

Seminar: **Dynamische Modelle komplexer Systeme**

Vortrag:

„Symmetriebrechung & Musterbildung“

Dienstag, 12.07.2005
17:15 Uhr, SR/GMG

Referent:
Philippe Bourdin

Blattnervatur eines tropischen Farns [3]



Definition: „Symmetriebrechung & Musterbildung“

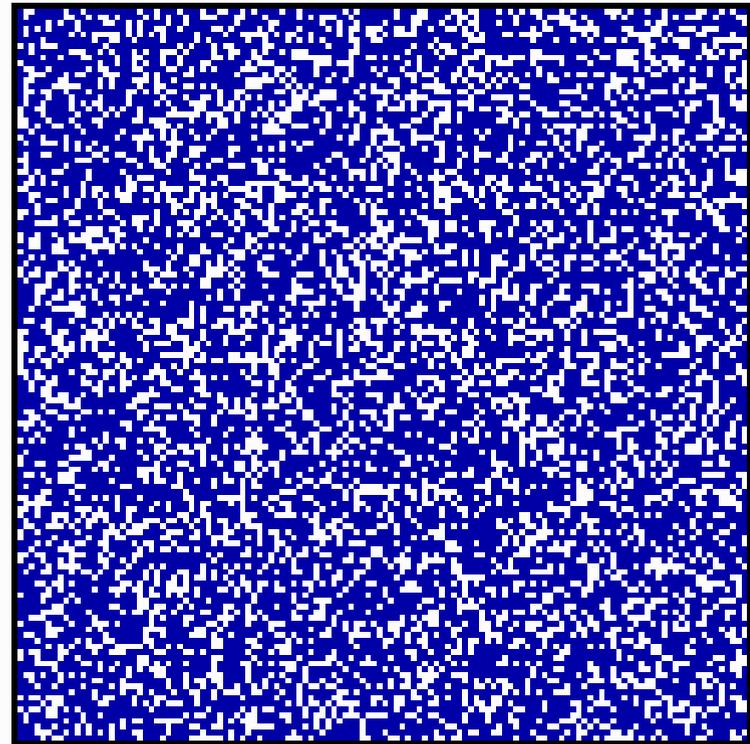
Musterbildung ist ein Prozeß, bei dem ein räumlich homogener Zustand instabil wird und einem inhomogenen Zustand, also einem Muster weicht.

Meist wird eine solche spontane Symmetriebrechung durch Veränderung eines Parameters in einem nichtlinearen System erzielt.

Definition: „Symmetriebrechung & Musterbildung“

Musterbildung ist ein Prozeß, bei dem ein räumlich homogener Zustand instabil wird und einem inhomogenen Zustand, also einem Muster weicht.

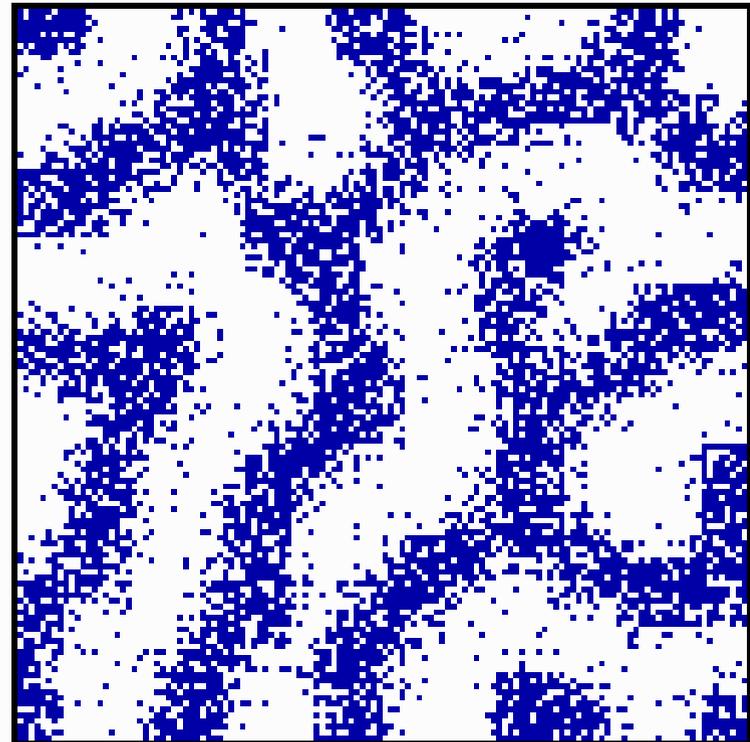
Meist wird eine solche spontane Symmetriebrechung durch Veränderung eines Parameters in einem nichtlinearen System erzielt.



Definition: „Symmetriebrechung & Musterbildung“

Musterbildung ist ein Prozeß, bei dem ein räumlich homogener Zustand instabil wird und einem inhomogenen Zustand, also einem Muster weicht.

Meist wird eine solche spontane Symmetriebrechung durch Veränderung eines Parameters in einem nichtlinearen System erzielt.



Inhalt: „Symmetriebrechung & Musterbildung“

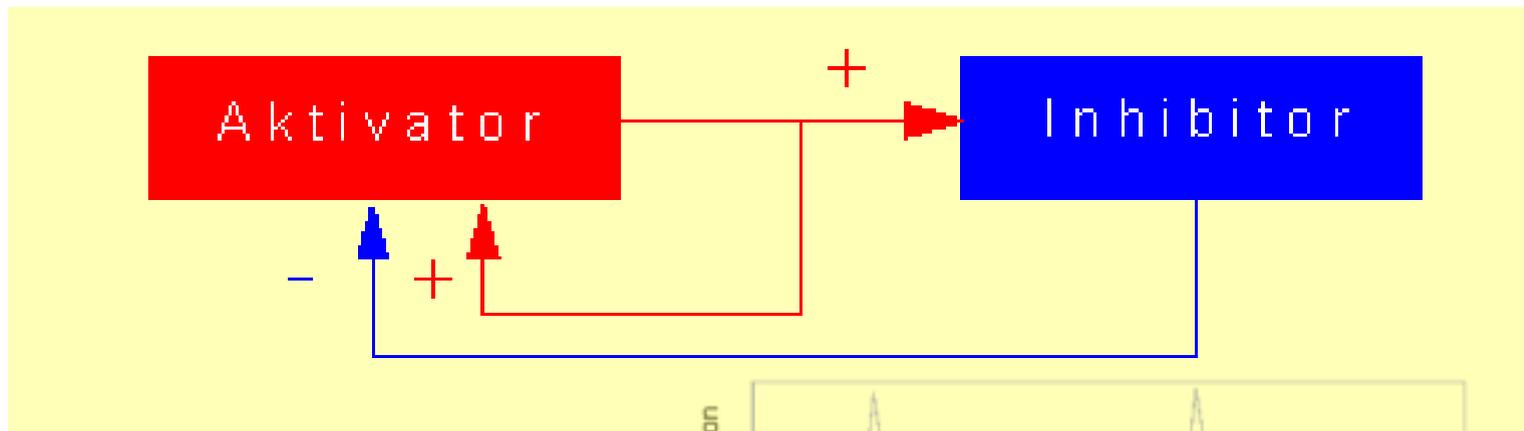
- Ein bißchen Geschichte
- Zweidimensionale Muster
- Das Bénard-Experiment
- Komplexe Ginzburg-Landau-Gleichung (CGLE)
- Belousov-Zhabotinsky-Reaktion (BZ)
- Reaktions-Diffusions-Gleichungen (RD)
- Simulation: Der Brüsselator
- Weitere Muster in der Natur

Ein bißchen Geschichte

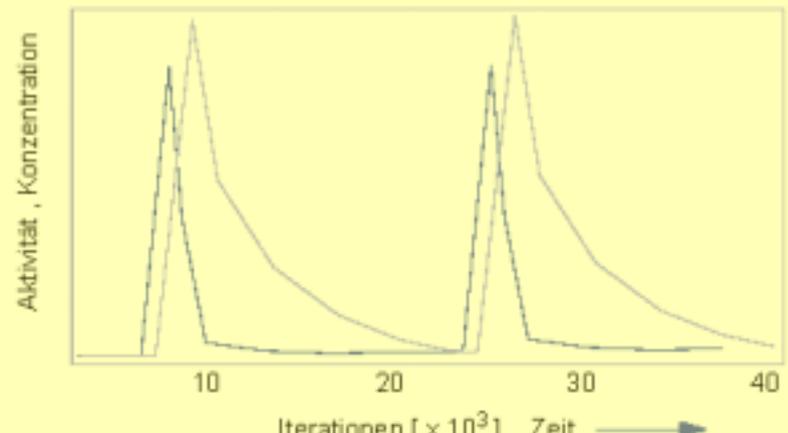
- Wie entstehen zweidimensionale Muster ?

Ein bißchen Geschichte

- Wie entstehen zweidimensionale Muster ?
- Ab 1965 erforscht u.a. von A. Gierer und H. Meinhardt (MPI)
- Einfaches Turing-Modell: System aus Aktivator und Inhibitor



- beschreibbar durch zwei nichtlineare, partielle Differentialgleichungen

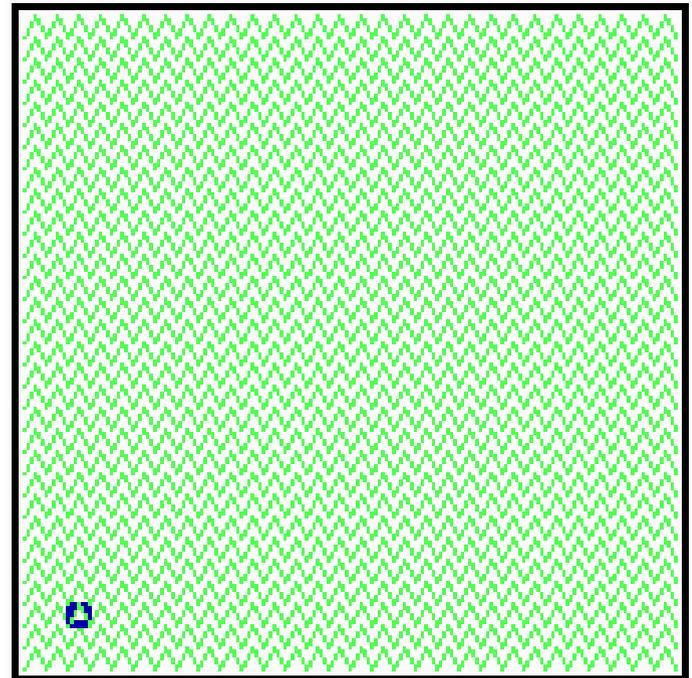


Zweidimensionale Muster

- Beispiel: Astwachstum am Süßwasserpolyphen

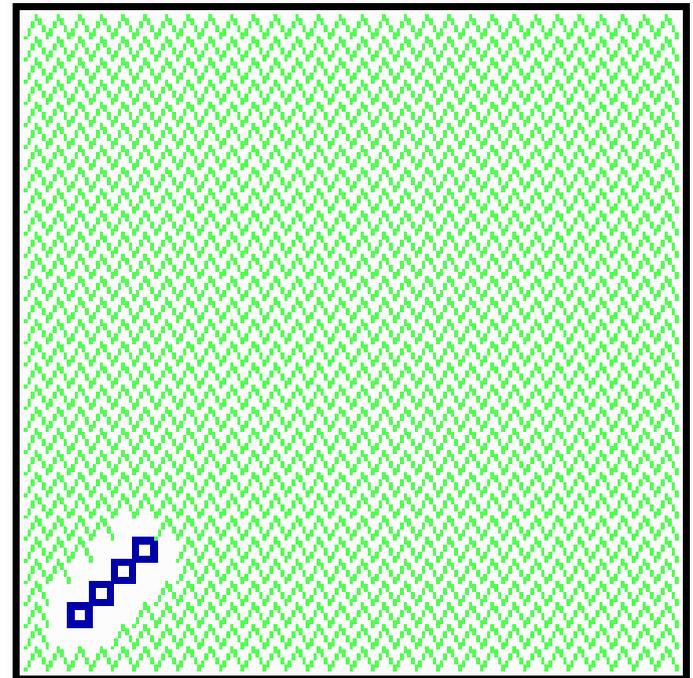
Zweidimensionale Muster

- Beispiel: Astwachstum am Süßwasserpolypen
- Substrat nötig, Fluktuation („Samen“) startet für Zellwachstum
- Wachstum geht zur höchsten Substrat-Konzentration
- Inhibitor zieht weiter mit Aktivator
- Ist Aktivator weit genug entfernt, kann ein Abzweig entstehen, da der Inhibitor ebenfalls fehlt
- Zweig-Wachstum wieder zur höchsten Substrat-Dichte
- Wachstum geht weiter, bis Substrat aufgebraucht ist
- Kein „zusammenwachsen“



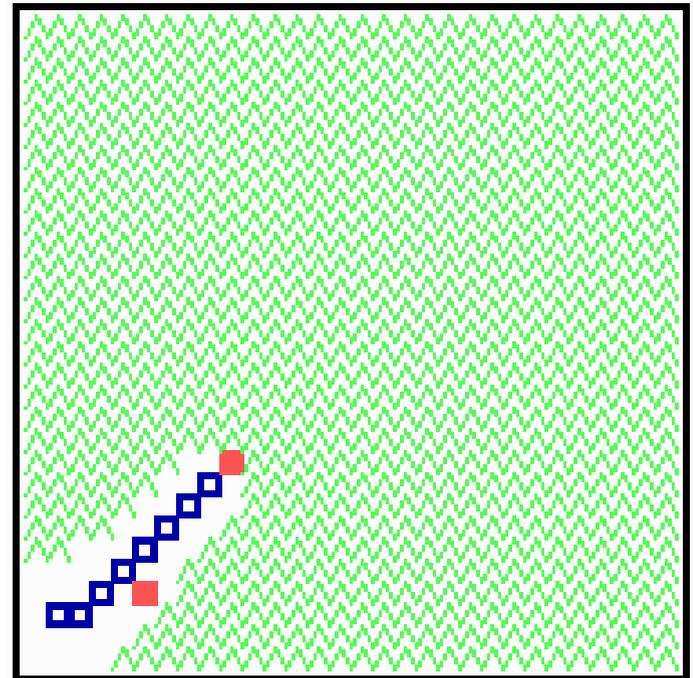
Zweidimensionale Muster

- Beispiel: Astwachstum am Süßwasserpolypen
- Substrat nötig, Fluktuation („Samen“) startet für Zellwachstum
- Wachstum geht zur höchsten Substrat-Konzentration
- Inhibitor zieht weiter mit Aktivator
- Ist Aktivator weit genug entfernt, kann ein Abzweig entstehen, da der Inhibitor ebenfalls fehlt
- Zweig-Wachstum wieder zur höchsten Substrat-Dichte
- Wachstum geht weiter, bis Substrat aufgebraucht ist
- Kein „zusammenwachsen“



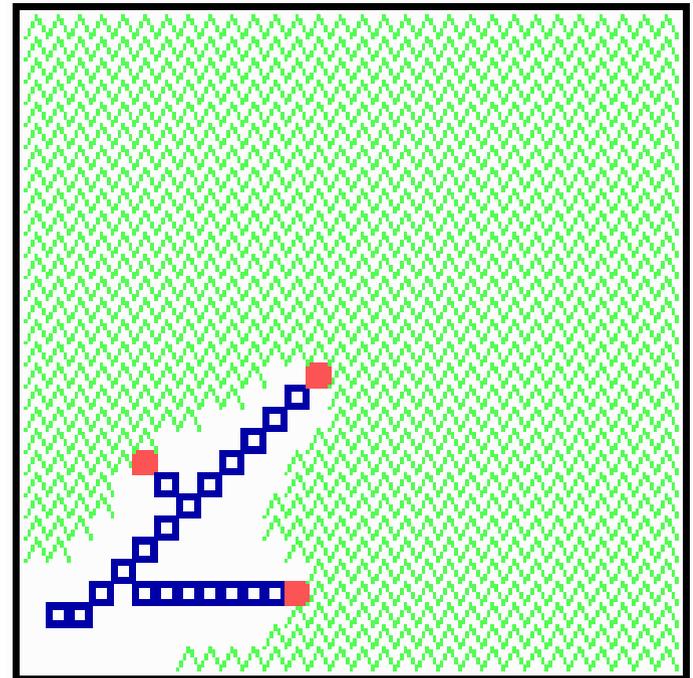
Zweidimensionale Muster

- Beispiel: Astwachstum am Süßwasserpolypen
- Substrat nötig, Fluktuation („Samen“) startet für Zellwachstum
- Wachstum geht zur höchsten Substrat-Konzentration
- Inhibitor zieht weiter mit Aktivator
- Ist Aktivator weit genug entfernt, kann ein Abzweig entstehen, da der Inhibitor ebenfalls fehlt
- Zweig-Wachstum wieder zur höchsten Substrat-Dichte
- Wachstum geht weiter, bis Substrat aufgebraucht ist
- Kein „zusammenwachsen“



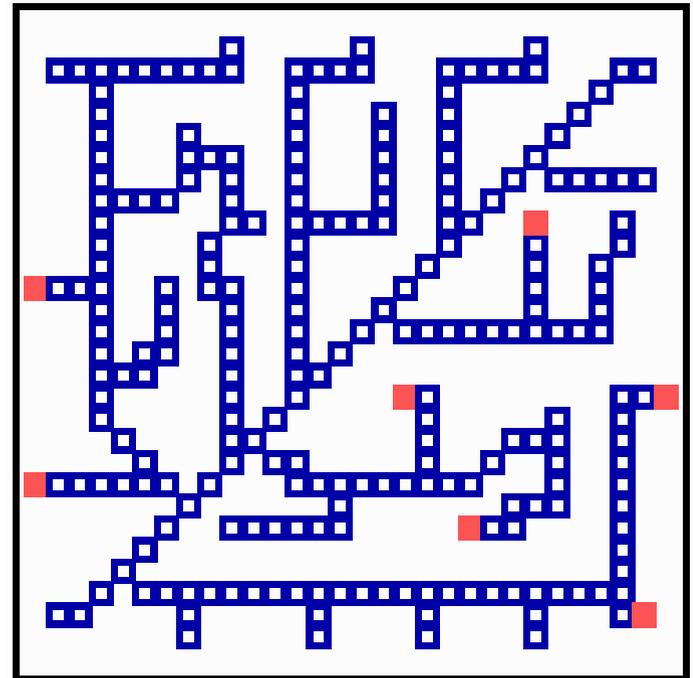
Zweidimensionale Muster

- Beispiel: Astwachstum am Süßwasserpolyphen
- Substrat nötig, Fluktuation („Samen“) startet für Zellwachstum
- Wachstum geht zur höchsten Substrat-Konzentration
- Inhibitor zieht weiter mit Aktivator
- Ist Aktivator weit genug entfernt, kann ein Abzweig entstehen, da der Inhibitor ebenfalls fehlt
- Zweig-Wachstum wieder zur höchsten Substrat-Dichte
- Wachstum geht weiter, bis Substrat aufgebraucht ist
- Kein „zusammenwachsen“



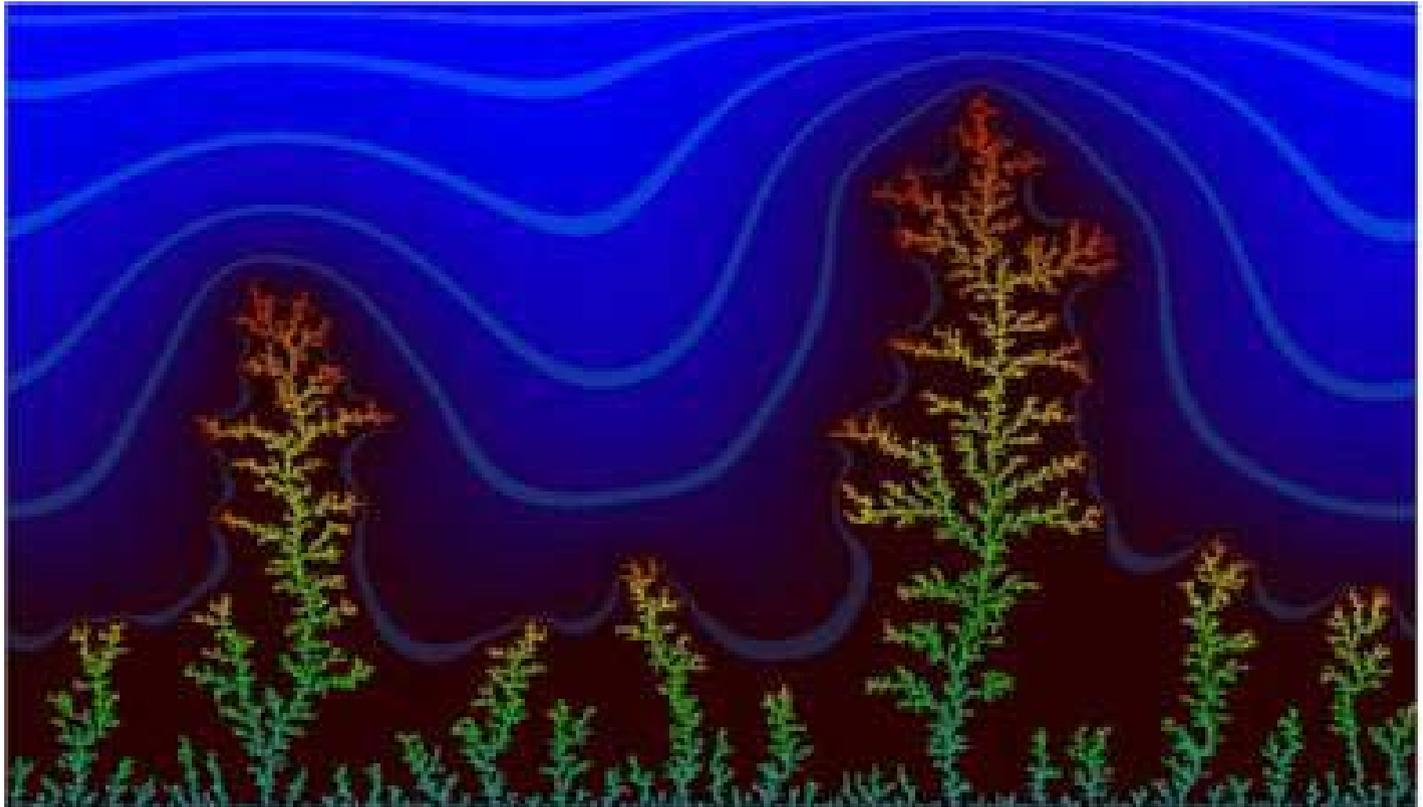
Zweidimensionale Muster

- Beispiel: Astwachstum am Süßwasserpolypen
- Substrat nötig, Fluktuation („Samen“) startet für Zellwachstum
- Wachstum geht zur höchsten Substrat-Konzentration
- Inhibitor zieht weiter mit Aktivator
- Ist Aktivator weit genug entfernt, kann ein Abzweig entstehen, da der Inhibitor ebenfalls fehlt
- Zweig-Wachstum wieder zur höchsten Substrat-Dichte
- Wachstum geht weiter, bis Substrat aufgebraucht ist
- Kein „zusammenwachsen“



Zweidimensionale Muster

- Simulation versus Beobachtung: Wachstum von ZnSO_4
- Dendritische Ablagerung simulierbar durch Zelluläre Automaten

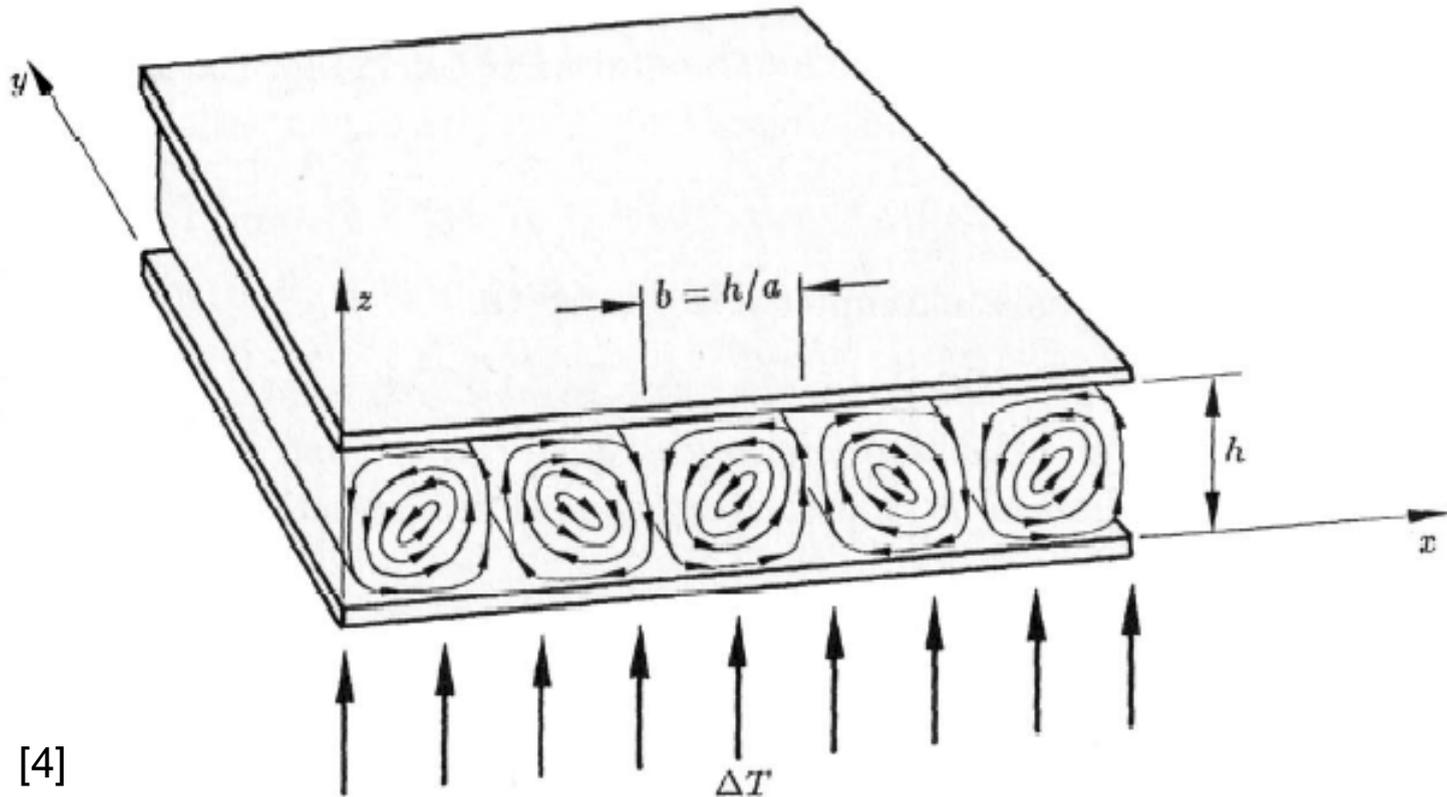


Das Bénard-Experiment

- Temperaturgradient sorgt für Wärmetransport

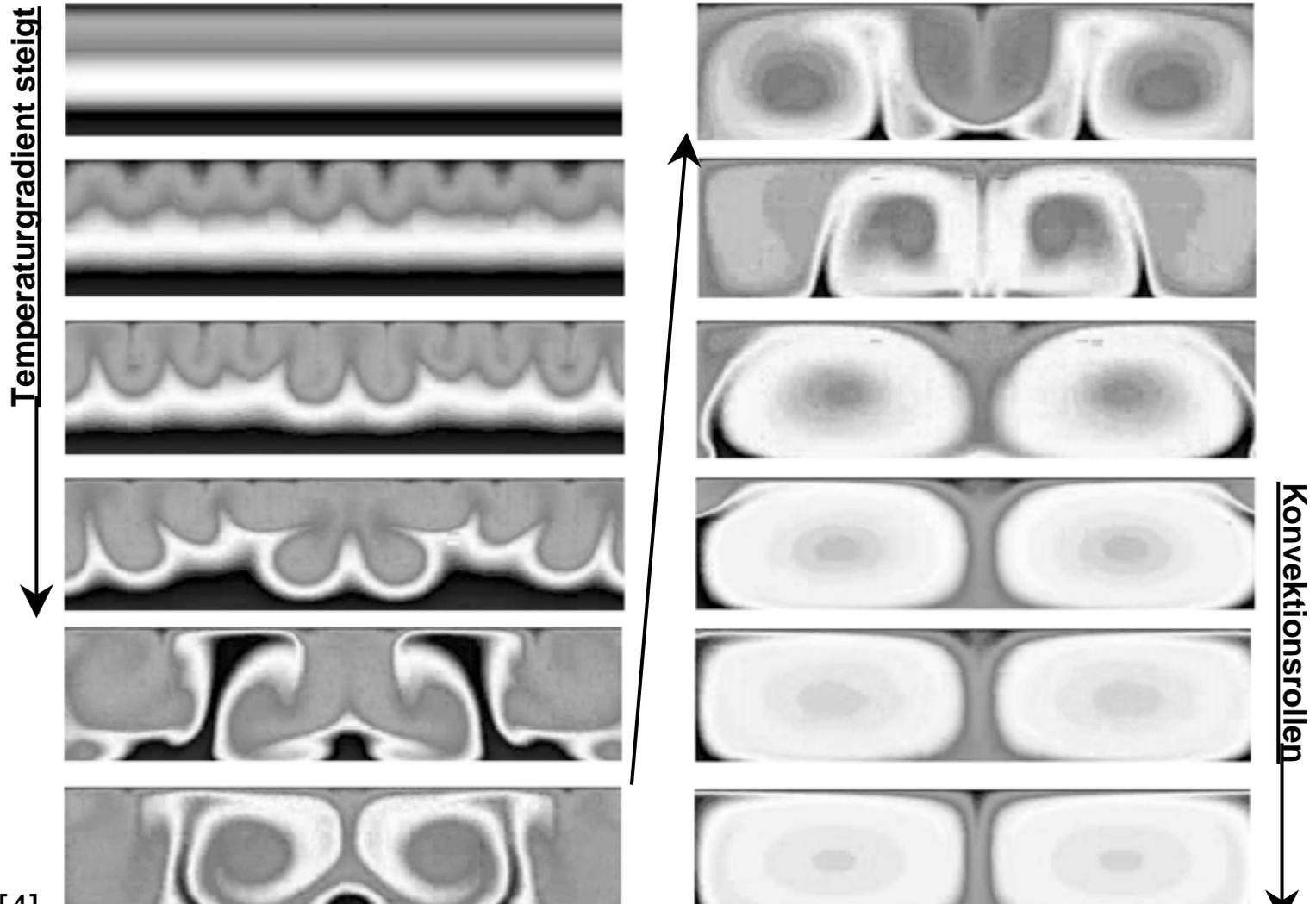
Das Bénard-Experiment

- Temperaturgradient sorgt für Wärmetransport
- Viskosität der Flüssigkeit bremst Konvektion



Das Bénard-Experiment

- Kritischer Temperaturgradient notwendig für ein Umschlagen



Das Bénard-Experiment

- Aus: Naviér-Stokes-Gleichung, Bewegungsgleichungen, Kontinuitätsgleichung und Wärmeleitungs-Gleichung.

- Boussinesq-Approximation: $\rho = \rho_0(1 - \alpha(T - T_0))$

(mit α als thermischen Ausdehnungskoeffizient)

Alle anderen Materialparameter konstant.

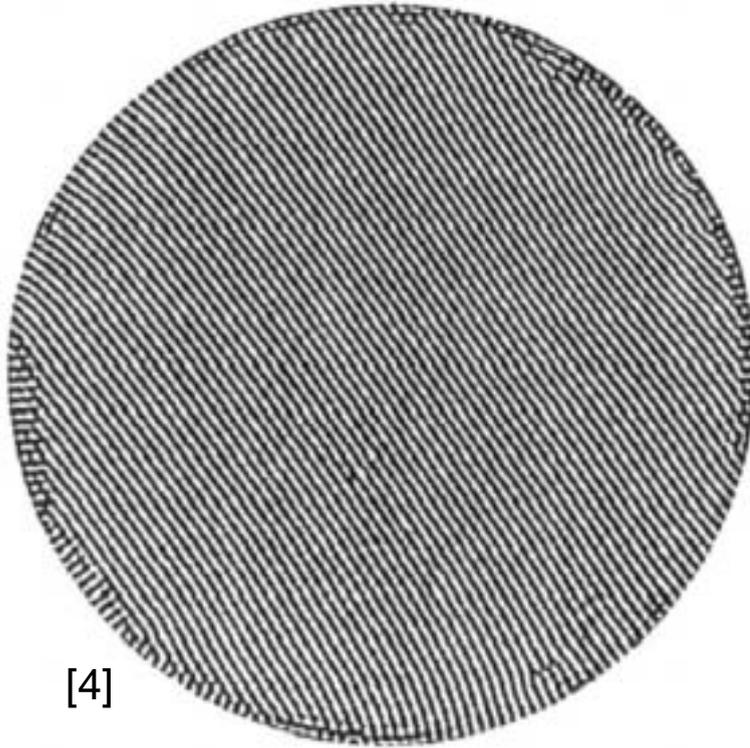
- Man erhält mit weiteren Näherungen und Vereinfachungen die spezielle Navier-Stokes-Gleichung:

$$\rho_0 \frac{\partial u_i}{\partial t} + \rho_0 \left(u_j \frac{\partial}{\partial x_j} \right) u_i = - \frac{\partial}{\partial x_i} p + q \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_i \partial x_i} + g_i (\rho - \rho_0)$$

(u: innere Energie q: transportierte Wärmemenge g: Gravitation)

Das Bénard-Experiment

- Damit lassen sich die Konvektionsrollen erklären:



[4]

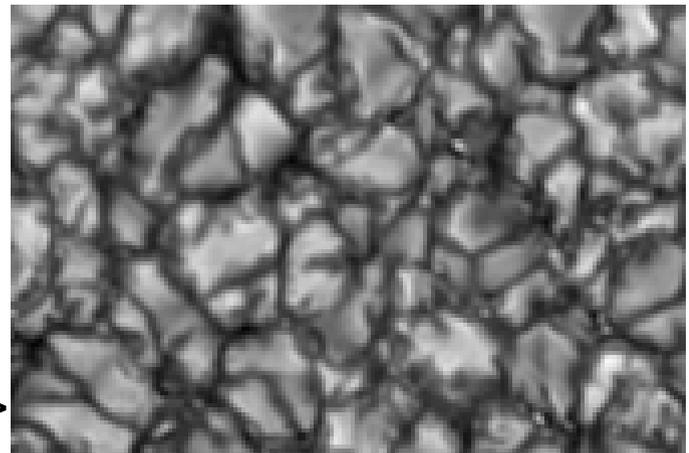
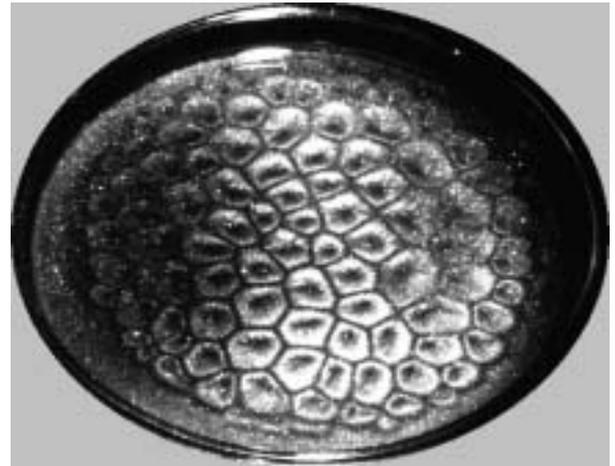
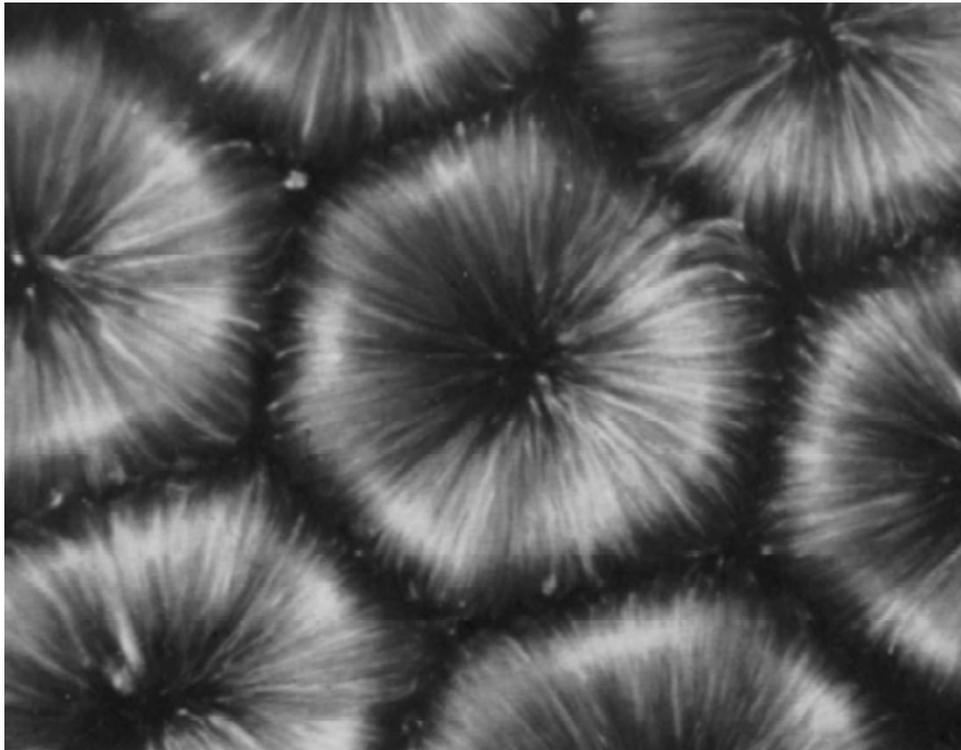
laminare Konvektionsrollen



Chaotisch bei höherem T.-Gradienten

Das Bénard-Experiment

- Offene Randbedingungen => Hexagonale Konvektionszellen



[4]

Entspricht rein qualitativ den Konvektions-Granulen der Sonne =>

Komplexe Ginzburg-Landau-Gleichung (CGLE)

- Allgemeine Formulierung des Problems:

$$\partial X_i(\vec{r}, t) / \partial t = F_i(\{\nabla^k X_j\}, \{X_j\}, \lambda)$$

Komplexe Ginzburg-Landau-Gleichung (CGLE)

- Allgemeine Formulierung des Problems:

$$\partial X_i(\vec{r}, t) / \partial t = F_i(\{\nabla^k X_j\}, \{X_j\}, \lambda)$$

- Vereinfacht: $d\vec{X}(t) / dt = \vec{F}(\vec{X}, \lambda)$

- Störungsrechnung: $\vec{X}(t) = \vec{X}_s + \vec{x}(t)$ mit $F(\vec{X}_s, \lambda) = 0$

\vec{X}_s : Ruhezustand + $\vec{x}(t)$: kleine Störung

- Taylor-Entwicklung:

$$\frac{d\vec{x}(t)}{dt} = \underbrace{L(\lambda) \cdot \vec{x}}_{\text{Linearteil}} + \underbrace{\bar{h}(\vec{x}, \lambda)}_{\text{Nichtlinearität}} \stackrel{1.\text{Ordnung}}{=} L(\lambda) \cdot \vec{x}$$

Komplexe Ginzburg-Landau-Gleichung (CGLE)

- Differentialgleichung: $\frac{d\vec{x}(t)}{dt} \stackrel{1. \text{ Ordnung}}{=} L(\lambda) \cdot \vec{x}$

- Lösungs-Ansatz: $\vec{x}(t) = \vec{u} \cdot e^{\omega t}$

- => Eigenwertgleichung: $L(\lambda) \cdot \vec{u} = \omega \cdot \vec{u}$

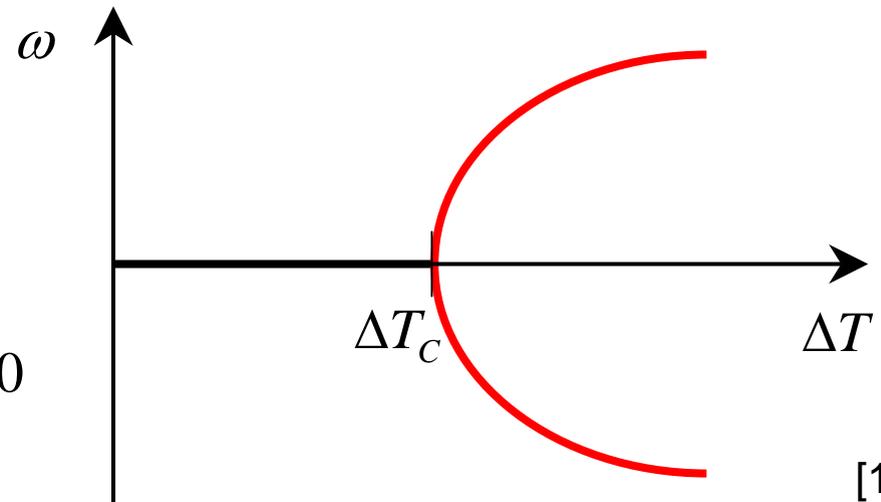
- Stabilitätsbedingung:

$$\operatorname{Re}(\omega) > 0 \Rightarrow \textit{instabil}$$

$$\operatorname{Re}(\omega) < 0 \Rightarrow \textit{stabil}$$

- Wenn $\operatorname{Re}(\omega_c) = \operatorname{Re}(\omega(\lambda_c)) = 0$

=> Bifurkation



Komplexe Ginzburg-Landau-Gleichung (CGLE)

- Allgemeine Ausgangs-Gl.: $\frac{\partial \bar{x}(\vec{r}, t)}{\partial t} = L(\lambda, \nabla) \cdot \bar{x} + \bar{h}(\bar{x}, \nabla, \lambda)$
- Entwicklung um kritischen Punkt: $\lambda - \lambda_c \mapsto \varepsilon \gamma_1 + \varepsilon^2 \gamma_2 + \dots$
- Taylor-Entwicklung für: $\bar{x}(\vec{r}, t) \mapsto \varepsilon \bar{x}_1 + \varepsilon^2 \bar{x}_2 + \dots$
- und: $\frac{\partial}{\partial t} \mapsto \text{Im}(\omega_c) \frac{\partial}{\partial T} + \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial \tau}$
- In Systemen großer räumlicher Ausdehnung: $\frac{\partial}{\partial r} \mapsto \varepsilon \frac{\partial}{\partial \rho} + \dots$
- man erhält:

$$\frac{\partial \bar{x}(\vec{r}, t)}{\partial t} = L_0(\lambda) \cdot \bar{x} + L_1(\lambda) \cdot \Delta \bar{x} + \bar{h}(\bar{x}, \lambda)$$

Komplexe Ginzburg-Landau-Gleichung (CGLE)

- Einsetzen und Koeffizientenvergleich in Ordnungen von ε :

$$O(\varepsilon) \Rightarrow \left(\operatorname{Im}(\omega_c) \frac{\partial}{\partial T} - L_0(\lambda_c) \right) \bar{x}_1 = 0$$

$$\Rightarrow \bar{x}_1 = c(\tau, \rho) \cdot \bar{u} \cdot e^{iT} + cc \text{ (analog zur linearen Analyse)}$$

$$O(\varepsilon^2) \Rightarrow \left(\operatorname{Im}(\omega_c) \frac{\partial}{\partial T} - L_0(\lambda_c) \right) \bar{x}_2 = \frac{1}{2} h_{xx} \cdot x_1 x_1$$

$$\Rightarrow \bar{x}_2 = c^2 \cdot \bar{p}_2 \cdot e^{i2T} + cc + |c^2| \cdot \bar{p}_0$$

- In dritter Ordnung erhält man inhomogenes Gleichungssystem
- Lösbarkeitskriterium mittels „Satz von Fredholm“ (kompliziert)

Komplexe Ginzburg-Landau-Gleichung (CGLE)

- Man erhält schließlich (mit $\varepsilon \cdot c \mapsto z$):

$$\frac{\partial z}{\partial t} = (\lambda - \lambda_c)z + (1 + i\alpha)\Delta z + (1 + i\beta)|z|^2 z$$

- Die „Komplexe Ginzburg-Landau-Gleichung“ (CGLE)
- Höhere Ordnungen von ε sind nicht enthalten.
- Entwicklung in ε auch für Bénard-Zelle möglich:
=> „Newell-Whitehead-Segel-Gleichung“ (NWSE)

Die BZ-Reaktion

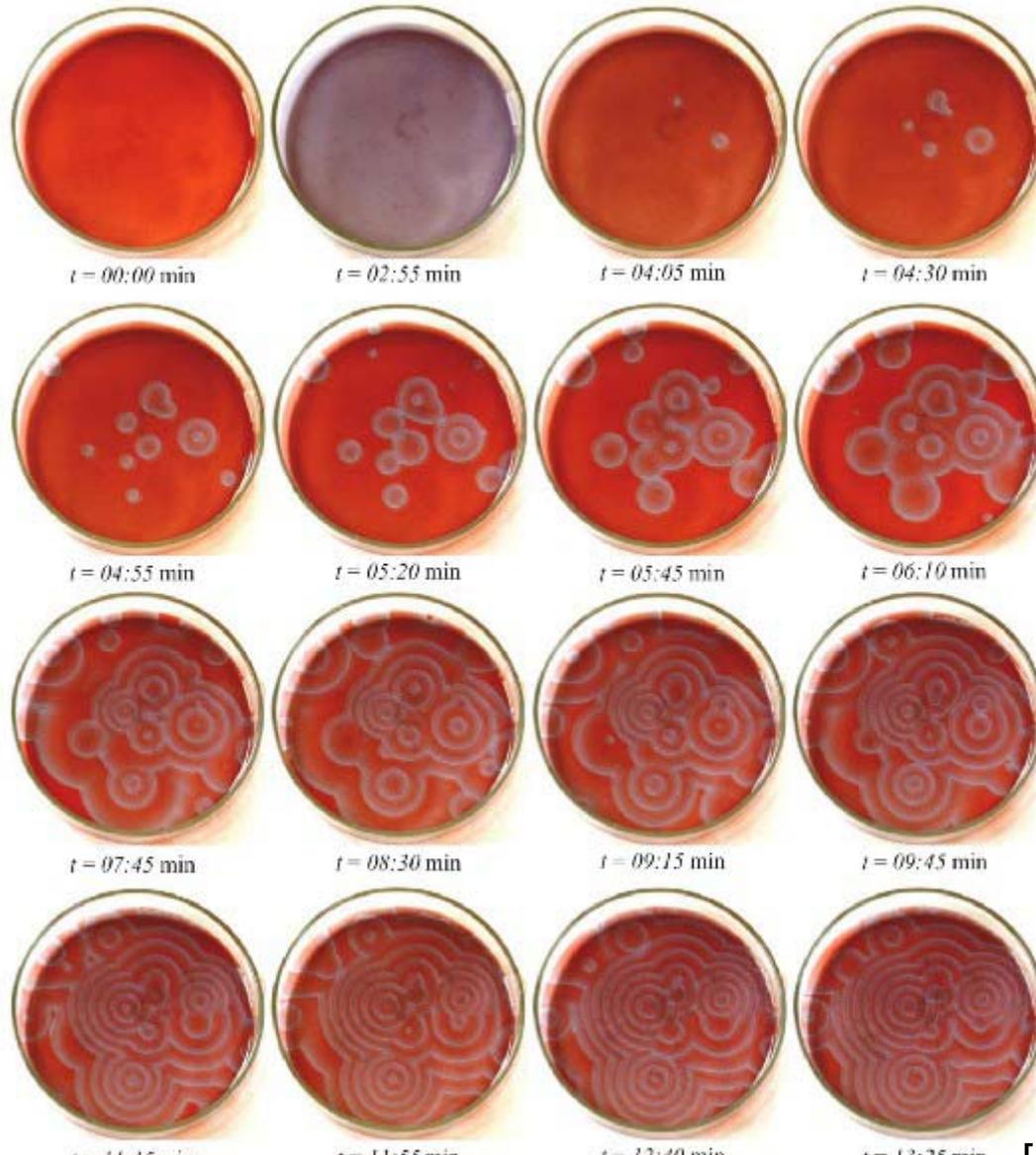
- Oszillierende Reaktion
in einer Petrischale:
- Bromid und Cer $^{3+}/^{4+}$

Die BZ-Reaktion

- Oszillierende Reaktion
in einer Petrischale:
- Bromid und Cer $^{3+}/^{4+}$
- Inhibitor: Bromid
- Reaktion 1:
verbraucht Bromid
- Reaktion 2:
oxidiert Ce^{3+}
(Farbwechsel)
- Reaktion 3:
bildet Ce^{4+} und
Bromid zurück

Die BZ-Reaktion

- Oszillierende Reaktion in einer Petrischale:
- Bromid und $\text{Ce}^{3+/4+}$
- Inhibitor: Bromid
- Reaktion 1: verbraucht Bromid
- Reaktion 2: oxidiert Ce^{3+} (Farbwechsel)
- Reaktion 3: bildet Ce^{4+} und Bromid zurück

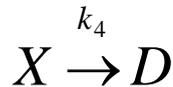
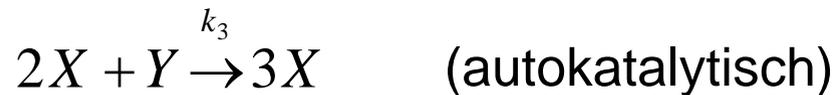
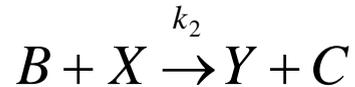
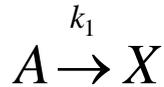


Reaktions-Diffusions-Gleichungen

- Allgemeine Formulierung für oszillierende Reaktionen:

Reaktions-Diffusions-Gleichungen

- Allgemeine Formulierung für oszillierende Reaktionen:



- „Brüsselator“-Modell (Prigogine, Lefever, Nicolis, Brorckmans: 1968-1988)
- Quelle der Nicht-Linearität: autokatalytische Reaktion
- Reaktionsgeschwindigkeiten $k_1 \dots k_4 \Rightarrow$ Ratengleichungen

Reaktions-Diffusions-Gleichungen

- Ratengleichungen:
$$\begin{aligned} dX/dt &= k_1 A - k_2 BX + k_3 X^2 Y - k_4 X \\ dY/dt &= k_2 BX - k_3 X^2 Y \end{aligned}$$

- Allgemein, mit Diffusionsterm (D: Diffusionskonstante):

$$\frac{dX}{dt} = F(X, Y, \lambda) + D \cdot \Delta X$$

$$\frac{dY}{dt} = \dots \text{ (analog)}$$

- Lösung nur numerisch durch Zelluläre Automaten
- Zum Vergleich:
Bénard-Zelle beschreibbar
durch Lorenz-Gleichungen:

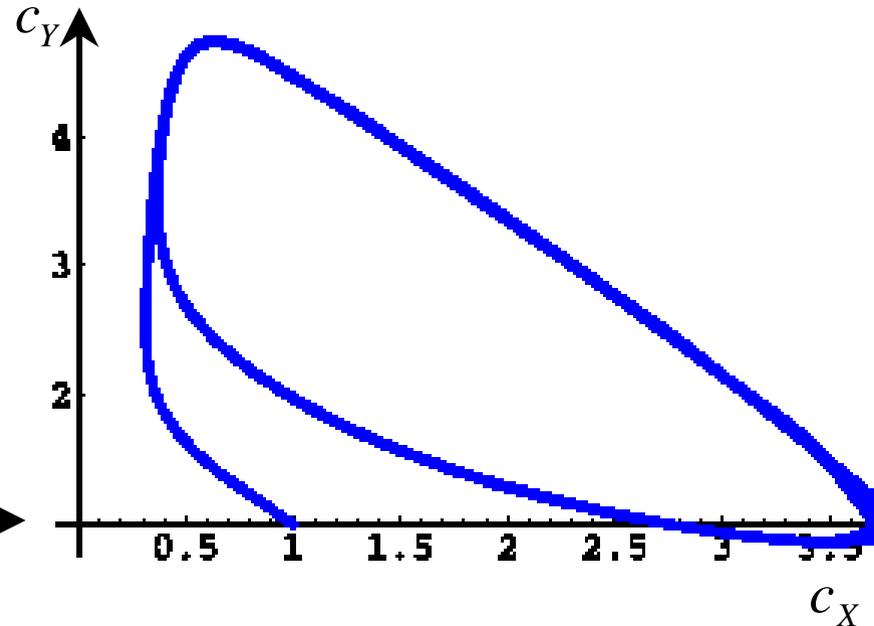
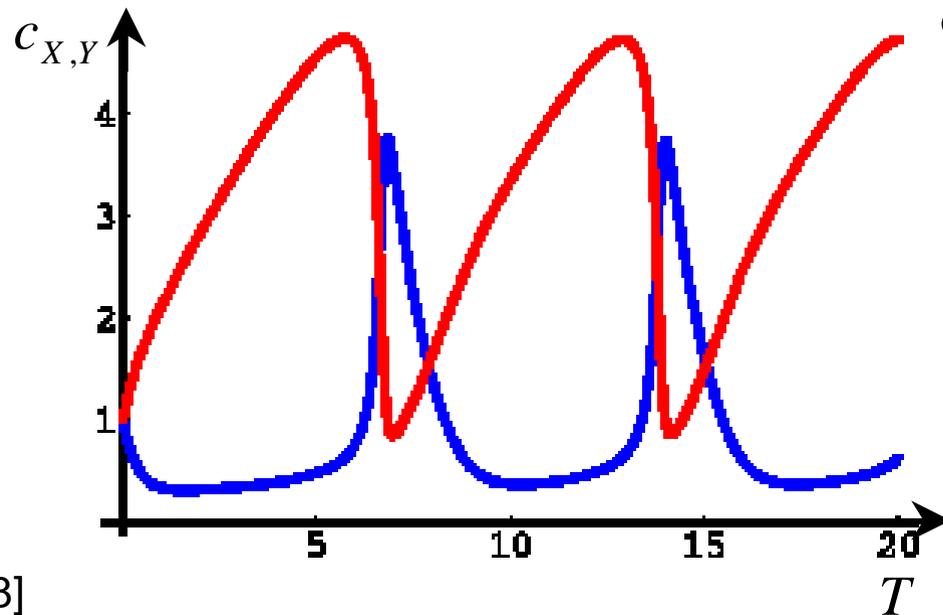
$$\begin{aligned} dX/dt &= \sigma(X - Y) \\ dY/dt &= RX - Y - XZ \\ dZ/dt &= XY - bZ \end{aligned}$$

Simulation: Der Brüsselator

- Ratengleichungen:
$$dX/dt = k_1A - k_2BX + k_3X^2Y - k_4X$$
$$dY/dt = k_2BX - k_3X^2Y$$

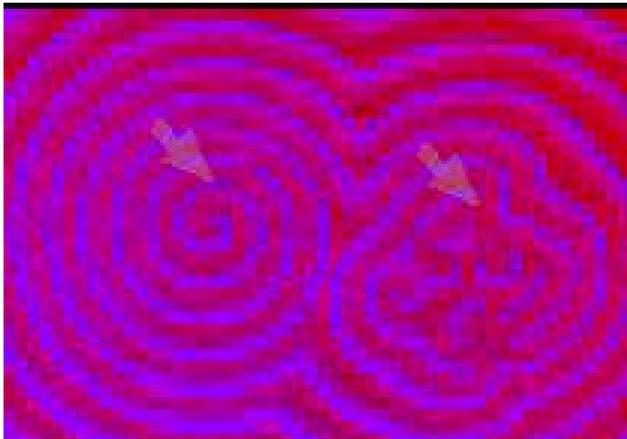
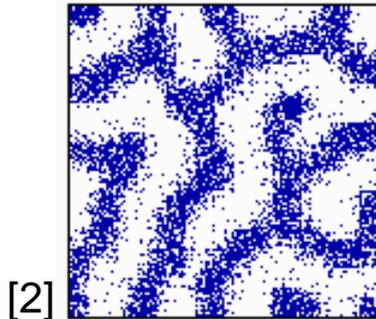
Simulation: Der Brüsselator

- Ratengleichungen:
$$dX/dt = k_1 A - k_2 B X + k_3 X^2 Y - k_4 X$$
$$dY/dt = k_2 B X - k_3 X^2 Y$$
- Numerische Simulation: ($A=1, B=3, X_0=Y_0=1, k_1=\dots=k_4=1$)

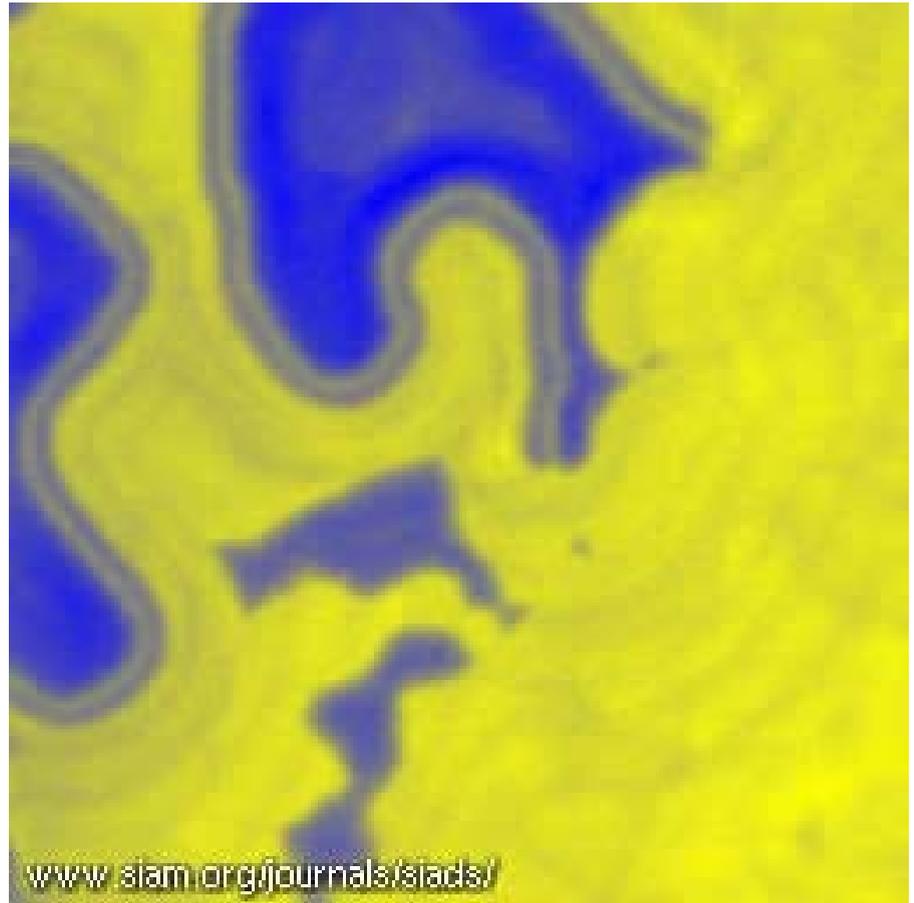


Simulation: Der Brüsselator

- Die BZ-Reaktion Simulation versus Beobachtung:



- Spiralwellen und Chaotische Oszillationen

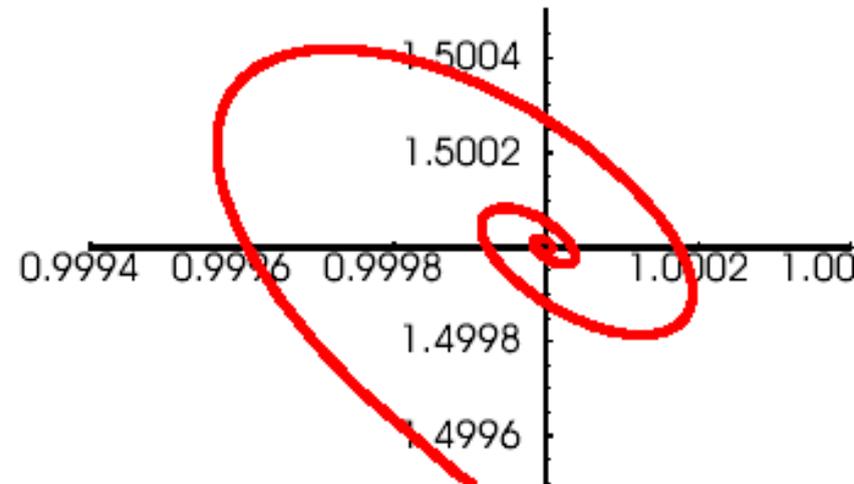
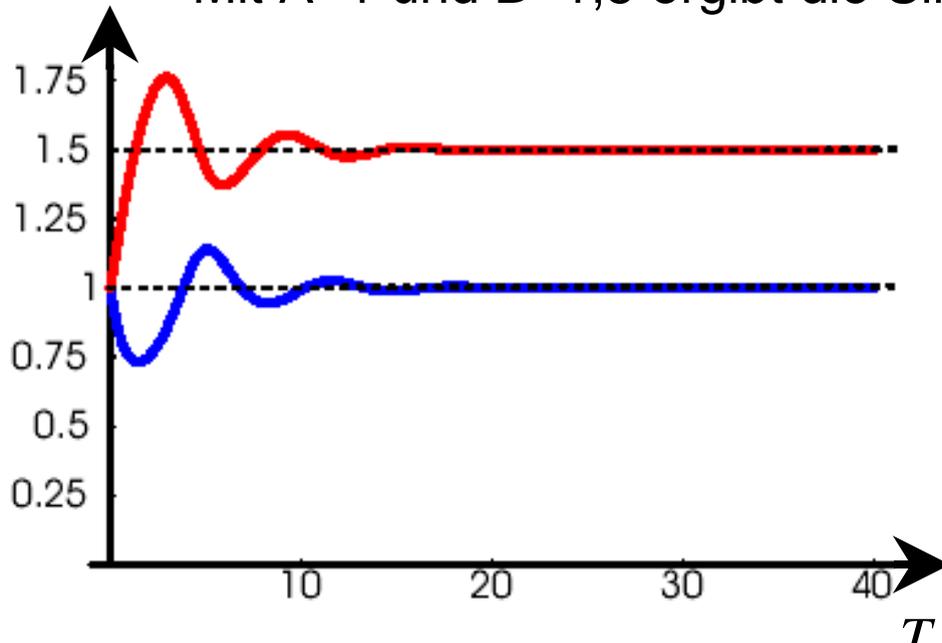


Simulation: Der Brüsselator

- Stabilitätsbetrachtung des Brüsselators:
- Stationäre Zustände: $(dX/dt = dY/dt = 0)$

$$X_s = \frac{k_1}{k_4} \cdot A \quad Y_s = \frac{k_4 k_2}{k_3 k_1} \cdot \frac{B}{A}$$

- Mit $A=1$ und $B=1,5$ ergibt die Simulation:



Simulation: Der Brüsselator

- Stabilitätmatrix:
$$\begin{pmatrix} k_2 B - k_4 & k_3 X_S^2 \\ -k_2 B & -k_3 X_S^2 \end{pmatrix}$$

- Berechne Eigenwerte:

$$\lambda_{\pm} = \frac{1}{2} \left(\underbrace{k_2 B - k_3 X_S^2 - k_4}_{\text{Realteil}} \pm \sqrt{\underbrace{(k_3 X_S^2 + k_4 - k_2 B)^2 - 4k_3 k_4 X_S^2}_{\text{Imaginärteil}}} \right)$$

- Instabil für:

$$B > \frac{k_4}{k_2} + \frac{k_3}{k_2} \cdot X_S^2 = \frac{k_4}{k_2} + \frac{k_3}{k_2} \frac{k_1^2}{k_4^2} \cdot A^2$$

Weitere Muster in der Natur

Weitere Muster in der Natur

- Schneckenmuster:
$$\frac{\partial a}{\partial t} = s \left(\frac{a^2}{b} + b_a \right) - r_a a + D_a \frac{\partial^2 a}{\partial x^2}$$
$$\frac{\partial b}{\partial t} = s a^2 - r_b b + D_b \frac{\partial^2 b}{\partial x^2}$$

- Aktivator, Inhibitor, Diffusionsterme, Zerfallsraten, Grundproduktion



[Amoria dampieria]



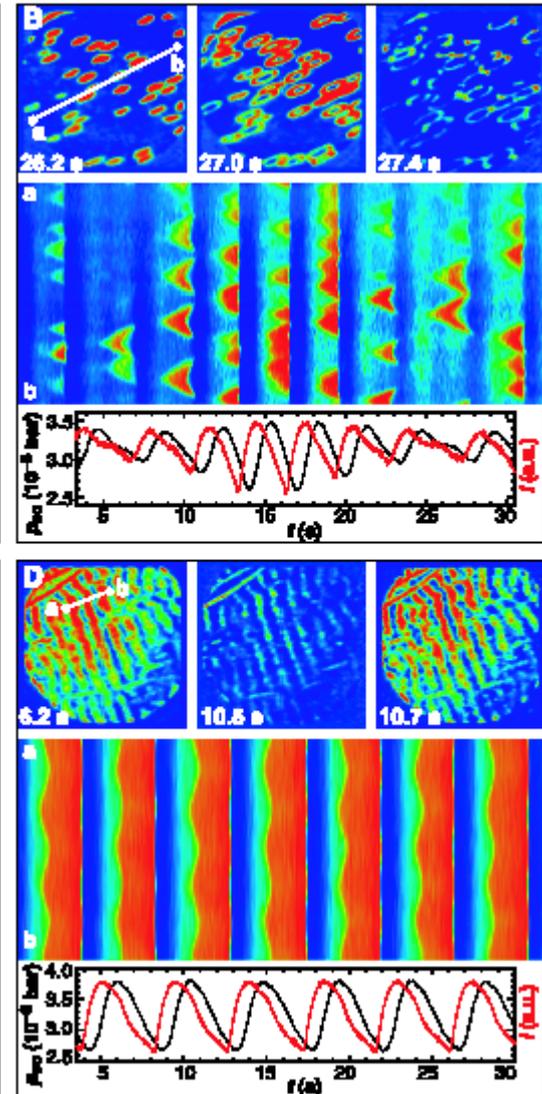
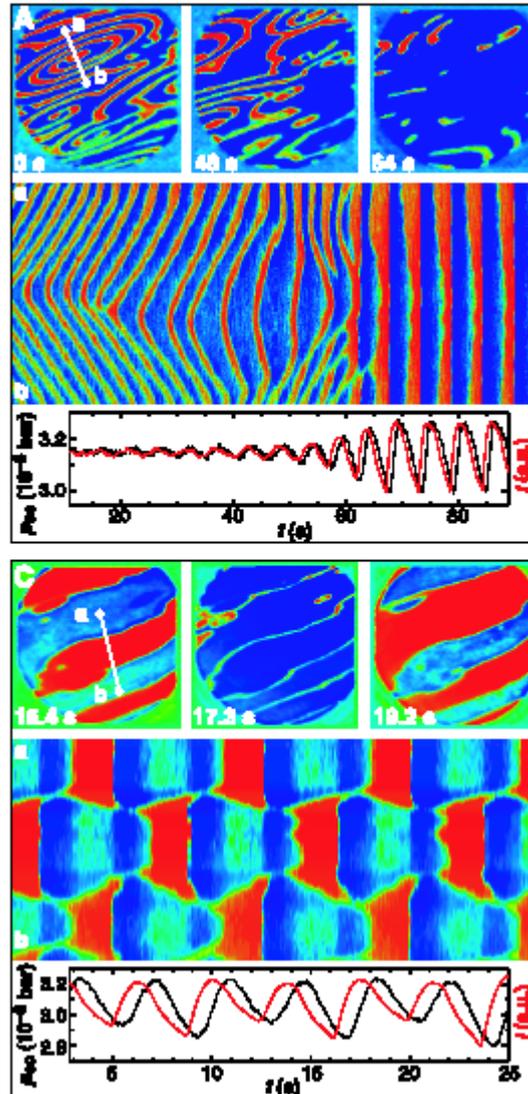
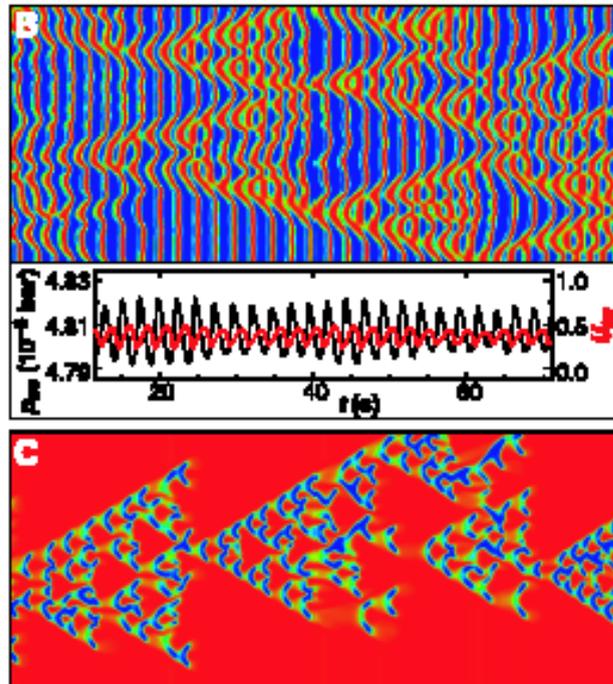
[Natica stercusmuscarum]

Weitere Muster in der Natur

- Musterbildung:

Katalytische
CO-Oxidation

[5]



Zusammenfassung

- Wir sahen Muster in: der Natur, der Physik und der Chemie
- Theoretische Modelle bieten eine gute Beschreibung
- Simulationen zeigen teilweise gute Übereinstimmungen zwischen Theorie und der Beobachtung
- Trotz allem gibt es bisher keine eindeutigen Beweise, daß die Muster in der Natur tatsächlich durch diejenigen Prozesse entstehen, die in den theoretischen Modellen zugrunde gelegt worden sind.
- Es gibt noch viel zu tun...

Literatur

- [1] **G. Nicolis**: „Introduction to nonlinear science“
1995, Cambridge University Press
- [2] **H. Meinhardt**: „Biological Pattern Formation“
http://www.biologie.uni-hamburg.de/b-online/e28_1/pattern.htm
- [3] **P. Prusinkiewicz**: „Musterbildung“
<http://www.biologie.uni-hamburg.de/b-online/d28/28b.htm>
- [4] **E. Jakobi**: Vortrag „Selbstorganisation“
2003, <http://prp0.prp.physik.tu-darmstadt.de/~ejakobi/rbkonv.pdf>
- [5] **M. Kim**, M. Bertram, H. Rotermund: „CO Oxidation“
2001, Science, 292:1357-1359
- [6] **Simulations-Software**: „The Virtual Laboratory“
http://algorithmicbotany.org/virtual_laboratory/
- [7] **P. Meakin**: „A new model for biological pattern formation“
1986, Journal of Theoretical Biology, 118:101-113
- [8] **J. Krieger**: „Reaktions-Diffusions-Systeme“
<http://jkrieger.de/bzr/inhalt.html>