aus (2.71) im Instabilitätsintervall aus (2.72) liegt. Damit wäre die Entstehung eines Musters mit 6 Streifen zu erwarten. Für $B = (0, 2) \times (0, 1)$ lässt sich diese Mode zum Beispiel mit $\gamma = 107$ isolieren. Das für diese Situation simulierte Muster ist in Abb.13 zu sehen und weist, wie erwartet, die 6 Streifen auf.

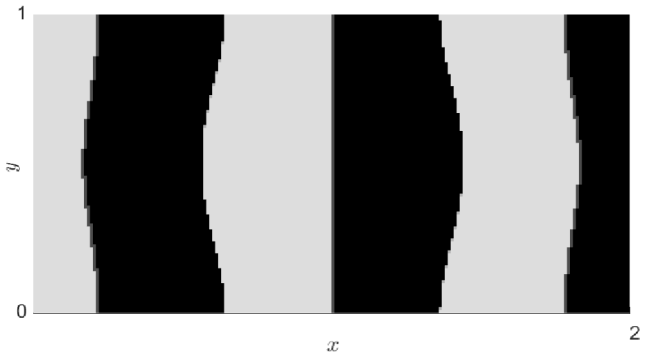


Abb. 13: Simulation (2-SBDF) des Schnakenberg-Modells ($a = -0.3$, $b = 1.53$, $d = 4.54$, $\gamma = 107$) im rechteckigen Gebiet $B = (0, 2) \times (0, 1)$ und einem Gitter mit $M = 200$, $N = 100$, sowie $\Delta t = 0.001$ nach 5000 Iterationen (Isolierte Mode zur Simulation eines Streifenmusters) [*Eigene Abbildung*]

4 Anwendung in der Biologie: Musterbildung auf Fellen von Säugetieren

Es werden nun die bisher erarbeiteten Ergebnisse mit in der Natur vorkommenden Mustern – speziell mit Mustern auf Fellen von Säugetieren – verglichen. Dieses Kapitel ist größtenteils an Kapitel 3 von J. D. Murrays Buch [16] angelehnt. Der Grundgedanke ist, dass der hier behandelte Mechanismus ein „Vormuster“ in Form eines Konzentrationsmusters – sogenannter Morphogene – während der Entwicklung eines Tieres erzeugt. Bestimmte Typen von Zellen reagieren dann auf dieses Konzentrationsmuster derart, dass sie Melanin produzieren, falls die lokale Konzentration eines der Morphogene über einem gewissen Niveau liegt.

Einige der interessantesten Muster in der Natur finden sich in der Überfamilie der Katzenartigen (Feliformia). Bekannte Vertreter sind beispielsweise die Jaguare, Leoparden und Geparden, wie sie in Abb.14 zu sehen sind. Was bei diesen Tieren auffällt, ist, dass sie zwar gefleckt sind, die Musterung auf Schwanz und Beinen aber ab einem gewissen Punkt (wie in Abb.15 dargestellt) in ein Streifenmuster übergeht. Ob – und falls ja, wie – diese Beobachtung zu dem in Kapitel 2 untersuchten Mechanismus passt, wird nun untersucht.

Abb. 14: Vertreter der Überfamilie der Katzenartigen. Von links nach rechts: Ginsterkatze (Genetta), Leopard (Panthera pardus), Gepard (Acinonyx jubatus) [*Quellen: vignette3.wikia.nocookie.net (10.04.2016), duden.de (10.04.2016), pixabay.com (10.04.2016)*]

4.1 Musterung von Schwanz und Beinen

Der Schwanz und die Beine der Tiere werden im Folgenden durch einen länglichen Kegelstumpf angenähert, dessen Mantelfläche dann das Gebiet darstellt, auf dem das Muster entsteht. Erfüllen die Parameter eines Mechanismus die Bedingungen (2.43) aus Kapitel 2.4, so kann ein Bereich von instabilen Moden k^2 angegeben werden. Für ein rechteckiges Gebiet der Form $B = (0, p) \times (0, q)$ wurde dieser Bereich bestimmt als

$$\gamma L = k_1^2 < k^2 = \pi^2 \left(\frac{n^2}{p^2} + \frac{m^2}{q^2} \right) < k_2^2 = \gamma M, \tag{4.1}$$

mit $m, n \in \mathbb{Z}$. Dabei hängen L und M nur von den Parametern der Reaktionskinetik ab. Mit Nullfluss-Randbedingungen beinhaltet die Lösung des linearisierten Problems dann exponentiell wachsende Moden und verhält sich für große t wie

$$\sum_{n,m} \vec{c}_{n,m} \exp\left(\lambda(k^2)t\right) \cos\left(\frac{n\pi x}{p}\right) \cos\left(\frac{m\pi y}{q}\right) \text{ mit } k^2 = \pi^2 \left(\frac{n^2}{p^2} + \frac{m^2}{q^2}\right). \tag{4.2}$$

Dabei werden die Konstanten $\vec{c}_{n,m}$ durch eine Fourierreihen-Entwicklung der Anfangsbedingungen bestimmt und nur über die (n, m) summiert, die (4.1) erfüllen.

Dies lässt sich nun auf die Mantelfläche B eines Kegelstumpfs der Höhe s und Radien $r_0 > r_1$ der Grund- und der Deckfläche übertragen. Für eine Darstellung der Mantelfläche in Zylinderkoordinaten seien r, φ und z die Radial-, Winkel- und Axialkoordinate mit $z \in (0, s)$ und $\varphi \in [0, 2\pi)$. Der Kegelstumpf wird nun aufrecht mit dem Mittelpunkt der Grundfläche im Ursprung des Koordinatensystems platziert. Auf B lässt sich die Radialkoordinate r bereits durch die Axialkoordinate darstellen:

$$r = r(z) := \frac{r_1 - r_0}{s} z + r_0. \tag{4.3}$$

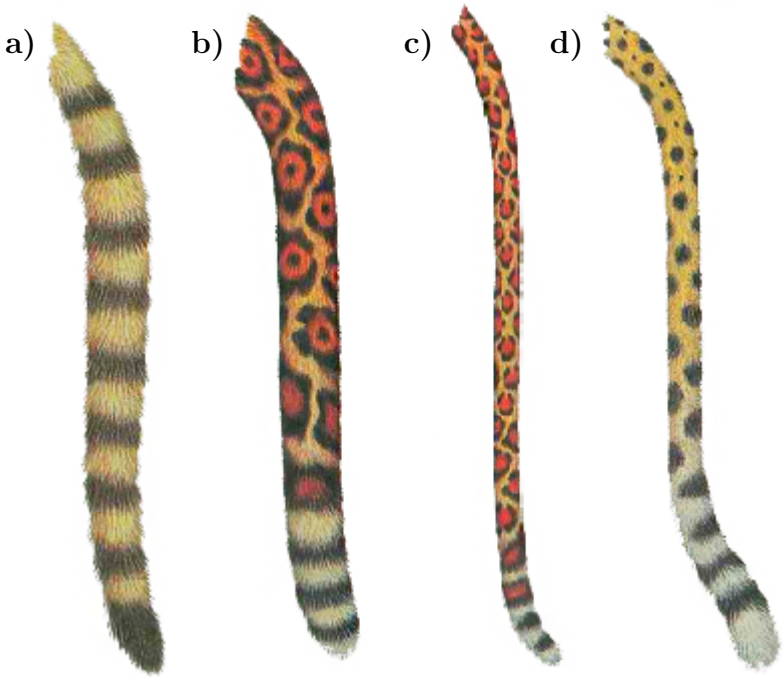


Abb. 15: Fellmusterung auf dem Schwanz verschiedener Vertreter der Katzenartigen. **a)** Ginsterkatze **b)** Leopard **c)** Jaguar **d)** Gepard [*Abbildungen aus [16], S.147, Figure 3.2*]

Analog wie in (2.28) führt die Linearisierung des Differentialgleichungssystems dann auf das räumliche Rand-Eigenwertproblem

$$\begin{aligned} 0 &= \Delta W + k^2 W \\ \Rightarrow 0 &= \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial W}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 W}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 W}{\partial z^2} + k^2 W, \end{aligned} \tag{4.4}$$

mit Nullfluss-Randbedingungen in $z \in \{0, z\}$ und Periodizität in φ.

Da $W = W(z, \varphi)$ wegen (4.3) unabhängig von r ist, lässt sich (4.4) schreiben als

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 W}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 W}{\partial z^2} + k^2 W = 0, \tag{4.5}$$

mit Randbedingungen wie in (4.4). Die Situation auf der Mantelfläche des Kegelstumpfs wird nun mithilfe von Zylindern mit verschiedenen, festen Radien R betrachtet. Für festes $r = R$ (also $r_0 = r_1 = R$ in (4.3)) führt ein Separationsansatz der Form $W(z, \varphi) = Z(z)\Phi(\varphi)$ auf die zwei Randwertprobleme

$$\begin{aligned} \Phi''(\varphi) + K_1^2 \Phi(\varphi) = 0 \text{ mit } \Phi \text{ periodisch und} \\ Z''(z) + K_2^2 Z(z) = 0 \text{ mit } Z'(0) = Z'(s) = 0 \end{aligned} \tag{4.6}$$

und mit

$$\frac{1}{R^2} K_1^2 + K_2^2 = k^2. \tag{4.7}$$

Analog zur Herleitung von (4.2) aus Kapitel 2, lassen sich die Lösungen von (4.6) bestimmen und sind folglich von der Gestalt

$$\left.\begin{aligned} \Phi(\varphi) &= \cos(n\varphi) \\ Z(z) &= \cos\left(\frac{m\pi}{s} z\right) \end{aligned}\right\} \Rightarrow W_{n,m}(z, \varphi) = \cos(n\varphi)\cos\left(\frac{m\pi}{s} z\right), \tag{4.8}$$

mit $n, m \in \mathbb{N}_0$. Mit (4.8) und (4.7) folgt für die Wellenzahl k:

$$k^2 = \frac{n^2}{R^2} + \frac{m^2\pi^2}{s^2}. \tag{4.9}$$

Die Lösung von (4.5) für $r = R =$const ist dann gegeben durch

$$W(z, \varphi) = \sum_{n,m} a_{n,m} \cos(n\varphi) \cos\left(\frac{m\pi}{s} z\right), \tag{4.10}$$

mit Konstanten $a_{n,m}$. Damit ergibt sich, analog zur Herleitung der Lösung aus (4.2), das Verhalten der Lösung des linearisierten Problems für große t:

$$\sum_{n,m} \vec{c}_{n,m} \exp(\lambda(k^2)t) \cos(n\varphi) \cos\left(\frac{m\pi}{s} z\right) \text{ mit } k^2 = \frac{n^2}{R^2} + \frac{m^2\pi^2}{s^2}, \tag{4.11}$$

wobei sich die Konstanten $\vec{c}_{n,m}$ wieder durch eine Fouriereihen-Entwicklung der Anfangswerte ergeben und über die (n, m) summiert wird, die

$$\gamma L = k_1^2 < k^2 = \frac{n^2}{R^2} + \frac{m^2\pi^2}{s^2} < k_2^2 = \gamma M \tag{4.12}$$

aus (4.1) erfüllen. Für jede feste Höhe des Kegelstumpfs, also für festes $z_0 \in [0, s]$ liegt eine bezüglich φ äquivalente Situation wie auf einem Zylinder mit Radius $R = r(z_0)$ vor. Für eine Untersuchung des Musters bezüglich der Winkelkoordinate φ genügt es also, das Problem lokal auf einem Zylinder mit entsprechendem Radius zu betrachten.

Wird nun ein Kegelstumpf mit hinreichend kleinen $r_0 > r_1$ betrachtet, sodass für gegebenes γ kein n^2/r_0 mit $n \neq 0$ im instabilen Bereich aus (4.12) liegt, so gilt dies auch für jedes $r_1 \leq r \leq r_0$ und damit für jedes $0 \leq z \leq s$. Das bedeutet, dass auf der ganzen Länge des Kegelstumpfs nur Wellenzahlen mit $n = 0$ im instabilen Bereich liegen und die Lösung damit unabhängig von φ ist. Damit kann das Muster nur in z-Richtung variieren und es entsteht ein Streifenmuster.

Wird ein ein Kegelstumpf betrachtet, für den $1/r_0^2$ im instabilen Bereich aus (4.12) liegt, $1/r_1^2$ aber nicht, dann können bei $z = 0$ mehrere Wellenzahlen mit $n \neq 0$ und $m \neq 0$ instabil sein und sich damit am breiten Ende des Kegelstumpfs andere Muster als reine Streifenmuster entwickeln. Am schmalen Ende sind wieder nur Wellenzahlen mit $n = 0$ instabil und es kann sich in einer Umgebung des dünnen Endes des Kegelstumpfs wieder nur ein Streifenmuster bilden.

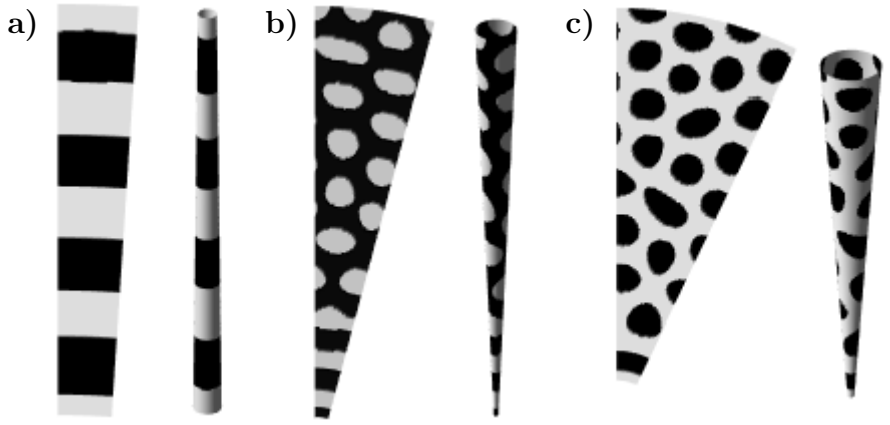


Abb. 16: Schnakenberg $a = -0.3, b = 1.53, d = 5$ **a)** $\gamma = 45, r_0 = 0.1, r_1 = 0.16, s = 5$ **b)** $\gamma = 450, r_0 = 0.02, r_1 = 0.19, s = 4$ **c)** $\gamma = 450, r_0 = 0.04, r_1 = 0.32, s = 4$ ($u < u_0$ schwarz) [*Eigene Abbildung in Anlehnung an [16], S.147, Figure 3.2*]

Die mit dem 2-SBDF-Verfahren durchgeführten Simulationen aus Abb.16 bestätigen nicht nur die obige theoretische Überlegung sondern zeigen auch, dass die Muster auf Tierschwänzen aus Abb.15 durch das Modell erzeugt werden können und sich ähnlich verhalten. Es wurden für alle Simulationen aus Abb.16 die gleichen Parameter a, b der Schnakenberg-Kinetik und der gleiche Diffusionskoeffizienten-Quotient d verwendet. Lediglich die Geometrie des Gebiets und der Parameter γ wurden verändert. Die Simulation wurden mit dem in Anhang A angegebenen MATLAB®-Skript *schnakenberg_2sbdf_kreisringsegment.m* erzeugt.

Im Detail variieren die Muster verschiedener Individuen einer Art. So wurden beispielsweise bei der Ginsterkatze (Abb.15 a)) sowohl Tiere mit nur sechs Streifen als auch Tiere mit bis zu dreizehn schwarzen Streifen auf dem Schwanz beobachtet. In Kapitel 2.4.4 wurde gezeigt, dass die Anzahl der sich entwickelnden Streifen unmittelbar von der Länge des betrachteten Gebiets abhängt. In diesem Kontext heißt dies aber nicht, dass ausgewachsene Tiere mit unterschiedlicher Schwanzlänge unterschiedlich viele Streifen auf diesem haben müssen. Der Entstehungsprozess der Muster findet schon zu einem früheren, pränatalen Stadium statt. Die Schwanzgröße des Embryos zu diesem Zeitpunkt ist ausschlaggebend für die Anzahl an Streifen.

Dies ist jedoch nur einer von vielen Faktoren, der jedes Muster auch intraspezifisch einzigartig macht. Warum die Ginsterkatze im Gegensatz zum Jaguar (Abb.15 b)) einen komplett einheitlich gestreiften Schwanz hat, hängt unter anderem von der Geometrie des Schwanzes zum Zeitpunkt des Musterbildungsprozesses ab.

Der Schwanz der Ginsterkatze (Abb.15 a)) ist über die komplette Länge gestreift. Ein Ginsterkatzen-Embryo hat einen dünnen, sich nur sehr schwach zuspitzenden Schwanz. Für die Simulation in Abb.16 a) wurde daher ein dünner, fast zylindrischer Kegelstumpf verwendet. Wie zu sehen ist, führt die Simulation zu einem sehr ähnlichen Muster, wie es sich auch bei der Ginsterkatze entwickelt.

Die pränatale Schwanzform eines Jaguars ist kurz und sehr spitz zulaufend. Deshalb wurde der Kegelstumpf für die Simulation aus Abb.16 c) stark spitz zulaufend gewählt und es sind auch hier die gleichen typischen Muster zu beobachten. Sowohl der Schwanz aus Abb.15 c) als auch die zugehörige Simulation (Abb.16 c)) sind fast bis zur Spitze gepunktet und weisen in einem kleinen Bereich am dünnen Ende (wenn überhaupt) vereinzelte und teils unvollständige Streifen auf.

Insgesamt ist diese markante, in der Natur auftretende Eigenschaft des Musters auf Schwanz und Beinen der Tiere also mit der Idee des Turing-Mechanismus als zugrundeliegender musterbildender Prozess vereinbar. Des Weiteren wäre nach dieser Theorie die Existenz eines Säugetiers auszuschließen, das einen gestreiften Körper hat und einen gepunkteten Schwanz. Tatsächlich ist unter den Säugetieren eine solche Fellmusterung auch noch nie beobachtet worden.

4.2 Musterung des Rumpfs

Nachdem das besondere Verhalten der Muster auf Schwanz und Beinen untersucht wurde, werden nun verschiedene Besonderheiten von Musterungen des Rumpfs verschiedener Tiere betrachtet, die sich mit dem Turing-Mechanismus erklären lassen würden.

Wie schon zuvor gezeigt wurde, spielt die durch γ repräsentierte Größe des zugrundeliegenden Gebiets eine große Rolle, was die Art der sich entwickelnden Muster betrifft. Daher wäre es nützlich zu wissen, wann der Musterbildungsprozess bestimmter Tiere beginnt, um die Form und Größe des Embryos zu dieser Zeit einschätzen zu können. Dieser Zeitpunkt ist aber im Allgemeinen nicht bekannt. Im Fall des Zebras stellte J. Bard [3] genauere Untersuchungen an, dessen Ergebnisse nun kurz wiedergegeben werden.

Der Biologe J. Bard vermutete die Bildung des Vormusters auf den Zebra-Embryonen zwischen der dritten und fünften Trächtigkeitswoche. Die verschiedenen Zebra-Arten weisen teilweise deutlich unterschiedliche Muster auf. Beispiel dafür ist das in Abb.17 a) abgebildete Burchell-Zebra (Equus quogga burchelli), das im Vergleich zum Grevy-Zebra (Equus grevy) deutlich weniger Streifen aufweist. Ein weiterer qualitativer Unterschied der Streifen der beiden Zebra-Arten ist der Verlauf in der Hüftregion. Während die Streifen beim Burchell-Zebra in der Hüftregion nahezu

horizontal verlaufen und breit geschwungen senkrecht an der unteren Bauchregion enden, verlaufen die gleichmäßigeren Streifen des Grevy-Zebras dort deutlich vertikaler. J. Bard führt diese Unterschiede in Anzahl und Form der Streifen auf unterschiedliche Zeitpunkte zurück, zu denen sich diese auf dem Embryo des Zebras entwickeln. Die Bildung der Streifen des Burchell-Zebras schätzt er auf die dritte Trächtigkeitswoche. Auf dem Zebra-Embryo sind zu dieser Zeit außer dem Schwanz noch keine Extremitäten zu erkennen (vgl. Abb.17 c)). Die durch das Wachstum der Hinterläufe resultierende Verzerrung des Streifenmusters würde den charakteristischen Verlauf der Streifen erklären. Beim Grevy-Zebra hingegen entstehen die Streifen nach Bard erst in der fünften Trächtigkeitswoche. Zu dieser Zeit sind Vorder- und Hinterläufe des Tieres bereits ausgebildet (Abb.17 d)), weshalb eine solche Verzerrung nicht auftritt. Analog kann der Zeitpunkt der Entstehung der Streifen eines Tigers (Felis tigris) geschätzt werden, die in der Hüftregion die gleiche Verzerrung der Streifen aufweisen wie beim Burchell-Zebra.

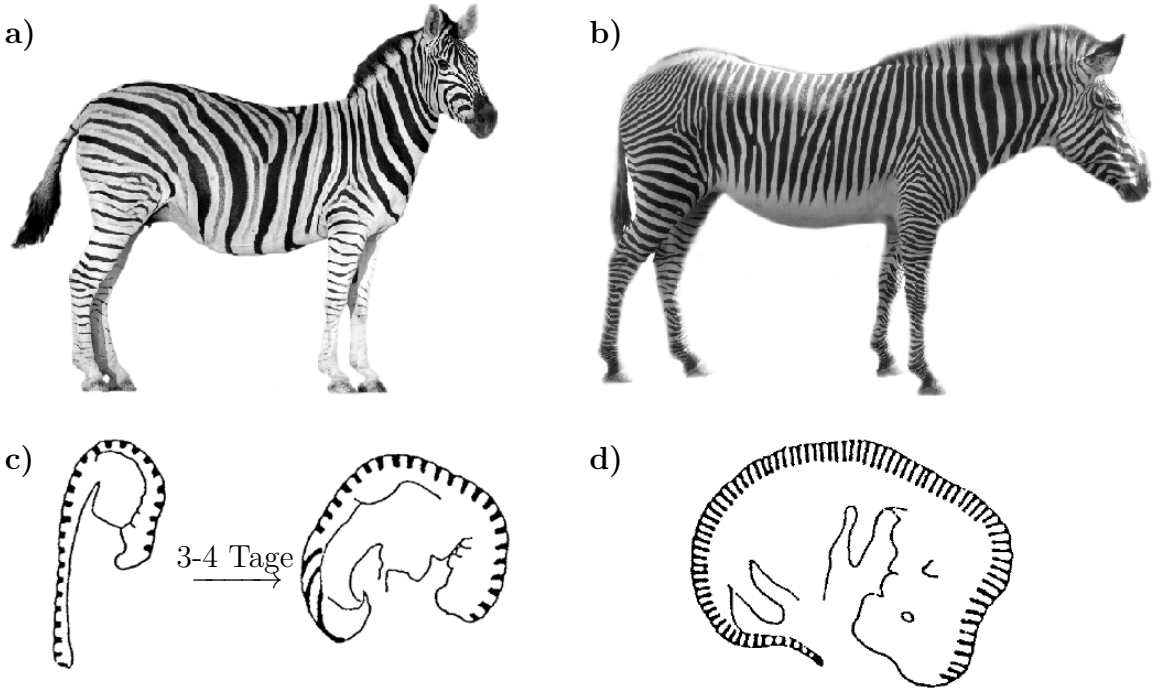


Abb. 17: **a)** Burchell-Zebra (Equus quogga burchelli) **b)** Grevy-Zebra (Equus grevy) **c)** Skizze eines Burchell-Zebra-Embryos zum Zeitpunkt der Bildung des Vormusters (12 Tage, links) und der Einfluss des Wachstums auf das Muster (rechts). **d)** Skizze eines Grevy-Zebra-Embryos zum Zeitpunkt der Bildung des Vormusters (5 Wochen). [*Quellen: a) en.wikipedia.org (10.04.2016) b) upload.wikimedia.org (10.04.2016) c),d) [16], S.149, Figure 3.3*]

Wie schon in der Simulation aus Abb.16 a) gezeigt, ist es möglich, mit Turing-Mechanismen gleichmäßige Streifenmuster zu erzeugen. Auch die Theorie zur Musterbildung durch diffusionsbedingte Instabilität ist mit den Überlegungen Bards vereinbar. Denn nach dieser nimmt die Anzahl der Streifen (vgl. Abb.6, Abb.7) mit

der Größe des Gebiets zu (hier die Embryonen der Zebras zur Zeit der Bildung des Vormusters).

Ein weiteres markantes Muster ist das der Giraffe. Sie ist eines der größten Tiere, das noch ein gepunktetes Fellmuster aufweist. Der wohl bekannteste Vertreter der Giraffen ist die in Abb.18 a) abgebildete Netzgiraffe (Giraffa camelopardalis reticulata). Wie in Abb.16 b) und c) beschrieben, können mit dem Schnakenberg-Modell Punktmuster erzeugt werden. In diesen Abbildungen wurde als Grenzwert, ab dem die Zellen Melanin produzieren (dargestellt als die schwarzen Flächen) der Wert des homogenen Gleichgewichts u_0 von u gewählt. Mit den gleichen Parametern wie in Abb.16 b) und c) lässt sich mit dem Schnakenberg-Modell (2.44) ein Punktmuster wie in Abb.18 b) erzeugen, wobei auch hier u_0 als Grenzkonzentration gewählt wurde. Wird der Grenzwert gesenkt, so wird das Punktmuster aus Abb.18 b) größer und leicht deformiert. Es entstehen also größere Flächen, die zu einer Produktion von Melanin führen. Dieses Ergebnis ähnelt stark dem Muster der Netzgiraffe.

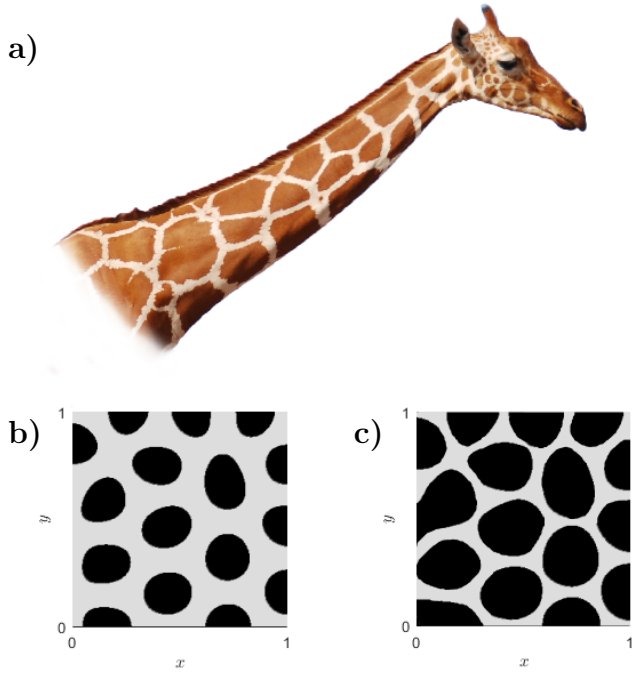


Abb. 18: a) Netzgiraffe (Giraffa camelopardalis reticulata) **b)** Simulation Schnakenberg ($a = -0.3$, $b = 1.53$, $d = 5\,\gamma = 1000$, Grenzkonzentration $u_g = u_0 = 1.5$. **c)** Parameter wie in b) mit $u_g = 1.2$. [*Quellen: a) giraffeworlds.com (10.04.2016), b),c) Eigene Abbildungen in Anlehnung an [16], S.150, Figure 3.5*]

Zur Verdeutlichung des Einflusses des Parameters γ zieht Murray [16] Simulationsergebnisse in speziellen Gebieten heran, die in der Form der Oberfläche eines vierbeinigen Säugetiers ähneln. Die in Abb.19 abgebildeten Simulationsergebnisse wurden mit COMSOL® Multiphysics 4.3 erstellt. Es wurden für alle Teilbilder die gleichen Parameter a, b, und d verwendet und lediglich der Parameter γ geändert. Als Randbedingungen wurden ausschließlich Nullfluss-Bedingungen gewählt. Die Simulationen in Abb.19 sollen auch einen Eindruck vom Verhalten der Muster in

komplexeren Gebieten geben. Die folgenden Vergleiche mit Tierfell-Mustern dürfen nicht zu streng gesehen werden. Die Form des für die Simulation gewählten Gebiets entspricht nicht unbedingt der Oberfläche des Embryos zur Zeit, in der sich das Vormuster entwickelt.

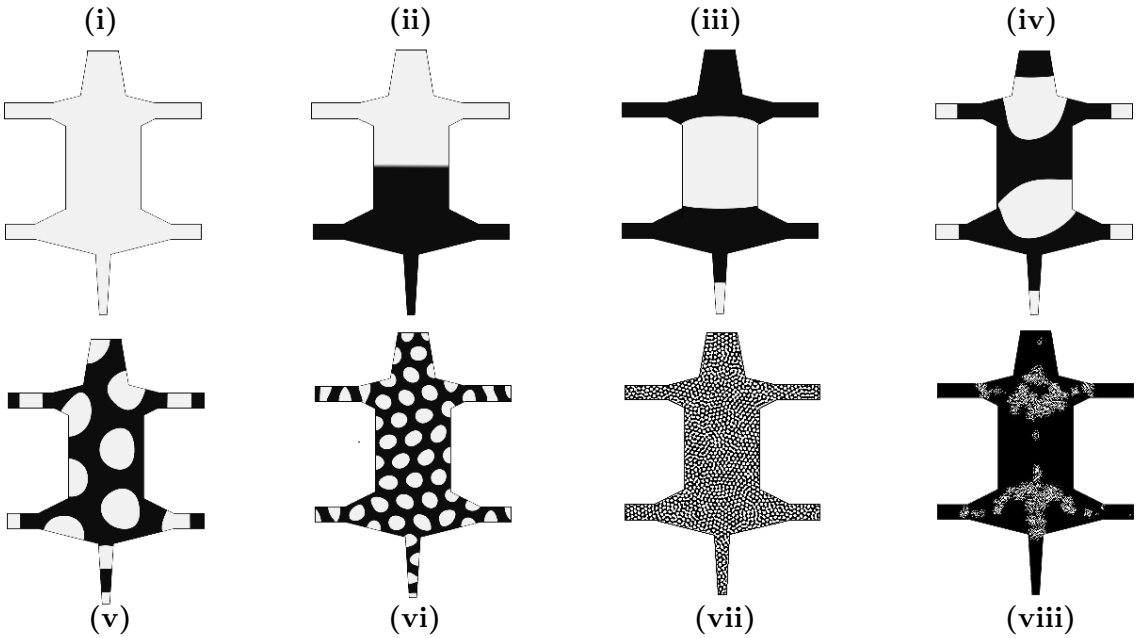


Abb. 19: Simulation Schnakenberg ($a = -0.3$, $b = 1.53$, $d = 5$) **(i)** $\gamma = 0.3$ **(ii)** $\gamma = 2$ **(iii)** $\gamma = 25$ **(iv)** $\gamma = 50$ **(v)** $\gamma = 150$ **(vi)** $\gamma = 1000$ **(vii)** $\gamma = 1.5 \cdot 10^4$ **(viii)** $\gamma = 5 \cdot 10^5$ [*Eigene Abbildungen in Anlehnung an [16], S.151, Figure 3.6*]

Es wurde bereits gezeigt, dass sich für zu kleines γ kein Muster entwickeln kann (vgl. Abb.19 (i)). Demnach müssten sehr kleine Tiere eine einheitliche Färbung aufweisen – was auch meistens der Fall ist. Im anderen Extremfall, wenn γ sehr groß, ist wird die Musterung so fein, dass sie schon wieder einheitlich erscheint (vgl. Abb.19 (viii)). Also würde dies auch wieder bedeuten, dass sehr große Tiere, wie zum Beispiel Elefanten, kein bzw. kein erkennbares Muster haben. Bis auf einige Ausnahmen, wie die oben betrachteten Giraffen, trifft dies auch zu. In Abb.19 (ii) ist γ dann hinreichend groß, sodass sich ein einfaches, zweigeteiltes Muster ergibt. Auch hier sind in der Natur Tiere zu finden, die diese Musterung aufweisen. Beispiele hierfür sind die Valais-Ziege und der Honigdachs (vgl. Abb.20).

Auch für das in Abb.19 (iii) simulierte, dreigeteilte Muster finden sich unter den Säugetieren Beispiele, die eine entsprechende Färbung aufweisen. In Abb.20 b) ist ein südlicher Tamandua abgebildet, der eines von vielen Beispielen für Tiere mit diesem speziellen Muster ist. Die numerischen Simulationen aus Abb.19 hängen immer von den Anfangswerten ab. So führt jede Simulation mit gleichen Parametern, Gebietsgeometrie und Skala mit zufällig gewählten Störungen um die homogene Ruhelage als Anfangswerte zu unterschiedlichen Mustern, die sich qualitativ jedoch nicht unterscheiden.

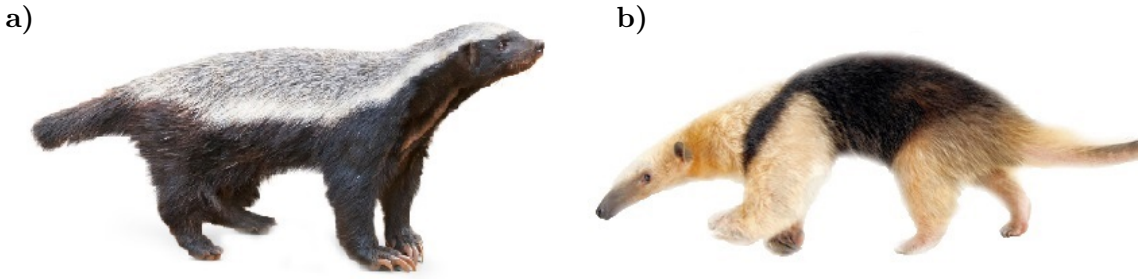


Abb. 20: a) Honigdachs (Mallivora caoensis) **b)** Südlicher Tamandua (Tamandua tetradactyla) [*Quellen: a) dkfindout.com (10.04.2016), b) posterlounge.de (10.04.2016)*]

Wird dies auf die Idee der Turing-Mechanismen als Prozess zur Bildung von Tierfell-Mustern übertragen, so führen die für jedes Tier unterschiedlichen Anfangsbedingungen zu jeweils unterschiedliche Muster. So ist zwar in der Regel jeder Jaguar gepunktet und jedes Zebra gestreift, aber in genauer Form, Verteilung und Anzahl der Punkte und Streifen unterscheidet sich jedes Individuum vom anderen.

Auch wenn hier nur wenige Beispiele von Fellmustern zum Vergleich mit den vom Modell generierten Muster herangezogen wurden, wird doch deutlich, dass evidente Ähnlichkeiten zwischen diesen beiden bestehen.

4.3 Anomalien

Der Turing-Mechanismus liefern unter anderem mögliche Erklärungen für in der Natur auftretende Anomalien der Musterung gewisser Tierarten.

Beispielsweise ist bekannt, dass eine verfrühte oder verspätete Bildung des Musters auf Zebra-Embryonen zu einer Anomalie des Musters führt. Eine zu frühe Aktivierung des Mechanismus führt zu einem fast komplett schwarzen Zebra, wohingegen bei verspäteter Aktivierung anstatt weißer Streifen weiße Punkte auf dem Fell entstehen. Hierbei ist anzumerken, dass hier davon ausgegangen wird, dass Zebras eine schwarze Grundfärbung mit weißen Streifen besitzen.

Diese zwei Situationen lassen sich nun auf das Reaktions-Diffusions-Modell übertragen. Setzt die Bildung des Vormusters beim Zebra zu früh ein, so ist die Fläche des Embryos zu diesem Zeitpunkt deutlich kleiner. Für den Mechanismus ist das äquivalent zu einer Verkleinerung der durch γ gemessenen Gebietsgröße. Wie in Abb.19 zu sehen war, kann eine Verkleinerung von γ dazu führen, dass anstatt einem Streifenmuster eine einheitliche Färbung ausgebildet wird. In diesem Fall wäre das Zebra einfarbig. Die Grundfärbung der Zebras ist schwarz und deshalb müsste nach dem hier betrachteten Modell eine verfrühte Aktivierung des Mechanismus zu einem fast einheitlich schwarz gefärbten Zebra führen. Im Fall einer Verzögerung der Aktivierung wäre die Fläche des Embryos zum Zeitpunkt der Bildung des Musters größer als normal. Hier ist wieder aus Abb.19 erkennbar, dass die daraus resultieren-

de Vergrößerung der Skala γ zu einem gepunkteten Muster führen kann. Das Zebra würde demnach weiße Punkte anstatt weißer Streifen ausbilden. Für beide dieser Fälle wurden schon Zebras mit entsprechender Musterung beobachtet.

In Abb.21 a) ist ein Burchell-Zebra abgebildet, das eine Muster-Anomalie derart aufweist, dass es teilweise ein Punkt- statt einem Streifenmuster aufweist – also dem zweiten hier genannte Fall entspricht. In Abb.21 b) ist ein weiteres Beispiel einer anormalen Färbung eines Zebras. Hier sind die Streifen nur sehr dünn und unvollständig ausgebildet. Eine mögliche Erklärung wäre hier, dass der Mechanismus zwar zum richtigen Zeitpunkt aktiviert, jedoch frühzeitig unterbrochen wurde.

Interessant ist auch das Beispiel des Gepards. Im Jahre 1926 wurde erstmals von der Sichtung einer Großkatze berichtet, die stark einem Geparden ähnelt aber anstatt des typisch fein gefleckten Musters (vgl. Abb.14) Streifen entlang des Rückens und dicke, schwarze, unregelmäßige Flecken am restlichen Körper aufweist. Der Zoologe R. I. Pocock beschrieb dieses Tier als neue Unterart – den sogenannten Königsgeparden (Acinonyx jubatus rex). Jedoch wurde spätestens in den frühen 1980ern (nachdem im Wurf eines gewöhnlichen Geparden-Paars ein Königsgepard vorgefunden wurde) klar, dass es sich hier nicht um eine eigene Unterart, sondern lediglich um eine Fellmuster-Anomalie handelt.

Abb. 21: Fellmuster-Anomalien **a)** Burchell-Zebra **b)** Gepard (Acinonyx jubatus rex) [*Quellen: a) wildlifeextra.com (10.04.2016), b) quora.com (10.04.2016), c) c2.staticflickr.com (10.04.2016)*]

Mit dem Reaktions-Diffusions-Modell würde sich diese Anomalie wieder mit einer verfrühten Einsetzung des Musterbildungsprozesses auf dem Geparden-Embryo begründen lassen. Denn in dieser Situation ist der Embryo zum Zeitpunkt der Bildung des Musters wieder kleiner als gewöhnlich und es können anstatt Punkte teilweise

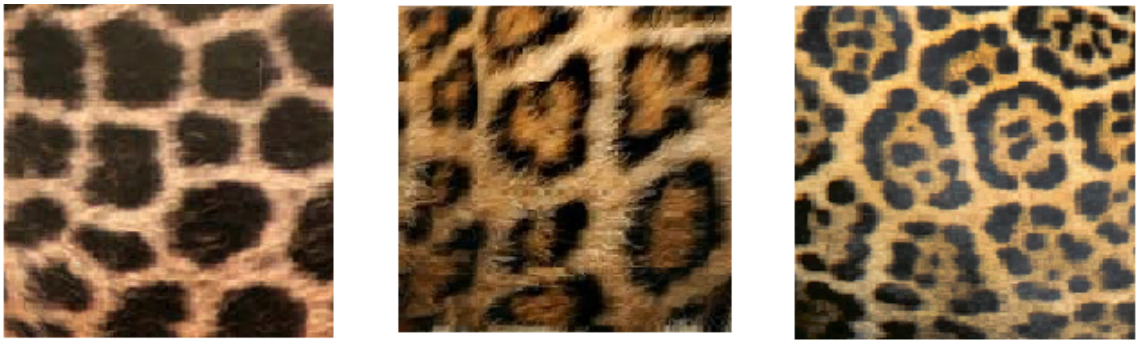
Streifen auf dem Fell des Gepards auftreten. Auch wird das entstehende Punktmuster durch kleineres γ gröber. Das heißt es entstehen weniger Punkte, die dicker sind (vgl. Abb.19 (v) und (vi)).

4.4 2-Phasen-Modell für Leoparden- und Jaguarmuster

Bisher wurden die Parameter der Modelle immer konstant gewählt. Einige Muster verändern sich jedoch während des Wachstums der Tiere noch derart, dass es nicht mit einer wachstumsbedingten Verzerrung des Musters erklärbar ist.

Beispiele hierfür sind Jaguare und Leoparden. In Abschnitt 4.1 wurde dieses Muster durch ein einfaches Punktmuster angenähert. Tatsächlich weisen jedoch nur junge Tiere ein Punktmuster auf. Dieses entwickelt sich im Laufe des Wachstums über ein Ringmuster zum typischen, rosettenähnlichen Muster der Tiere. Ein solches Rosettenmuster kann mit den in Kapitel 2 vorgestellten Reaktionstermen für feste Parameter zwar erzeugt werden, wünschenswert wäre jedoch ein Modell, dass die gleichen Phasen durchläuft wie das wirkliche Muster des Tieres. Hierfür entwarf der britische Mathematiker P. K. Maini et al. [12] ein Zwei-Phasen-Modell. In der ersten Phase werden einfache Punkte erzeugt. In der zweiten Phase werden die Modellparameter so angepasst, dass aus den Punkten Ringe und daraus das jeweilige Muster des ausgewachsenen Tieres entstehen. In diesem Abschnitt wird dieses Modell kurz vorgestellt. Zuvor jedoch wird die Entwicklung des Fellmusters des Leopards und des Jaguars genauer betrachtet.

Das Fell ist nach der Geburt des Leoparden gepunktet (vgl. Abb22 (i)). Während der ersten Lebenswochen des Tieres entwickelt sich dieses Punktmuster zu einem Ringmuster, wie in Abb.22 (ii). Ein ausgewachsenes Tier weist dann das typische Rosettenmuster (Abb.22 (iii)) auf, aus in Kreisen angeordneten Punkten.



(i) **(ii)** **(iii)**

Abb. 22: Fellmuster Leopard **(i)** kurz nach der Geburt (Punkte), **(ii)** nach wenigen Wochen (Ringe) und**(iii)** beim ausgewachsenen Tier (Rosetten). [*Quellen: (i) dailymail.co.uk (10.04.2016), (ii) zooborns.com (10.04.2016), (iii) upload.wikimedia.org (10.04.2016)*]

Bei Jaguaren ist der Verlauf der Musterung ähnlich wie beim Leopard. Bei Neugebo-

renen Jaguaren ist in der Regel ein einfaches Punktmuster (Abb.23 (i)) vorhanden. Dieses entwickelt sich während des Wachstums zu einem Muster aus unregelmäßigen Ringen (Abb. 23 (ii)). Bei einem ausgewachsenen Tier findet sich dann ein Muster aus unregelmäßig gebrochenen Polygonen, die einzelne, kleine Punkte umschließen (Abb.23 (iii)).

An dieser Stelle ist noch anzumerken, dass sowohl beim Jaguar als auch beim Leopard die Anzahl der Punkte des Jungtiers der Anzahl der späteren Rosetten (bzw. Polygonen) entspricht.

(i) **(ii)** **(iii)**

Abb. 23: Fellmuster Jaguar **(i)** einige Tage nach der Geburt (Punkte), **(ii)** nach wenigen Wochen (unregelmäßige Ringe) und **(iii)** beim ausgewachsenen Tier (kleine Punkte, eingeschlossen in unregelmäßig gebrochenen Polygonen). [*Quellen: (i) kotv.images.worldnow.com (10.04.2016), (ii) de.pinterest.com (10.04.2016), (iii) flickr.com (10.04.2016)*]

Für das Modell schlägt Maini ein einfaches Reaktions-Dffusions-Modell der Form

$$\begin{aligned} \frac{\partial U}{\partial t} &= D\delta\Delta U + V + aU - r_1 UV - ar_2 UV^2 \\ \frac{\partial V}{\partial t} &= \delta\Delta V + bV - aU + r_1 UV + ar_2 UV^2 \end{aligned} \tag{4.13}$$

vor, wobei $\sqrt{\delta}$ hier antiproportional zur Längenskala ist, D das Verhältnis des Diffusionskoeffizienten von u zum dem von v bezeichnet und a, b Konstanten sind. Das System (4.13) lässt sich mit der Transformation

$$\gamma := \frac{1}{\delta D},\ d := \frac{1}{D}, u = U\frac{1}{D\delta},\ v = V\frac{1}{D\delta} \tag{4.14}$$

in die Form (2.4) bringen. Dies führt dann auf das System

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= \Delta u + \gamma f(u,v) \text{ mit } f(u,v) = v + au - r_1 uv - ar_2 uv^2, \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= d\Delta v + \gamma g(u,v) \text{ mit } g(u,v) = bv - au + r_1 uv + ar_2 uv^2. \end{aligned} \tag{4.15}$$

Damit liegt das System wieder in der Form vor, wie sie bisher in dieser Arbeit betrachtet wurde. Der Parameter γ ist also wieder ein Maß für die Gebietsgröße und

d beschreibt das Verhältnis der Diffusionskoeffizienten von v und u. Anders als zuvor wurde das Modell hier so entworfen, dass $(u_0, v_0) = (0, 0)$ die homogene Ruhelage darstellt. Es sind also u bzw. v nicht direkt als aktuelle Konzentration zu verstehen, sondern vielmehr als Abweichung von der Ruhelage.

Die von Maini verwendeten Parameter für das Modell in (4.13) wurden hier für die Verwendung des Modells (4.15) abgeändert, sodass qualitativ gleiche Simulationsergebnisse erzielt wurden. Zur Bestimmung von Parametern, für die das System (4.14) eine diffusionsbedingte Instabilität aufweist, werden wieder zuerst die (in der Ruhelage $(0, 0)$ ausgewerteten) partiellen Ableitungen von f und g bestimmt. Mit der Notation aus den letzten Abschnitten ergibt sich

$$f_u = a,\ f_v = 1,\ g_u = -a,\ g_v = b. \tag{4.16}$$

Die Bedingungen auf (2.43) stellen dann die folgenden Bedingungen an die Parameter:

$$\begin{aligned} f_u + g_v < 0 \Rightarrow &\quad a + b < 0 \\ f_u g_v - f_v g_u > 0 \Rightarrow &\quad a(b+1) > 0 \\ d f_u + g_v > 0 \Rightarrow &\quad da + b > 0 \\ (d f_u + g_v)^2 - 4d(f_u g_v - f_v g_u) > 0 \Rightarrow &\quad (da + b)^2 - 4da(b+1) > 0. \end{aligned} \tag{4.17}$$

Außerdem müssen f_u und g_v (also a und b) unterschiedliche Vorzeichen haben und es muss $d > 1$ gelten. Diese Ungleichungen definieren für jedes $d > 1$ einen Parameterraum zulässiger Parameter im (a, b)-Raum. Für $d = 2.22$ ist dieser in Abb.24 dargestellt.

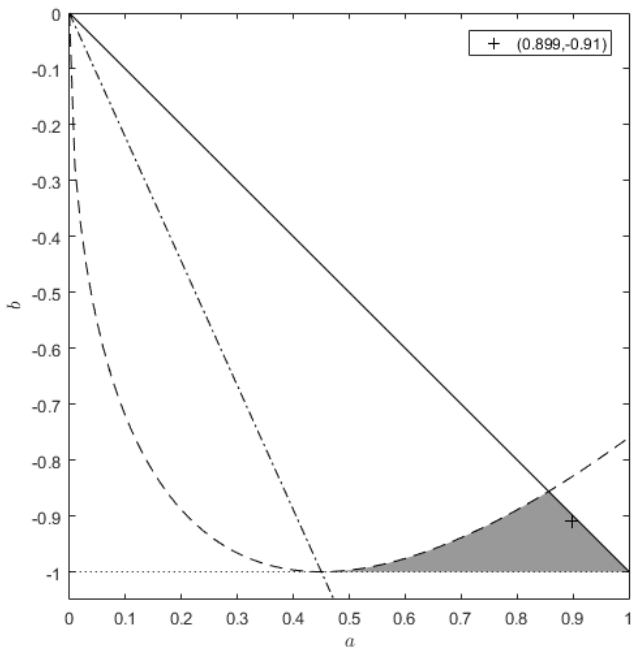
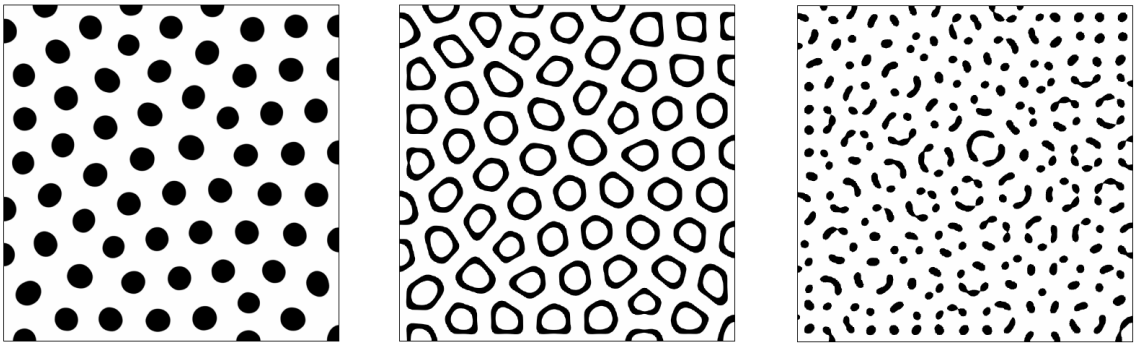


Abb. 24: Turing-Raum (gefärbte Fläche) des 2-Phasen-Modells für $d = 2.22$ und zulässiger Punkt $(a, b) = (0.899, -0.91)$ (+). [*Eigene Abbildung in Anlehnung an [12], S.5, FIG. 5*]

Für die erste Phase des Modells (Erzeugung des Punktmusters) werden die Parameter

$$d = 2.22,\ \gamma = 0.37,\ r_1 = 2,\ r_2 = 3.5 \tag{4.18}$$

sowie das in Abb.24 eingezeichnete Parameterpaar $(a, b) = (0.899, -0.91)$ gewählt. Außerdem werden auch hier Nullfluss-Randbedingungen gewählt. Die nachfolgenden Simulationen wurden alle mit COMSOL® Multiphysics 4.3, auf einem Quadrat mit 200×200 Gitterpunkten durchgeführt. Für die erste Phase wurden für die Anfangswerte von u und v jeweils gleichverteilte Zufallswerte aus $[0, 1]$ gewählt. Dies führt auf das in Abb.25 (i) abgebildete Punktmuster.



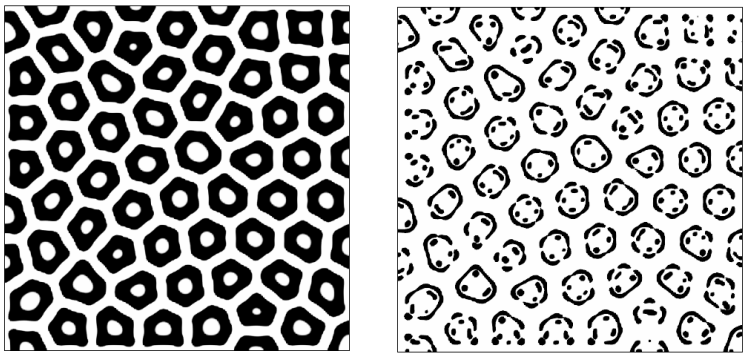
(i) **(ii)** **(iii)**

Abb. 25: Simulation 2-Phasen-Modell **(i)** $a = 0.899, b = -0.91, d = 2.22, \gamma = 0.37$, $r_1 = 2$, $r_2 = 3.5$ **(ii)** aus (i) durch Erhöhung von r_1 auf 7. **(iii)** aus (ii) durch Erhöhung von γ auf 1 und anschließender Stabilisierung durch Erhöhung von d auf 6.67. [*Eigene Abbildung in Anlehnung an [12], S.4, FIG. 3 und FIG. 4*]

Dieses Punktmuster wird nun als Anfangswert für die zweite Phase des Modells herangezogen. In dieser wird zuerst r_1 erhöht und dann γ und d jeweils erhöht. Es wird als erstes der Koeffizient r_1 der quadratischen Terme aus (4.15) von 2 auf 7 erhöht. Quadratische Terme begünstigen die Bildung von Punkten im entstehenden Muster. Die Erhöhung von r_2 wirkt sich deshalb derart aus, dass die Konzentration in den Punkten stark erhöht wird, die Punkte wachsen und sich letztendlich zu Ringen entwickeln. Das dadurch entstehende Muster ist in Abb.25 (ii) dargestellt. Als nächstes werden d und γ erhöht. Die Auswirkung einer Erhöhung von γ wurde schon in den vorangehenden Kapiteln diskutiert. Durch eine Erhöhung von γ auf 1 beginnen die Ringe aus Abb.25 (ii) zu zerbrechen. Dieser Prozess dauert so lange an, bis das Muster durch die Erhöhung von d auf 6.67 stabilisiert wird. Das dadurch entstehende finale Muster ist in Abb.25 (iii) zu sehen.

Für die Simulation des Jaguarmusters werden die gleichen Schritte durchgeführt. Es gibt jedoch zwei kleine Unterschiede im Vergleich zur zweiten Phase für das Leopardenmuster. Es wird wieder das Punktmuster aus Abb.25 (i) als Anfangswert für die zweite Phase des Modells verwendet. Eine Erhöhung von r_2 auf 7 führt wieder zu einer Vergrößerung der Punkte des Punktmusters. Hierbei wird, im Gegensatz zur Simulation des Leopardenmusters, γ erst später erhöht. Die entstehenden Ringe wachsen, bis sie in die Form von Hexagonen übergehen (vgl. Abb.26 (i)). Hier bilden sich eigentlich jeweils zwei Ringe, da die Konzentration am äußeren und inneren Rand der Ringe aus Abb.26 (i) deutlich höher ist als auf dem Rest des Rings. In

der in Abb.26 gewählten Darstellung, die nur aufzeigt ob die Konzentration größer (schwarz) oder kleiner (weiß) als die im homogenen Gleichgewicht ist, werden diese zwei Ringe erst später sichtbar. Anschließend wird γ von 0.37 auf 1.2 erhöht. Dabei beginnen die inneren Ringe zuerst zu brechen. Nachdem diese komplett zerbrochen sind, wird d auf 6.67 erhöht und das Muster dadurch stabilisiert. Das dadurch entstehende Muster ist in Abb.26 (ii) zu sehen.



(i) **(ii)**

Abb. 26: Simulation 2-Phasen-Modell **(i)** aus Abb.25 (i) durch Erhöhung von r_2 auf 7 und längeres Halten der Parameter. **(ii)** aus (i) durch Erhöhen von γ auf 1.2 und anschließender Stabilisierung des Musters durch Erhöhung von d auf 6.67. [*Eigene Abbildung in Anlehnung an [12], S.5, FIG. 7*]

Dieses Modell durchläuft nicht nur die Phasen des Leoparden- bzw. des Jaguarmusters sondern ist auch mit der oben genannten Tatsache vereinbar, dass die Anzahl der Rosetten des ausgewachsenen Tiers mit der Anzahl der Punkte des Jungtiers übereinstimmt.

Wichtig ist auch die Tatsache, dass die Muster aus Abb.25 und Abb.26 nicht nur mit den hier gewählten Parametern erzeugt werden können. Der Bereich der Parameter, die verwendet werden können, um das Punktmuster zu erzeugen, das als Anfangswert für die zweite Phase des Modells verwendet wird, ist groß. Wäre eine solche Robustheit des Modells nicht gegeben, so würde sich das Modell als möglicher natürlicher Mechanismus zur Erzeugung dieser Fellmuster weniger eignen, da in der Natur immer gewisse Schwankungen der Parameter zu erwarten sind.

Die Erhöhung des Parameters γ in der zweiten Phase lässt sich mit der Bedeutung von γ direkt mit dem Wachstum des Tieres identifizieren. Da das Wachstum eines Tiers immer ein stetiger Prozess ist, ist es sinnvoll, die Änderung der Parameter auch stetig vorzunehmen. Für die Simulationen in Abb.25 und Abb.26 wurden hierfür einfache lineare Funktionen verwendet. Zur Änderung eines Parameters g von g_0 auf g_1, wurde im Zeitintervall der Änderung des Parameters die Funktion

$$g(t) = g_0 + c\,t(g_1 - g_0) \tag{4.19}$$

verwendet, wobei c die Änderungsrate des Parameters in diesem Zeitintervall bezeichnet. Alternativ lässt sich die Änderung der Parameter auch mit einer glatteren,

logistischen Wachstumsfunktion der Form

$$g(t) = \frac{g_1}{1 + \exp(-c\,t)\left(\frac{g_0}{g_1} - 1\right)} \tag{4.20}$$

realisieren.

Es ist also auch möglich komplexere Muster und deren in der Natur auftretende zeitliche Entwicklung mit dem Turing-Mechanismus zu erzeugen.

5 Fazit und Ausblick

Die Analyse des Turing-Mechanismus hat gezeigt, dass ein Reaktions-Diffusions-System unter bestimmten Voraussetzungen zweidimensionale, räumliche Muster erzeugen kann. Eine lineare Stabilitätsanalyse des Systems ergab spezielle Bedingungen an die Parameter der Reaktionskinetik und an das Verhältnis der Diffusionskoeffizienten, die erfüllt sein müssen, damit eine diffusionsbedingte Instabilität auftreten kann. Sind diese Bedingungen erfüllt, so kann ein von der Reaktionskinetik, der Diffusionskoeffizienten und der Gebietsgröße abhängiges Intervall angegeben werden, das die instabilen Wellenzahlen des Systems bestimmt. Die räumlichen Moden zu diesen instabilen Wellenzahlen wachsen in der Nähe der homogenen Ruhelage exponentiell an, während alle anderen exponentiell abklingen. Diese instabilen, räumlichen Moden bestimmen das sich in Form eines räumlich inhomogenen Gleichgewichts entwickelnde Muster.

Numerisch lassen sich diese Muster unter anderem mit dem Prinzip der Linienmethode realisieren. Es wurde eine Ortsdiskretisierung des Laplace-Operators in einem rechteckigen Gebiet und einem Kreisring-Segment mit der Finite-Differenzen-Methode durchgeführt. Für die Zeitdiskretisierung wurden das explizite Euler-Verfahren und verschiedene IMEX-Verfahren herangezogen. In gewissen Situationen erwies sich das explizite Euler-Verfahren durch die vergleichsweise schlechten Stabilitätsbedingungen und der daraus resultierenden großen Anzahl an notwendigen Zeitschritten jedoch als nicht empfehlenswert. Mit den IMEX-Verfahren oder dem ADI-Verfahren lässt sich dieses Problem umgehen.

Bei einer biologischen Interpretation des Mechanismus wurde gezeigt, dass sich Fellmuster verschiedener Säugetiere erzeugen lassen. Hierbei wurden neben einfachen Streifen- und Punktmustern, wie sie beispielsweise bei Zebras und Geparden zu finden sind auch komplexere Rosettenmuster, wie die des Jaguars erzeugt. Auffällig waren dabei die Parallelen im Verhalten in speziellen Situationen von natürlichen und erzeugten Mustern. So ist bei einigen Säugetieren, wie zum Beispiel einigen Vertretern der Katzenähnlichen, zu beobachten, dass sie einen gepunkteten oder gefleckten Körper haben, das Muster auf den Beinen und dem Schwanz aber oft in ein Streifenmuster übergeht. Durch Vereinfachung der Form von Schwanz und Beinen als Kegelstumpf konnte dieses Verhalten auch für die durch den Turing-Mechanismus erzeugten Muster nachgewiesen werden. Es stellte sich heraus, dass sich mit dem Turing-Mechanismus auch verschiedene Fellmuster-Anomalien erklären lassen. So spielt es nach diesem Modell eine entscheidende Rolle, wann der Musterbildungsprozess einsetzt, da das entstehende Muster zum Teil sensibel von der Gebietsgröße abhängt, die in dieser Situation durch die Oberfläche des Embryos zu diesem Zeitpunkt beschrieben wird. Ferner wurden Jaguar- und Leopardenmuster genauer betrachtet. Die charakteristische Musterung dieser Tiere entwickelt sich während des postnatalen Wachstums aus einem einfachen Punktmuster. Mit zeitabhängigen Parametern konnten die Phasen, die das Muster dieser Großkatzen während der Entwicklung durchläuft, realisiert werden.

Insgesamt konnte dargestellt werden, unter welchen bestimmten Voraussetzungen zweidimensionale Muster mit dem Turing-Mechanismus erzeugt und wie diese numerisch umgesetzt werden können. Mit diesen erarbeiteten theoretischen und nu-

merischen Ergebnissen wurde ein mathematischer Zugang und damit ein möglicher Erklärungsansatz zum komplexen Prozess der biologischen Musterbildung gelegt.

Die Anwendbarkeit dieser Theorie beschränkt sich nicht nur auf die hier betrachteten Fellmuster von Säugetieren. Der Turing-Mechanismus eignet sich zum Beispiel auch als möglicher Erzeuger von Mustern auf Schalen von Muscheln und Schnecken, Schuppenmustern von Fischen oder Flügelmustern von Schmetterlingen. In der Biologie sind jedoch nicht nur zweidimensionale Muster von Interesse. Die Entwicklungsbiologie beschäftigt sich auch mit der Entstehung dreidimensionaler Muster – also der Bildung von plastischen Formen. Durch eine Betrachtung des Turing-Mechanismus in drei Raumdimensionen lässt sich beispielsweise auch die pränatale Bildung von Extremitäten oder das Wachstum von Tumoren beschreiben. Der unlängst erbrachte Nachweis der bis dahin rein spekulativen Existenz der von Turing eingeführten Morphogene konnte die Theorie des Turing-Mechanismus als zugrundeliegendem universellen Mechanismus der natürlichen Musterbildung weiter bestärken. Deshalb ist es sehr wahrscheinlich, dass dieser Mechanismus auch in Zukunft ein fester und richtungsweisender Bestandteil der Entwicklungsbiologie bleibt.

Anhang A: MATLAB®-Codes

schnakenberg.m

```
function [f,g]=schnakenberg(a,b,u,v)
%% SCHNAKENBERG
% schnakenberg(a,b,u,v) wertet die Schnakenberg-Kinetik
%                                        f(x,y)=a-x+y*x^2,
%                                        g(x,y)= b-y*x^2
%                        für die Parameter a und b in (u,v) aus
%
% INPUT:
%       a,b              - Parameter für Schnakenberg-Kinetik
%       u,v              - auszuwertende Stelle
%
% OUTPUT:
%       f,g              - Funktionswerte f(u,v), g(u,v)
%
%%

% Berechnen der Funktionswerte
f=a-u+(u.^2).*v;
g=b-(u.^2).*v;

end
```

schnakenberg_parameter.m

```
function [a_n,b_n,d_n] = schnakenberg_parameter(a,b,d)
%% SCHNAKENBERG_PARAMETER
% schnakenberg_parameter(a,b,d) prüft, ob Parametertripel (a,b,d) zulässig
%                                zur Bildung von räumlichen Mustern ist.
%                                Falls für (a,b) kein d existiert, sodass
%                                (a,b,d) zulässig, wird eine neue Eingabe
%                                der Parameter a,b gefordert. Falls d_z
%                                existiert, sodass (a,b,d_z) zulässig, wird
%                                kritisches d_c angegeben, für das (a,b,d)
%                                zulässig für alle d>d_c. Falls (a,b,d)
%                                bereits zulässig, werden diese wieder
%                                ausgegeben.
%
% INPUT:
%       a,b,d                    - zu prüfendes Parameter-Tripel
%
% OUTPUT:
%       a_n,b_n,d_n              - zulässige Parameter-Konstellation
%
%%

% Ruhelage u_0
u_0=a+b;

% Aktuelles Parametertripel
a_z=a;
b_z=b;
```

```
d_z=d;

while (.5*u_0*(1-u_0^2)>=a_z) || (a_z>=b_z)
    % Solange a,b so, dass kein d_z existiert mit (a,b,d_z) zulässig

    disp('Parametertupel (a,b) unzulässig!')

    % Neue Eingabe der Parameter a unf b
    a_z=input('a=');
    b_z=input('b=');

    % Neue Ruhelage u_0
    u_0=a_z+b_z;

end

% Kritisches d_c mit (a_z,b_z,d_z) zulässig für alle d_z>d_c
d_c=-(-2*u_0^2-2*u_0*sqrt(u_0^2-2*a_z+u_0)+2*a_z-u_0)*u_0^2/(2*a_z-u_0)^2;

while d_z<=d_c
    % Solange aktuelles d_z unter kritischem d_c

    disp(['Bitte ein d>d_c=',num2str(d_c),' wählen!'])

    % Neue Eingabe eines d>d_c
    d_z=input('d=');

end

% Gefundene zulässige Parameter als Ausgabeparameter
a_n=a_z;
b_n=b_z;
d_n=d_z;

if (a_n==a) && (b_n==b) && (d_n==d)
    disp('Die gewählten Parameter sind zulässig')
end

end
```

schnakenberg_explizit_euler_rechteck.m

```
%% SCHNAKENBERG EXPLIZIT EULER
% BESCHREIBUNG:
% Programm zur numerischen Lösung des Schnakenberg-Modells auf einem
% rechteckigen Gebiet mit dem expliziten Euler-Verfahren im Rahmen einer
% Untersuchung auf räumliche Musterbildung
%%

clc; close all; clear all;

%% EINGABE DER PARAMETER FÜR DAS GEBIET UND DAS EXPLIZITE EULER-VERFAHREN

% Eingabe der Breite p und Höhe q des rechteckigen Gebiets (0,p)x(0,q)
p=input('Gebietsbreite p=');
q=input('Gebietshöhe q=');

% Eingabe der Grenze t_end des Zeitintervalls [0,t_end]
```

```
t_end=input('t_end=');

% Eingabe der Anzahl der Orts- und Zeitschritte
M=input('Ortsschritte in x-Richtung M=');
N=input('Ortsschritte in y-Richtung N=');
Delta_t=input('Delta_t=');

% Berechnung der Schrittweiten
Delta_x=p/M;
Delta_y=q/N;

%% EINGABE UND PRÜFUNG DER PARAMETER DES SCHNAKENBERG-MODELLS

% Ausgabe
fprintf(['\n','Eingabe Parameter für das Schnakenbergmodell:\n'])

% Eingabe Diffusionskoeffizienten-Quotien d
a=input('a=');
b=input('b=');
d=input('d=');

% Prüfen ob Parameter zuässig und eventuelle Findung zulässiger Parameter
[a,b,d]=schnakenberg_parameter(a,b,d);

% Eingabe Parameter gamma
gamma=input(sprintf(['\n','gamma=']));

% Berechnung der homogenen Ruhelagen
u_0=a+b;
v_0=b/(a+b)^2;

% Amplitude der Störung um Ruhelage für Anfangswerte
eps=.01;

%% DEFINITION DES GITTERS, DER ANFANGSWERTE UND DER VERFAHRENS-MATRIX

% Gitter über das Rechteck (0,p)x(0,q)
[X,Y]=meshgrid(0:Delta_x:p,0:Delta_y:q);

% Anfangswerte
U_0=u_0+2*eps*rand((M+1)*(N+1),1)-eps;
V_0=v_0+2*eps*rand((M+1)*(N+1),1)-eps;

h_1=1/Delta_x^2;
h_2=1/Delta_y^2;

% Teilmatrizen der Verfahrens-Matrix
C=h_1*spdiags([ones(M+1,1),-[1;2*ones(M-1,1);1],ones(M+1,1)],[-1,0,1],...
    M+1,M+1);
D=-h_2*speye(M+1);
E=-2*h_2*speye(M+1);

% Liste mit Diagonalelementen(Matrizen) der Verfahrensmatrix (Blockmatrix)
BlckMat=[{C+D},repmat({C+E},1,N-1),{C+D}];

% Verfahrens-Matrix
A=blkdiag(BlckMat{:})+spdiags(h_2*ones((M+1)*(N+1),2),[-M-1,M+1],...
    (M+1)*(N+1),(M+1)*(N+1));

%% DURCHFÜHRUNG DES EXPLIZITEN EULER-VERFAHRENS

% Für spätere Abfrage, ob Delta_t angepasst wurde
angepasst=0;
```

```
% Index für Zeitschritte
t=1;

% Anfangswerte
U=U_0;
V=V_0;

% Schleife für Iteration
while Delta_t*t<=t_end

    % Auswertung der Schnakenberg-Kinetik in U,V
    [f,g]=schnakenberg(a,b,U,V);

    % Schritt mit expliziten Euler-Verfahren
    U=U+Delta_t*(gamma*f+A*U);
    V=V+Delta_t*(gamma*g+d*A*V);

    % Prüfen ob Vefahren divergiert
    if isnan(max(abs(U))) || isnan(max(abs(V)))
        % Falls Verfahren divertgiert

        % Delta_t wird um 10% verringert
        Delta_t=0.9*Delta_t;

        if ~angepasst
            % Falls Delta_t noch nicht angepasst wurde

            % Ausgabe
            fprintf(['\n','Mit den gewählten Schrittweiten ist das'...
                ' Verfahren nicht konvergent.\n','Die Zeitschrittweite',...
                ' wird verringert:\n'])

        end

        % Iterationsindex zurücketzen
        t=0;

        % U,V zurücksetzen auf Anfangswerte
        U=U_0;
        V=V_0;

        % Delta_t als angepasst kennzeichnen
        angepasst=1;

    end

    % Erhöhung des Iterationsindex
    t=t+1;

end

if angepasst
    % Falls Delta_t angepasst wurde

    % Ausgabe
    fprintf(['Delta_t=',num2str(Delta_t),'\n'])

end

%% PLOTTEN DER ERGEBNISSE

% Vektor W mit Einträgen 1, falls entsprechender Wert in U > u_0
```

```
% und 0, falls U <= u_0
W=ones((M+1)*(N+1),1);
W(U<=u_0)=0;

% Umschreiben des Vektors W in eine (M+1)x(N+1)-Matrix
U_muster=reshape(W,[M+1,N+1])';

% Laden einer Schwarz-Weiß-Colormap
colormap([1,1,1;0,0,0])

% Plotten von U_pattern (Schwarz-Weiß-Muster)
surf(X,Y,U_muster,'EdgeColor','none')

% Aufsicht
view(2);

% Achsenbeschriftung und Titel
axis equal;
set(gca,'xlim',[0,p],'xtick',[0,p])
xlabel('$$x$$','interpreter','latex')
set(gca,'ylim',[0,q],'ytick',[0,q])
ylabel('$$y$$','interpreter','latex')
title(['$a=$',num2str(a),', $b=$',num2str(b),', $d=$',num2str(d),...
    ', $\gamma=$',num2str(gamma),', t=',num2str(t_end)],...
    'interpreter','latex')
```

schnakenberg_2sbdf_rechteck.m

```
%% SCHNAKENBERG 2-SBDF
% BESCHREIBUNG:
% Programm zur numerischen Lösung des Schnakenberg-Modells auf einem
% rechteckigen Gebiet mit dem 2SBDF-Verfahren im Rahmen einer
% Untersuchung auf räumliche Musterbildung. Für den ersten
% Iterationsschritt wird hier das 1SBDF-Verfahren herangezogen
%%

clc; close all; clear all;

%% EINGABE DER PARAMETER FÜR DAS GEBIET UND DAS 2-SBDF-VERFAHREN

% Eingabe der Breite p und Höhe q des rechteckigen Gebiets (0,p)x(0,q)
p=input('Gebietsbreite p=');
q=input('Gebietshöhe q=');

% Eingabe der Grenze t_end des Zeitintervalls [0,t_end]
t_end=input('t_end=');

% Eingabe der Anzahl der Orts- und Zeitschritte
M=input('Gitterpunkte Breite M=');
N=input('Gitterpunkte Höhe N=');
Delta_t=input('Delta_t=');

% Berechnung der Schrittweiten
Delta_x=p/M;
Delta_y=q/N;

%% EINGABE UND PRÜFUNG DER PARAMETER DES SCHNAKENBERG-MODELLS

```

```
% Ausgabe
fprintf(['\n','Eingabe Parameter für das Schnakenbergmodell:\n'])

% Eingabe Diffusionskoeffizienten-Quotien d
a=input('a=');
b=input('b=');
d=input('d=');

% Prüfen ob Parameter zuässig und eventuelle Findung zulässiger Parameter
[a,b,d]=schnakenberg_parameter(a,b,d);

% Eingabe Parameter gamma
gamma=input(sprintf(['\n','gamma=']));

% Berechnung der homogenen Ruhelagen
u_0=a+b;
v_0=b/(a+b)^2;

% Amplitude der Störung um Ruhelage für Anfangswerte
eps=.01;

%% DEFINITION DES GITTERS, DER ANFANGSWERTE UND DER VERFAHRENS-MATRIX

% Gitter über das Rechteck (0,p)x(0,q)
[X,Y]=meshgrid(0:Delta_x:p,0:Delta_y:q);

% Anfangswerte
U_0=u_0+2*eps*rand((M+1)*(N+1),1)-eps;
V_0=v_0+2*eps*rand((M+1)*(N+1),1)-eps;

h_1=1/Delta_x^2;
h_2=1/Delta_y^2;

% Teilmatrizen der Verfahrens-Matrix
C=h_1*spdiags([ones(M+1,1),-[1;2*ones(M-1,1);1],ones(M+1,1)],[-1,0,1],...
    M+1,M+1);
D=-h_2*speye(M+1);
E=-2*h_2*speye(M+1);
I=speye((M+1)*(N+1));

% Liste mit Diagonalelementen(Matrizen) der Verfahrensmatrix (Blockmatrix)
DiagMat=[{C+D},repmat({C+E},1,N-1),{C+D}];

% Verfahrens-Matrix
A=blkdiag(DiagMat{:})+spdiags(h_2*ones((M+1)*(N+1),2),[-M-1,M+1],...
    (M+1)*(N+1),(M+1)*(N+1));

%% DURCHFÜHRUNG DES 2-SBDF-VERFAHRENS

% Für spätere Abfrage, ob Delta_t angepasst wurde
angepasst=0;

% Index für Zeitschritte
t=1;

% Anfangswerte
U=U_0;
V=V_0;
U1=1;
V1=1;

% Schleife für Iteration
while Delta_t*t<=t_end
```

```
94
95      % Zwischenspeichern der aktuellen Werte von U und V
96      U2=U;
97      V2=V;
98
99      % Auswertung der Schnakenberg-Kinetik
100     [F,G]=schnakenberg(a,b,U,V);
101     [F1,G1]=schnakenberg(a,b,U1,V1);
102
103     if t==1
104         % Erster Schritt mit 1-SBDF-Verfahren
105
106         % Schritt mit 1-SBDF-Verfahren
107         U=(I-Delta_t*A)\(U+Delta_t*gamma*F);
108         V=(I-d*Delta_t*A)\(V+Delta_t*gamma*G);
109
110     else
111
112         % Schritt mit 2-SBDF-Verfahren
113         U=(3*I-2*Delta_t*A)\(4*U-U1+2*Delta_t*gamma*(2*F-F1));
114         V=(3*I-2*d*Delta_t*A)\(4*V-V1+2*Delta_t*gamma*(2*G-G1));
115
116     end
117
118     % U1,V1 als Werte des letzten Zeitschritts
119     U1=U2;
120     V1=V2;
121
122     % Prüfen ob Vefahren divergiert
123     if isnan(max(abs(U))) || isnan(max(abs(V)))
124         % Falls Verfahren divertgiert
125
126         % Delta_t wird um 10% verringert
127         Delta_t=0.9*Delta_t;
128
129         if ~angepasst
130             % Falls Delta_t noch nicht angepasst wurde
131
132             % Ausgabe
133             fprintf(['\n','Mit den gewählten Schrittweiten ist das'...
134                 ' Verfahren nicht konvergent.\n','Die Zeitschrittweite',...
135                 ' wird verringert:\n'])
136
137         end
138
139         % Iterationsindex zurücketzen
140         t=0;
141
142         % U,V zurücksetzen auf Anfangswerte
143         U=U_0;
144         V=V_0;
145
146         % Delta_t als angepasst kennzeichnen
147         angepasst=1;
148
149     end
150
151     t=t+1;
152
153 end
154
155 if angepasst
156     % Falls Delta_t angepasst wurde
```

```
    % Ausgabe
    fprintf(['Delta_t=',num2str(Delta_t),'\n'])

end

%% PLOTTEN DER ERGEBNISSE

% Vektor W mit Einträgen 1, falls entsprechender Wert in U > u_0
% und 0, falls U <= u_0
W=ones((M+1)*(N+1),1);
W(U<=u_0)=0;

% Umschreiben des Vektors W in eine (M+1)x(N+1)-Matrix
U_muster=reshape(W,[M+1,N+1])';

% Laden einer Schwarz-Weiß-Colormap
colormap([1,1,1;0,0,0])

% Plotten von U_pattern (Schwarz-Weiß-Muster)
surf(X,Y,U_muster,'EdgeColor','none')

% Aufsicht
view(2);

% Achsenbeschriftung und Titel
axis equal;
set(gca,'xlim',[0,p],'xtick',[0,p])
xlabel('$$x$$','interpreter','latex')
set(gca,'ylim',[0,q],'ytick',[0,q])
ylabel('$$y$$','interpreter','latex')
title(['$a=$',num2str(a),', $b=$',num2str(b),', $d=$',num2str(d),...
    ', $\gamma=$',num2str(gamma),', t=',num2str(t_end)],...
    'interpreter','latex')
```

schnakenberg_adi_rechteck.m

```
%% SCHNAKENBERG ADI
% BESCHREIBUNG:
% Programm zur numerischen Lösung des Schnakenberg-Modells auf einem
% rechteckigen Gebiet mit dem ADI-Verfahren im Rahmen einer
% Untersuchung auf räumliche Musterbildung.
%%

clc; close all; clear all;

%% EINGABE DER PARAMETER FÜR DAS GEBIET UND DAS ADI-VERFAHREN

% Eingabe der Breite p und Höhe q des rechteckigen Gebiets (0,p)x(0,q)
p=input('Gebietsbreite p=');
q=input('Gebietshöhe q=');

% Eingabe der Grenze t_end des Zeitintervalls [0,t_end]
t_end=input('t_end=');

% Eingabe der Anzahl der Orts- und Zeitschritte
M=input('Gitterpunkte Breite M=');
N=input('Gitterpunkte Höhe N=');
```

```
Delta_t=input('Delta_t=');

% Berechnung der Schrittweiten
Delta_x=p/M;
Delta_y=q/N;

%% EINGABE UND PRÜFUNG DER PARAMETER DES SCHNAKENBERG-MODELLS

% Ausgabe
fprintf(['\n','Eingabe Parameter für das Schnakenbergmodell:\n'])

% Eingabe Diffusionskoeffizienten-Quotien d
a=input('a=');
b=input('b=');
d=input('d=');

% Prüfen ob Parameter zuässig und eventuelle Findung zulässiger Parameter
[a,b,d]=schnakenberg_parameter(a,b,d);

% Eingabe Parameter gamma
gamma=input(sprintf(['\n','gamma=']));

% Berechnung der homogenen Ruhelagen
u_0=a+b;
v_0=b/(a+b)^2;

% Amplitude der Störung um Ruhelage für Anfangswerte
eps=.01;

%% DEFINITION DES GITTERS, DER ANFANGSWERTE UND DER VERFAHRENS-MATRIX

% Gitter über das Rechteck (0,p)x(0,q)
[X,Y]=meshgrid(0:Delta_x:p,0:Delta_y:q);

% Anfangswerte
U_0=u_0+2*eps*rand((M+1)*(N+1),1)-eps;
V_0=v_0+2*eps*rand((M+1)*(N+1),1)-eps;

h_1=1/Delta_x^2;
h_2=1/Delta_y^2;

% Teilmatrizen der Verfahrens-Matrix
C=h_1*spdiags([ones(M+1,1),-[1;2*ones(M-1,1);1],ones(M+1,1)],[-1,0,1],...
    M+1,M+1);
D=-h_2*speye(M+1);
E=-2*h_2*speye(M+1);
I=speye((M+1)*(N+1));

% Listen mit Diagonalelementen(Matrizen) der Verfahrensmatrizen
DiagMat1=repmat({C},1,N+1);
DiagMat2=[{D},repmat({E},1,N-1),{D}];

% Verfahrens-Matrizen
A_1=blkdiag(DiagMat1{:});
A_2=blkdiag(DiagMat2{:})+spdiags(h_2*ones((M+1)*(N+1),2),[-M-1,M+1],...
    (M+1)*(N+1),(M+1)*(N+1));

%% DURCHFÜHRUNG DES ADI-VERFAHRENS

% Für spätere Abfrage, ob Delta_t angepasst wurde
angepasst=0;

% Index für Zeitschritte
```

```
t=1;

% Anfangswerte
U=U_0;
V=V_0;

% Schleife für Iteration
while Delta_t*t<=t_end

    if mod(t,2)==1
        % Falls t ungerade

        % Reihenfolge der impliziten und expliziten Behandlung des Laplace-
        % Operators in den zwei Teilschritten wird festgelegt
        k=[1,2];

    else
        % Falls t gerade

        % Umgekehrte Reihenfolge, wie für t ungerade
        k=[2,1];

    end

    for i=k

        % Auswertung der Schnakenberg-Kinetik in U,V
        [F,G]=schnakenberg(a,b,U,V);

        if i==1

            % Halbschritt mit dem ADI-Verfahren, implizit in x-Richtung
            U=(I-.5*Delta_t*A_1)\((I+.5*Delta_t*A_2)*U+.5*Delta_t*gamma*F);
            V=(I-d*.5*Delta_t*A_1)\((I+d*.5*Delta_t*A_2)*V+.5*Delta_t*...
                gamma*G);

        else

            % Halbschritt mit dem ADI-Verfahren, implizit in y-Richtung
            U=(I-.5*Delta_t*A_2)\((I+.5*Delta_t*A_1)*U+.5*Delta_t*gamma*F);
            V=(I-d*.5*Delta_t*A_2)\((I+d*.5*Delta_t*A_1)*V+.5*Delta_t*...
                gamma*G);

        end

    end

    % Prüfen ob Vefahren divergiert
    if isnan(max(abs(U))) || isnan(max(abs(V)))
        % Falls Verfahren divertgiert

        % Delta_t wird um 10% verringert
        Delta_t=0.9*Delta_t;

        if ~angepasst
            % Falls Delta_t noch nicht angepasst wurde

            % Ausgabe
            fprintf(['\n','Mit den gewählten Schrittweiten ist das'...
                ' Verfahren nicht konvergent.\n','Die Zeitschrittweite',...
                ' wird verringert:\n'])

        end
```

```
148
149         % Iterationsindex zurücketzen
150         t=0;
151
152         % U,V zurücksetzen auf Anfangswerte
153         U=U_0;
154         V=V_0;
155
156         % Delta_t als angepasst kennzeichnen
157         angepasst=1;
158
159     end
160
161     t=t+1;
162
163 end
164
165 if angepasst
166     % Falls Delta_t angepasst wurde
167
168     % Ausgabe
169     fprintf(['Delta_t=',num2str(Delta_t),'\n'])
170
171 end
172
173 %% PLOTTEN DER ERGEBNISSE
174
175 % Vektor W mit Einträgen 1, falls entsprechender Wert in U > u_0
176 % und 0, falls U <= u_0
177 W=ones((M+1)*(N+1),1);
178 W(U<=u_0)=0;
179
180 % Umschreiben des Vektors W in eine (M+1)x(N+1)-Matrix
181 U_muster=reshape(W,[M+1,N+1])';
182
183 % Laden einer Schwarz-Weiß-Colormap
184 colormap([1,1,1;0,0,0])
185
186 % Plotten von U_pattern (Schwarz-Weiß-Muster)
187 surf(X,Y,U_muster,'EdgeColor','none')
188
189 % Aufsicht
190 view(2);
191
192 % Achsenbeschriftung und Titel
193 axis equal;
194 set(gca,'xlim',[0,p],'xtick',[0,p])
195 xlabel('$$x$$','interpreter','latex')
196 set(gca,'ylim',[0,q],'ytick',[0,q])
197 ylabel('$$y$$','interpreter','latex')
198 title(['$a=$',num2str(a),', $b=$',num2str(b),', $d=$',num2str(d),...
199     ', $\gamma=$',num2str(gamma),', t=',num2str(t_end)],...
200     'interpreter','latex')
```

schnakenberg_2sbdf_kreisringsegment.m

```
%% SCHNAKENBERG EXPLIZIT EULER
% BESCHREIBUNG:
% Programm zur numerischen Lösung des Schnakenberg-Modells auf einem
% Kreisring-Segment mit dem 2-SBDF-Verfahren, im Rahmen einer
% Untersuchung auf räumliche Musterbildung
%%

clc; close all; clear all;

%% EINGABE DER PARAMETER FÜR DAS GEBIET UND DAS 2-SBDF-VERFAHRENS

% Eingabe der Radien und des WInkels des Kreisrings-Segments
R_0=input('Innerer Radius R_0=');
R_1=input('Äußerer Radius R_1=');
alpha=input('Winkel alpha=');

% Eingabe der Grenze t_end des Zeitintervalls [0,t_end]
t_end=input('t_end=');

% Eingabe der Anzahl der Orts- und Zeitschritte
M=input('Gitterpunkte in phi M=');
N=input('Gitterpunkte in r N=');
Delta_t=input('Delta_t=');

% Berechnung der Schrittweiten
Delta_r=(R_1-R_0)/M;
Delta_phi=alpha/N;

%% EINGABE UND PRÜFUNG DER PARAMETER DES SCHNAKENBERG-MODELLS

% Ausgabe
fprintf(['\n','Eingabe Parameter für das Schnakenbergmodell:\n'])

% Eingabe Diffusionskoeffizienten-Quotien d
a=input('a=');
b=input('b=');
d=input('d=');

% Prüfen ob Parameter zuässig und eventuelle Findung zulässiger Parameter
[a,b,d]=schnakenberg_parameter(a,b,d);

% Eingabe Parameter gamma
gamma=input(sprintf(['\n','gamma=']));

% Berechnung der homogenen Ruhelagen
u_0=a+b;
v_0=b/(a+b)^2;

% Amplitude der Störung um Ruhelage für Anfangswerte
eps=.01;

R_V=R_0:Delta_r:R_1;

%% DEFINITION DES GITTERS, DER ANFANGSWERTE UND DER VERFAHRENS-MATRIX

% Gitter über Kresring-Segment
[R,Phi]=meshgrid(R_0:Delta_r:R_1,0:Delta_phi:alpha);

% Anfangswerte
```

```
U_0=u_0+2*eps*rand((M+1)*(N+1),1)-eps;
V_0=v_0+2*eps*rand((M+1)*(N+1),1)-eps;

h_1=1/Delta_r^2;
h_2=1/Delta_phi^2;

% Teilmatrizen der Verfahrens-Matrix
R_M=spdiags(1./(R_V'.^2),0,M+1,M+1);
C=h_1*spdiags([[(ones(M,1)+Delta_r./(2*R_V(2:end)'));0],         ...
    [-1+Delta_r/(2*R_0);-2*ones(M-1,1);-(1+Delta_r/(2*R_1))],      ...
    [0;(ones(M,1)-Delta_r./(2*R_V(1:end-1)'))]],[-1,0,1],M+1,M+1);
D=-2*h_2*R_M;
H_2=h_2*R_M;
I=speye((M+1)*(N+1));

% Liste mit Diagonalelementen(Matrizen) der Verfahrensmatrix (Blockmatrix)
BlckMat=repmat({C+D},1,N+1);

% Verfahrens-Matrix
A=blkdiag(BlckMat{:})+spdiags([[diag(H_2);zeros((N-1)*(M+1),1);         ...
    diag(H_2)],[repmat(diag(H_2),N,1);zeros(M+1,1)],[zeros(M+1,1);      ...
    repmat(diag(H_2),N,1)],[diag(H_2);zeros((N-1)*(M+1),1);diag(H_2)]],...
    [-N*(M+1),-(M+1),M+1,N*(M+1)],(M+1)*(N+1),(M+1)*(N+1));

%% DURCHFÜHRUNG DES 2-SBDF-VERFAHRENS

% Für spätere Abfrage, ob Delta_t angepasst wurde
angepasst=0;

% Index für Zeitschritte
t=1;

% Anfangswerte
U=U_0;
V=V_0;
U1=1;
V1=1;

% Schleife für Iteration
while Delta_t*t<=t_end

    % Zwischenspeichern der aktuellen Werte von U und V
    U2=U;
    V2=V;

    % Auswertung der Schnakenberg-Kinetik
    [F,G]=schnakenberg(a,b,U,V);
    [F1,G1]=schnakenberg(a,b,U1,V1);

    if t==1
        % Erster Schritt mit 1-SBDF-Verfahren

        % Schritt mit 1-SBDF-Verfahren
        U=(I-Delta_t*A)\(U+Delta_t*gamma*F);
        V=(I-d*Delta_t*A)\(V+Delta_t*gamma*G);

    else

        % Schritt mit 2-SBDF-Verfahren
        U=(3*I-2*Delta_t*A)\(4*U-U1+2*Delta_t*gamma*(2*F-F1));
        V=(3*I-2*d*Delta_t*A)\(4*V-V1+2*Delta_t*gamma*(2*G-G1));

    end
```

```
    % U1,V1 als Werte des letzten Zeitschritts
    U1=U2;
    V1=V2;

    % Prüfen ob Vefahren divergiert
    if isnan(max(abs(U))) || isnan(max(abs(V)))
        % Falls Verfahren divertgiert

        % Delta_t wird um 10% verringert
        Delta_t=0.9*Delta_t;

        if ~angepasst
            % Falls Delta_t noch nicht angepasst wurde

            % Ausgabe
            fprintf(['\n','Mit den gewählten Schrittweiten ist das'...
                ' Verfahren nicht konvergent.\n','Die Zeitschrittweite',...
                ' wird verringert:\n'])

        end

        % Iterationsindex zurücketzen
        t=0;

        % U,V zurücksetzen auf Anfangswerte
        U=U_0;
        V=V_0;

        % Delta_t als angepasst kennzeichnen
        angepasst=1;

    end

    t=t+1;

end

if angepasst
    % Falls Delta_t angepasst wurde

    % Ausgabe
    fprintf(['Delta_t=',num2str(Delta_t),'\n'])

end

%% PLOTTEN DER ERGEBNISSE

% Vektor W mit Einträgen 1, falls entsprechender Wert in U > u_0
% und 0, falls U <= u_0
W=ones((M+1)*(N+1),1);
W(U<=u_0)=0;

U_uster=reshape(W,[M+1,N+1])';

colormap([1,1,1;0,0,0])
surf(R.*sin(Phi),R.*cos(Phi),U_uster,'EdgeColor','none')
axis equal;
view(2);
grid off
axis off
title(['$\gamma=$',num2str(gamma),', t=',num2str(t_end)], 'interpreter',...
    'latex')
```

Anhang B: Inhalt der beigelegten CD-ROM

Die beigelegte CD-ROM enthält die folgenden Inhalte:

- MATLAB®-Dateien:
  - schnakenberg.m
  - schnakenberg_parameter.m
  - schakenberg_explizit_euler_reckteck.m
  - schnakenberg_2sbdf_reckteck.m
  - schnakenberg_adi_reckteck.m
  - schnakenberg_2sbdf_kreisringsegment.m
- Bachelorarbeit „Analysis und Numerik zur Evolution zweidimensionaler Muster, mit Anwendung in der Biologie“ im *Portable Document Format* (PDF)
- Alle in dieser Arbeit verwendeten Abbildungen im *Portable Network Graphics* Format (PNG)

Literaturverzeichnis

[1] Arendt W./Urban K. (2010): *Partielle Differentialgleichungen – Eine Einführung in analytische und numerische Methoden.* Heidelberg: Spektrum Verlag

[2] Atkinson K. E. (1989): *An Introduction to Numerical Analysis (Second Edition).* West Sussex: John Wiley & Sons

[3] Bard J. B. L. (1977): *A Unity Underlying the Different Zebra Striping Patterns.* Journal of Zoology, Band 183, Ausgabe 4, S.527-539

[4] Cooper S. B./van Leeuwen J. (2013): *Alan Turing – His Work and Impact.* Oxford: Elsevier Science

[5] Denk R./Racke R. (2011): *Kompendium der Analysis – Band 1: Differential- und Integralrechnung, Gewöhnliche Differentialgleichungen.* Wiesbden: Vieweg+Teubner Verlag

[6] Deutsch A. (1994): *Muster des Lebendigen – Faszination ihrer Entstehung und Simulation.* Wiesbaden: Springer Spektrum Verlag

[7] Deutsch A. et al. (2007): *Mathematical Modeling of Biological Systems, Volume I – Cellular Biophysics, Regulatory Networks, Development, Biomedicine, and Data Analysis.* Basel: Birkhäuser Verlag

[8] Gierer A./Meinhardt H. (1972): *A Theory of Biological Pattern Formation.* Kybernetik, Band 12, Ausgabe 1, S.30-39

[9] Grüne L./Junge O. (2016): *Gewöhnliche Differentialgleichungen – Eine Einführung aus der Perspektive der dynamischen Systeme.* Wiesbaden: Springer Spektrum Verlag

[10] Jakob A. : *Die mathematische Untersuchung der Musterbildung auf Tierfellen.* Hamburg: Diplomica Verlag GmbH

[11] Li J./Chen Y.-T. (2008): *Computional Partial Differential Equations Using MATLAB®.* CRC Press, Taylor & Francis Group

[12] Maini P. K. et al. (2006): *Two-Stage Turing Model for Generating Pigment Patterns on the Leopard and the Jaguar.* Physical Review E, Vol. 74, Ausgabe 1, 011914-1/-8

[13] Méndez V. et al. (2010): *Reaction-Transport Systems – Mesotropic Foundations, Fronts, and Spatial Instabilities.* New-York: Springer Verlag

[14] Murray J. D. (1974): *How the Leopard Gets Its Spots.* Scientific American Vol.258, Ausgabe 3, S.80-87

[15] Murray J. D. (2002): *Mathematical Biology I – An Introduction.* New-York: Springer Verlag

[16] Murray J. D. (2003): *Mathematical Biology II: Spatial Models and Biomedical Applications*. New-York: Springer Verlag

[17] Peaceman D. W./Rachford H. H. (1955): *The Numerical Solution of Parabolic and Elliptic Differential Equations*. Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics, Band 3, Ausgabe 1

[18] Ruuth S. J. (1995): *Implicit-Explicit Methods for Reaction-Diffusion Problems in Pattern Formation*. Journal of Mathematical Biology, Vol.34, Ausgabe 2, S.148-176

[19] Schnakenberg J. (1979): *Simple Chemical Reaction Systems with Limit Cycle Behaviour*. Journal of Theoretical Biology, Band 81, Ausgabe 3

[20] Sick S. et al. (2006): *WNT and DKK Determine Hair Follicle Spacing Through a Reaction-Diffusion Mechanism*. Science, Vol.314, Ausgabe 5804, S.1447-1450

[21] Smith G. D. (1985): *Numerical Solution of Partial Differential Equations – Finite Difference Methods*. Oxford: Oxford University Press

[22] Smoller J. (1994): *Shock Waves and Reaction-Diffusion Equations*. New-York: Springer Verlag

[23] Thomas D. (1975): *Artifical Enzyme Membranes, Transport, Memory and Oscillatory Phenomena*. Amsterdam: North-Holland Verlag

[24] Thomas J. W. (1995): *Numerical Partial Differential Equations: Finite Difference Methods*. New-York: Springer Verlag

[25] Turing A. M. (1952): *The Chemical Basis of Morphogenesis*. Philosophical Transactions of The Royal Society B, Band 237, Ausgabe 641, S.37-72

Eigenständigkeitserklärung

Ich versichere hiermit, dass ich die anliegende Bachelorarbeit mit dem Thema:

Analysis und Numerik zur Evolution von zweidimensionalen Mustern,
mit Anwendung in der Biologie

selbständig verfasst und keine anderen Hilfsmittel und Quellen als die angegebenen benutzt habe.

Die Stellen, die anderen Werken (einschließlich des Internets und anderer elektronischer Text- und Datensammlungen) dem Wortlaut oder dem Sinn nach entnommen sind, habe ich in jedem einzelnen Fall durch Angabe der Quelle bzw. der Sekundärliteratur als Entlehnung kenntlich gemacht.

Weiterhin versichere ich hiermit, dass die o.g. Arbeit noch nicht anderweitig als Abschlussarbeit einer Bachelor-Prüfung eingereicht wurde. Mir ist ferner bekannt, dass ich bis zum Abschluss des Prüfungsverfahrens die Materialien verfügbar zu halten habe, welche die eigenständige Abfassung der Arbeit belegen können.

Konstanz, 26. April 2016

(Lucas Heitele)