

Modellierung der Dynamik aktiver Teilchenmodelle in komplexer Umgebung und der universellen, kollektiven Dynamik gekoppelter, aktiver Spezies

Von der Universität Bayreuth
zur Erlangung des Grades eines
Doktors der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.)
genehmigte Abhandlung

von
Andre Förtsch
aus Kronach

1. Gutachter: Prof. Dr. Walter Zimmermann
2. Gutachter: Prof. Dr. Stephan Gekle

Tag der Einreichung: 19. August 2022
Tag des Kolloquiums: 27. Januar 2023

Zusammenfassung

Aufgrund ihrer Fähigkeit, externe Energie in gerichtete Bewegung umzuwandeln, zeigen aktive Materie und Mikroschwimmer faszinierende physikalische Eigenschaften und Effekte, die über das Verhalten und die Dynamik passiver Teilchen hinausgehen. Die Dynamik der aktiven Objekte kann dabei durch hydrodynamische und kontaktbasierte Wechselwirkung mit der Umgebung beeinflusst werden und zudem durch verschiedene Arten der Taxis geprägt sein. Sie reagieren beispielsweise auf externen Lichteinfall, chemische Botenstoffe oder die Richtung der Gravitation. In dieser Arbeit wird die komplexe Dynamik aktiver Teilchen mit numerischen Modellen sowie durch Methoden der nichtlinearen Physik und Strukturbildung untersucht.

Der erste Abschnitt dieser Arbeit behandelt das Verhalten von Modellen von Mikroschwimmern, wie die Alge *Chlamydomonas reinhardtii*, bei der Durchquerung einer komplexen Umgebung, bestehend aus einem Hindernisgitter aus mikroskopischen Zylindern. In dreidimensionalen Simulationen basierend auf der Lattice-Boltzmann Methode sowie einem Dissipativen-Kollisions-Modells wird gezeigt, dass die numerischen Schwimmermodelle mit Berücksichtigung der statistischen Natur der Mikroschwimmer eine systematische, nichtlineare Ablenkung bei der Durchquerung des Hindernisgebiets erfahren. Diese systematische Ablenkung wird auch in Vergleichsexperimenten von der Kooperationsgruppe in Grenoble gefunden. Durch die Möglichkeit, in den Simulationen die Einflussfaktoren der Verteilungsstatistik und der hydrodynamischen Wechselwirkung separat kontrollieren zu können, kann gezeigt werden, dass der nicht deterministische Anteil der intrinsischen Schwimmcharakteristik den Algen bei dem Durchqueren entlang des Lichteinfalls hilft und die Ablenkung abschwächt. Zudem wird gezeigt, dass die hydrodynamische Wechselwirkung mit zunehmender Schwimmerkonzentration wichtig wird und sich wie eine zusätzliche Rauschquelle verhält, was ebenfalls zu einem Abschwächen der Ablenkung führt.

Im zweiten Abschnitt wird das kollektive Verhalten zweier interagierender Gruppen aktiver Spezies untersucht. Als Beispiel solcher aktiver Spezies dient in dieser Arbeit ein Modell chemotaktisch navigierender Zellen mit Quorum sensing, welche durch Signalfelder miteinander gekoppelt sind. Eine wichtige Eigenschaft ist hierbei die Erhaltung der

Teilchenzahl jeder Spezies. Je nach wechselseitiger Kopplung zeigen zwei interagierende Spezies sowohl stationäre als auch oszillatorische Entmischungsvorgänge. In dieser Arbeit werden die allgemeinen, generischen Transportgleichungen, welche Phasenseparation zweier gekoppelter, erhaltener Felder in der Nähe des Einsatzpunktes beschreiben, formuliert. Durch eine adiabatische Reduktion können die Signalfelder des gekoppelten Zellmodells eliminiert und das System auf die allgemeinen Transportgleichungen zurückgeführt werden. Im stationären Fall ist die beschreibende Ordnungsparametergleichung vom sogenannten Cahn-Hilliard Typ. Um das oszillatorische Komplement zu bestimmen, wird eine verallgemeinerte Störungsrechnung entwickelt. Mit dieser ist es möglich, aus den generischen Transportgleichungen die universelle Ordnungsparametergleichung für oszillatorische Entmischungsvorgänge erhaltener Systeme nahe des Übergangs der Instabilität abzuleiten. Hierbei kann die Verknüpfung der Parameter von dem ursprünglichen chemotaktischen System bis zur Ordnungsparametergleichung gegeben werden. Die Lösungseigenschaften der universellen Transportgleichung sowie der Ordnungsparametergleichung werden für typische Szenarien untersucht.

Abstract

Due to their ability to convert external energy into directed motion, active matter and microswimmers show fascinating physical properties and effects which go beyond the behavior and dynamics of passive particles. The dynamics of those active objects can be affected by hydrodynamic and contact-based interactions with their environment as well as different types of taxis. For example, they react to external sources of light, chemical messengers or the direction of gravity. In the present work, the complex dynamics of active particles is investigated with numerical models and methods of nonlinear physics and pattern formation.

The first part of this thesis addresses the behavior of microswimmer models such as the algae *Chlamydomonas reinhardtii* when crossing a complex environment, built up of microscopic cylindrical obstacles. It is shown in three dimensional numerical simulations based on the Lattice-Boltzmann method as well as a dissipative-collision model that model particles which take into account the statistical nature of the swimmer experience a systematic nonlinear deflection when crossing the obstacle region. This systematic deflection is also found in an experimental setup by our cooperation group in Grenoble. Due to the possibility of controlling different elements such as the statistical distribution or the hydrodynamic interaction separately, it can be shown that the non-deterministic part of the intrinsic swimming-characteristics helps the algae to cross the obstacle region and mitigates the deflection. Additionally, it is demonstrated that the influence of hydrodynamic interaction increases with the number of interacting swimmers. It acts like an additional source of noise and also mitigates the deflection.

In the second part of this thesis, the collective behavior of two interacting groups of active species is investigated. As example for such active species, the model of chemotactically navigating cells with quorum sensing, coupled by signaling fields, is used in this work. An important feature of this system is the conservation of the particle number per species. Depending on the respective coupling, two interacting species can show stationary and oscillatory phase separation. In this thesis, the general transport equations describing phase separation of two coupled, conserved fields near the onset of instability are formulated.

By an adiabatic reduction, the two messenger fields of the cell model can be eliminated and the system can be linked to the general transport equations. In the stationary case, the describing order parameter equation is of the so-called Cahn-Hilliard type. To identify the oscillatory complement, a generalized perturbation theory is developed. Starting with the transport equations, the developed scheme allows to determine the universal order parameter equation for oscillatory phase separation in conserved systems near the threshold of instability. During this process, the link between the parameters of the initial chemotactic system up to the order parameter equation can be given. The properties of the solutions for the universal transport equations as well as the order parameter equation are investigated for typical scenarios.

Inhaltsverzeichnis

1. Einführung	1
I. Aktive Mikroschwimmer in der Einteilchenbeschreibung	5
2. Einleitung	7
3. Grundlagen und theoretischer Hintergrund	11
3.1. Bewegungsgleichung für Flüssigkeiten	11
3.2. Boltzmann Gleichung und kinetische Gastheorie	14
3.3. Eigenschaften von Mikroschwimmern	16
3.3.1. Bewegung bei kleinen Reynoldszahlen	16
3.3.2. Beeinflussung der Dynamik von Mikroschwimmern durch Hinder- nisse	18
4. Methoden und Modelle	21
4.1. Lattice-Boltzmann Methode	21
4.1.1. Allgemeines	21
4.1.2. Randbedingungen	24
4.1.3. Externe Kräfte	28
4.2. Mikroschwimmer Chlamydomonas reinhardtii	30
4.2.1. Allgemeines	30
4.2.2. Eigenschaften der im Experiment untersuchten Chlamydomonas reinhardtii	34
4.2.3. Numerische Modellierung der Chlamydomonas reinhardtii	34
5. Mikroschwimmer in komplexer Umgebung	41
5.1. Einleitung und Motivation	41
5.2. Aufbau des untersuchten Systems	43
5.3. Experimentelle Eigenschaften	44

5.4.	Numerische Beschreibung des Systems	47
5.4.1.	Ablenkung der Mikroschwimmer	47
5.4.2.	Deterministisches Modell für Streuung im komplexen Medium . . .	48
5.4.3.	Einfluss der Phototaxis auf die Ablenkungscharakteristik	51
5.4.4.	Einfluss der Hydrodynamik auf die numerische Ablenkungscharakteristik	53
5.5.	Diskussion und Fazit	57
II.	Aktive Mikroschwimmer in der Kontinuumsbeschreibung	61
6.	Einleitung	63
7.	Grundlagen	69
7.1.	Phasenseparation und die klassische Cahn-Hilliard-Gleichung	69
7.1.1.	Nichtoszillatorische Vergrößerungsphänomene der Klasse II_s^c . . .	70
7.2.	Beispiele von Erhaltungseigenschaften in Systemen aktiver Materie	73
7.2.1.	Aktive, Brownsche Teilchen in Kontakt	75
7.2.2.	Teilchen im verdünnten Limes unter Berücksichtigung von Taxis . .	76
7.2.3.	Adiabatische Reduktion	77
8.	Methoden	79
8.1.	Numerische Berechnungsmethoden	79
8.1.1.	Pseudo-Spektral Methode	80
8.1.2.	Zeitliche Integration	83
8.1.3.	Bestimmung der charakteristischen Länge	84
8.2.	Numerische Umsetzung	84
8.3.	Programm-Tests	85
8.3.1.	Cahn-Hilliard Gleichung	85
8.4.	Darstellung der Ergebnisse zweidimensionaler Datensätze	88
9.	Stationäre und oszillatorische Übergänge in gekoppelten Systemen	89
9.1.	Einleitung	89
9.2.	Gekoppelte Transport-Gleichungen für oszillatorische Phasenseparation . .	90
9.3.	Minimal Modell für (oszillatorische) Phasenseparation	97
9.3.1.	Einsatz der Phasenseparation im Minimal Modell (MiMo)	98
9.3.2.	Charakterisierung des dynamischen, nichtlinearen Verhaltens . . .	101
9.4.	Diskussion und Fazit	116

10. Cahn-Hilliard Modell für oszillatorische Phasenseparation	121
10.1. Einleitung	121
10.2. Analyse der linearisierten Transportgleichungen im oszillatorischen Fall . .	123
10.3. Kontrollparameterwahl	125
10.4. Spezielle Eigenschaften der gekoppelten Transportgleichungen für oszillatorische Übergänge	126
10.5. Vorüberlegungen für das Reduktionsschema	127
10.6. Reduktion auf die Ordnungsparametergleichung	128
10.6.1. Diskussion der Ordnungsparametergleichung (Gl. (10.23))	135
10.7. Ausgewählte Lösungsszenarien	138
10.7.1. Reduziertes Modell der Gl. (10.23)	138
10.7.2. Numerische Lösungen	145
10.8. Diskussion und Ausblick	158
11. Weitere Anwendungen des Reduktionsschemas	161
11.1. Beschreibung stationärer Übergänge der gekoppelten Transportgleichungen für oszillatorische Phasen-Separation (GTOPS)	161
12. Aktive Teilchen mit Kopplung durch Botenstoffe	167
12.1. Einleitung	167
12.2. Modell gekoppelter, chemotaktischer Spezies mit Quorum sensing	168
12.3. Einsatzpunkt der Typ II _o Phasenseparation	170
12.4. Verknüpfung des chemotaktischen Modells zu den verschiedenen Reduktionsebenen	174
12.5. Fazit	181
Literaturverzeichnis	183
Akronyme	205
III. Appendix	207
A. Simulation der Mikroschwimmer	209
Eigene Publikationen	213

1. Einführung

Das Regime von Teilchen auf mikroskopischen Längenskalen beeinflusst, häufig unbemerkt, unser alltägliches Leben und bestimmt die Abläufe in der uns umgebenden Natur. Die Komponenten unseres Körpers wie Neuronen, Körperzellen oder auch Bestandteile des Blutes wie rote Blutzellen sind ebenso in dieser Größenordnung zu finden wie Bakterien und Plankton [1–4].

Aufgrund ihrer Größe sind solche Objekte für das bloße Auge kaum sichtbar und blieben deshalb für eine lange Zeit unentdeckt. Die Entwicklung des Mikroskops im 16. Jahrhundert ermöglichte es, mikroskopische Objekte für das menschliche Auge sichtbar zu machen und gewährte Einblick in die Welt der Zellen und Bakterien [5–7]. In der Wissenschaft wurde das Mikroskop anfänglich eingehend für die Klassifikation und Beschreibung verschiedenster Objekte und Vorgänge verwendet, wobei es in den Gebieten der Biologie und Physik enorme Beiträge lieferte [6–8]. Es dauerte nicht lange bis es Einzug in die Medizin fand, wo es zur Erkennung von Krankheiten verwendet wurde und half, die Mechanismen des Körpers zu verstehen [6, 8].

Die wissenschaftlichen Anwendungen waren dabei jedoch aufgrund der schwierigen Handhabung auf diesen Längenskalen für eine lange Zeit durch passive Beobachtungen geprägt. Dabei ist die Möglichkeit, solch kleine Teilchen zu manipulieren oder ihre Beweglichkeit nutzbar zu machen, in verschiedenen Bereichen der Wissenschaft und Technik von großer Bedeutung, wie zum Beispiel in der Medizin bei der gezielten Abgabe von Medikamenten oder in der Industrie bei der Gewinnung von Bio-Treibstoff [9–13]. Bei der Bekämpfung von Umweltverschmutzung rückte Mikroplastik in den Fokus der wissenschaftlichen Untersuchungen, wobei auch hier die Forschung von neuen Wegen profitiert, die es erlauben, mikroskopische Teilchen kontrolliert zu bewegen oder entsprechend der Objekteigenschaften zu selektieren bzw. zu trennen [14–16].

Einen großen Schritt hin zur aktiven Manipulation von Mikroobjekten stellt eine Erfindung von Arthur Ashkin aus den 1970-er Jahren dar, welche es erlaubt, mikroskopische Objekte durch fokussiertes Licht festzuhalten und zu bewegen [17], weshalb man hierbei auch von Optischen Pinzetten (engl. *Optical Tweezers*) spricht. Diese Art der kontaktlosen, gezielten

Krafteinwirkung auf Teilchen der mikroskopischen und submikroskopischen Längenskalen ermöglichte präzise Untersuchung von Zellen und anderen Objekten und wurde zu einem unersetzlichen Instrument für experimentelle Untersuchungen, wofür Ashkin 2018 mit dem Nobelpreis ausgezeichnet wurde [17–20].

Auch der Fortschritt auf dem Gebiet der Fertigungsmethoden von Objekten auf kleinen Skalen trieb die Möglichkeiten der Interaktion mit kleinen Teilchen voran. Dies ermöglichte die Entwicklung und Herstellung sogenannter Chiplabore (engl. *Lab-on-a-chip (LoC)*) [21–24]. Dabei handelt es sich um Instrumente, welche die automatisierte Auswertung von kleinsten Mengen an Flüssigkeiten ermöglichen und typischerweise eine Gesamtgröße von wenigen Zentimetern haben [23–25]. Die Flüssigkeiten werden in den Chips durch Mikrokanäle gepumpt und verschiedene aktive Elemente können eingesetzt werden, um bestimmte Aufgaben zu erfüllen [21, 23, 25, 26]. Zu den Komponenten, aus denen LoC Geräte aufgebaut sein können, zählen unter anderem Fluidik-Komponenten wie Schalter, Pumpen, Separatoren und viele weitere [25–27]. Da sie einfach zu transportieren sind und Anwendungen wie Selektion oder Separation mit hohem Durchfluss ermöglichen, stellen sie eine Vielzahl an Anwendungen in Aussicht.

Mikroobjekte können jedoch nicht nur durch externe Flüsse oder Felder getrieben werden. Die Evolution hat zahlreiche Organismen hervorgebracht, welche durch intrinsische Energieumwandlung Kräfte auf ihre Umgebung ausüben, um sich auf mikroskopischen Längenskalen fortzubewegen, sogenannte Mikroschwimmer [3, 28, 29]. Ihre Beweglichkeit erlaubt es diesen Schwimmern ihre Umgebung zu erkunden und, in Kombination mit Rezeptoren, entsprechend der äußeren Einflüsse ihren Aufenthaltsort gezielt zu verändern. Die Alge *CR* nutzt zum Beispiel ihren Antrieb, um ihre Position relativ zu einfallendem Licht zu ändern [30–34]. Somit kann sie die ihre Energieumwandlung durch Photosynthese optimieren. Auch andere Organismen verlassen sich auf ihre Beweglichkeit, wie Spermien auf dem Weg zur Eizelle oder Bakterien und Amöben bei der Nährstoffsuche oder dem Ausweichen von Schadstoffen [3, 28, 29, 35–40].

Mit dem Fortschritt der Technik und den Möglichkeiten der Fabrikation von Objekten auf kleinen Längenskalen mit verschiedenen Materialien und Formen wurde es möglich, künstliche Mikroschwimmer herzustellen [28]. Die Methoden, mit denen sich diese künstlichen aktiven Teilchen fortbewegen, sind dabei vielfältig: Janus-Teilchen mit asymmetrisch beschichteter Oberflächen können durch chemische Reaktionen eine Bewegung erzeugen, aber auch durch Magnetfelder oder Lichteinstrahlung getriebene, aktive Objekte wurden entwickelt [41–47].

Beschreibt man eine Vielzahl miteinander interagierender, aktiver Teilchen, spricht man

häufig von *aktiver Materie* (engl. *active matter*) [3, 28, 48–52]. Aktive Materie kann aus verschiedensten Bestandteilen aufgebaut sein und umfasst Objekte auf unterschiedlichen Skalen wie Vogelschwärme und Fischschulen, aber auch Bakterien oder Mikrotubuli [28, 49, 50, 53–57]. Im Zusammenspiel der einzelnen, aktiven Akteure zeigen sich dabei interessante, neue Effekte wie zum Beispiel aktivitätsinduzierte Phasenseparation, Schwarmverhalten oder auch das Auftreten von aktiver Turbulenz [58–64]. Bei der Beschreibung solcher Systeme durch übergeordnete, makroskopische Modelle muss jedoch ihre intrinsische Natur fern vom thermischen Gleichgewicht berücksichtigt werden, was sie von der Beschreibung von Systemen im thermischen Gleichgewicht unterscheidet.

In der Forschung ist das Interesse an aktiven Objekten und aktiver Materie über die letzten Jahre stark gestiegen [28]. Ihre Erforschung könnte helfen, neue Materialien weit weg vom thermischen Gleichgewicht zu entwickeln, zum Verständnis der natürlichen Entwicklung verschiedener Lebewesen beitragen, oder Anwendungen basierend auf aktiver Materie oder Mikroschwimmern zu entwickeln und sie für Aufgaben nutzbar zu machen [28]. Dabei spielt die Beantwortung grundlegender Fragen eine große Rolle: Wie lässt sich die Dynamik von aktiven Teilchen wie Mikroschwimmern modellieren? Wie verhalten sich aktive Objekte und aktive Materie in der Anwesenheit von äußeren Einflüssen, wie bei der Interaktion mit Hindernissen oder anderen Teilchen und Spezies? Welchen Einfluss hat die Umgebung auf das Verhalten aktiver Objekte? Kann ihr Verhalten vorhergesagt und allgemeine Gesetzmäßigkeiten identifiziert werden? Wie interagieren verschiedene aktive Spezies miteinander?

In dieser Arbeit wird die komplexe Dynamik aktiver Teilchen wie Mikroschwimmer untersucht. Je nach Fragestellung kommen dabei verschiedene Methoden zum Einsatz. In Teil I wird auf die Fragen eingegangen, welche systematische Ablenkung Mikroschwimmer Modelle wie die Alge *Chlamydomonas reinhardtii* (CR) bei Durchqueren eines Hindernisgebietes aus einem Gitter aus mikroskopischen Zylindern erfahren und welche Rolle hydrodynamische Effekte dabei spielen. Für die Untersuchungen werden die Mikroschwimmer im mikroskopischen Bild durch verschiedene dreidimensionale, numerische Modelle abgebildet und die Ergebnisse der theoretischen Modelle mit experimentellen Daten verglichen. In Teil II wird der Einfluss der Interaktion zwischen verschiedenen, miteinander wechselwirkenden, aktiven Teilchenspezies untersucht. Beispiele für solche Systeme sind unter anderem chemotaktisch gelenkte Bakterien. Dabei wird der Fokus auf das komplexe Verhalten sowie die Phasenübergänge in Systemen mit Erhaltungseigenschaft, welche durch ein Zusammenspiel der Aktivität und der Wechselwirkung der Teilchen induziert werden, gelegt. In der Strukturbildung können diese Systeme gemäß der Kategorisierung aus [65] in den Typ II^c eingeordnet werden. Es werden Modelle in drei aufeinander aufbauenden

Konsistenzebenen beschrieben. Zunächst werden die allgemeine Transportgleichung für Systeme zweier global erhaltener, miteinander interagierender, aktiver Spezies formuliert. Zudem wird ein explizites Modell gekoppelter, aktiver Teilchen beschrieben, das über Signalfelder mit Teilchen der eigenen Spezies sowie mit anderen Spezies kommunizieren kann. Durch eine adiabatische Elimination kann dieses Modell mit der Beschreibung auf Ebene der Transportgleichungen verknüpft werden. Die Dynamik beider Beschreibungsebenen weist für nicht reziproke Wechselwirkung in großen Parameterbereichen oszillatorische Phasenübergänge mit globaler Erhaltung (Typ II_0^c) auf. In diesem Zusammenhang wird eine neue Sörungsrechnung entwickelt, mit welcher die universelle Ordnungsgleichung für die vorher definierten gekoppelten Transportgleichungen mit Erhaltung im Bereich der oszillatorischen Dynamik nahe des Übergangs systematisch bestimmt wird. Die Lösungen der oszillatorischen Nichtgleichgewichtsdynamik werden sowohl analytisch als auch numerisch für exemplarische Szenarien untersucht und auf den drei Modellebenen miteinander verglichen.

Teil I.

Aktive Mikroschwimmer in der Einteilchenbeschreibung

2. Einleitung

“Now, I’m going to talk about a world which as physicists we almost never think about. [...] I want to take you into the world of very low Reynolds number – a world which is inhabited by the overwhelming majority of the organisms in this room. This world is quite different from the one that we have developed our intuitions in.” ([66], p. 3)

Die Welt, welche Purcell in seinem berühmten Vortrag, der später unter dem Titel *Life at low Reynolds-number* bekannt wurde, vorstellt, ist die Welt der Mikroorganismen wie Bakterien, Algen und der Bestandteile unseres Blutes. Diese Welt hat eine Eigenschaft, die für uns völlig kontraintuitiv erscheint [66]. Werden die charakteristischen Längen, also die dominanten Größenskalen, kleiner, spielt die viskose Dämpfung eine immer wichtigere Rolle. Dies hat zur Folge, dass bei kleinen Reynolds-Zahlen das sogenannte *Scallop-Theorem* gilt und die Fortbewegung erschwert ist [66]. Purcell beschreibt dieses Phänomen am Beispiel einer Muschel, die zum Vorankommen nur ihren starren Deckel öffnet und schließt. Obwohl sich eine Muschel mit einer Größe im Zentimeterbereich durch diese Technik fortbewegen kann, würde dies bei einer Muschel mit einer Größe im Mikrometerbereich nicht funktionieren [66].

Natürlich vorkommende Mikroorganismen verlassen sich auf ihre Beweglichkeit, um die umgebende Flüssigkeit nach Nahrung oder Räubern zu erkunden [3, 28, 29]. Hierfür sind sie darauf angewiesen, die Einschränkungen dieser Größenordnungen bei kleinen Reynolds-Zahl (Re) zu überwinden. Deswegen haben sie verschiedene Techniken entwickelt, bei denen sie Energie umwandeln und Kräfte auf ihre Umgebung auszuüben, um somit das *Scallop-Theorem* zu brechen um sich fortzubewegen [3, 28, 29]. Diese Aktivität hat entscheidende Auswirkungen auf das Verhalten von Mikroschwimmern: Die Flüssigkeit vermittelt eine langreichweitige Wechselwirkung zwischen den Mikroschwimmern und ihrer Umgebung, welche die Schwimmer ablenken kann oder die Bewegung im Kollektiv verändert [67–70]. Auch wird, im Vergleich zu passiven Objekten, die Dynamik aktiver Teilchen durch die interne Energieumwandlung beeinflusst und es treten neue Effekte auf, wenn sie zum Beispiel mit Hindernissen in Kontakt kommen [71–74]

Für Mikroschwimmer spielen diese Eigenschaften eine wichtige Rolle. Sie sind häufig in

komplexen Umgebungen wie zum Beispiel in Böden, sandiger Umgebung oder in Gewebe beheimatet und somit der Wechselwirkung mit verschiedenen Randbedingungen ausgesetzt [28, 75, 76]. Bei der Untersuchung dieser Systeme stellt sich deshalb häufig die Frage, welchen Einfluss Hindernisse auf die Bewegung der Teilchen haben, wie sich die Schwimmer in Wechselwirkung mit verschiedenen Umgebungen zurechtfinden oder wie diese Wechselwirkung ausgenutzt werden kann, um Aufgaben zu erfüllen [28].

Eine solche Problemstellung wird in diesem Teil der vorliegenden Arbeit untersucht. Dabei werden Modelle der Mikroschwimmer CR bei der Durchquerung eines komplexen Mediums, bestehend aus einem Gitter zylindrischer Hindernisse, beschrieben. Hierbei wird analysiert, wie die Hindernisse die Dynamik der Schwimmrichtung beeinflussen. Die Komponenten werden dabei im mikroskopischen Bild dargestellt, was die Beschreibung der komplexen Randbedingungen vereinfacht. Hierfür werden in Abschnitt 3 zunächst die Grundlagen für die hydrodynamische Beschreibung aufgezeigt. Zudem wird ein Überblick über die hydrodynamischen Eigenschaften von Mikroschwimmern gegeben und die Auswirkung der Schwimmer-Aktivität auf die Wechselwirkung zwischen ihnen und ihrer Umgebung erläutert.

In Abschnitt 4 werden anschließend die verwendeten Methoden und Modelle zur numerischen Beschreibung von Flüssigkeiten und Mikroschwimmern vorgestellt und entwickelt. Für die Flüssigkeitswechselwirkung wird die Lattice Boltzmann Methode (LBM) verwendet, mit welcher die Navier-Stokes Gleichung und somit der Einfluss der hydrodynamischen Wechselwirkung simuliert werden kann. Anschließend werden in Abschnitt 4.2 die Grundlagen und verwendeten Modelle der einzelligen Algen CR beschrieben. Aufgrund ihrer Fähigkeit das *Scallop-Theorem* zu brechen und sich bei kleinen Re fortzubewegen sind CR ein beliebtes Forschungsobjekt. Hierfür wird eine allgemeine Beschreibung der CR gegeben und ein Modell entwickelt, mit dem die CR numerisch beschrieben werden können.

Im darauffolgenden Abschnitt 5 wird das Verhalten der CR Modelle bei der Durchquerung eines komplexen Mediums, bestehend aus einem periodischen Gitter an zylindrischen Hindernissen, untersucht. In Abschnitt 5.3 werden die experimentellen Ergebnisse eines Vergleichsexperiment aufgezeigt. Dieses weist eine nichtlineare Ablenkung der phototaktischen Schwimmer von der ungestörten Bewegungsbahn auf.

In Abschnitt 5.4 werden anschließend die in Abschnitt 4 beschriebenen Methoden angewandt, um das auftretende Verhalten zu verstehen und die verantwortlichen Einflüsse zu charakterisieren. Mit den numerischen Techniken ist es zudem im Modell möglich, verschiedene Effekte wie Hydrodynamik oder Phototaxis getrennt voneinander zu verändern. Somit können die verschiedenen Einflussfaktoren isoliert und deren jeweilige Auswirkung

auf die Dynamik der Schwimmer detektiert werden.

3. Grundlagen und theoretischer Hintergrund

3.1. Bewegungsgleichung für Flüssigkeiten

In der hydrodynamischen Beschreibung werden Flüssigkeiten oder Gase als Kontinuum beschrieben [77]. Hierfür wird angenommen, dass die freie Weglänge ℓ der mikroskopischen Flüssigkeitskomponenten viel kleiner ist als die charakteristischen Längen L , welche im System auftreten. Das bedeutet, dass für die Knudsen-Zahl (Kn) der Zusammenhang

$$\text{Kn} = \ell/L \ll 1$$

erfüllt sein muss [78]. In diesem Limit kann die Dichte $\rho(\mathbf{r},t)$ an der Position \mathbf{r} als Kontinuum genähert werden [78]. Für ein Flüssigkeitsteilchen mit Volumen V und Geschwindigkeit \mathbf{u} wird die Massenerhaltung in Abwesenheit von Quellen und Senken beschrieben durch [77]

$$d_t \int_V \rho d^3\mathbf{r} = - \int_{\partial V} \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} d\partial V = 0, \quad (3.1)$$

wobei ∂V die Oberfläche zu V mit zugehörigem Normalenvektor \mathbf{n} beschreibt. Da in Gl. (3.1) keine Bedingung an das Volumen gestellt wurde, muss für den Integranden lokal [77]

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0$$

gelten. Für inkompressible Flüssigkeiten verschwinden die räumlichen und zeitlichen Ableitungen der Dichte und man erhält die Bedingung für inkompressible Flüssigkeiten

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0. \quad (3.2)$$

In ähnlicher Weise kann man die Erhaltung des Impulsstroms $\rho \mathbf{u}$ fordern, welche zusammen mit der Bedingung für inkompressible Flüssigkeiten Gl. (3.2) schließlich die Navier-Stokes Gleichung (NSG) der Form [77]

$$\rho [\partial_t \mathbf{v} + (\mathbf{v} \nabla) \mathbf{v}] = -\nabla p + \eta \Delta \mathbf{v} \quad (3.3)$$

liefert. Dabei beschreibt p den Druck, η die Viskosität und \mathbf{f} eventuell auftretende Kraftdichten.

Falls mit Gl. (3.3) und Gl. (3.2) die Geschwindigkeiten v und Drücke p bekannt sind, kann man den Spannungstensor bestimmen, der für eine Newtonsche, inkompressible Flüssigkeit gegeben ist durch [77]

$$\sigma_{ij} = -p \delta_{ik} + \eta (\partial_{x_k} v_i + \partial_{x_i} v_k) .$$

Mit dessen Hilfe können die hydrodynamischen Kräfte \mathbf{F}_h und Drehmomente \mathbf{T}_h , welche auf ein Teilchen wirken, durch das Integral des Spannungstensors, über die Oberfläche ∂V des Teilchens, bestimmt werden. Hierfür gilt die Beziehung [77, 79]

$$\mathbf{F}_h = \oint_{\partial V} \sigma(\mathbf{r}, t) \mathbf{n} dS, \quad (3.4a)$$

$$\mathbf{T}_h = \oint_{\partial V} \mathbf{r} \times \sigma(\mathbf{r}, t) \mathbf{n} dS, \quad (3.4b)$$

wobei \mathbf{n} die Flächennormale der Oberfläche ist, die in den Körper hineinzeigt.

Um Ergebnisse verschiedener Simulationen oder Experimente vergleichbar zu machen, ist es hilfreich, das Gesetz der Ähnlichkeit zu verwenden [80]. Dies beruht auf dem Fakt, dass eine entdimensionalisierte Gleichung durch charakteristische Größen bestimmt wird. Für die NSG kann man die sogenannte Re [80, 81] bestimmen, für die gilt:

$$\text{Re} = \frac{\rho U L}{\eta} .$$

Hier ist U die charakteristische Geschwindigkeit und L die charakteristische Länge. Diese Zahl beschreibt das Verhältnis zwischen Trägheit und den Reibungskräften [66, 82]. Es zeigt sich, dass verschiedene Strömungen der gleichen Form und gleicher Re, unabhängig von den absoluten Größen, ähnliches Verhalten aufweisen [81]. Dies erleichtert den Vergleich von verschiedenen Systemen.

Im Limes kleiner Re vereinfacht sich die NSG für stationäre Strömungen zur Stokes-

Gleichung [77]

$$-\nabla p + \eta \Delta \mathbf{v} + \mathbf{f} = 0. \quad (3.5)$$

Diese gilt im Bereich dominierender Viskosität, was z. B. durch kleine Längenskalen ($L \ll 1$) wie bei Mikrokanälen bedingt sein kann, oder als Resultat großer Viskositäten ($\eta \gg 1$) auftritt, die bspw. bei der Plattentektonik vorzufinden sind [79, 83].

Aus der Stokes-Gleichung (3.5) lässt sich der Reibungswiderstand verschiedener Objekte berechnen, welche sich bei kleinen Re bewegen. Für eine Kugel mit Radius a kann der Reibungskoeffizienten ζ_t für Translationen bzw. ζ_r für Rotationen durch die Oberflächenintegration des zugehörigen Spannungstensors mit Gleichungen (3.4) bestimmt werden. Für ein Teilchen, das sich mit konstanter Geschwindigkeit \mathbf{v} bzw. Winkelgeschwindigkeit $\mathbf{\Omega}$ in einer Flüssigkeit bewegt, erhält man die Reibung durch Gleichungen (3.4) der Flüssigkeit gemäß [79, 84]

$$\mathbf{F}_d = 6\pi\eta a \mathbf{v} =: \zeta_t \mathbf{v}, \quad \mathbf{T}_d = 8\pi\eta a^3 \mathbf{\Omega} =: \zeta_r \mathbf{\Omega}.$$

Umgekehrt kann man auch für Kräfte \mathbf{F}_d bzw. Drehmomenten \mathbf{T}_d die resultierenden Geschwindigkeiten \mathbf{v} und Winkelgeschwindigkeiten $\mathbf{\Omega}$ im Limes kleiner Re berechnen und erhält [79]

$$\mathbf{v} = \frac{\mathbf{F}_d}{\zeta_t}, \quad \mathbf{\Omega} = \frac{\mathbf{T}_d}{\zeta_r}. \quad (3.6)$$

Aufgrund der linearen Gestalt lässt sich Gl. (3.5) für inkompressible Flüssigkeiten nach der Geschwindigkeit $\mathbf{v}(\mathbf{r})$ auflösen. Dies liefert für eine Punktkraft $\mathbf{f} = \mathbf{F}\delta(\mathbf{r})$, und der Randbedingung verschwindender Geschwindigkeiten im Unendlichen, die Beziehung

$$\mathbf{v}(\mathbf{r}) = \mathbf{O}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{F},$$

wobei

$$\mathbf{O}(\mathbf{r}) = \frac{1}{8\pi\eta r} \left(\mathbf{1} + \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}}{r^2} \right) \quad (3.7)$$

der sogenannte *Oseen-Tensor* ist [85].

3.2. Boltzmann Gleichung und kinetische Gastheorie

Im vorherigen Kapitel wurde die Herleitung der Bewegungsgleichung für Flüssigkeiten mit dem Kontinuums-Modell und der Forderung makroskopischer Erhaltung gezeigt. Eine andere Möglichkeit der Herleitung kann mittels statistischer Überlegungen erfolgen, wofür im Folgenden eine Einführung basierend auf den Referenzen [82, 86–88] gezeigt wird.

Für die statistische Beschreibung wird die Flüssigkeit in mesoskopische Teilchen aufgeteilt. Hierbei werden N Teilchen mit Position $\mathbf{x} = (\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_d)$, Geschwindigkeit $\mathbf{u} = (\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_d)$ zur Zeit t durch die Verteilungsfunktion $f_N(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)$ im $d \times N$ -dimensionalen Phasenraum beschrieben. Das *Liouville Theorem* besagt, dass das Volumen einer Phasenraum-Einheit konstant ist:

$$d_t f_N = [\partial_t + u_\beta \partial_{x_\beta} + F_\beta \rho^{-1} \partial_{u_\beta}] f_N = 0,$$

wobei $u_\beta = d_t x_\beta$ die Geschwindigkeit und $F_\beta \rho^{-1}$ die die spezifischen Volumen-Kräfte für ein Paar-Wechselwirkungspotential Φ_{ij} darstellen [86–88]. Die Größe $f_N(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)$ enthält die Ensembleinformation für alle N Teilchen. Um die Entwicklung eines einzelnen Flüssigkeitsteilchens bestimmen zu können, wird die reduzierte Wahrscheinlichkeitsdichte eingeführt [82, 86–88]

$$f_i(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_i, \mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_i, t) = \int f_N(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) d\mathbf{x}_{i+1} \dots d\mathbf{x}_N d\mathbf{u}_{i+1} \dots d\mathbf{u}_N, \quad (3.8)$$

mit welcher die Hierarchie für die reduzierten Wahrscheinlichkeitsdichten berechnet werden kann gemäß [86–88]

$$\begin{aligned} \partial_t f_i + \sum_{j=1}^i \left[\mathbf{u}_j \partial_{\mathbf{x}_j} - \rho^{-1} \left(\sum_{k=1 \neq j}^i \partial_{\mathbf{x}_j} \Phi_{jk} \right) \partial_{\mathbf{u}_j} \right] f_i \\ = (N - i) \sum_{j=1}^i \int \rho^{-1} \partial_{\mathbf{x}_j} \Phi_{j i+1} \partial_{\mathbf{u}_j} f_{i+1} d\mathbf{x}_{i+1} d\mathbf{u}_{i+1}. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Dies ist die BBGKY-Hierarchie, benannt nach den Autoren Bogoliubov, Born, H. S. Green und Kirkwood, welche diese Gleichung unabhängig voneinander hergeleitet haben. Zur Berechnung von f_i ist es nötig f_{i+1} in Gl. (3.9) zu kennen; folglich ist der Formalismus nicht geschlossen. Um eine Lösung angeben zu können, muss man die Hierarchie für ein $j > i$ durch adäquate Annahmen brechen. Ludwig Boltzmann nahm hierfür an, dass die Dynamik im Wesentlichen durch Zwei-Körper-Stöße $f_2(\mathbf{x}_a, \mathbf{x}_b, \mathbf{u}_a, \mathbf{u}_b, t) = f_1(\mathbf{x}_a, \mathbf{u}_a, t) f_1(\mathbf{x}_b, \mathbf{u}_b, t)$ dominiert wird, was auch unter dem Namen *Molecular Chaos* oder *Stosszahlansatz* bekannt

ist [86–88]. Dies vereinfacht das Stoß-Integral Gl. (3.9) und liefert, mit $f_1 := f$ letztendlich die Boltzmann-Gleichung [86–88]

$$[\partial_t + \mathbf{u}\partial_{\mathbf{x}} + \rho^{-1}\mathbf{F}\partial_{\mathbf{v}}] f(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) = (\partial_t f)_C, \quad (3.10)$$

wobei $(\partial_t f)_C$ das Stoß-Integral des Streuvorgangs ist [86–88]. Die Gleichung beschreibt, wie sich die Advektion des Phaseraumes der linken Seite von Gl. (3.10) während einer Kollision, beschrieben durch die rechte Seite, ändert. Hierfür nimmt das Bhatnagar-Gross-Krook (BGK)-Modell an, dass Anteile der Verteilungsfunktion, welche sich nicht im Gleichgewicht befinden, durch einen Stoß gemäß [88–90]

$$(\partial_t f)_C = -\tau^{-1} (f - f^{eq}), \quad (3.11)$$

lokal zur Gleichgewichtsverteilung

$$f^{eq} = \rho(2\pi RT)^{-\frac{3}{2}} e^{-\frac{|\mathbf{v}|^2}{RT}}$$

gestreut werden. Hier beschreibt τ die mittlere Zeit τ zwischen zwei aufeinanderfolgenden Stößen [88]. Die Verbindung zu den makroskopischen Größen ist schließlich durch die Momente von f gegeben durch [86, 88]

$$\begin{bmatrix} \rho(\mathbf{x}, t) \\ \rho(\mathbf{x}, t)\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \\ \rho(\mathbf{x}, t)E(\mathbf{x}, t) \end{bmatrix} = \int \begin{bmatrix} 1 \\ \mathbf{u} \\ |\mathbf{u}|^2 \end{bmatrix} f(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) d^d u. \quad (3.12)$$

Mit der Geschwindigkeit U kann man die Knudsen-Zahl ausdrücken als $\text{Kn} = \frac{\ell}{L} = \frac{U\tau}{L} \ll 1$ [82]. Hierbei wird deutlich, dass die Forderung für kleine τ äquivalent zur Forderung nach kleinen Kn ist. Man kann somit die sogenannte *Chapman-Enskog Entwicklung* als Multi-Skalen-Entwicklung durchführen. Dafür werden f und t^{-1} nach Ordnungen des Kleinheitsparameters ϵ und $(\partial_t f)_C$ gemäß ϵ^{-1} entwickelt: [86, 88]

$$\begin{aligned} f &= f^{(eq)} + \epsilon f^{(1)} + \epsilon^2 f^{(2)} + \dots, \\ \partial_t &\rightarrow \partial_{t_0} + \epsilon \partial_{t_1} + \epsilon^2 \partial_{t_2} + \dots \end{aligned}$$

Setzt man dies in Gl. (3.10) ein, erhält man durch die ersten Momente schließlich die Kontinuitätsgleichung für die Dichte und den Impulsstrom, äquivalent zur NSG [82, 86, 88].

3.3. Eigenschaften von Mikroschwimmern

3.3.1. Bewegung bei kleinen Reynoldszahlen

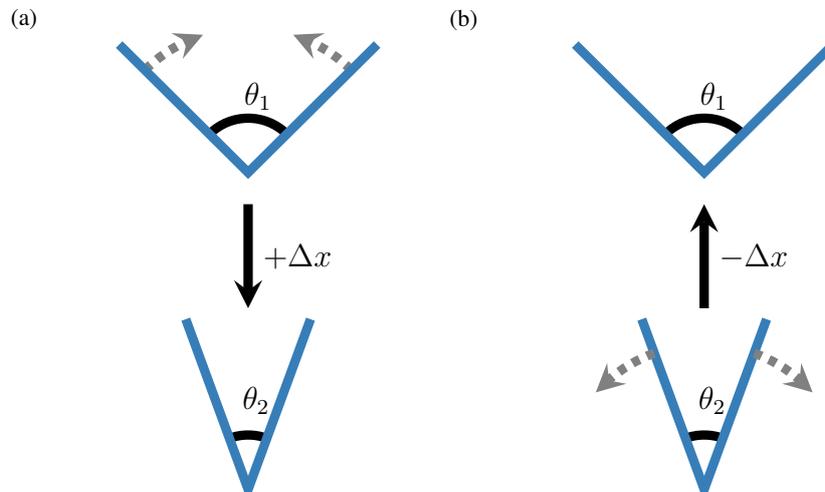


Abb. 3.1.: Im Bereich kleiner Re kann ein Schwimmer, der seine Form in einer zeitlich symmetrischen Form verändert, keinen Netto-Fortschritt erreichen. Dies wird an der Skizze einer Muschel deutlich, die im geöffneten Zustand mit θ_1 startet und durch Schließen der Hälften zu $\theta_2 < \theta_1$ einen Fortschritt $+\Delta x$ erreicht (a). Um den Zyklus zu schließen, muss sie in den Ausgangszustand durch Öffnen der Hälften zurück, wobei sie einen Rückschritt $-\Delta x$ erfährt und somit wieder den Ausgangszustand erreicht (b). Die Skizze ist angelehnt an typische Darstellungen wie zum Beispiel in [66, 91].

Mikroschwimmer besitzen eine sehr kleine räumliche Ausdehnung und sind häufig in Flüssigkeiten vorzufinden. Für sie gelten somit die Gesetze des *Stokes-Limes*. Wie in Abschnitt 3.1 beschrieben, hat dies zur Folge, dass die Trägheitseffekte der umgebenden Flüssigkeit im Vergleich zu Reibungseffekten an Einfluss verlieren [66]. Die beschreibenden Gleichungen Gl. (3.5) in diesem Limes sind zeitlich reversibel. Ein Antrieb durch eine zeitlich symmetrische Deformierung erlaubt unter diesen Bedingungen keinen effektiven Fortschritt, wie häufig am folgenden Beispiel veranschaulicht wird: Eine Muschel, die nur ihre beiden Deckel, wie in Abb. 3.1 skizziert öffnet und wieder schließt, könnte sich bei kleinen Re nicht vorwärts bewegen [66]. Der Fortschritt während des Öffnens würde durch den symmetrischen Rückschritt beim Schließen des Deckels wieder ausgeglichen und die Muschel wäre effektiv nicht vorangekommen.

Um sich dennoch in diesem Regime fortzubewegen, darf der Bewegungsablauf von aktiven Mikroschwimmer nicht durch eine zeitlich symmetrischen Zyklus von Bewegungsmustern erfolgen. Das Bakterium *Escherichia Coli* nutzt hierfür die Rotation von Flagellen hinter dem Körper als Antrieb (siehe Skizze Abb. 3.2(a)) [37, 38, 92–95]. Da die Bewegung durch eine kontinuierliche Rotation in eine Richtung stattfindet, ohne eine entsprechende

Rückwärtsbewegung zu vollziehen, können sich diese Schwimmer auch bei kleinen Re fortbewegen. Auch zyklische Bewegungen können bei kleinen Re eine Fortbewegung erlauben. Eine Voraussetzung hierfür ist, dass während der verschiedenen Abschnitten der periodischen Bewegung eine Asymmetrie vorliegt. Diese wird häufig durch Bewegung von flexiblen Elementen erzeugt. Ein Beispiel hierfür ist die periodische Bewegung der Geißeln der CR, die aufgrund der elastischen Flagellen einen unterschiedlichen Reibungskoeffizienten während der verschiedenen Phasen der Flagellenbewegung aufweist (siehe auch Abschnitt 4.2.1) [30–34]. Andere Beispiele sind Spermien, die sich durch schlagen einer flexiblen Geißel fortbewegen [35, 36, 96] oder Amöben, welche eine Technik mit gezielter aktiver Änderung der Körperhülle entwickelt haben [39, 40, 97, 98]. Für die theoretische Beschreibung der verschiedenen Antriebsarten existieren zahlreiche Formulierungen, welche die einzelnen Mikroschwimmer sehr gut beschreiben [3, 68, 99].

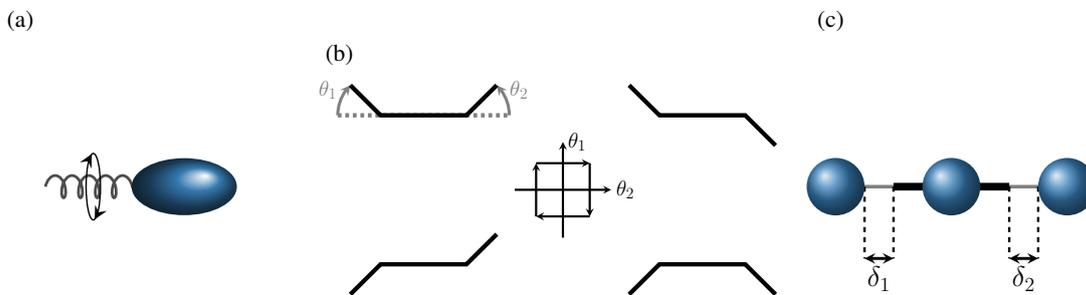


Abb. 3.2.: Skizzen für verschiedene Realisierungen der Antriebe bei kleinen Re , wie (a) ein Schwimmer mit helikaler, rotierende Geißel, (b) einem künstlichen Purcell-Schwimmer [66] oder (c) ein Drei-Bead Schwimmer [100]. Während der Schwimmer in (a) durch eine gleichmäßige Rotation eine Bewegung verursacht, können in (b) und (c) eine zeitlich asymmetrische Abfolge von Winkeländerungen θ_1, θ_2 oder Abstandsänderungen δ_1, δ_2 zu einem Fortschritt führen. [66, 91]. Die Skizzen sind angelehnt an die Abbildungen aus [66] und [100].

Neben den natürlichen Antriebsarten wurden auch theoretische Modelle für die Bewegung bei kleinen Re vorgeschlagen. Hierzu zählen Purcells-Schwimmer [66, 101] oder auch der Drei-Bead-Schwimmer [100]. Diese nutzen eine asymmetrische Abfolge von Formänderungen entweder durch Winkeländerung von starren Stäben oder Abstandsänderung von reibungsbehafteten Kugeln für die Fortbewegung aus, wie in Abb. 3.2(b) und (c) gezeigt [66, 100, 101].

Während des Schwimmvorgangs erzeugen die Mikroschwimmer ein Strömungsfeld um sich herum. Um dieses in Simulationen abzubilden, hat sich die Beschreibung durch Dipolschwimmer-Modelle als effektive und effiziente Methode zur Darstellung des Strömungsfeldes erwiesen [28, 49, 69]. Möchte man bspw. das Strömungsprofil eines aktiven

Teilchens, wie in Abb. 3.2(a) dargestellt, beschreiben, so kann man annehmen, dass an der Position der Geißel eine Punktkraft auf die Flüssigkeit ausgeübt wird. Die entsprechende negative Kraft liegt am Körper an, womit das System kräftefrei ist. Die beiden anliegenden Punktkräfte können zum Beispiel über ein Stokeslet wie in Gl. (3.7) genähert oder durch andere Methoden implementiert werden, um die Schwimmcharakteristik des Schwimmers nachzuahmen. Das Strömungsfeld, welches durch diese Modellierung erzeugt wird, kann zwei Charakteristiken besitzen: Für Schwimmer wie Spermien mit einem Antrieb hinter dem Körper (entgegen der Schwimmrichtung) erhält man eine sogenannte *Pusher*-Typ Charakteristik mit der typischen Form der Strömungsprofils wie in Abb. 3.3(a) skizziert [28, 49, 69]. Auch den entgegengesetzten Fall, bei dem die Kraft auf die Flüssigkeit vor dem Körper anliegt, kann man auf diese Weise modellieren (siehe Abb. 3.3(b)). Dies entspricht der sogenannten *Puller*-Typ Charakteristik [28, 49, 69].

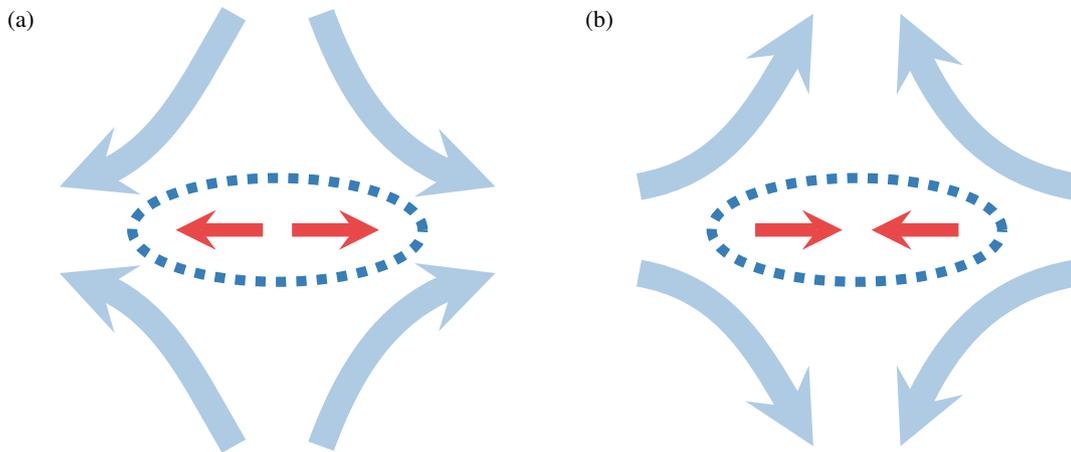


Abb. 3.3.: Darstellung des Strömungsfeldes (blaue Pfeile), hervorgerufen durch einen Kraftdipol (rote Pfeile) mit (a) einer *Pusher*-Konfiguration und (b) einer *Puller*-Konfiguration. Die Skizzen sind angelehnt an die Darstellung in [28, 49, 69].

3.3.2. Beeinflussung der Dynamik von Mikroschwimmern durch Hindernisse

Die Aktivität der Mikroschwimmer hat einen großen Einfluss auf ihre Dynamik bei der Interaktion mit Hindernissen im Vergleich zum Verhalten passiver Teilchen [102, 103, 105–108]. In Abb. 3.4(a) ist die Kollision eines aktiven Teilchens mit konstanter Schwimmrichtung entlang des roten Pfeils dargestellt. Für ein passives Teilchen, das ballistisch mit der Wand kollidiert, würde man eine Rückstreuung mit einem Ausfallswinkel gleich dem Einfallswinkel beobachten (schwarz gestrichelte Linie). Für aktive Teilchen ist diese Symmetrie der Streuung allerdings gebrochen: Nach der Kollision mit der Wand schwimmt das

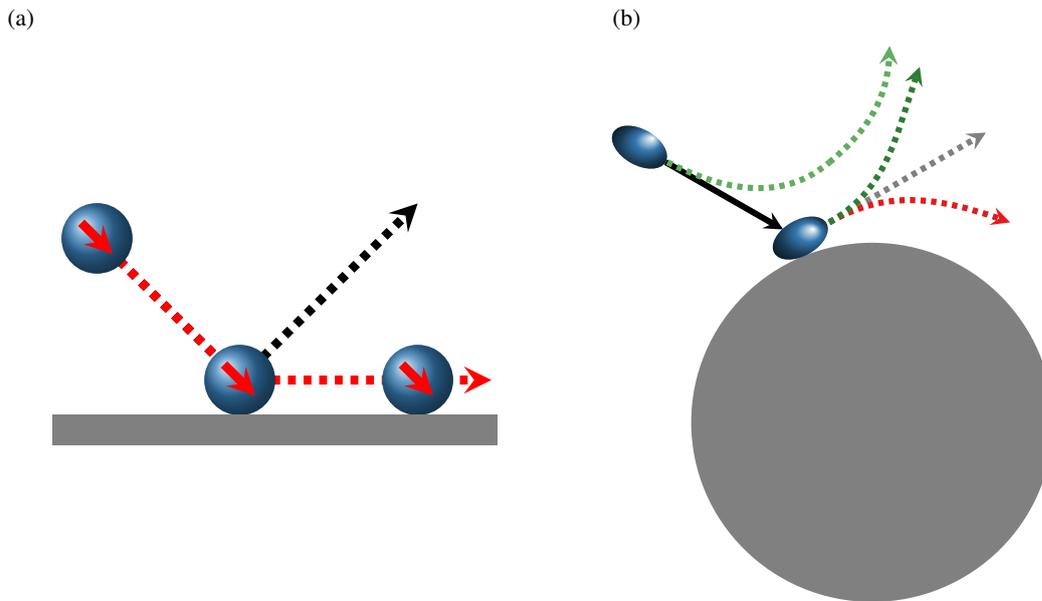


Abb. 3.4.: Aufgrund ihrer Aktivität verhalten sich aktive Teilchen bei der Wechselwirkung mit Hindernissen anders als passive Teilchen. (a) Ein aktives Teilchen mit konstanter Geschwindigkeit in Richtung des roten Pfeils trifft auf eine Wand. Nach dem Kontakt mit der Wand ist das Teilchen zunächst noch in der ursprünglichen Richtung orientiert und die Aktivität bewegt das Teilchen entlang der Wand (rot gestrichelte Linie) bis es zum Beispiel durch Diffusion die Orientierung ändert [102]. Ein passives Teilchen wäre im Einfallswinkel zurückgestreut worden (schwarze gestrichelte Linie). (b) Ein elongiertes Teilchen, welches auf ein Hindernis trifft, wird umorientiert und ändert die Austrittsrichtung (graue gestrichelte Linie). Je nach hydrodynamischem Typ (*Pusher*, *Puller*, *Neutral*) können verschiedene Streueignisse auftreten, die die Charakteristik der Streuung verändern [103–106].

Teilchen weiter in Richtung der Orientierung. Da diese in die Wand zeigt, bewegt sich das Teilchen entlang der Wandoberfläche, bis sich die Orientierung durch Effekte wie Reibung, Diffusion oder anderer Einflüsse ändert. Diese einfache Eigenschaft ruft einige interessante Effekte hervor, welche sich von der Dynamik passiver Teilchen unterscheiden.

Eine eindrucksvolle Demonstration dieses Effektes ist zum Beispiel das Verhalten eines mikroskopischen Zahnrads mit asymmetrischen Zacken, welches in ein Bad von aktiven Mikroschwimmern gelegt wird [72, 109]. Treffen die Schwimmer auf das Zahnrad, so werden sie bei Kontakt mit dem Rad aufgrund der Asymmetrie der Zähne in eine bevorzugte Richtung auf der Oberfläche des Zahnrades gebündelt. Dies führt schlussendlich dazu, dass das Rad sich ohne extern angelegte Kraftfelder zu drehen beginnt [72, 109]. Eine andere Folge der Aktivität ist zum Beispiel die Interaktion mit passiven Objekten. In einem Bad aus aktiven Teilchen kann sich eine aktivitätsinduzierte Verarmungszone zwischen den Objekten bilden. Dies führt dazu, dass die passiven Objekte eine anziehende Kraft zueinander erfahren, was auch manchmal als *Casimir*-Effekt aktiver Teilchen bezeichnet

wird [110–113].

Auch die hydrodynamische Wechselwirkung ruft einige interessante Effekte bei der Wechselwirkung von aktiven Schwimmern mit ihrer Umgebung hervor. In theoretischen und experimentellen Modellen wurde gezeigt, dass Mikroschwimmer in der Nähe eines kugelförmigen Objektes auf Bahnen um dieses herum eingefangen werden [103–105]. Das Einfangen ist dabei sowohl von der Dipol-Charakteristik (*Pusher*- oder *Puller*-Typ) und der Dipol-Stärke als auch vom Kugeldurchmesser des Hindernisses abhängig. Mit CR, welche eine *Puller*-Charakteristik zeigen, wurden ebenfalls theoretische und experimentelle Untersuchungen für die Streuung an zylinderförmigen Hindernissen durchgeführt [114]. In diesem Aufbau zeigen sich zwei Regime abhängig vom Eintrittswinkel zwischen der Schwimmrichtung und der Verbindung zur Zylinderachse. Ist dieser klein, so dominiert ein Kontaktregime, bei dem die Streuung durch die Kontaktwechselwirkung der Schwimmer dominiert und elastisch gestreut wird (vgl. graue Linie in Abb. 3.4(b)). Wird der Winkel des Eintritts steiler, so wechselt die Charakteristik zum hydrodynamischen Regime, in welchem die Schwimmer durch Flüssigkeitswechselwirkung zusätzlich von der Oberfläche abgestoßen werden (vgl. grüne Linien in Abb. 3.4(b)). Die Wechselwirkung von aktiven Teilchen wurde zum Beispiel für Modelle von aktiven *Brownschen* Teilchen in [102, 115] sowohl mit als auch ohne Berücksichtigung der Hydrodynamik untersucht. Es zeigt sich, dass die aktiven Objekte eine erhöhte Aufenthaltswahrscheinlichkeit in der Nähe der Wände besitzen.

Bei der Untersuchung von aktiven Schwimmern, welche in Wechselwirkung mit verschiedenen Randbedingung stehen, können folglich die Einflussfaktoren wie Kontaktwechselwirkung und hydrodynamische Wechselwirkung die Dynamik der Schwimmer entscheidend beeinflussen. Deshalb ist es wichtig, diese bei der Modellierung für numerische Studien wie die Untersuchung der CR in Abschnitt 5 zu berücksichtigen. In Abschnitt 4 werden die in dieser Arbeit hierfür verwendeten Modelle aufgezeigt.

4. Methoden und Modelle

*In diesem Abschnitt werden die Methoden und Modelle für die hydrodynamische Beschreibung durch die LBM als auch der Modelle der aktiven Mikroschwimmer CR vorgestellt. Teile der hier vorgestellten Methodik und Modellierung wurden bereits in Marvin Brun-Cosme-Bruny, Andre Förtsch, Walter Zimmermann, Eric Bertin, Philippe Peyla, and Salima Rafai, *Phys. Rev. Fluids*, 5, 093302,(2020) [116] veröffentlicht. Die Methoden der LBM und das hierfür erstellte numerische Programm fanden zudem Anwendungen in Publikation [117], wo sie angepasst für die Simulation von passiven Objekten mit Trägheit verwendet wurden, sowie Publikation [118], wo sie die für die Flüssigkeitsberechnung der roten Blutzellen verwendet wurde.*

4.1. Lattice-Boltzmann Methode

Die LBM ist eine Technik zur Lösung der Bewegungsgleichung für Flüssigkeiten, die die Boltzmann-Gleichung Gl. (3.10) für diskretisierte Geschwindigkeiten, Orte und Zeiten löst [119]. Sie ging aus den *Lattice-Gas Automata* [120, 121] hervor, indem boolesche Werte durch eine dezimal Darstellung der mesoskopischen mittleren Teilchendichte ersetzt wurden, was das statistische Rauschen erheblich minimierte [122]. Dadurch kann gezeigt werden, dass unter Zuhilfenahme der Chapman-Enskog Entwicklung die NSG aus der LBM erhalten kann, weshalb die LBM eine weite Verbreitung zur Simulation von Flüssigkeiten erfährt. Ein Überblick ist in [82, 119, 123] zu finden, auf welchen die folgenden Darstellungen aufbauen.

4.1.1. Allgemeines

Um die LBM in diskretisierter Form darzustellen, wird die Boltzmann-Gleichung (3.10) auf ein diskretisiertes Ortsgitter und einen diskretisierten Geschwindigkeitsraum abgebildet [82]. Bei der Diskretisierung werden Wichtungsfaktoren w_i eingeführt, welche abhängig von der Dimension und der Anzahl diskreter Richtungen die Erhaltung der Momente

gewährleisten. Die kontinuierlichen Geschwindigkeiten \mathbf{v} werden durch ein endliches Set \mathbf{c}_i , $i \in [0, \dots, q]$ ersetzt, die auf dem Orts-Gitter \mathbf{x}_j ausgewertet werden. Bei der Bezeichnung der jeweiligen Implementierung der LBM verwendet man häufig die abgekürzte Schreibweise $DdQq$, wobei d die Raumdimension und q die Anzahl der verwendeten Richtungen darstellen. Es existieren verschiedene Möglichkeiten für zwei- und dreidimensionale Implementierungen, wie bspw. D3Q15 oder D3Q18. Allerdings können nicht beliebige Werte für q verwendet werden, da die Rotations- und Translationsinvarianz nicht bei allen erhalten wäre [82]. Die Entwicklung von Gl. (3.10) mit den diskretisierten Koordinaten liefert schließlich die eigentliche LBM Bestimmungsgleichung [82]

$$f_i(\mathbf{x}_j + \mathbf{c}_i, t + \Delta t) = f_i(\mathbf{x}_j, t) + \Omega_i(\mathbf{x}_j, t). \quad (4.1)$$

Der Term Ω_i entspricht dem Kollisions-Operator in Äquivalenz zur rechten Seite in Gl. (3.10) und Δt ist die Auflösung des diskretisierten Zeitschritts. Für $\Omega_i(\mathbf{x}_j, t)$ wird in dieser Arbeit der BGK Kollisions-Operator verwendet. Die diskretisierte Form von Gl. (3.11) entspricht [82]

$$\Omega_i^{BGK} = -\frac{\Delta t}{\tau} [f_i - f_i^{eq}] + \mathcal{F}$$

mit der Gleichgewichtsverteilung

$$f_i^{eq} = w_i \rho \left(1 + \frac{\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u})^2}{2c_s^4} - \frac{\mathbf{u}^2}{2c_s^2} \right).$$

Hierbei sind \mathcal{F} eine Korrektur für anliegende Kräfte, c_s ist die Schallgeschwindigkeit und w_i sind die Wichtungsfaktoren des jeweiligen Modells. Die physikalischen Größen können aus den diskretisierten Momenten der Gleichungen (3.12) berechnet werden als

$$\begin{aligned} \rho &= \sum_i f_i, \\ \rho \mathbf{v} &= \sum_i \mathbf{c}_i f_i. \end{aligned}$$

Für die dynamische Viskosität erhält man $\nu = c_s^2 \Delta t (\tau - \frac{1}{2})$. Die Wahl der Dichte ρ sowie der Orts- und Zeitdiskretisierung Δx und Δt definiert ein Set an Simulations-Einheiten, für welches in dieser Arbeit $\Delta x = \Delta t = 1$ verwendet wird [124], wobei $N_{x,y,z}$ die Anzahl der Stützstellen in der jeweiligen Raumrichtung angibt.

Um die diskretisierte Form Gl. (4.1) der Boltzmann-Gleichung zu lösen, ist es hilfreich, die Auswertung in den Kollisions- und den Strömungsschritt aufzuteilen. Dies erleichtert

die numerische Behandlung, wobei die Berechnung der einzelnen Schritte folgende Form besitzt [82]:

$$\text{[Kollisionsschritt]} \quad f_i^*(\mathbf{x}, t) = f_i(\mathbf{x}, t) + \Omega_i(\mathbf{x}, t),$$

$$\text{[Strömungsschritt]} \quad f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i^*.$$

Der Kollisionsschritt verteilt die Gewichtung der verschiedenen Richtungen der Dichte $f_i(\mathbf{x}, t)$ gemäß dem Kollisionsoperator lokal um. Im Strömungsschritt werden die zuvor berechneten Dichten an die jeweilige neue Position verschoben. Der Zustand zwischen Strömungs- und Kollisionsschritt wird häufig mit einem Stern gekennzeichnet. Manchmal findet man in der Literatur auch die Notation $f_i^*(\mathbf{x}, t) = f_i(\mathbf{x}, t^*)$ vor.

In dieser Arbeit wird die LBM mit der D3Q19 Diskretisierung, mit den Raumrichtungen

$$\mathbf{c}_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{c}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \mathbf{c}_2 = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \mathbf{c}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \mathbf{c}_4 = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}, \mathbf{c}_5 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \mathbf{c}_6 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{c}_7 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \mathbf{c}_8 = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \mathbf{c}_9 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}, \mathbf{c}_{10} = \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{c}_{11} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \mathbf{c}_{12} = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \mathbf{c}_{13} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \mathbf{c}_{14} = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{c}_{15} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \mathbf{c}_{16} = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}, \mathbf{c}_{17} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \mathbf{c}_{18} = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix},$$

sowie der Konstante $c_s = \frac{1}{\sqrt{3}}$ und den Gewichtungen

$$w_i = \begin{cases} \frac{1}{3} & \text{falls } |\mathbf{c}_i| = 0 \\ \frac{1}{18} & \text{falls } |\mathbf{c}_i| = 1 \\ \frac{1}{36} & \text{falls } |\mathbf{c}_i| = \sqrt{2} \end{cases}$$

verwendet [82, 123]. Für die Initialisierung der Flüssigkeitsdichten wird die Gleichge-

wichtsverteilung $f_i = f_i^{eq}$ mit $\rho = 1$ und $\mathbf{u} = 0$ herangezogen [82]. Mit den gewählten Parametern ergibt sich ein Stabilitätskriterium von $\tau > \frac{\Delta t}{2} = \frac{1}{2}$ für die Relaxationszeit sowie $|\mathbf{u}_{max}| < \sqrt{\frac{1}{3} \frac{\Delta x}{\Delta t}} \approx 0.577$ für die Strömungsgeschwindigkeit [82].

4.1.2. Randbedingungen

Periodische Randbedingungen

Periodische Randbedingungen werden in der LBM durch einen Übertrag der Werte von $f_i^*(\mathbf{x}, t)$ an den Rändern in die periodische Fortgesetzte Position während des Strömungsschrittes erzeugt. Soll bspw. das periodische Gebiet in y -Richtung durch $[0, L_y[$ begrenzt sein, so werden Dichten am Ort $f_i^*((x, 0, z)^T, t)$, welche in negative y -Richtung strömen (und somit $\hat{\mathbf{e}}_y \cdot \mathbf{c}_i < 0$) in die Speicherstellen am oberen y -Rand geströmt: $f_i((x, L_y - \hat{\mathbf{e}}_y \mathbf{c}_i, z)^T, t + \Delta t) = f_i^*((x, 0, z)^T, t)$ [82]. Dies gilt analog für die anderen Raumrichtungen bzw. die obere Begrenzung mit Projektion an die untere Speicherstelle.

No-slip Randbedingungen

Um Wände in der LBM zu repräsentieren, muss deren Eigenschaft der Haftbedingung oder auch *No-Slip* Randbedingung berücksichtigt werden. Hierfür gibt es verschiedene Möglichkeiten, wobei in dieser Arbeit der sogenannte *Halfway Bounce-Back* Algorithmus nach [125, 126] verwendet wird. Dieser streut die in eine Wand einfallende Flüssigkeitsteilchen zurück, wodurch auf der Oberfläche der Wand die *No-Slip* Bedingung erfüllt wird.

Für diese Technik wird, falls sich zwischen Gitterpunkt \mathbf{x} und $\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta x$ eine Wand befindet, diese Verbindung als Wandverbindung identifiziert. Hierbei werden die Richtungen der Wahrscheinlichkeitsdichten f_i , die in eine Wand strömen, an der Wand zurückgestreut und folglich auf der linken Seite von Gl. (4.1) nach der Kollision umgekehrt ($f_i \rightarrow f_{i'}$). Das Ergebnis ist eine räumlich diskretisierte Darstellung der Objekte mit festen Randbedingungen. Während der Reflektion an der Wand muss der Impulsaustausch in der Wahrscheinlichkeitsdichte berücksichtigt werden, so dass man für den angepassten Kollisionsschritt [82, 125, 127]

$$f_{i'}(\mathbf{x}_b, t + \Delta t) = f_i(\mathbf{x}_b, t) + \Delta t \Omega_i + \mathcal{W}$$

mit dem zusätzlichen Beitrag \mathcal{W} , erhält. Für eine Wand mit der Geschwindigkeit $\mathbf{u}_w(\mathbf{x}_w)$

an der Position $\mathbf{x}_w = \mathbf{x}_b + \mathbf{c}_i \Delta t / 2$ erhält man für die Korrektur den Faktor

$$\mathcal{W} = \begin{cases} -\frac{2w_i \rho}{c_s^2} \mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u}_w & \text{falls } i \text{ in die Wand zeigt} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} .$$

Diese Implementierung besitzt eine räumliche Auflösung zweiter Ordnung [82].

Bewegliche, undeformierbare Teilchen

Möchte man undeformierbare Teilchen wie zum Beispiel harte Kugeln simulieren, so kann man die Oberfläche der Kugeln als Wand, an welcher die Flüssigkeit reflektiert wird, modellieren [82, 128]. Die Bewegung der Kugel wird anschließend über die zeitliche Integration der auf ihr wirkenden Kräfte ermittelt. Hierfür müssen die von der Flüssigkeit ausgeübten Kräfte auf das Teilchen bestimmt werden. Knoten an der Position \mathbf{x}_i innerhalb der Kugel mit Radius a und Position \mathbf{r} mit $|\mathbf{x}_i - \mathbf{r}| < a$ werden als Wandknoten behandelt und nicht für die Berechnung der Flüssigkeitsupdates berücksichtigt [128]. Hierbei wird mindestens ein Flüssigkeitsknoten zwischen zwei Objekten forciert. Bei der Bewegung werden Flüssigkeitsteilchen, die auf die Oberfläche der Kugel strömen, an dieser reflektiert und üben dabei eine Kraft auf die Kugel aus, welche der hydrodynamischen Wechselwirkung zwischen Teilchen und Flüssigkeit entspricht. Diese wird gleichmäßig über alle rückgestreuten Richtungen aufsummiert (vgl. Gleichungen (3.4)) und man erhält [82, 128, 129]

$$\mathbf{F}_{bbk} = \sum_{i \in bbk} \frac{\Delta x^3}{\Delta t} (2f_i^*(\mathbf{x}_b, t) + \mathcal{W}) \mathbf{c}_i$$

$$\mathbf{T}_{bbk} = \sum_{i \in bbk} \frac{\Delta x^3}{\Delta t} (2f_i^*(\mathbf{x}_b, t) + \mathcal{W}) (\mathbf{x}_w - \mathbf{r}(t)) \times \mathbf{c}_i .$$

Hierbei sind \mathbf{x}_b Gitterpositionen, welche in eine Wand an der Stelle \mathbf{x}_w (mit $i \in bbk$) zeigen. Die Geschwindigkeit der Wand wird basierend auf der (Winkel-)Geschwindigkeit (Ω_p) \mathbf{u}_p des Teilchen an Position \mathbf{r} mit

$$\mathbf{u}_w(\mathbf{x}_w) = \mathbf{u}_p + \Omega_p \times (\mathbf{x}_w - \mathbf{r}) \quad (4.3)$$

berechnet. Bei der Bewegung des Objektes müssen nach jedem Zeitschritt die Knoten, die als Wand identifiziert werden, aktualisiert werden. Hierbei kann es vorkommen, dass Flüssigkeitsknoten, welche zuvor innerhalb der Kugel lagen, sich danach außerhalb befinden (oder umgekehrt). Flüssigkeitspunkte am Ort \mathbf{x}_j , die im letzten Zeitschritt außerhalb des beweglichen Teilchens mit Position \mathbf{r} , Geschwindigkeit \mathbf{u}_p und Winkelgeschwindigkeit Ω_p

lagen und im nächsten Zeitschritt innerhalb sind, werden dann von der Kugel verdeckt. Die zugehörigen Flüssigkeitsteilchen gehen dem System verloren und der Anteil

$$\mathbf{F}_c = \sum_c \frac{\Delta x^3}{\Delta t} \sum_i f_i(\mathbf{x}_j, t) \mathbf{c}_i,$$

$$\mathbf{T}_c = \sum_c \frac{\Delta x^3}{\Delta t} (\mathbf{x}_j - \mathbf{r}) \times \mathbf{F}_c,$$

wird gemäß [128] gleichmäßig für einen Zeitschritt auf den des Teilchens addiert, um die Kräftebilanz auszugleichen, wobei über alle neu bedeckten Knoten c summiert wird. Äquivalent werden Knoten, die zuvor innerhalb der Kugel lagen und im nächsten Zeitschritt freigelegt sind, mit einem neuen Flüssigkeitspartikel gefüllt. Für das neu entstandene Flüssigkeitsteilchen wird eine Geschwindigkeit $\mathbf{v}_{node}(\mathbf{x}_j) = \mathbf{u}_w(\mathbf{x}_j)$ gemäß Gleichungen (4.3) und eine mittlere Dichte $\bar{\rho}$ der um \mathbf{x}_j liegenden Flüssigkeitsteilchen angenommen [82, 128]. Die dabei ausgeübten Kräfte und Drehmomente von freigelegten Flüssigkeitsteilchen aller freigelegten Knoten u betragen [82]

$$\mathbf{F}_u = \sum_u -\frac{\Delta x^3}{\Delta t} \bar{\rho} \mathbf{v}_{node},$$

$$\mathbf{T}_u = \sum_u \frac{\Delta x^3}{\Delta t} (\mathbf{x}_j - \mathbf{r}) \times \mathbf{F}_u,$$

was ebenfalls in der Bilanz des Teilchens berücksichtigt wird. Die gesamten resultierenden hydrodynamischen Kräfte \mathbf{F}_h und Drehmomente \mathbf{T}_h

$$\mathbf{F}_h = \mathbf{F}_{bbk} + \mathbf{F}_c + \mathbf{F}_u \quad \text{und} \quad (4.4a)$$

$$\mathbf{T}_h = \mathbf{T}_{bbk} + \mathbf{T}_c + \mathbf{T}_u \quad (4.4b)$$

werden als konstant über ein Zeitintervall $t \rightarrow t + \Delta t/2$ angenommen und beschreiben somit den Zustand zu $t + \Delta t/2$ [128]. Die Kräfte und Drehmomente zur Zeit t_0 auf das Teilchen können anschließend durch

$$\mathbf{F}_h(t_0) = \frac{1}{2} \left[\mathbf{F}_h(t_0 + \frac{1}{2}\Delta t) + \mathbf{F}_h(t_0 - \frac{1}{2}\Delta t) \right] \quad \text{und}$$

$$\mathbf{T}_h(t_0) = \frac{1}{2} \left[\mathbf{T}_h(t_0 + \frac{1}{2}\Delta t) + \mathbf{T}_h(t_0 - \frac{1}{2}\Delta t) \right]$$

über eine Mittelung zweier aufeinander folgender Zeitschritte berechnet werden [128] und in die Gesamtbilanz der Kräfte auf das Teilchen aufgenommen werden.

Um die Geschwindigkeit von starren Kugeln, auf denen externe Kräfte \mathbf{F}_b und Drehmomente \mathbf{T}_b sowie die hydrodynamischen Kräfte \mathbf{F}_h und Drehmomente \mathbf{T}_h wirken, zu berechnen, kann man die *Newtonsche* Bewegungsgleichung der anliegenden Kräfte zeitlich diskretisiert integrieren und erhält

$$\mathbf{v}_b(t_0 + \Delta t) = \mathbf{v}_b(t_0) + \frac{\Delta t}{M} [\mathbf{F}_h(t_0) + \mathbf{F}_b(t_0)] , \quad (4.5a)$$

$$\mathbf{w}_b(t_0 + \Delta t) = \mathbf{w}_b(t_0) + \frac{\Delta t}{I} [\mathbf{T}_h(t_0) + \mathbf{T}_b(t_0)] , \quad (4.5b)$$

wobei $M = \frac{4}{3}\pi a^3 \rho_K$ die Masse und $I = \frac{2}{5}ma^2$ das Trägheitsmoment der Kugeln mit Dichte ρ_K darstellt. Die (Winkel-)Geschwindigkeit der Kugeln kann anschließend numerisch integriert werden, um so die neue Position und Orientierung der Kugel zu erhalten.

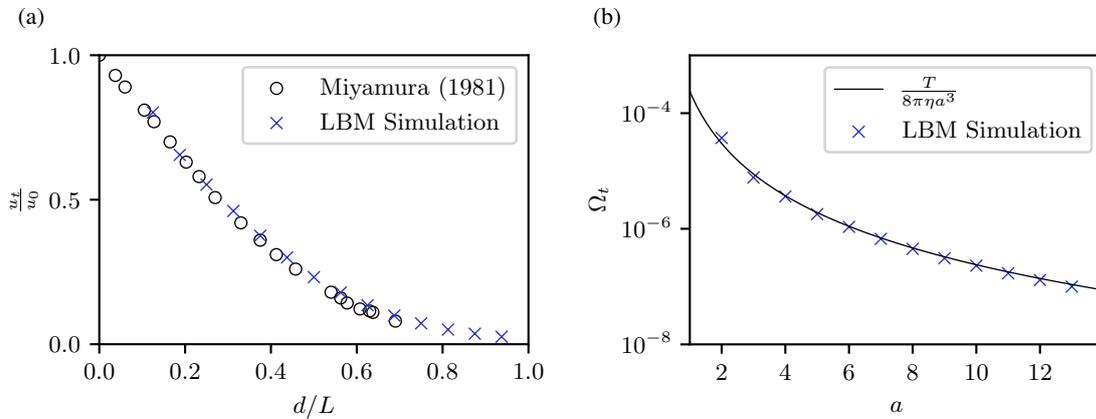


Abb. 4.1.: (a) Test der Translationsgeschwindigkeit von harten Kugeln, basierend auf dem System aus [128][Fig. 6]. Gezeigt ist das Verhältnis der y -Sedimentationsgeschwindigkeit u_t und der ungestörten Geschwindigkeit u_0 (siehe Gleichungen (3.6)) einer harten Kugel, die unter einer konstanten Kraft $\mathbf{F}_s = -0.1\hat{\mathbf{e}}_y$ in einem Kanal y -periodischen Kanal und Wänden in x,z -Richtung sedimentieren. Hierbei wurde das Verhältnis des Kugeldurchmessers d und der Kanalbreite L variiert. Als Vergleich dienen die Datenpunkte Miyamura (1981), welche aus [128][Fig. 6] entnommen sind (schwarze Kreise). Parameter: $\tau = 1, \eta = 1/6, N_{x,z} = 32, N_y = 1024, \rho_K = 1, F_s = 0.1$. (b) Finale Winkelgeschwindigkeit $\Omega_t = |\boldsymbol{\Omega}_t|$ einer harten Kugel mit Radius a , die in einem periodischen Gebiet ($N_{x,y,z} = 64$) mit konstant anliegendem Drehmoment ($\mathbf{T}_r = 0.001\hat{\mathbf{e}}_z$) und $\rho_K = 1, \tau = 1, \eta = 1/6$ rotiert. Dargestellt sind die Datenpunkte der Simulation der LBM (blaue Kreuze) sowie die analytische Beziehung aus Gleichungen (3.6).

Abb. 4.1 zeigt die Ergebnisse für die translatorische sowie rotatorische Bewegung einer harten Kugel für kleine Re , die mit der LBM simuliert wurden. Für die translatorischen Tests wird die Sedimentation einer Kugel mit anliegender Kraft $\mathbf{F}_s = -\hat{\mathbf{e}}_y F_s$ in einem in y -Richtung periodischen Kanal, der in x,z -Richtung durch Wände begrenzt ist, bei kleinen Geschwindigkeiten u_t untersucht. Für eine Kugel in einem freien Gebiet würde sich die

Geschwindigkeit $u_0 = \frac{F_s}{6\pi\eta a}$ gemäß des Stokesschen Gesetzes Gl. (3.6) einstellen. Da die Wände jedoch eine Reibung auf die Kugel ausüben, ist die tatsächliche Sedimentationsgeschwindigkeit eine Funktion des Verhältnisses von Kugeldurchmesser d und Kanalbreite L mit $\frac{u_t}{u_0} < 1$. Die mit der LBM bestimmten Ergebnisse stimmen sehr gut mit den in Fig. 6 aus Ref. [128] angegebenen Werten überein. Für den Test der Rotationsgeschwindigkeit wird eine Kugel mit Radius a in einem periodischen Gebiet mit $N_{x,y,z} = 64$ simuliert, auf welche ein konstantes Drehmoment anliegt. Die sich einstellende Winkelgeschwindigkeit der LBM-Simulationen wird mit der analytischen Näherung der *Stokesschen* Reibung verglichen. Sowohl für die Translation als auch die Rotation zeigt sich eine sehr gute Übereinstimmung mit den erwarteten Werten.

4.1.3. Externe Kräfte

Um externe Kräfte, die auf die Flüssigkeit wirken, zu implementieren, wird in dieser Arbeit der Ansatz von [130] verwendet. Diese Methode basiert auf einer Kopplung externer Kräfte auf der rechten Seite von Gl. (4.1), welche nach kleinen Geschwindigkeiten der Flüssigkeitsteilchen entwickelt wird. Sie ist für kleine Mach Zahlen (Mas) äquivalent zur alternativen Implementierung in [131], wie in [132] gezeigt wird. Für die Prozedur nach [130] kann man externe Kräfte \mathbf{F}_c in der Entwicklungsgleichung durch die Anpassungen

$$\begin{aligned}\Omega_i^{BGK} &= -\frac{\Delta t}{\tau} [f_i - f_i^{eq}] + \Delta t \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) w_i \left[\frac{\mathbf{c}_i - \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u})}{c_s^4} \mathbf{c}_i \right] \cdot \mathbf{F}_c, \\ \rho &= \sum_i f_i, \\ \rho \mathbf{v} &= \sum_i f_i \mathbf{c}_i + \frac{\Delta t}{2} \mathbf{F}_c,\end{aligned}$$

berücksichtigen. In Abb. 4.2 ist das sich einstellende Strömungsprofil zwischen zwei Platten abgebildet, das durch eine Volumenkraft, die an jedem Knoten anliegt, getrieben wird, wobei $H = 64, L_{x,y} = 64, \eta = 1/6, u_0 = 0.05$. Wie man erkennt, stellt sich das typische parabelförmige Poiseuille-Profil der Strömung mit Amplitude u_0 in der Mitte der Platten ein.

Da externe Kräfte häufig auf einem kontinuierlichen Koordinatensystem definiert sind, werden externe Punktkräfte auf die diskrete Euler-Repräsentation mithilfe der sogenannten *Immersed-Boundary* Methode übertragen. Diese vermittelt zwischen beiden Darstellungen

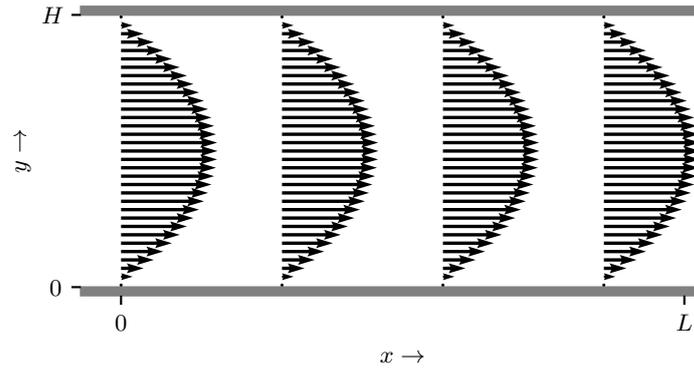


Abb. 4.2.: Poiseuille-Profil zwischen zwei parallelen Platten in der LBM-Simulation, welches durch eine konstante Volumenkraft $\mathbf{F}_c = \hat{\mathbf{e}}_x 2u_0\eta/(H/2)^2$, die gemäß Abschnitt 4.1.3 an jedem Knoten der Flüssigkeit berücksichtigt wird, getrieben wird. Es stellt sich das typische parabelförmige Profil ein.

über eine diskrete Delta-Verteilungsfunktion [82, 133, 134]

$$\delta_{\Delta}(\mathbf{r}) = \phi(r_1)\phi(r_2)\phi(r_3)\frac{1}{\Delta x^3},$$

wobei $\mathbf{r} = (r_1, r_2, r_3)^T$. Für eine skalare Größe A , die zwischen der Euler-Darstellung $A_E(\mathbf{x}_j, t)$ an diskreten Orten \mathbf{x}_j und der Lagrange-Darstellung $A_L(\mathbf{r}, t)$ am kontinuierlichen Ort \mathbf{r} vermittelt, gilt

$$A_E(\mathbf{x}_j, t) = A_L(\mathbf{r}, t)\delta_{\Delta}(\mathbf{x}_j(t) - \mathbf{r}(t)).$$

Die Verteilungsfunktion hat eine obere Grenze zur Berücksichtigung des Kopplungsradius für $\mathbf{x}_j(t) - \mathbf{r}(t)$ und ist im Allgemeinen so bestimmt, dass der (Dreh-)Impuls erhalten ist und die Funktion an den Definitionsrändern möglichst kontinuierlich erfolgt [130]. Je nach Wahl des maximal berücksichtigten Radius erhält man verschiedene Verteilungs-Funktionen ϕ , die diese Eigenschaften erfüllen [82]. In dieser Arbeit werden die nächsten vier Stützstellen um den Lagrangeschen Wert berücksichtigt. Eine gute Näherung für die Verteilungsfunktion $\phi(x)$ stellt die Funktion

$$\phi'_4(x) = \begin{cases} 4^{-1} (1 + \cos(\pi x/2)) & x \leq |x| \leq 2\Delta x \\ 0 & 2\Delta x \leq |x| \end{cases}$$

dar [134].

4.2. Mikroschwimmer *Chlamydomonas reinhardtii*

4.2.1. Allgemeines

Chlamydomonas reinhardtii (CR) ist eine Grünalge, die aus einem einzelligen Körper mit einem Durchmesser von $10\mu\text{m}$ besteht [30]. Diese Mikroalge ist vornehmlich in Süßwasser vorzufinden, in welchem sie sich, getrieben durch ihre zwei Geißeln, bewegen kann. Die Flagellen bewegen sich periodisch in einer Form ähnlich der Brustschwimm-Bewegung [30, 34, 135], wie in Abb. 4.3 dargestellt. Die Geschwindigkeit der CR beträgt ungefähr $50 - 200\mu\text{m/s}$, womit die Algen in einer Flüssigkeit wie Wasser mit $\eta \approx 1\text{mPa} \cdot \text{s}$ und einer Dichte von $\rho \approx 10^3\text{kg/m}^3$ eine Re von ca. $2.5 \cdot 10^{-4}$ aufweisen [33].

Die Energie für die Fortbewegung gewinnt der Organismus durch Photosynthese mit einem im Zellkörper befindlichen Chloroplast [30]. Die Zellen besitzen einen Augenfleck (siehe rote Markierung in Abb. 4.3(c)), auch Stigma genannt, welcher circa einen Mikrometer Durchmesser aufweist und auf Lichteinfall im Bereich 510nm reagiert [30, 34, 136–140]. Die Bewegung der Alge ist mit dem Augenfleck gekoppelt und steuert die Alge entweder auf eine Lichtquelle zu oder von ihr weg [141]. Dies erlaubt es ihnen, gemäß der äußeren Beeinflussung, ihre Position zu ändern und somit die Entfernung zur Wasseroberfläche und damit auch die Lichteinstrahlung zu kontrollieren [30, 142].

Aufgrund ihrer einfachen genetischen Bauweise, der Möglichkeit, durch genetische Veränderungen die Alge zu verändern, sowie ihrer Fähigkeit, sich bei kleinen Re fortzubewegen hat sich dieser Einzeller als Modellobjekt für zahlreiche Gebiete in der Wissenschaft etabliert [30, 31, 34, 68, 135, 143]. Die Anwendungen sind dabei vielfältig. So wurden bspw. genetische Veränderungen getroffen, um die Produktion von Wasserstoff während der Photosynthese zu erhöhen und somit die Alge als Quelle für diesen Rohstoff einzusetzen [144]. Auch andere Arten der verbesserten Wasserstoff-Anreicherung oder die Verwendung der Algen als Lieferant für Biomasse und Biotreibstoffe sind Forschungsgegenstand [12, 145].

Im Folgenden werden die wichtigsten Grundlagen zur theoretischen Beschreibung der Algen aufgezeigt. Anschließend wird in Abschnitt 4.2.3 beschrieben, wie die CR für die Untersuchungen in Abschnitt 5 modelliert werden.

Fortbewegung

Der Körper der Algen ist begrenzt durch eine Zellmembran, die (auf den untersuchten Zeitskalen) undurchdringlich für die Flüssigkeit ist. An diesem Körper ist der Antriebsapparat befestigt, welcher aus zwei getrennt agierenden Flagellen besteht. Um das *Scallop-Theorem*

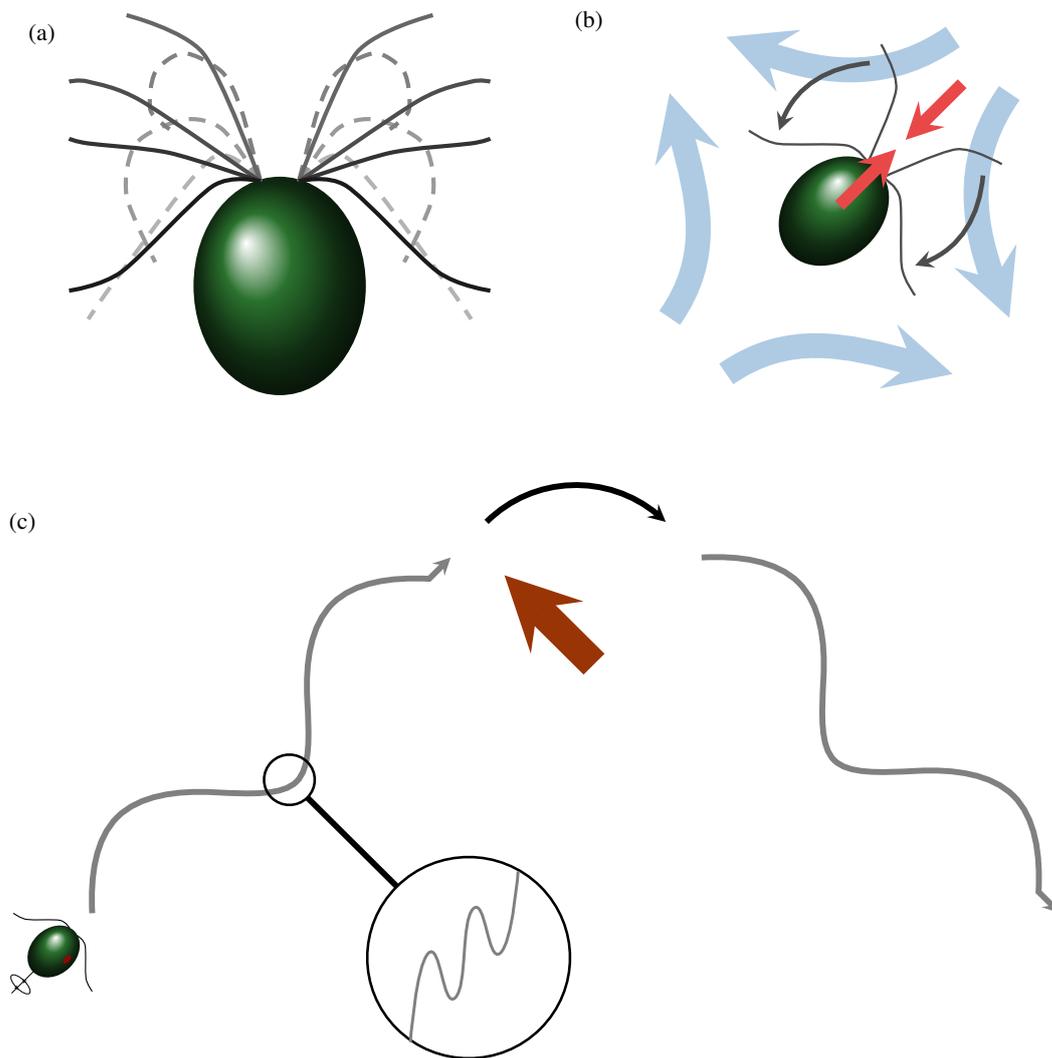


Abb. 4.3.: (a) Skizze der symmetrischen Schwimmbewegung der Flagellen der Alge CR. Während des *Power-Stroke*s bewegt die Alge ihre Flagellen hin zum Körper (durchgezogene Linien), wobei der Körper sich nach vorne bewegt [30]. Während des *Return-Stroke*s werden die Flagellen eng anliegend an den Körper wieder nach vorne geholt (gestrichelte Linien), der Körper bewegt sich leicht zurück [30]. (b) Im Mittel erzeugt diese Bewegung ein Strömungsprofil mit *Puller*-Charakteristik, angedeutet durch die blauen Pfeile (siehe Abschnitt 3.3.1). Diese Bewegung erzeugt einen Kraftdipol, bei welchem eine gemittelte Kraft in Schwimmrichtung auf die Alge wirkt (rote Pfeile). (c) Die volle Schwimmer-Trajektorie verläuft auf einer helikalen Bahn (graue Linie), welche eine Substruktur aufgrund der Schwimmbewegung aufweist (vergrößerter Bereich). Die Phototaxis sorgt für eine Ablenkung der Richtung entlang externer Lichtquellen (dunkel-roter Pfeil). Skizzen angelehnt an [30, 34, 138, 139, 146–148].

zu brechen, vollzieht die Alge eine Bewegung, die in zwei Teile gegliedert werden kann [30, 34, 143, 149] (siehe Abb. 4.3(a)). Der erste Teil des Zyklus besteht aus dem sogenannten *Power-Stroke*, bei dem die Flagellen weit vom Körper nach vorne gestreckt starten und zum hinteren Ende der Zelle bewegt werden. Dabei wird durch die Reibung mit der Flüssigkeit eine Kraft auf den Körper erzeugt und die Alge bewegt sich nach vorne. Um die Periode zu vollenden und einen Schwimmzyklus zu schließen, müssen die Geißeln wieder in die Ausgangslage gebracht werden. Dies geschieht im *Return-Stroke*, wobei die Geißeln näher am Zellkörper geführt wieder nach vorne geholt werden. Die Reibung mit der Flüssigkeit erzeugt dabei einen Rückschritt, der aufgrund der unterschiedlichen Lage der Fühler näher am Körper und folglich mit einem geringeren Reibungswiderstand als der *Power-Stroke* kleiner ist als der Vorwärtsschritt. Durch diese zeitlich asymmetrische Bewegung kann sich die Alge somit im Mittel vorwärts bewegen, wobei die Trajektorie der CR, eine oszillatorische Substruktur, wie in Abb. 4.3(c) im vergrößerten Bereich gezeigt, aufweist. Die Frequenz, mit der die Flagellen der CR oszillieren, beträgt circa 50Hz [31].

Während der Fortbewegung dreht sich die Alge gegen den Uhrzeigersinn um die eigene Längsachse, da die Flagellen nicht in einer Ebene, sondern leicht verkippt zueinander schlagen [34, 136, 138, 147, 148, 150, 151]. Zudem weisen die Flagellen eine unterschiedliche Intensität beim Schlagen auf. Das Zusammenspiel dieser Effekte führt zu einer Bewegung auf einer helikalen Bahn, wie in Abb. 4.3(c) skizziert [136, 138, 147, 148, 150]. Für die Beschreibung der Bewegung der CR wird häufig, wie auch in dieser Arbeit, der gemittelte Bewegungsvorgang der Algen dargestellt [31, 149]. Das entsprechende Strömungsprofil der Algen kann durch einen Kraftdipol mit *Puller*-Charakteristik, wie in Abb. 4.3(b) gezeigt, genähert werden.

In Abwesenheit einer Lichtquelle vollziehen CR eine sogenannte *run-and-tumble* Bewegung [33, 137, 152]. Dabei bewegen sich die Algen für eine Zeit τ auf einer geraden, helikalen Bahn. Nach dieser Zeit vollziehen sie einen sogenannten Taumel-Vorgang (engl. *Tumbling*) und schwimmen anschließend in eine neue, zufällige Richtung wieder auf einer Geraden bis zum nächsten Taumel-Vorgang [137, 152]. Eine mögliche Ursache für dieses Verhalten ist die Desynchronisation der Flagellen, welcher zu einer zufälligen Reorientierung der Schwimmrichtung während der Bewegung führt [137, 152]. Dieses Bewegungsmuster ist schematisch in Abb. 4.4 dargestellt. Die Zeiten τ , in denen die Algen auf einer Geraden schwimmen, weisen eine exponentiell abfallende Statistik auf [152].

In Anwesenheit einer Lichtquelle geht die ungeordnete *run-and-tumble* Bewegung in eine gerichtete Bewegung entlang der Lichtquelle über, auch *Phototaxis* genannt [30, 142]. Es wird vermutet, dass bei CR die Licht-gesteuerte Bewegung auf dem folgenden Effekt beruht:

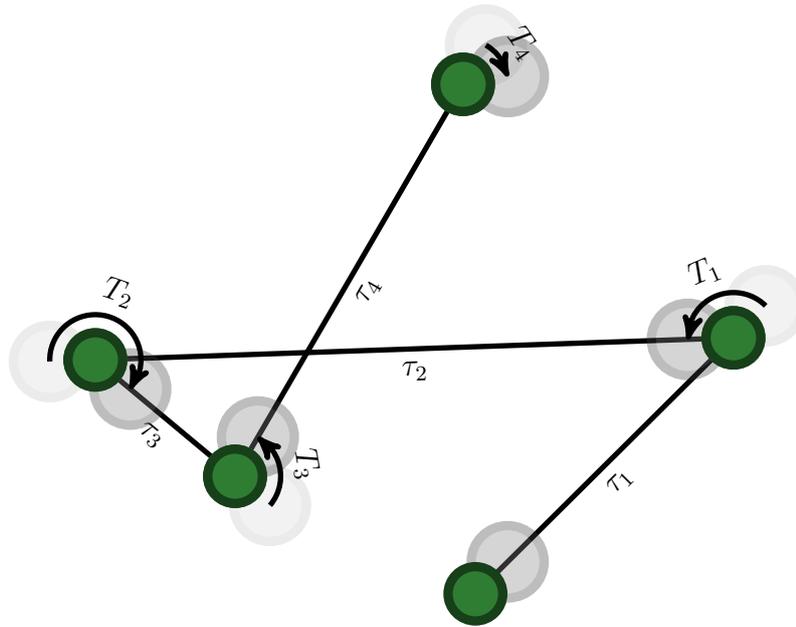


Abb. 4.4.: Darstellung der *run-and-tumble* Bewegung der CR [137, 152] in Abwesenheit einer Lichtquelle. Während der Fortbewegung bewegt sich die Alge für eine ballistische Zeit mit Mittelwert τ , nahezu auf einer Geraden. Anschließend findet eine Reorientierung in eine zufällige Richtung statt.

Das *cis*- bzw. *trans*-Flagellum ändert die Oszillationsdynamik je nach Lichtintensität, die auf den Augenfleck trifft [153, 154]. Somit wird die helikale Bahn wie in Abb. 4.3(c) skizziert, abgelenkt, wenn das Licht nicht parallel zur Schwimmrichtung der Alge eintrifft, da der Lichtfleck bei der Rotation um die eigene Achse wechselnder Einstrahlung ausgesetzt ist. Ist die Schwimmrichtung parallel zur Lichteinstrahlung, ändert sich die Belichtung des Augenflecks während der Schwimmer-Rotation im Mittel nicht und die Bewegungsrichtung ist nicht gekrümmt. Dies hilft den Algen dabei, den optimalen Lebensraum zu finden. Die Schwimmer können, je nach Algenstamm, sowohl positive als auch negative *Phototaxis* aufweisen [147].

Auch in Anwesenheit einer Lichtquelle ist die Bewegung der Algen nicht vollständig deterministisch. Die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Orientierungen θ von CR relativ zur Lichtquelle kann in einer ruhenden Flüssigkeit durch

$$\psi(\theta) = \frac{\Gamma}{2\pi} \frac{1}{\frac{\Gamma^2}{4} + \theta^2} \quad (4.6)$$

genähert werden, was einer Lorentzverteilung entspricht [140].

4.2.2. Eigenschaften der im Experiment untersuchten *Chlamydomonas reinhardtii*

Die Experimente wurden von Marvin Brun-Cosme-Bruny im Labor Universität Grenoble Alpes, CNRS, LIPhy durchgeführt, wobei die verwendeten Materialien und Methoden in [116] zu finden sind. Für die Versuche wurden Algen *Chlamydomonas reinhardtii* des Wildtyps CC-124 bei 22°C in der Mitte der exponentiellen Wachstumsphase des 14h/10h Hell/Dunkel Zyklus gewonnen. Dieser Wildtyp hat einen Körperdurchmesser von ungefähr 10µm und zeigt negative Phototaxis als Reaktion auf Lichteinfall im Bereich einer Wellenlänge um 510nm [155] und schwimmt mit circa 130µm/s.

Für die Herstellung der lichtdurchlässigen Hindernisse wurde ein Lithographie-Verfahren mit transparentem PDMS verwendet [156], der zusätzlich durch Bovine Serum Albumine Beschichtet wurde.

4.2.3. Numerische Modellierung der *Chlamydomonas reinhardtii*

In den vorausgehenden Erläuterungen in Abschnitt 4.2.1 wurden die allgemeinen Grundlagen zum Aufbau und Fortbewegung der Algen CR beschrieben. Diese sollen später in Abschnitt 5 auf ihr Verhalten in einer komplexen Umgebung hin untersucht werden. Hierfür werden numerische Simulationen mit und ohne Berücksichtigung der umgebenden Flüssigkeit durchgeführt. In diesem Abschnitt werden die Grundlagen für die theoretische Beschreibung der vorhergehenden Ausführungen zur Fortbewegung der CR gegeben, die dann in Abschnitt 5 verwendet werden. Teile aus dieser Beschreibung sind bereits in der Veröffentlichung [116] zu finden.

Die Modellierung der Schwimmer in dieser Arbeit ist dazu gedacht, das Verhalten von Schwimmern in Wechselwirkung mit einer komplexen Umgebung zu erfassen, wobei das zeitlich gemittelte Verhalten beim Durchqueren einer Hindernis-Landschaft untersucht wird. Die Bewegung soll hierbei im Mittel qualitativ richtig wiedergegeben werden. Für diesen Zweck werden die Schwimmer basierend auf dem Modell aus [140] modelliert, das um eine Kontaktwechselwirkung sowie der Kopplung an die LBM zur Simulation der hydrodynamischen Wechselwirkung, erweitert wird.

Aufbau der Schwimmer

Um die Algen zu modellieren, wird eine Repräsentation wie in Abb. 4.5(a) dargestellt, verwendet. Diese werden durch eine Position \mathbf{r}_b des Körpers sowie der Orientierung $\hat{\mathbf{e}}$

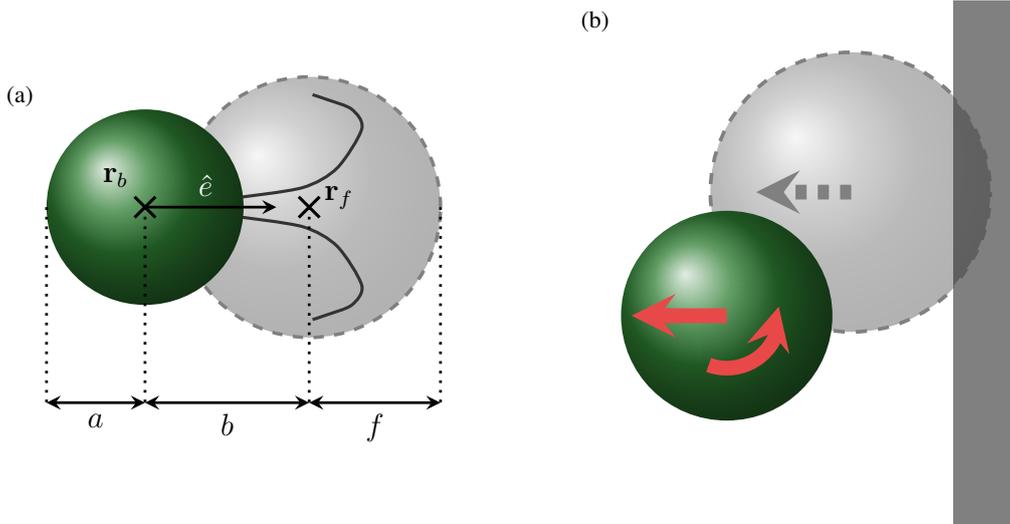


Abb. 4.5.: Die CR werden in dieser Arbeit als runder Körper mit Radius a am Ort \mathbf{r} modelliert, der für die Flüssigkeit undurchdringlich ist (Kugel, dargestellt in der LBM als bewegliche Wand) und bei Kontakt mit Objekten eine abstoßende Wechselwirkung erfährt. Die CR besitzen zudem eine Schwimmrichtung $\hat{\mathbf{e}}$ und eine abstoßende Region mit Radius f an der Position $\mathbf{r} + \hat{\mathbf{e}}b$. Diese Region spiegelt den Kontaktbereich der Flagellen wieder [106, 108, 114, 157].

beschrieben. Der Körper wird als Kugel mit Radius a an der Position \mathbf{r}_b genähert. Kommen die Flagellen der CR bei der Schwimmbewegung in Kontakt mit einem Hindernis, sorgt die periodische Bewegung der Schwimmerarme für eine Abstoßung zwischen den Algen und dem Objekt [106, 108, 114, 157]. Da dieser Effekt die Verweildauer und den Winkel der Schwimmer nach der Kollision mit Objekten beeinflusst, muss dies im Modell der CR berücksichtigt werden. Die Flagellen werden durch ein Kontaktgebiet mit effektivem Bewegungsradius $\frac{4}{3}a$ im Abstand $b = \frac{5}{3}a$ zum Körper modelliert, welcher das während der Schwimmbewegung erreichte Gebiet der Geißeln repräsentiert [106, 108, 114, 157]. Die Aktivität wird über eine Dipolkraft mit *Puller*-Charakteristik nachgebildet. Die auf den Körper wirkenden Kräfte, welche nicht durch die Flüssigkeit hervorgerufen werden, sind gegeben durch

$$\mathbf{F}_b = \mathbf{F}_d + \sum_i \mathbf{F}_e(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_b) + \mathbf{F}_e(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_f), \quad (4.7)$$

$$\mathbf{T}_b = \sum_i (\mathbf{r}_f - \mathbf{r}_b) \times \mathbf{F}_e(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_f),$$

wobei die Summe über alle Objekte i an den Orten \mathbf{r}_i ausgeführt wird, die für die Abstoßung in Betracht gezogen werden sollen.

Hierbei ist $\mathbf{F}_d = F_d \hat{\mathbf{e}}$ die auf den Körper in Schwimmrichtung $\hat{\mathbf{e}}$ wirkende Dipolkraft. Eine

entgegengesetzte Kraft $-\mathbf{F}_d$ wird bei Simulationen mit der LBM auf die Flüssigkeit an der Position $\mathbf{r}_b + \hat{\mathbf{e}}_b$ als externe Kraft mithilfe der *Immersed-Boundary* Methode angelegt (siehe Abschnitt 4.1.3). Die separierende Kontaktkraft $\mathbf{F}_e(\mathbf{r})$ ist der abstoßende Ast des *Weeks-Chandler-Anderson* Potentials [158] und setzt ein, falls zwei Objekte überlappen.

Die Kräfte $\mathbf{F}_e(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_f)$ und Drehmomente $(\mathbf{r}_f - \mathbf{r}_b) \times \mathbf{F}_e(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_f)$ sind die durch die Flagellen hervorgerufenen Beiträge (siehe Abb. 4.5(b)), welche auf den Körper im Abstand $\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_f$ übertragen werden.

Bewegungsgleichung der Schwimmerdynamik

Für die Bestimmung der Dynamik des Schwimmermodells muss anhand der jeweiligen Konfiguration des Systems die Geschwindigkeit \mathbf{v}_b und Winkelgeschwindigkeit \mathbf{w}_b der Körper bestimmt werden. Für die späteren Untersuchungen werden zwei verschiedene Techniken verwendet: Zum einen kommt die LBM zum Einsatz, welche die Effekte der hydrodynamischen Wechselwirkung beinhaltet. Zudem wird ein ballistisches Verfahren verwendet, das die Wechselwirkung mit der Flüssigkeit vernachlässigt. Beide Methoden erhalten als Input die Schwimmer-Informationen (Position $\mathbf{r}_{b,i}$, nicht hydrodynamische Kräfte und Drehmomente $\mathbf{F}_{b,i}$ und $\mathbf{T}_{b,i}$ sowie Dipol-Kräfte $\mathbf{F}_{d,i}$) aller Schwimmer $i = 1, \dots, N$ bei einer Gesamtzahl an N Schwimmern und liefern die entsprechenden Geschwindigkeiten \mathbf{v}_i und Winkelgeschwindigkeiten \mathbf{w}_i der einzelnen Schwimmer. Die Positionen und Orientierungen können anschließend mit einem Integrationsverfahren (zum Beispiel Euler oder Runge-Kutta) numerisch integriert werden.

Bewegung unter Berücksichtigung der hydrodynamischen Wechselwirkung mithilfe der LBM — Um den Einfluss der Hydrodynamik zu bestimmen wird die LBM verwendet. Für jeden Schwimmer i werden zur Zeit t hierfür die Dipolkräfte $-\hat{\mathbf{e}}_i F_d$ an der Position $\mathbf{r}_{f,i}$ als externe Volumenkräfte mit der *Immersed-Boundary* Methode in die LBM gemäß Abschnitt 4.1.3 eingebunden. Die Körper sollen undurchdringlich für die Flüssigkeit sein, weshalb sie als harte Kugeln (siehe Abschnitt 4.1.2) mit Radius a an der Position $\mathbf{r}_{b,i}$ mit anliegenden Kräften $\mathbf{F}_{b,i}$ und Drehmomenten $\mathbf{T}_{b,i}$ (siehe Gleichungen (4.7)) eingebunden werden. Anschließend wird ein Zeitschritt der LBM durchgeführt, in dem die Wechselwirkung der Schwimmer mit der Flüssigkeit (wie zum Beispiel Reibung und hydrodynamische Wechselwirkung mit anderen Schwimmern und Wänden) berechnet und die resultierenden Geschwindigkeiten \mathbf{v}_i und \mathbf{w}_i gemäß Gleichungen (4.5) zurückgeliefert werden.

Dissipatives-Kollosions-Modell — Um den Einfluss der rein kontaktbasierten Effekte von hydrodynamischen Effekten trennen zu können, wird das Dissipatives-Kollosions-Modell (DKM) eingeführt. Hierbei werden die Geschwindigkeiten \mathbf{v}_i und Winkelgeschwindigkeiten

\mathbf{w}_i durch die Stokessche Reibung der Teilchen nach Gleichungen (3.6) berechnet, d.h.

$$\mathbf{v}_i = \frac{\mathbf{F}_{b,i}}{6\pi\eta a} \quad , \quad \mathbf{w}_i = \frac{\mathbf{T}_{b,i}}{8\pi\eta a^3} \quad ,$$

wobei η die Viskosität ist. Diese Methode erlaubt es, die Bewegung der Mikroschwimmer aufgrund der Kontaktwechselwirkung von hydrodynamischen Einflüssen entkoppelt zu betrachten.

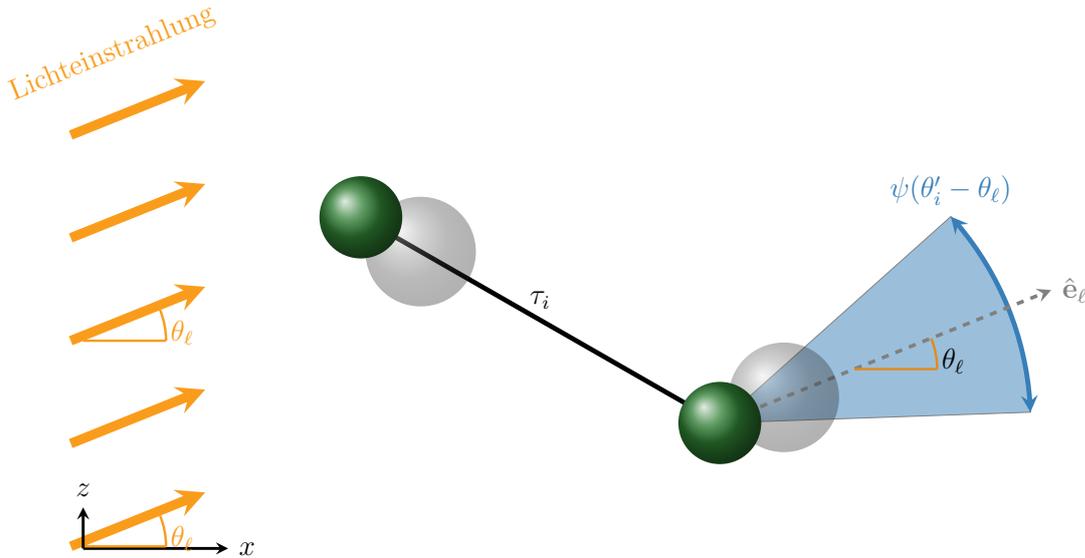


Abb. 4.6.: Darstellung des phototaktischen Verhaltens im Modell der CR. Nach einer zufällig gewählten ballistischen Zeit τ_i wird der Schwimmer gemäß der Lichtquelle reorientiert. Hierbei wird die neue Schwimmerrichtung $\hat{\mathbf{e}}'$ zufällig gewählt, wobei die Verteilung des neuen Winkels θ'_i zur Lichtquelle mit θ_ℓ einer Lorentzverteilung Gl. (4.9) entspricht, die um θ_ℓ zentriert ist. Die ballistischen Zeiten sind gemäß Gl. (4.8) verteilt. Die Darstellung entspricht CR mit negativer Phototaxis, wie sie auch im experimentellen Versuchsaufbau verwendet werden (siehe Abschnitt 4.2.2).

Modellierung des phototaktischen Verhaltens

Für die Modellierung des phototaktischen Verhaltens wird gemäß [140] die Schwimmer-Orientierungen mit einer gewissen Rate α reorientiert. Die Zeiten τ_i zwischen zwei Reorientierungen werden dabei durch eine exponentielle Verteilung

$$p(\tau_i) = \alpha e^{-\alpha\tau_i} \quad (4.8)$$

beschrieben, wobei $\alpha \approx 0.33/\text{s}$ die Rate der Reorientierungen angibt [140]. Nach einer Reorientierung wird die neue Richtung $\hat{\mathbf{e}}'_i$ des Schwimmers i anhand der Verteilungsfunktion

in Gl. (4.6) gewählt, sodass die Schwimmrichtungen nach einem solchen Ereignis eine Lorentzverteilung aufweisen (vgl. Abschnitt 4.2.1 bzw. [33]). Hierbei wird die negative Phototaxis des im experimentellen Aufbau verwendeten Stammes der CR beachtet und die Schwimmer reorientieren sich in Richtung der Licht-Vektoren, weg von der Lichtquelle (siehe Abschnitt 4.2.2 bzw. Abb. 4.6). Falls der Schwimmer nach der Reorientierung mit einem Hindernis oder anderen Schwimmer überlappen würde, wird die Reorientierung nicht durchgeführt. Soll eine Lichteinstrahlung in der xy -Ebene mit Winkel θ_ℓ zur x -Achse abgebildet werden, so entspricht die verwendete Verteilung

$$\psi(\theta_{i'} - \theta_\ell, \Gamma) = \frac{\Gamma}{2\pi} \frac{1}{\frac{\Gamma^2}{4} + (\theta_{i'} - \theta_\ell)^2}, \quad (4.9)$$

welche auf den Bereich $-\pi < \theta_{i'} < \pi$ beschränkt wird. Hierbei ist $\theta_{i'}$ der Winkel der Schwimmrichtung des Schwimmers i zur x -Achse nach der Reorientierung und Γ gibt die Breite der Verteilung an.

Parameterwahl

Für die beiden Simulationsmethoden werden die Simulations-Parameter gleich gewählt.

Neben den in Abschnitt 4.1 angegebenen Konstanten wird $\eta = \frac{1}{6}$ sowie $\rho_{fluid} = \rho_{swimmer} = 1$ gewählt. Für die LBM ergibt sich somit eine Relaxationskonstante von $\tau = 1$, was innerhalb des Stabilitätsbereichs $\tau > \frac{\Delta t}{2} = \frac{1}{2}$ liegt [82]. Die Schwimmerkörper werden mit $a = 3$ modelliert, womit sie eine hinreichend gute Gitter-Auflösung in der LBM aufweisen, jedoch möglichst klein gewählt wurden, um die Anzahl der zu simulierenden Flüssigkeitsknoten und somit die Simulationszeit gering zu halten.

Für die Wahl der Schwimmergeschwindigkeit V_0 muss eine hinreichend gute Übereinstimmung des Strömungsprofils für den Stokes-Limes gegeben sein, was für $V_0 = 5.4 \cdot 10^{-3}$ erfüllt ist (siehe Appendix A für die Prozedur zur Auswahl der Schwimmer-Geschwindigkeit). Da im DKM die Rückströmung der Flagellen vernachlässigt wird, ist die Dipol-Stärke, die zu $V_0 = 5.4 \cdot 10^{-3}$ führt, in beiden Methoden verschieden. Die gewünschte Geschwindigkeit stellt sich für eine Dipolstärke $F_d^{(LBM)} = 0.25$ in der LBM bzw. $F_d^{(DKM)} = 0.051$ für DKM ein.

Das mit der LBM für die gewählten Parameter erhaltene Strömungsprofil der Schwimmer ist in Abb. 4.7 dargestellt. Im festen Laborsystem (linke Spalte) erkennt man die für CR typische *Puller*-Charakteristik des Strömungsprofils.

Für die Rate der Reorientierung wird der Wert von $\alpha_P = 0.014 \frac{V_0}{a}$ nahe des Wertes $\alpha = 0.33/s$

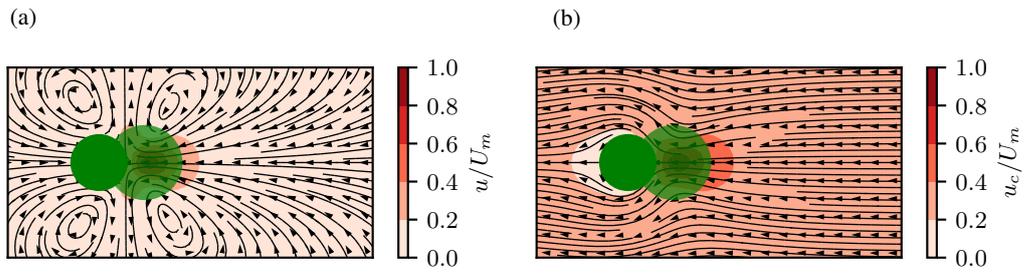


Abb. 4.7.: Strömungsprofil $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ der LBM für das Dipol-Schwimmer Modell, normiert mit der maximalen Flussstärke U_m im festen Laborsystem (a) sowie im mitbewegten System des Schwimmers (b) mit $\mathbf{u}_c(\mathbf{r}) = \mathbf{u}(\mathbf{r}) - \mathbf{e}V_0$. Man erkennt im Laborsystem die für CR typische *Puller*-Charakteristik.

verwendet [140].

5. Mikroschwimmer in komplexer Umgebung

In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse der Untersuchungen zu dem Mikroschwimmern CR bei der Durchquerung einer komplexen Umgebung dargestellt. Teile dieses Abschnittes wurden bereits in Marvin Brun-Cosme-Bruny, Andre Förtsch, Walter Zimmermann, Eric Bertin, Philippe Peyla, and Salima Rafäi, Phys. Rev. Fluids, 5, 093302,(2020) [116] veröffentlicht. Das Design und die Implementierung des numerischen Codes für das deterministische Modell und die numerischen Simulationen sowie deren Durchführung wurden vom Autor vorgenommen. Das Design, der Aufbau und die Durchführung der experimentellen Versuche wurde von M. Brun-Cosme-Bruny zusammen mit S. Rafäi und P. Peyla durchgeführt.

5.1. Einleitung und Motivation

Wie in Abschnitt 3.3 beschrieben, beeinflussen Hindernisse das Verhalten von Mikroschwimmern auf verschiedene Weise. In der Natur vorkommende Mikroschwimmer befinden sich häufig in porösen Medien oder leben in Geweben, welche eine komplexe Umgebung mit Hindernissen darstellen, mit denen die Schwimmer interagieren [159–161]. Auch im Labor finden sich diese Umgebungen wieder, wie bspw. bei der Kultivierung und Untersuchung von Schwimmern in Nährmedien wie Agar [162].

Die Dynamik der Mikroschwimmer wird dabei durch wiederholte Wechselwirkung mit Hindernissen bestimmt, was einen großen Einfluss auf die Trajektorien hat und sogar das Zusammenleben verschiedener Spezies beeinflusst [159–163]. In Böden ist zum Beispiel die Porengröße ein wichtiger Faktor, der die bakterielle Zusammensetzung sowie die Biodiversität koexistierender Bakterien bestimmt [159–161]. Auch das Schwimmverhalten von aktiven Teilchen wird durch komplexe Medien geprägt und deren Diffusion wird durch Hindernisse verändert [164]. In Nährmedien zeigt sich eine erhöhte Diffusivität oder kollektive Dynamik der aktiven Schwimmer, bei welchen die Schwimmrichtung einen Rausch-Beitrag

beinhaltet [162, 165] oder Subdiffusion sowie Regime, in denen die Teilchen durch die Umgebung gefangen werden, abhängig von den jeweiligen Teilchen Eigenschaften [73, 163, 166].

Werden die Teilchen durch externe Einflüsse getrieben, kommen zusätzliche Effekte hinzu. In [167] wurden *E. Coli* Bakterien in einer Strömung untersucht, die durch zufällig angeordnete Pfeiler mit variierendem Durchmesser führt. Dort konnte gezeigt werden, dass die Aktivität die Verweildauer der Bakterien in der Nähe der Pfeiler erhöht und sich Korridore mit erhöhtem Schwimmer-Durchsatz bilden. Lässt man aktive Teilchen in einem Fluss durch ein periodisches Gitter fließen, so ändert sich die Charakteristik von aktiver Dispersion hin zur *Taylor*-Dispersion [71]. Neben einem externen, treibenden Fluss können auch externe Felder für einen Drift der Teilchen verwendet werden. Passive Teilchen zeigen ein sogenanntes *Locking* oder Einrasten der Richtung, wenn sie durch ein externes Feld durch periodische Gitter gelenkt werden [168–170]. Die mittlere Richtung ist abhängig von der Kombination aus Teilchen und Hindernis-Parametern, weshalb dieser Effekt das Sortieren von Teilchen nach gewissen Eigenschaften erlaubt [168–170]. Auch für aktive Teilchen mit einem zusätzlichen externen Drift wurde dieser Effekt vorhergesagt [171, 172]. Dort wurden Scheiben mit konstanter Geschwindigkeit und externer Krafteinwirkung untersucht, wobei sowohl Phasen der Richtungsselektion als auch blockierte oder musterbildende Zustände gefunden wurden [171]. Außerdem ist die Form der Hindernisse in diesem Zusammenhang von Interesse. In [173] wurden aktive Brownsche Teilchen mit einem externen Drift beim Durchqueren eines Parcours aus periodisch angeordneten, ellipsoidalen Hindernissen untersucht. Hierbei zeigte sich, dass die Teilchen während des Durchquerens eine Ablenkung erfahren und sich sogar senkrecht zur externen treibenden Kraft bewegen können, wobei die freien Achsen der Gitteranordnung bei der Bewegung bevorzugt werden [173].

Das Verständnis, wie die Wechselwirkung das Verhalten von aktiven Objekten in heterogenen Medien beeinflusst, kann zur Entwicklung von Lösungsansätzen verschiedener Probleme beitragen, wie sie z. B. in der Medizin bei der Krebsbekämpfung, der industriellen Treibstoffgewinnung von Biomaterialien oder vielen anderen Gebieten auftreten [12, 174–178].

Zur Untersuchung dieser Szenarien sind die Mikroschwimmer CR besonders geeignet: Sie zeigen phototaktisches Verhalten und bewegen sich relativ zur Richtung einer Lichtquelle. Somit ist eine einfache, gerichtete Führung der Teilchen möglich, ohne dass externe Felder oder Ströme verwendet werden müssen.

Im Folgenden werden Modelle dieser Mikroschwimmer bei der Wechselwirkung mit einer komplexen Umgebung beschrieben. Es wird untersucht, wie die Bewegung der Schwimmer

bei Durchqueren einer Landschaft aus zylindrischen Hindernissen beeinflusst wird. Dabei spielen verschiedene Effekte eine Rolle. Zum einen wird die Dynamik durch die kontaktbasierte Wechselwirkung mit den Hindernissen verändert. Hierbei ist von Interesse, welchen Einfluss eine wiederholte Streuung an den Zylindern auf die mittlere Schwimmrichtung hat. Zudem wirkt sich die hydrodynamische Wechselwirkung auf die Bewegung der aktiven Teilchen aus. Durch die Möglichkeit, die hydrodynamische Wechselwirkung selektiert an- und abzuschalten wird deren Einfluss auf die Schwimmerdynamik analysiert. Des Weiteren besitzt die Schwimmcharakteristik der CR einen statistischen Anteil in der Orientierung und es wird untersucht, welchen Einfluss dieser auf die mittlere Schwimmrichtung hat.

5.2. Aufbau des untersuchten Systems

In Abb. 5.1 ist der experimentelle Aufbau dargestellt. Dieser wurde entsprechend für die Simulationen übernommen (siehe auch [116]).

Die Schwimmer werden in eine Flüssigkeitskammer zwischen zwei Platten im Abstand $h = 14a$ in y Richtung gegeben. In diesem befindet sich ein quadratisches Array von zylindrischen Hindernissen mit einem Durchmesser von $D = 40a$, die periodisch mit einem Spalt $d = 6a$ in x - und z -Richtung platziert sind und eine Symmetrieachse entlang der x - und z -Richtung aufweisen. Während des Durchquerens dieses Hindernisgitters soll eine Reorientierung der CR möglich sein. Dementsprechend wurden die Längenverhältnisse des Hindernisgitters in der Größenordnung der Persistenzlänge der CR gewählt.

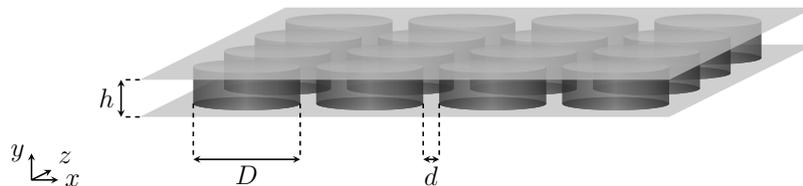
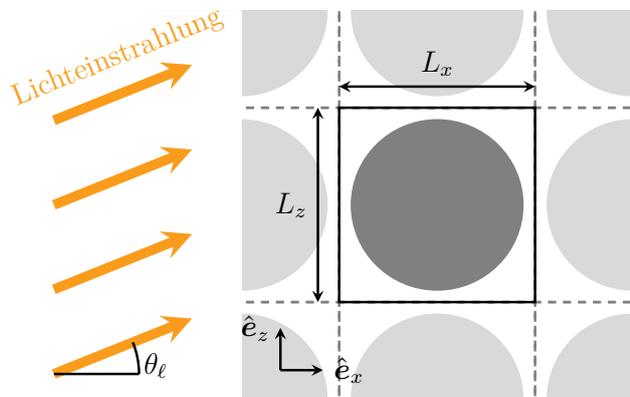


Abb. 5.1.: Skizze eines Ausschnitts des Versuchsaufbaus der Flüssigkeitszelle. Die Zelle ist in Richtung y durch zwei Platten im Abstand $h = 14a$ begrenzt, zwischen denen sich das quadratische Array aus zylindrischen Hindernissen mit Durchmesser $D = 40a$ und Oberflächenabstand $d = 6a$ in x - und z -Richtungen befindet.

Für die Simulationen wurde das Hindernisgitter durch eine Box der Länge $L_x = L_y = D + d = 46a$ und periodischen Rändern in x - und z -Richtung mit einem zylindrischen Hindernis modelliert, welche das quadratische Hindernisgitter durch die periodische Fortsetzung abbildet (siehe Abb. 5.2). In y -Richtung werden *No-Slip* Wände in einem Abstand von h verwendet, zwischen denen sich die Algen bewegen. Die Eigenschaften der verwendeten CR sind in Abschnitt 4.2.2 für das Experiment bzw. in Abschnitt 4.2.3 für das numerische

Modell beschrieben. Die Lichteinstrahlung erfolgt in der xz -Ebene, wobei θ_ℓ den Einfallswinkel des Lichtes gegen die x -Achse angibt. Der verwendete Algenstamm weist negative Phototaxis auf, weshalb sich die Schwimmer entsprechend von der Lichtquelle entfernen und in positiver xz -Richtung durch das Hindernisgebiet gelenkt werden.

Abb. 5.2: Skizze einer Einheitszelle für die Simulation (Sicht von oben) mit Länge $L_x = L_y = D + d = 46a$, begrenzt durch die schwarze Linie. In x - und z -Richtung werden in der Simulation periodische Ränder angenommen, wodurch das Hindernisgitter durch die periodische Fortsetzung, angedeutet durch die hellgrauen Kreise, entsteht. In y -Richtung ist die Simulationsebene begrenzt durch *No-Slip* Ränder.



5.3. Experimentelle Eigenschaften

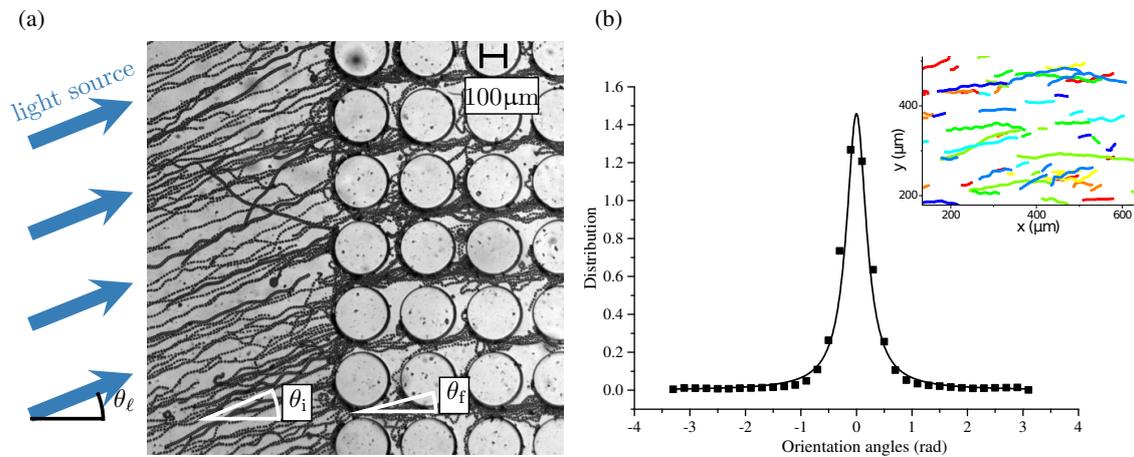


Abb. 5.3.: (a) Abgebildet ist der experimentelle Aufbau mit den Trajektorien der CR [116]. Am linken Rand erkennt man das säulenfreie Gebiet, in dem die gemittelte, ungestörte Schwimmrichtung $\bar{\theta}_i$ bei einem Lichteinfall mit Einfallswinkel θ_ℓ bestimmt wird. Rechts daran grenzt das Gebiet mit den zylindrischen Hindernissen, in dem die mittlere Schwimmrichtung $\bar{\theta}_f$ innerhalb des Hindernisgebiets bestimmt werden kann. (b) Gezeigt ist die Verteilung der Schwimmerorientierungen im säulenfreien Gebiet für $\theta_\ell = 0$ mit angefitzter Lorentzverteilung. Im Inset sind einige Schwimmertrajektorien gezeigt. Nachgebildete Abbildung mit Genehmigung von [116] Copyright (2020) by the American Physical Society.

In Abb. 5.3(a) ist eine Aufnahme des experimentellen Aufbaus von oben gezeigt. Man er-

kennt die Flüssigkeitskammer mit dem Gitter aus transparenten PDMS-Hindernissen mit den geometrischen Verhältnissen, wie in Abschnitt 5.2 beschrieben. An das Hindernisgitter grenzt am linken Rand zusätzlich ein Gebiet ohne Säulen, in welchem sich die Schwimmer ungehindert in x - und z -Richtung bewegen können, wodurch die neutrale Verteilung der Schwimmer bestimmt werden kann. Für die Versuche wurde eine geringe Dichte der Schwimmer verwendet, um die Wechselwirkung zwischen den Schwimmern gering zu halten. Das Licht wird von links im Winkel θ_ℓ gegen die x -Achse eingestrahlt und die Schwimmer, welche negative Phototaxis aufweisen, bewegen sich entsprechend in die entgegengesetzte Richtung durch das säulenfreie Gebiet in das Hindernisgitter hinein. Die Bestimmung der Trajektorien wird über eine 0.5s gemittelte Schwimmbahn des CR Ensembles durchgeführt, wodurch die Verteilung der Schwimmrichtung θ_i in der säulenfreien Region sowie θ_f innerhalb des Hindernisgitters bestimmt werden kann.

In Abb. 5.3(b) ist die Verteilung der Schwimmer-Orientierungen θ_i in der säulenfreien Region gezeigt, die für eine Lichteinstrahlung $\theta_\ell = 0$ aufgenommen wurde. Man erkennt, dass die Winkel eine Lorentz-Verteilung aufweisen [33]. Die durchgezogene Linie entspricht der Verteilung aus Gl. (4.9) mit einer Breite von $\Gamma = 0.436\text{rad} \approx 25^\circ$. Für einen Lichteinfall $\theta_\ell \neq 0$ erhält man eine um den Mittelwert $\bar{\theta}_i = \langle \theta_i \rangle \approx \theta_\ell$ verschobene Lorentz-Verteilung. Das bedeutet, dass in der säulenfreien Region die Schwimmer im Mittel der negativen Lichteinstrahlung folgen.

Die experimentellen Ergebnisse des Verhaltens der CR innerhalb des Hindernisgitters sind für vier verschiedene Winkel $\theta_\ell \approx \bar{\theta}_i = 10^\circ, 27^\circ, 56^\circ, 87^\circ$ in Abb. 5.4 zu sehen, wobei die linke Spalte die aufgenommenen Trajektorien der Schwimmer zwischen den zylindrischen Säulen zeigt und die rechte Spalte die jeweils zugehörige Orientierungsverteilung θ_f mit Mittelwert $\bar{\theta}_f = \langle \theta_f \rangle$ wiedergibt. Bei den Trajektorien erkennt man, dass sich die Schwimmer für einen Lichteinfall $\theta_\ell \approx 0^\circ, 90^\circ$ im Mittel ohne Abweichung entlang der zylinderfreien Achsen bewegen, welche bei $0^\circ, 90^\circ$ gelegen sind und die Schwimmer nahezu keine Wechsel zwischen den Bahnen zeigen. Dies erkennt man auch in den Verteilungen der Orientierung. Dort fallen die Mittelwerte der Orientierung $\bar{\theta}_f$ innerhalb des Hindernisgebietes mit denen im säulenfreien Gebiet $\bar{\theta}_i$ zusammen, das heißt $\bar{\theta}_f \approx \theta_\ell$ für $\theta_\ell \approx 0^\circ, 90^\circ$. In der zweiten und dritten Reihe sind die Bewegungsmuster bei einem Lichteinfall $\theta_\ell \approx 27^\circ, 56^\circ$ zu sehen. In diesem Fall kollidieren die Bahnen der Schwimmer mit den Zylindern, wenn sie versuchen der Richtung des Lichteinfalls zu folgen und werden daher abgelenkt. Dementsprechend fallen auch die Maxima der Orientierungen für θ_i und θ_f nicht mehr zusammen.

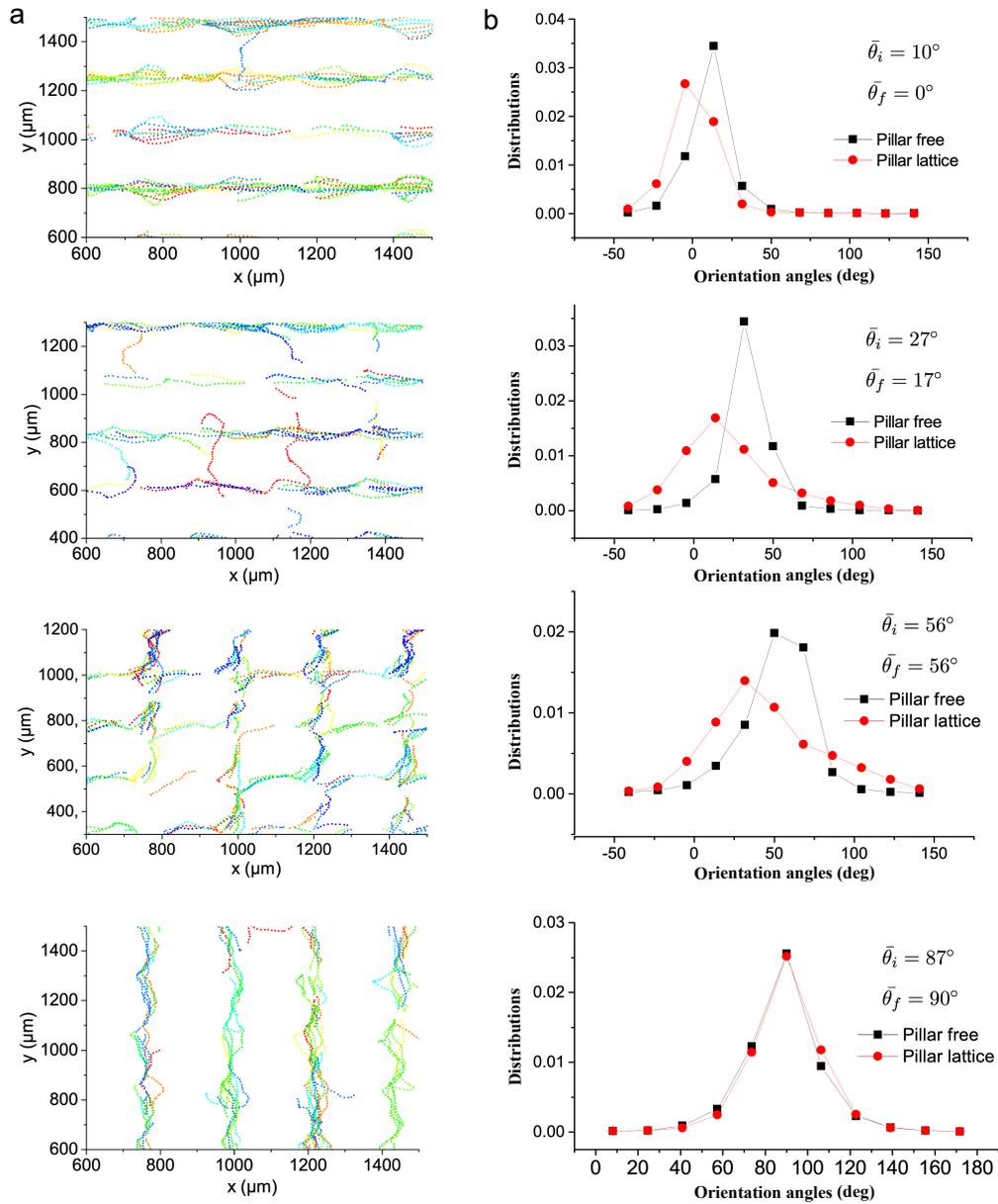


Abb. 5.4.: Experimentelle Ergebnisse der Schwimmerdynamik innerhalb des Hindernisgebietes für vier verschiedene Werte der Lichteinstrahlung $\theta_\ell \approx \bar{\theta}_i = 10^\circ, 27^\circ, 56^\circ, 87^\circ$. Die linke Spalte zeigt die aufgenommenen Trajektorien der Schwimmer zwischen den zylindrischen Hindernissen, während die rechte Spalte die jeweils zugehörige Richtungsverteilung für θ_f der Schwimmer innerhalb des Hindernisgitters mit Mittelwert $\bar{\theta}_f$ angibt. Nachgebildete Abbildung mit Genehmigung von [116] Copyright (2020) by the American Physical Society.

5.4. Numerische Beschreibung des Systems

Um das experimentelle Verhalten und die Ablenkungscharakteristik der Schwimmer im komplexen Medium genauer zu untersuchen, werden numerische Analysen durchgeführt. Der Vorteil hierbei ist, dass verschiedene Effekte wie zum Beispiel die Hydrodynamik oder das phototaktische Verhalten abgeschaltet oder verändert werden können. Somit kann ein tieferer Einblick in die Mechanismen der Schwimmcharakteristik erhalten werden.

5.4.1. Ablenkung der Mikroschwimmer

Für die numerische Untersuchung der Schwimmcharakteristik wird zunächst die Ablenkung der Schwimmer numerisch bestimmt. Diese Ergebnisse werden anschließend mit den experimentellen Daten der Ablenkung verglichen. Für die Bestimmung der Ablenkung der CR bei einem Winkel θ_ℓ des Lichteinfalls in den Simulationen werden die Schwimmer für mehrere Simulationen mit einer zufälligen Position und Orientierung im Simulationsgebiet Abb. 5.3 platziert. Um die experimentellen Verhältnisse des verdünnten Limes abzubilden, wird in den Simulationen nur ein Schwimmer pro Einheitszelle platziert und die aus den Messungen im säulenfreien Gebiet erhaltene Verteilungsbreite von $\Gamma \approx 25^\circ$ sowie eine Reorientierungsrate von $\alpha_P = 0.014 V_0/a$ verwendet (siehe Abschnitt 4.2.3). Zur Bestimmung der Ablenkung für einen Winkel θ_ℓ des Lichteinfalls werden für jede Simulation j die Trajektorien der Schwimmer für mehrere hundert Durchquerungen der Einheitszelle verfolgt und anschließend aus dem Simulationsensemble der mittlere Winkel der Schwimmrichtung $\bar{\theta}_f = \langle \theta_{f,j}(t) \rangle_{j,t}$ bestimmt. Dies wird für verschiedene Winkel θ_ℓ wiederholt.

In Abb. 5.5 sind die Ergebnisse der Ablenkung $\Delta := \bar{\theta}_f - \bar{\theta}_i$ der mittleren Schwimmrichtung $\bar{\theta}_f$ zur ungestörten Schwimmrichtung $\bar{\theta}_i \approx \theta_\ell$ sowohl für die experimentellen Daten als auch die Simulationen mit (LBM) und ohne (DKM) hydrodynamische Wechselwirkung (engl. auch hydrodynamic interaction (HI) genannt) gezeigt. Wie bereits im vorherigen Kapitel erwähnt, zeigen die experimentellen Daten, dass für $\theta_\ell \approx 0^\circ, 90^\circ$ fast keine Ablenkung stattfindet und die Schwimmer das komplexe Medium ohne Ablenkung passieren können. Dies zeigt sich auch in der Darstellung der Ablenkung der Schwimmrichtung, die für $\theta_\ell \approx 0^\circ, 90^\circ$ verschwindet. Für kleine Lichtwinkel θ_ℓ ist die Ablenkung Δ zunächst negativ, was bedeutet, dass der effektive Schwimmwinkel $\bar{\theta}_f$ kleiner ist als der anliegende Einfallswinkel des Lichtes θ_ℓ und die Schwimmer somit in Richtung $\bar{\theta}_f \rightarrow 0$ abgelenkt werden. Mit zunehmendem Winkel θ_ℓ steigt die Ablenkung an, bis sie schließlich ein Extremum von $\Delta \approx -10^\circ$ bei $\theta_\ell \approx 30^\circ$ aufweist. Erhöht man den Einfallswinkel θ_ℓ weiter, so wird der Betrag der Ablenkung Δ kleiner bis er schließlich bei $\theta = 45^\circ$ das Vorzeichen wechselt. Für

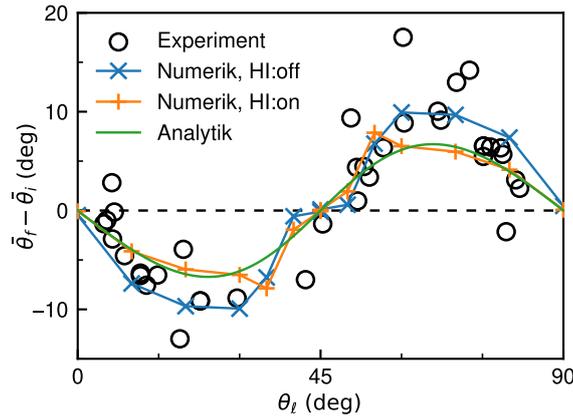


Abb. 5.5.: Vergleich der Ablenkung $\bar{\theta}_f - \bar{\theta}_i$ der effektiven Schwimmrichtung $\bar{\theta}_f$ zur ungestörten Schwimmrichtung $\bar{\theta}_i \approx \theta_\ell$ der CR bei Durchquerung der Zylinder. Die Parameter der Simulation betragen $N = 1, \tau_P = 0.014 V_0/a, \Gamma = 25^\circ$ und für die analytischen Kurven wurden die Werte $A_3 = 0.174, D_R = 0.37/s, \alpha = 0.33/s, \lambda_0 = 2.09/s$ gewählt. Nachgebildete Abbildung mit Genehmigung von [116] Copyright (2020) by the American Physical Society.

Werte $\theta_\ell > 45^\circ$ zeigt sich ein zu $\theta_\ell = 45^\circ$ antisymmetrischer Verlauf.

Der Vergleich der verschiedenen Methoden lässt erkennen, dass die Ablenkung sowohl für das Experiment, als auch in den Simulationen mit und ohne Berücksichtigung der hydrodynamischen Wechselwirkung die gleiche Charakteristik aufweist und beide numerischen Methoden gut mit den experimentellen Daten übereinstimmen. Somit wird die grundlegende Form der Ablenkung nicht durch die Wechselwirkung mit der Flüssigkeit hervorgerufen oder verhindert. Hierbei ist interessant, welchen Einfluss die nicht-hydrodynamischen Effekte auf die Ablenkungsdynamik haben: Wie beeinflusst die Geometrie die Schwimmerbahn durch das komplexe Medium? Welche Rolle spielt die Verteilung der Phototaxis? Um diese Fragen zu klären wird ein deterministisches Modell ohne Berücksichtigung der Lichtquelle erstellt, welches später um den Effekt der Phototaxis erweitert wird.

5.4.2. Deterministisches Modell für Streuung im komplexen Medium

Für die Bestimmung der Ablenkung, die allein durch die geometrischen Eigenschaften der Hindernisse hervorgerufen wird, wird in diesem Abschnitt ein deterministisches Modell der Streuung der Schwimmer während der Durchquerung einer einzelnen Gitterzelle beschrieben. Dieses Modell erlaubt es, die Effekte der Ablenkung getrennt vom Einfluss der Hydrodynamik und der phototaktischen Streuung zu untersuchen. Es liefert zudem eine Grundlage für die Motivation des analytischen Modells, welches in [116] vorgestellt wird.

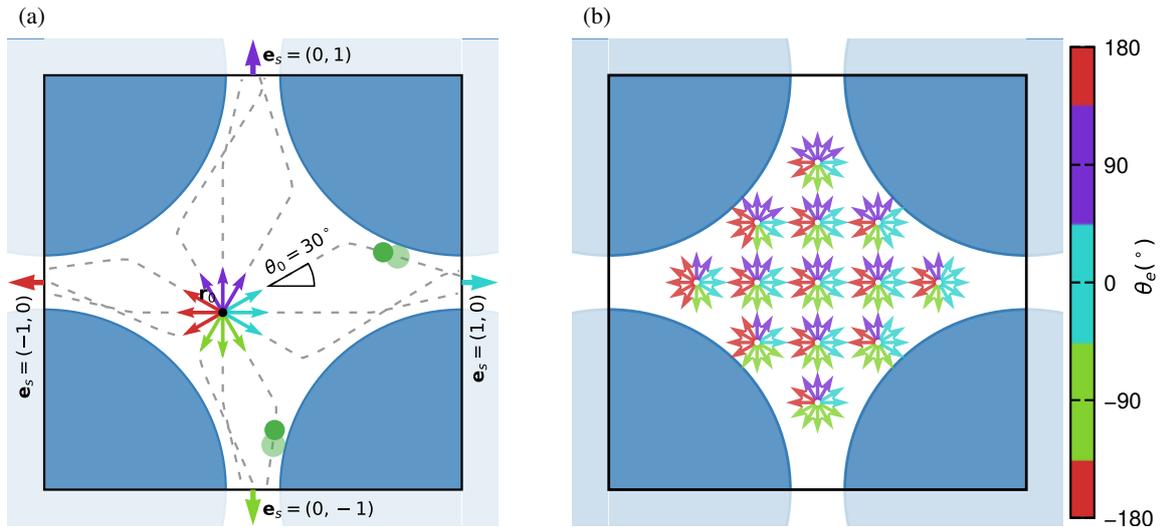


Abb. 5.6.: Skizze des Ablaufs zur Bestimmung der deterministischen Streukurve der Schwimmer mit dem DKM. (a) Die Pfeile um \mathbf{r}_0 zeigen jeweils die Anfangsposition und Orientierung der Schwimmer. Die Trajektorie (grau gestrichelte Linie) wird simuliert, bis der Schwimmer die Gitterzelle verlässt. Der Farbcode der Pfeile gibt an, durch welchen Ausgang der Schwimmer die Gitter-Zelle verlässt. (b) Gezeigt sind einige der verwendeten Startpositionen und Orientierungen mit den jeweiligen Austrittswinkeln θ_s als Farbcode dargestellt, aus denen die Streufunktion $\theta_s(\mathbf{r}_0, \theta_0)$ bestimmt wird. Abbildung (a): Nachgebildete Abbildung mit Genehmigung von [116] Copyright (2020) by the American Physical Society.

Die volle Trajektorie eines Schwimmers während des Durchquerens des komplexen Mediums kann in viele, nacheinander ablaufende Durchquerungen einer einzelnen Gitterzelle aufgeteilt werden, wie sie z. B. in Abb. 5.6 gezeigt ist. Dabei wird der Schwimmer von den zylindrischen Hindernissen abgelenkt. Hierbei ist entscheidend, durch welche der vier Öffnungen, beschrieben durch die Austrittsvektoren $\mathbf{e}_s = \{(\pm 1, 0), (0, \pm 1)\}$, der Schwimmer die Zelle verlässt. Der Fortschritt nach dem Durchqueren einer Zelle beträgt dann $L_K \mathbf{e}_s$, wobei $L_K = L_x = L_y$ die Kantenlänge der Gitterzelle ist. Die Dynamik bei der Durchquerung vieler solcher Zellen ist dann durch die Summe der einzelnen Ablenkungen gegeben, wobei die Austrittsvektoren im Allgemeinen jeweils von den vorherigen Zuständen abhängen können.

Zur Bestimmung der Austrittsvektoren $\mathbf{e}_s(\mathbf{r}_0, \theta_0)$ als Funktion des Ortes und der Orientierung wird mit dem DKM Modell die Schwimmer-Trajektorie ohne Berücksichtigung der phototaktischen Reorientierung simuliert. Der Schwimmer wird mit der Position \mathbf{r}_0 und Orientierung \mathbf{e}_0 initialisiert, wobei \mathbf{e}_0 mit der x -Achse den Winkel θ_0 einschließt. Anschließend wird die simulierte Schwimmerbahn solange verfolgt, bis der Schwimmer die Einheitszelle durch eine der vier Öffnungen verlässt. Eine Skizze des Ablaufs ist in Abb. 5.6 für eine

Position und neun Anfangsorientierungen gezeigt. Diese Prozedur wird für verschiedene, gleichverteilte Anfangsbedingungen ausgeführt. Somit kann der Austrittsvektor $\mathbf{e}_s(\mathbf{r}_0, \theta_0)$ bzw. der Austrittswinkel $\theta_s(\mathbf{r}_0, \theta_0) = \{0^\circ, \pm 90^\circ, 180^\circ\}$ als Funktion der (Anfangs-) Position \mathbf{r}_0 und der (Anfangs-)Orientierung θ_0 gegen die x -Achse bestimmt werden.

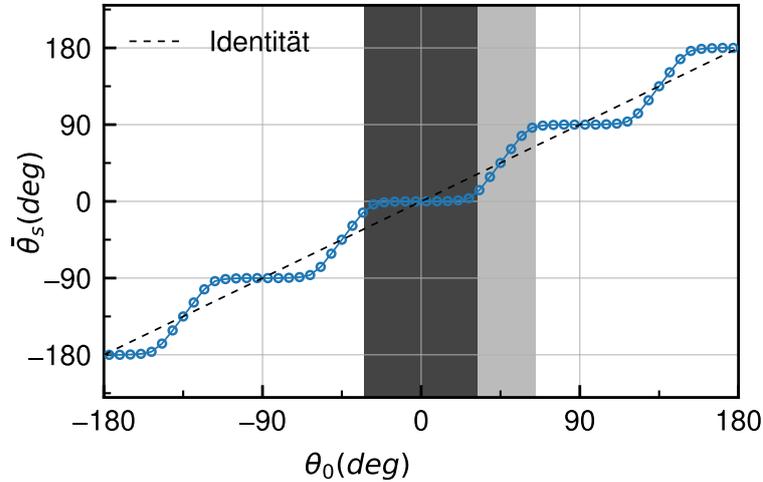


Abb. 5.7.: Die Darstellung der über die Anfangspositionen gemittelten Streuwinkel $\bar{\theta}_s$ des deterministischen Modells für eine einzelne Streuung als Funktion des Anfangswinkels θ_0 weist einen stufenförmigen Verlauf auf. Innerhalb der Symmetrieachsen bei $\theta_0 = 0^\circ, \pm 90^\circ, 180^\circ$ werden die Schwimmer fokussiert, folglich bleibt der Austrittswinkel für $\theta_0 \approx 0^\circ, \pm 90^\circ, 180^\circ$ nahezu unverändert und es bilden sich vier Plateaus (dunkelgrauer Bereich), welche jeweils durch einen steilen Übergangsbereich (hellgrau) verbunden sind. Nachgebildete Abbildung mit Genehmigung von [116] Copyright (2020) by the American Physical Society.

In Abb. 5.7 ist das Ergebnis des Austrittswinkels $\bar{\theta}_s(\theta_0) = \langle \theta \rangle_{\mathbf{r}_0}$, gemittelt über die Anfangspositionen \mathbf{r}_0 dargestellt. Man erkennt, dass die Austrittswinkel eine stufenartige Funktion der Eintrittswinkel sind. Die Stufen treten dabei entlang der hindernisfreien Achsen bei $0^\circ, \pm 90^\circ, 180^\circ$ auf. Startet ein Schwimmer zum Beispiel in der Mitte zwischen den vier angrenzenden Hindernissen mit einem flachen Winkel $\theta_0 \approx 0$, wird er zunächst zu dem rechten Ausgang mit $\mathbf{e}_s = (1,0)$ schwimmen. Für $\theta_0 \neq 0$ wird er eventuell mit dem zylindrischen Hindernis kollidieren und abgelenkt. Ist der Auftreffwinkel jedoch nicht zu groß, wird der Schwimmer weiterhin durch den Ausgang in Richtung $\mathbf{e}_s = (1,0)$ gelenkt. Dies hat zur Folge, dass die mittlere Schwimmrichtung $\bar{\mathbf{e}}_s(\theta_0) = \langle \mathbf{e}_s(\mathbf{r}_0, \theta_0) \rangle_{\mathbf{r}_0}$ für $|\theta_0| \lesssim 30^\circ$ in Richtung $\mathbf{e}_s = (1,0)$ fokussiert wird und ein Plateau in $\bar{\theta}_s$ entsteht (siehe dunkelgrauer Bereich in Abb. 5.7). Aufgrund der Symmetrie des Systems ist dies auch bei $\theta_0 \approx \pm 90^\circ, 180^\circ$ zu beobachten. Zwischen den Plateau-Bereichen mit der Fokussierung zu den jeweiligen Ausgängen existiert ein steiler Übergangsbereich: Mit einer Anfangsorientierung von $\theta_0 = 45^\circ$ ist die Wahrscheinlichkeit nach oben oder rechts abgelenkt zu werden, iden-

tisch und folglich entspricht der Austrittswinkel der Symmetrieachse bei $\theta_s = 45^\circ$. Je nach Abweichung von dieser Achse werden die Schwimmer häufiger zum jeweiligen Ausgang abgelenkt und somit entsteht eine kontinuierliche Verbindung der beiden Plateaus (siehe Abb. 5.7 hellgrauer Bereich). Dies stellt sich aufgrund der Symmetrie des Systems analog für die Fälle $\theta_0 = \pm 45^\circ, \pm 135^\circ$ dar.

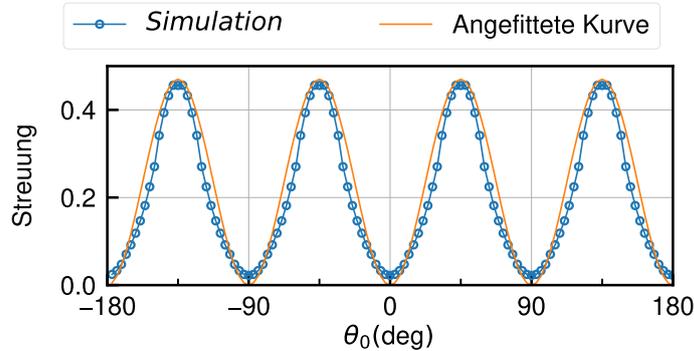


Abb. 5.8.: Mittlere Ablenkung $\langle 1 - \mathbf{e}_0(\theta_0) \cdot \mathbf{e}_s(\theta_0) \rangle_{\mathbf{r}_0}$ der Schwimmer im deterministischen Modell als Funktion der Anfangsorientierung θ_0 . Entlang der Symmetrieachsen bei $\theta_0 = 0^\circ, \pm 90^\circ, 180^\circ$ verschwindet die Ablenkung nahezu. Nachgebildete Abbildung mit Genehmigung von [116] Copyright (2020) by the American Physical Society.

Neben der Bestimmung der Austrittswinkel kann auch die Ablenkung bzw. Streuung über die Dekorrelation

$$\langle 1 - \mathbf{e}_0(\theta, \mathbf{r}_0) \cdot \mathbf{e}_s(\theta, \mathbf{r}_0) \rangle_{\mathbf{r}_0}$$

bestimmt werden. Diese ist in Abb. 5.8 gezeigt. Auch hier kann man die Fokussierung erkennen: Entlang der Richtungen $\theta_0 = 0^\circ, \pm 90^\circ, 180^\circ$ verschwindet die Ablenkung fast vollständig. Für $\theta_0 \approx \pm 45^\circ, \pm 135^\circ$ besitzt die Ablenkung jeweils ein Maximum. Die Form der Ablenkungskurve kann durch die Funktion $\propto [1 - \cos(4\theta_0)]$ genähert werden (siehe Fit in Abb. 5.8) und liefert somit eine mikroskopische Begründung für die in [116] verwendete Streurate des analytischen Modells.

5.4.3. Einfluss der Phototaxis auf die Ablenkungscharakteristik

In Anwesenheit einer Lichtquelle reorientieren sich Schwimmer in Richtung einer äußeren Lichtquelle. Wie bereits in Abschnitt 4.2 beschrieben, kann dies genähert werden als stochastischer Prozess ähnlich einer *Run-and-Tumble* Bewegung, bei dem die neue Richtung entsprechend einer Lorentzverteilung um den Einfallswinkel der Lichtquelle gewählt wird. Die Zeiten, zu denen diese Reorientierung auftritt, sind dabei exponentiell verteilt und

besitzen eine mittlere Rate α für die Orientierungsereignisse. Die experimentellen Abmessungen in Abschnitt 5.3 sind so gewählt, dass die Größenordnung der Persistenzlänge zwischen zwei Reorientierungen der Länge einer Gitterzelle entspricht. Es wird angenommen, dass der Schwimmer nach einer solchen Reorientierung keine Information an den vorherigen Zustand hat.

Folglich kann die effektive Bewegungsrichtung $\bar{\mathbf{e}}_f$ durch das Gitter aufgrund wiederholter Streuungen an einer Gitterzelle nach den Reorientierungen beschrieben werden. Die Ausrichtung nach der Reorientierung entspricht dem initialen Winkel θ_0 eines Streuvorgangs mit der Verteilung $\psi(\theta_0 - \theta_\ell, \Gamma)$ (siehe Gl. (4.9)).

Die effektive Schwimmrichtung $\bar{\mathbf{e}}_f(\theta_\ell, \Gamma)$ in Anwesenheit einer Lichtquelle ergibt sich dann durch den Mittelwert der Austrittsrichtungen $\bar{\mathbf{e}}_s(\theta_0)$, gewichtet mit der jeweiligen Wahrscheinlichkeit $\psi(\theta_0 - \theta_\ell, \Gamma)$ und man erhält

$$\hat{\mathbf{e}}_f(\theta_\ell, \Gamma) = \langle \hat{\mathbf{e}}_s \psi(\theta_0 - \theta_\ell, \Gamma) \rangle_{\theta_0}, \quad (5.1)$$

mit zugehörigem Schwimmwinkel $\bar{\theta}_f$ gegen die x -Achse.

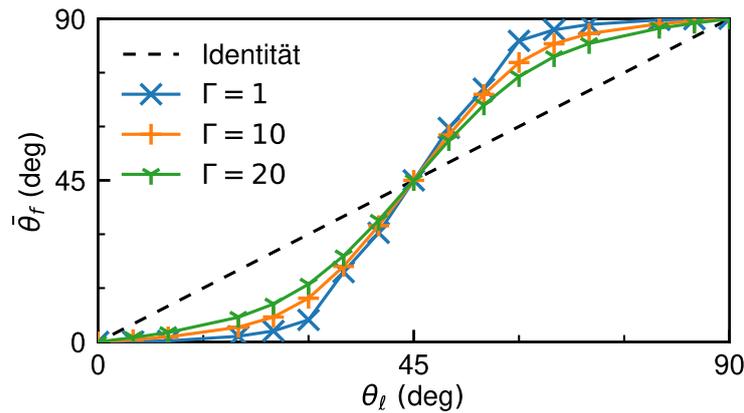


Abb. 5.9.: Die mittlere Ablenkung $\bar{\theta}_f$, welche mithilfe der Streufunktion des deterministischen Modells für ein Streuevent aus Abb. 5.7 unter Berücksichtigung der phototaktischen Reorientierung gemäß der Verteilung Gl. (4.9) erstellt wurde. Gezeigt sind die Verläufe der Orientierungen für drei verschiedene Werte der Verteilungsbreite $\Gamma = 1^\circ, 10^\circ, 20^\circ$. Man erkennt, dass mit breiterer phototaktischer Streuung die Ablenkung hin zur Winkelhalbierenden abgeflacht wird. Somit zeigt das deterministische Modell, dass eine Rauschquelle die Trajektorien der CR bei der Durchquerung eines Hindernisparcours stabilisiert und die Ablenkung abschwächt. Nachgebildete Abbildung mit Genehmigung von [116] Copyright (2020) by the American Physical Society.

In Abb. 5.9 sind die resultierenden mittleren Schwimmwinkel $\bar{\theta}_f$ als Funktion des Winkels des Lichteinfalls für einige Breiten Γ der Lorentzverteilung gezeigt. Betrachtet man die sehr schmale Verteilungsbreite $\Gamma = 1$, so fällt auf, dass die resultierenden Schwimmwinkel

$\bar{\theta}_f(\theta_\ell)$ sehr stufenförmig verlaufen. Für $\theta_\ell \lesssim 30^\circ$ ist der $\bar{\theta}_f(\theta_\ell)$ Verlauf sehr flach und zeigt einen steilen Übergang um $\theta_\ell = 45^\circ$ zum nächsten Plateau, ähnlich zu den Ergebnissen in Abb. 5.7(a) für $\bar{\theta}_s(\theta_0)$. Dies lässt sich damit erklären, dass sich für schmale Verteilungsbreiten ($\Gamma \rightarrow 0$) die Lorentzverteilung einer δ -Distribution annähert und man aus Gl. (5.1) im Limes kleiner Γ die Beziehung

$$\bar{\mathbf{e}}_f(\theta_\ell, \Gamma \rightarrow 0) \approx \langle \bar{\mathbf{e}}_s \delta(\theta_0, \theta_\ell) \rangle_{\theta_0} = \bar{\mathbf{e}}_s(\theta_\ell)$$

erhält. Die mittlere Schwimmrichtung entspricht in diesem Fall dem Verlauf in Abb. 5.7. Für größere Werte von Γ wird die Verteilung immer glatter und nähert sich der Winkelhalbierenden $\bar{\theta}_f = \theta_\ell$ an. Der Grund ist hierbei die breitere *Tumbling*-Verteilung: Auch wenn das Licht in Richtung einer säulenfreien Achse zeigt, so wird es mit breiterer Verteilung immer wahrscheinlicher, dass der Schwimmer nach einer Reorientierung in einen anderen Ausgang gestreut wird, womit die Plateaus schmaler werden und die Übergangsbereiche abflachen.

Dies liefert eine wichtige Erkenntnis: Die Symmetrie der Ablenkung wird durch die geometrischen Eigenschaften des Systems im Zusammenhang mit der Streuung der Schwimmer bestimmt. Hierbei zeigt sich eine Fokussierung der Schwimmerrichtung entlang der vier säulenfreien Symmetrieachsen des Systems. Diese Charakteristik ist überlagert von Effekten, die durch zufällige Ereignisse hervorgerufen werden, wie zum Beispiel der Reorientierung hin zum Licht. Diese sorgen dafür, dass die Ablenkungskurve sich aufgrund der Verteilungsbreite der Reorientierung hin zur Winkelhalbierenden bei $\bar{\theta}_f = \theta_\ell$ angleicht. Der stochastische Anteil hilft somit den Schwimmern, die Ablenkung durch das Hindernismedium zu verringern und sich entlang der Lichteinstrahlung θ_ℓ zu bewegen. Hierbei ist für die Veränderung der Ablenkungskurve zur Winkelhalbierenden unerheblich, welche genaue Form bei diesem Zufallsprozess zugrunde liegt, wie im nächsten Abschnitt dargestellt.

5.4.4. Einfluss der Hydrodynamik auf die numerische Ablenkungscharakteristik

In diesem Abschnitt wird der Einfluss der hydrodynamischen Wechselwirkung untersucht. Zu diesem Zweck wird für die phototaktische Modellierung eine schmale Verteilungsbreite von $\Gamma = 1^\circ$ sowie eine erhöhte Reorientierungsrate von $\alpha_S \approx 9\alpha_P$ verwendet, um Effekte aufgrund der phototaktischen Verteilung zu verringern. Da die hydrodynamische Wechselwirkung auch zwischen verschiedenen Schwimmern auftreten kann, werden neben Simulationen im verdünnten Limes mit einem Schwimmer ($N = 1$) pro Gitterzelle auch

mehrere Schwimmer ($N = 7$) in einer Gitterzelle berücksichtigt.

In Abb. 5.10 sind die Wahrscheinlichkeitsverteilungen $\mathcal{P}(x,y)$ für die Positionen der Schwimmer innerhalb einer Einheitszelle dargestellt. Hierbei wurden mehrere periodische Fortsetzungen des Simulationsgebietes abgebildet, um einen besseren Eindruck der Wahrscheinlichkeitsverteilung zu bekommen. Die Bilder in einer Zeile entsprechen Simulationen der selben Teilchenzahl N und Simulationsmethode. Die Spalten entsprechen einem gleichen Wert θ_ℓ der Lichteinstrahlung.

In der ersten Zeile (a)-(d) sind die Simulationen der DKM ohne Berücksichtigung der HI (simuliert mit der DKM) gezeigt. Für einen Lichteinfall in Richtung der Symmetrieachse $\theta_\ell = 0$ erkennt man in (a), dass die Schwimmer sich vornehmlich entlang der säulenfreien Achse bewegen. Im säulenfreien Korridor sind die Wahrscheinlichkeiten hingegen nahezu gleich verteilt. Lediglich am Kontaktpunkt mit dem Hindernis existiert ein Gebiet erhöhter Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Erhöht man den Anstellwinkel auf $\theta_\ell = 20^\circ$ erkennt man in Bild (b), dass die Schwimmer zwischen den Hindernissen dem Licht in einer Bahn mit einem Winkel von ca. 20° folgen. Entlang dieser Bahn kollidieren sie allerdings mit einem Hindernis und werden abgelenkt. Aufgrund des flachen Auftreffwinkels wird ein Großteil der Schwimmer hierbei in Richtung des Zwischenraumes entlang $\theta = 0^\circ$ gestreut und die Schwimmerbahn zeigt einen Knick am Kontaktpunkt mit dem Hindernis. Bei weiterer Erhöhung des Lichtwinkels zu $\theta_\ell = 30^\circ$ steigt die Wahrscheinlichkeit, dass Schwimmer bei der Kollision mit dem Hindernis nach oben abgelenkt werden. Dies ist am Aufspalten der Bahn in Bild (c) zu erkennen. Für $\theta_\ell = 45^\circ$ (d) ist die Wahrscheinlichkeit zur Streuung in beide Richtungen gleich groß und es stellt sich eine zur Winkelhalbierenden symmetrische Wahrscheinlichkeitsverteilung ein.

Vergleicht man die Ergebnisse ohne Hydrodynamik mit $N = 1$ Schwimmern in der Einheitszelle ((a)-(d)) mit den Ergebnissen mit $N = 7$ Schwimmern in der Einheitszelle ((e)-(h)), so erkennt man, dass sich die Aufenthalts-Wahrscheinlichkeiten nicht ändern. Da für diese Simulationen die HI keine Rolle spielt, können die verschiedenen Schwimmer sich gegenseitig nur über direkten Kontakt beeinflussen. Für $N = 7$ Schwimmer in einer Zelle ist die Wahrscheinlichkeit einer Kollision verschiedener Schwimmer immer noch sehr gering, weshalb die Ergebnisse für $N = 1$ und $N = 7$ ohne Berücksichtigung der HI keine wesentlichen Unterschiede zeigen.

In der dritten Zeile (i)-(l) sind die Simulationsergebnisse der LBM mit Berücksichtigung der HI für $N = 1$ Schwimmer in der Einheitszelle gezeigt. Im Unterschied zu den Ergebnissen der DKM erkennt man, dass die hydrodynamische Wechselwirkung zu einer Fokussierung der Schwimmer in der Kanalmitte zwischen den Hindernissen führt, was besonders für

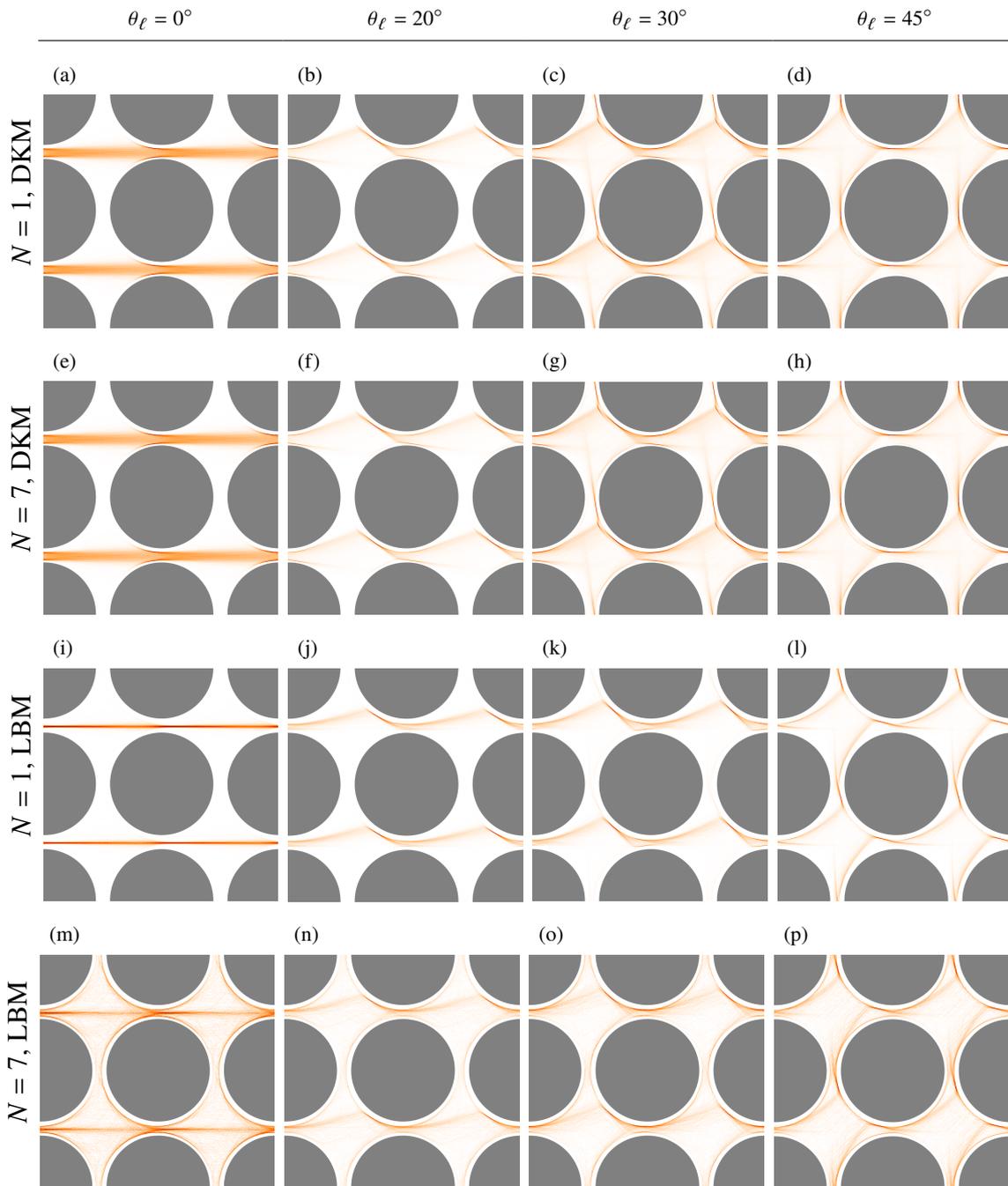


Abb. 5.10.: Wahrscheinlichkeitsverteilung $\mathcal{P}(x,y)$ (a.u.) der Positionen der Schwimmer für verschiedene Anzahlen N an Schwimmer pro Einheitszelle und Lichteinfallswinkel θ_ℓ , einer Verteilungsbreite von $\Gamma = 1^\circ$ und einer Reorientierungsrate von $\alpha_S \approx 9\alpha_P$. Die Schwimmer werden in den Simulationen mit der LBM von den Hindernissen langreichweitig abgestoßen und auf den säulenfreien Achsen fokussiert (vgl. (a) und (i)). In Simulationen (e)-(h) mit der LBM sorgt, im Gegensatz zu (m)-(p) mit der DKM, die Wechselwirkung mehrerer Schwimmer zu einer Streuung und Defokussierung der Aufenthaltswahrscheinlichkeiten. Bilder (a) und (e): Nachgebildete Abbildung mit Genehmigung von [116] Copyright (2020) by the American Physical Society

$\theta_\ell = 0$ im Vergleich von (a) zu (i) erkennbar ist. Zudem verschiebt sich der Wert θ_ℓ , ab dem die Schwimmer bei der Kollision am Hindernis in einen anderen Ausgang gestreut werden durch die Hydrodynamik leicht. Während ohne HI für $\theta_\ell = 30^\circ$ die Wahrscheinlichkeiten nach oben oder rechts gestreut zu werden, ähnlich groß sind (siehe (c)), ist für den Fall mit HI der rechte Ausgang bevorzugt (siehe (k)).

Im Falle $N = 7$ Schwimmer erkennt man in den Simulationen der LBM, dass die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Schwimmer eine breitere Streuung als im Fall von $N = 1$ aufweist. Im Bild (m) ist der Fall $N = 7$ für $\theta_\ell = 0^\circ$ gezeigt. Hier erkennt man zwar noch die Bevorzugung der Symmetrieachse, allerdings ist im gesamten Simulationsbereich eine deutliche Aufenthaltswahrscheinlichkeit für die Schwimmer gegeben. Dies deutet darauf hin, dass die hydrodynamische Wechselwirkung bei einer erhöhten Schwimmerdichte sich wie ein zusätzlicher Rauschterm in den Schwimmertrajektorien auswirkt.

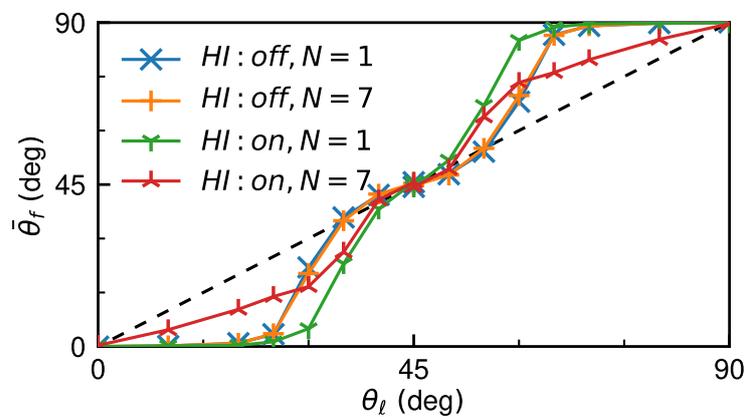


Abb. 5.11.: Ablenkungscharakteristik der CR für Simulationen mit der DKM (HI:off) und der LBM(HI:on) für eine verschiedene Anzahl N an Schwimmern pro Einheitszelle sowie der Verteilungsbreite $\Gamma = 1^\circ$ und einer Reorientierungsrate $\alpha_S \approx 9\alpha_P$. In den Simulationen mit Berücksichtigung der hydrodynamischen Wechselwirkung erkennt man, dass die Ablenkung mit einer höheren Anzahl an Schwimmern pro Einheitszelle verringert wird. In den Simulationen der DKM zeigt sich kein signifikanter Unterschied für $N = 1$ und $N = 7$ Schwimmern pro Einheitszelle. Nachgebildete Abbildung mit Genehmigung von [116] Copyright (2020) by the American Physical Society.

Die Erkenntnisse aus den Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Schwimmerpositionen finden sich auch in den Daten der effektiven Schwimmerrichtungen $\bar{\theta}_f$ wieder. In Abb. 5.11 sind die mittleren Schwimmerrichtungen durch das Hindernisgitter als Funktion des Lichteinfallswinkels θ_ℓ für verschiedene N mit und ohne hydrodynamische Wechselwirkung gezeigt. Zum einen erkennt man den fokussierenden Effekt der HI: Die Simulationen mit $N = 1$ ohne Berücksichtigung der Hydrodynamik (blaue Datenpunkte) sind bis zu einem Lichteinfallswinkel von ca. $\theta_\ell \approx 20^\circ$ entlang der Symmetrieachse mit $\bar{\theta}_f \approx 0^\circ$ fokussiert. Für

die LBM Simulationen mit $N = 1$ (grüne Datenpunkte) zeigt sich hingegen ein Übergang erst bei ca. $\theta_\ell \approx 30^\circ$.

Auch die Interaktion zwischen den Schwimmern für verschiedene Schwimmerzahlen ist ersichtlich. Für die Ablenkung stellt sich ohne HI keine Änderung bei Erhöhen der Schwimmerdichte in der Simulationsebene ein und die beiden Kurven der DKM für $N = 1$ (blaue Datenpunkte) und $N = 7$ (orange Datenpunkte) liegen übereinander. Für die Simulationen mit der LBM zeigt sich hingegen, dass die Interaktion der Schwimmer zu einem ähnlichen Effekt wie eine Erhöhung der Verteilungsbreite in Abschnitt 5.4.3 führt. Die Ablenkung $\bar{\theta}_f$ mit $N = 1$ Schwimmern weist eine deutliche Fokussierung entlang der Symmetrieachse $\theta_\ell = 0^\circ$ auf, während mit $N = 7$ Schwimmern unter Berücksichtigung der HI (rote Kurve) die effektive Schwimmrichtung näher zur Winkelhalbierenden verschoben ist.

Der Grund hierfür ist die nichtlineare Gestalt der hydrodynamischen Wechselwirkung. Aufgrund dieser lenken sich die Schwimmer gegenseitig bei der Durchquerung der Flüssigkeit, unabhängig von der Lichteinstrahlung oder der intrinsischen Reorientierung der Schwimmer, ab. Da diese Ablenkung nichtlinear vom Abstand der Schwimmer untereinander abhängt, ergibt sich eine komplexere Dynamik. Enthält das System eine hinreichend große Schwimmerdichte kann sich dieser Effekt wie eine zusätzliche Rauschquelle auswirken und, wie auch die Verteilungsbreite der Phototaxis, die effektive Schwimmrichtung $\Delta\theta_f$ abflachen.

5.5. Diskussion und Fazit

In diesem Kapitel wurde die Dynamik der Mikroschwimmer *Chlamydomonas reinhardtii* bei der Durchquerung eines Hindernisgebietes, bestehend aus einer quadratischen Anordnung an zylindrischen Hindernissen mit Symmetrieachsen entlang der x - und z -Achsen, untersucht. Hierfür wurde das in Abschnitt 4.2.3 vorgestellte Modell der CR verwendet, welches erlaubt, die Effekte mit hydrodynamischer Wechselwirkung mithilfe der LBM, als auch die rein kontakt-basierten Effekte mittels der DKM getrennt voneinander zu betrachten.

Die untersuchten CR weisen negative Phototaxis auf und bewegen sich bei einem Lichteinfallswinkel θ_ℓ entgegen der Einfallrichtung mit der mittleren Schwimmrichtung $\bar{\theta}_i \approx \theta_\ell$, wobei die Orientierungen einer Lorentzverteilung folgen.

In einem experimentellen Aufbau zeigten die Schwimmer beim Durchqueren des Hindernisgebietes eine systematische Ablenkung $\Delta = \bar{\theta}_f - \theta_\ell$ der Schwimmrichtung $\bar{\theta}_f$ im Vergleich zum anliegenden Lichteinfall θ_ℓ . Auch in den numerischen Simulationen mit gleichen geo-

metrischen Eigenschaften ist die Ablenkung sowohl mit der LBM (mit hydrodynamischer Wechselwirkung) als auch mit der DKM (keine hydrodynamische Wechselwirkung) zu beobachten. Hierbei zeigt sich eine qualitative Übereinstimmung zwischen beiden Simulationsmethoden und dem Experiment. Die Ablenkungscharakteristik weist in den verschiedenen Szenarien ein Maximum der Ablenkung bei $\theta_\ell \approx 30^\circ$ auf und verschwindet für Lichteinfallswinkel entlang der Symmetrieachsen in x - und z -Richtung.

Um ein Verständnis für die verschiedenen Einflussfaktoren zu erhalten und die grundlegenden Effekte für diese Ablenkung zu bestimmen, wurde ein deterministisches Modell erstellt. Dieses beschreibt die rein kontaktbasierte Streuung eines Schwimmers innerhalb einer Gitterzelle. Mithilfe des deterministischen Modells wurden die Austrittsvektoren $\bar{\mathbf{e}}_s$ und Richtungen $\bar{\theta}_s$ als Funktion der initialen Orientierung der Schwimmer bestimmt. Diese weist einen stufenförmigen Verlauf mit Plateaus entlang der Symmetrieachsen auf.

Aus dem deterministischen Modell wurde im Anschluss die mittlere Schwimmrichtung unter Berücksichtigung der Phototaxis berechnet. Durch eine Gewichtung der initialen Orientierungen θ_0 im deterministischen Modell gemäß der phototaktischen Reorientierungsverteilung $\psi(\theta_0 - \theta_\ell, \Gamma)$ ist es möglich, den Einfluss des intrinsischen Zufallsanteils während des Durchquerens des komplexen Mediums zu bestimmen. Hierbei zeigt sich eine entscheidende Eigenschaft für das Durchqueren des Hindernis-Parcours der Mikroschwimmer: Der zufällige Anteil, repräsentiert durch die Verteilungsbreite der Reorientierung, beeinflusst maßgeblich die Ablenkung und somit die mittlere Schwimmrichtung bei dem Passieren des komplexen Mediums. Für schmale Breiten der Reorientierungsverteilung (kleine Γ) findet eine starke Fokussierung der Schwimmrichtung durch die Streuung in Richtung der säulenfreien Achsen statt. Dies äußert sich durch ausgeprägte Plateaus bei $\theta_\ell = 0^\circ, \pm 90^\circ, 180^\circ$ mit steilen Übergängen im Bereich $\theta_\ell = \pm 45^\circ, \pm 135^\circ$ und nähert sich somit der rein kontaktbasierten Charakteristik von $\bar{\theta}_s$ an. Mit zunehmender Verteilungsbreite Γ werden die Schwimmer häufiger in andere Richtungen gestreut und die effektive Schwimmrichtung gleicht sich dem Lichteinfallswinkel an. Dies hat zur Folge, dass die Übergänge zwischen den Plateaus abflachen und die Ablenkung Δ insgesamt kleiner wird. Das bedeutet, dass der nicht deterministische Anteil der intrinsischen Schwimmcharakteristik den Algen bei der Durchquerung des Hindernisgebiets in Richtung des Lichts hilft.

Unter Verwendung der verschiedenen Simulationsmethoden ist es zudem möglich, den Einfluss der hydrodynamischen Wechselwirkung auf das Verhalten der Schwimmer zu identifizieren. In den Simulationen mit der LBM werden die Mikroschwimmer durch die Wechselwirkung von den Hindernissen abgestoßen und entlang der hindernisfreien Achsen fokussiert. Dies ist im Einklang mit Ergebnissen aus der Literatur, bei denen die Wech-

selwirkung von *Puller*-Schwimmern ein hydrodynamisches Regime aufweist, bei dem die Schwimmer von den Hindernissen bereits vor Kontakt mit den Hindernissen abgestoßen werden [114]. Bei Erhöhung der Schwimmerdichte in der Simulationsdomäne ergab sich zudem eine größere Streuung der Schwimmerpositionen in der gesamten Ebene. Hierfür ist die nichtlineare Natur der Wechselwirkung über die Flüssigkeit verantwortlich: Die verschiedenen Schwimmer sorgen für eine Reorientierung der umliegenden Schwimmer, unabhängig von der Ausrichtung oder Position. Erhöht man die Anzahl der Schwimmer ergibt sich eine zunehmend komplexe Dynamik. Dies hat auch Einfluss auf die Ablenkungscharakteristik. Während im verdünnten Limes die Resultate der DKM und LBM qualitativ übereinstimmen, ergibt sich bei Erhöhen der Schwimmerdichte unter Berücksichtigung der Hydrodynamik ein ähnlicher Effekt wie bei Erhöhen der Verteilungsbreite Γ : Die Wechselwirkung der Schwimmer bewirkt ebenfalls ein Abflachen der Kurve $\bar{\theta}_f(\theta_\ell)$ und führt somit zu einem Angleichen der effektiven Schwimmrichtung $\bar{\theta}_f$ an die einfallende Lichtorientierung θ_ℓ .

Die Ergebnisse aus diesem Abschnitt legen nahe, dass zufällige Prozesse Mikroschwimmern bei der Durchquerung eines komplexen Mediums helfen können. Hierbei scheint die Quelle des zufälligen Prozesses unerheblich zu sein und kann zum Beispiel von der phototaktischen Charakteristik oder der hydrodynamischen Wechselwirkung mehrerer Schwimmer induziert sein. Da die Verteilungscharakteristik der Schwimmer artenspezifisch ist, könnte der Effekt dafür verwendet werden, Schwimmer mit verschiedenen Verteilungsbreiten bei der Reorientierung durch ein komplexes Medium zu trennen.

Teil II.

Aktive Mikroschwimmer in der Kontinuumsbeschreibung

6. Einleitung

“The motion of a flock of birds is one of nature’s delights. Flocks and related synchronized group behaviors such as schools of fish or herds of land animals are both beautiful to watch and intriguing to contemplate. A flock exhibits many contrasts. It is made up of discrete birds, yet overall motion seems fluid; it is simple in concept yet so visually complex, it seems randomly arrayed and yet is magnificently synchronized. Perhaps most puzzling is the strong impression of intentional, centralized control. Yet all evidence indicates that flock motion must be merely the aggregate result of the actions of individual animals, each acting solely on the basis of its own local perception of the world” ([179], p. 25)

Dieses Zitat aus einer Arbeit von Reynolds aus dem Jahr 1987 beschreibt auf eine sehr illustrative Weise die Dynamik in Systemen von aktiver Materie [49, 50, 179], bei denen viele interagierende Objekte oftmals faszinierende kollektive Effekte zeigen.

Im vielen Fällen beschreibt aktive Materie ein Kollektiv einer großen Anzahl an Teilchen, welche durch Umwandeln von Energie eines jeden einzelnen Teilchens Kräfte auf ihre Umwelt ausüben, um sich bspw. fortzubewegen [3, 28, 48–50]. Dabei ist unerheblich, aus welchen Teilchen das Kollektiv aufgebaut ist. So zählen zu den aktiven Materiesystemen neben größeren Objekten wie Vogelschwärmen [180], Fisch-Schulen [53, 54], Heuschreckenschwärme [181] oder der Dynamik von Fußgängern [182]. Aber auch mikroskopische Objekte wie aktive Brownsche Teilchen [55, 56], künstliche Mikroschwimmer [183, 184] Bakterien, Spermien, Filamente und viele mehr [28, 49, 50].

Wenn man die Gesamtdynamik eines solchen Konglomerats individueller Teilchen beobachtet, stellt man fest, dass - wie im einleitenden Zitat beschrieben - trotz der unabhängigen Bewegung der einzelnen Objekte mit einer großen Anzahl an Freiheitsgraden die Gesamtheit allgemeinen, übergeordneten Regeln zu gehorchen scheint [179]. Die auftretenden Effekte sind vielzählig und reichen von komplexen Dynamiken mit Ähnlichkeiten zur Turbulenz [58, 59], polarisierten oder polaren, geordneten Zuständen [185], blockierten Zuständen [186], amöboiden Kristallen und der Formation von Bändern [187] über Defekt- und Gitterstrukturen [188, 189] bis hin zu Schwärmen und Kettenbildung [60], sowie zur Verschiebung von Gleichgewichtszuständen [190, 191], aktivitäts-induzierter Phasenseparation (oder auch

motility induced phase separation (MIPS)) [61–64] und vielen mehr [192–194]. Häufig treten diese Effekte als Übergang eines bekannten Grundzustands auf, was Ähnlichkeiten zu etablierten Beschreibungen der nichtlinearen Dynamik und Strukturbildung auf der Ebene von Kontinuumsgleichungen andeutet [64, 195]. Deshalb ist es von großem Interesse die zugehörigen mesoskopischen Kontinuumsgleichungen zu verstehen und auf bekannte Szenarien zu überführen. Im Vergleich zu den mikroskopischen Gleichungen mit Beschreibung der einzelnen Teilchen und einer großen Menge an Freiheitsgraden besitzen die mesoskopischen Kontinuumsgleichungen gemittelte Informationen der zugrundeliegenden Dynamik, was die Analyse relevanter Eigenschaften handhabbarer macht.

Bei aktiven Materie-Systemen werden häufig Übergänge zu kollektiven Verhalten beobachtet, bei denen sich die Zahl der beteiligten Objekte auf der betrachteten Zeitskala nicht ändert. Im Rahmen der Strukturbildung ordnet man solche Systeme mit kollektiven Verhalten den sogenannten Typ II, spezieller den Typ II^c Phasenübergängen, zu. Für Systeme mit Erhaltungseigenschaft und einer einzelnen beschreibenden Komponente beschreibt die klassische CH-Gleichung die stationäre Systemdynamik auf Ebene einer universellen Ordnungsparametergleichung, welche die langwellige Dynamik eines Systems und damit auch dessen Vergrößerungsdynamik beschreibt. Erst kürzlich wurde gezeigt, dass dies auch für den Fall von Nichtgleichgewichtssystemen gilt [64, 195, 196].

Bei der Kopplung mehrerer Felder mit Erhaltung kommen neue Effekte zu den Phänomenen der klassischen Cahn-Hilliard (CH)-Gleichung hinzu. So erläuterte bereits eine frühe Arbeit von Fromherz von 1988 eine neu auftretende Form der Dynamik [197]: Die Kopplung zweier erhaltener Systeme ermöglicht persistent dynamische Lösungen nahe des kritischen Punktes, wenn die Kopplung nicht wechselseitig gleich ist, wie in [197] anhand zweier gekoppelter Diffusionsgleichung für die Beschreibung von Ionenkanälen gezeigt und später in [198] diskutiert. Dieses Themengebiet der gekoppelten, erhaltenen Gleichungen erfuhr in letzter Zeit viel Aufmerksamkeit. Es wurden Untersuchungen zu den statistischen Eigenschaften nicht-reziproker Systeme sowie Untersuchungen mit linear gekoppelten Erhaltungsgleichungen verschiedenster Art wurden durchgeführt [70, 199–204]. Neben der abstrakten Betrachtungsebene gekoppelter erhaltener Systeme hat auch der Aufschwung des Gebiets der aktiven Materie zu einem verstärkten Interesse in diesem Forschungsgebiet beigetragen. Dies führte dazu, dass ebenfalls Studien mit mikroskopischen Teilchenmodellen durchgeführt wurden, welche zum Beispiel chemotaktisch interagierende Bakterien beschreiben [205–207].

In dieser Arbeit werden gekoppelte Systeme mit Erhaltungseigenschaft, basierend auf Kontinuumsmodellen der Mesoskala, beschrieben. Es soll zum einen untersucht werden, wie

eine konsistente Beschreibung des zugrundeliegenden Kontinuumsmodells gestaltet werden kann, welche die relevanten Kopplungen auf der entsprechenden Beschreibungsebene beinhaltet. Durch ein Reduktionsschema konnte in [64] für einkomponentige Systeme die Ordnungsparametergleichung (OPG) für stationäre Übergänge in aktiver Materie Systeme bestimmt werden. Das Reduktionsschema wird in dieser Arbeit erweitert und erlaubt somit die universelle OPG für gekoppelte Systeme mit oszillatorischen Übergängen des Typs II_o^c zu bestimmen.

Dies erlaubt es schließlich die verschiedenen Ebenen, ausgehend von einem expliziten Modell bis hin zur Beschreibung durch eine OPG zu verknüpfen. Zudem soll das allgemeine Verhalten der Typ II_o Übergänge untersucht werden. Die Motivation für die Analyse bildet in dieser Arbeit die Beschreibung aktiver Materie. Die Beobachtungen und Erkenntnisse sind jedoch nicht auf diese beschränkt. Sie lassen sich auf allgemeine Systeme mit der zugrundeliegenden Eigenschaft der Erhaltung anwenden.

Die Kapitel in Teil II sind wie folgt aufgebaut. In Abschnitt 7.1 werden die Grundlagen zu Systemen des Typs II^c gezeigt. Hierbei wird zunächst die Beschreibung der klassischen CH-Gleichung als generischer Vertreter der Typ II_s^c Dynamik erhaltener Kontinuumsgleichungen erläutert. Anschließend wird die Verknüpfung von der mikroskopischen Darstellung zu einer Kontinuumsbeschreibung anhand mehrerer Beispielsysteme aus bekannter Literatur der aktiven Materie gegeben. Eines dieser vorgestellten Systeme beschreibt das Verhalten von chemotaktisch wechselwirkenden Objekten, welches für den Fall zweier gekoppelter Quorum sensing Spezies in Abschnitt 12 eingeführt und erläutert wird. Danach wird in Abschnitt 8 eine Übersicht der später verwendeten technischen Hilfsmittel gegeben. Hierfür wird die Pseudo-Spektral-Methode vorgestellt, welche eine effiziente numerische Auswertung gekoppelter partieller Differentialgleichungen ermöglicht und in den folgenden Kapiteln zur numerischen Lösung der dynamischen Gleichungen verwendet wird. Außerdem werden verschiedene Methoden zur Auswertung und Darstellung der Ergebnisse erläutert.

In Abschnitt 9 werden dann gekoppelte Systeme mit Erhaltung untersucht. Hierbei werden im Hinblick auf eine konsistente Beschreibung die GTOPS eingeführt, welche im Gegensatz zu linear gekoppelten Gleichungen [200–202] auch nichtlineare Kopplungen berücksichtigen. Somit geht der Anwendungsbereich über linear gekoppelte CH Gleichungen hinaus. Die GTOPS sollen als Ausgangspunkt für die spätere Herleitung der allgemeinen OPG dienen und die Beschreibung von expliziten Systemen wie das chemotaktische Modell in Abschnitt 12 oder auch [197] ermöglichen. In diesem Bezug wird die Relevanz der nichtlineare Kopplungen auch in den späteren Erläuterungen in den Abschnitten 9.3, 10 und 12 deutlich.

Anschließend werden für Typ II_o^c charakteristische Übergangsszenarien untersucht. Hierfür wird das prototypische MiMo vorgeschlagen, welches komplementär zu der allgemeinen Beschreibung durch die GTOPS mit nur drei variablen Parametern beschrieben wird. Trotz der sehr einfachen Form deckt es die Umgebung eines entarteten Bifurkationspunktes am Übergang von einem stationären zu einer oszillatorischen Verzweigung ab, bei der zwei Eigenwerte gleichzeitig verschwinden. Für ihn ist im Englischen der Begriff Co-Dimension Two Point (CTP) üblich [208].

Im anschließenden Abschnitt 10 wird das System der GTOPS nahe des Einsatzpunktes der Instabilität analysiert und ein Reduktionsschema für die Extraktion der zugehörigen universellen OPG für Typ II_o^c Systeme aufgestellt. Dies geschieht, indem die Entwicklungsansätze zur Bestimmung der CH Gleichung [64] und der komplexen Ginzburg-Landau Gleichung [65, 209] auf das hier beschriebene Problem generalisiert werden. Hierbei ist im Vergleich zur Reduktion in anderen Systemen die Berücksichtigung der intrinsischen Eigenschaften von Typ II_o^c Systemen am Übergang zur Phasenseparation, welche eine Multi-Moden-Struktur aufzeigt und keine ausgezeichnete Wellenlänge beinhaltet, von zentraler Bedeutung. Mit diesem Reduktionsschema ist schließlich die Überführung der GTOPS auf eine zugehörige OPG zur Beschreibung von Typ II_o Phasenübergänge möglich. Eine anschließende Diskussion zeigt die Einordnung dieser OPG im Hinblick auf die GTOPS und das MiMo, sowie den Einfluss der nichtlinearen Kopplung und somit einer konsistenten Beschreibung in Abschnitt 9.

Die erhaltene OPG besitzt ein immenses Spektrum möglicher Lösungsszenarien. Für einen ausgewählten Parameterbereich wird dieses Spektrum anschließend analytisch als auch numerisch kategorisiert und später auf einen erweiterten Parameterbereich übertragen. Zudem werden einige selektierte Lösungen zur Demonstration der Lösungsvielfalt des vollen Parameterraumes vorgestellt.

Die bis dahin erlangten Erkenntnisse werden schließlich in Abschnitt 12 miteinander verknüpft: Es wird ein System gekoppelter chemotaktisch-wechselwirkender Bakterien untersucht. Dieses beinhaltet einen wichtigen Beitrag zur Dämpfung der Produktionsrate des Transmitters, welcher sich stabilisierend auf die Systemdynamik auswirkt. Anhand dieses expliziten Systems wird die Reduktion auf die verschiedenen Beschreibungsebenen, nämlich auf die von erhaltenen gekoppelten Gleichungen GTOPS und der generischen OPG für Typ II_o^c Systeme durchgeführt. Dies erlaubt die Auswirkungen der einzelnen Systemparameter einfach zu kategorisieren. Hierbei können durch diese Verknüpfung Rückschlüsse der Dämpfungskonstanten auf stabilisierende Terme der generischen Beschreibungen gezogen werden, die ohne Dämpfung nicht vorhanden wären. Zudem kann ein Vergleich der

Lösungen aller Beschreibungsebenen durchgeführt werden.

7. Grundlagen

7.1. Phasenseparation und die klassische Cahn-Hilliard-Gleichung

Phasenseparation ist ein bekanntes Phänomen, welches zum Beispiel bei binären Mischungen auftritt [210, 211]. Hier beginnen beim Unterschreiten (manchmal auch Überschreiten) einer kritischen Temperatur zwei homogen vermischte Substanzen zu entmischen. Dieser Entmischungsprozess setzt erst kurzskalig ein und die Ausdehnung der Längenskala von Gebieten mit jetzt unterschiedlichen Konzentration der beiden Komponenten wächst (vergrößert) mit der Zeit [210, 211]. Die generische Gleichung zur Beschreibung solcher Übergänge ist die CH Gleichung, welche in der klassischen Form eine intrinsische Erhaltung der beschriebenen Größe enthält. Der Einsatz zur Phasenseparation gehört zur sogenannte Typ II Instabilität [65], genauer zu einer nicht oszillatorischen Instabilität mit Erhaltung, die wir II_5^c nennen. Da bei der Beschreibung von aktiver Materie die Zahl der beteiligten Objekte, wie Bakterien oder kolloidaler Teilchen auf der betrachteten Zeitskala erhalten sein kann, weisen sie häufig Parallelen zu den bekannten Systemen mit Phasenseparationsdynamik auf. Somit können häufig Erkenntnisse der Strukturbildung und schwach-nichtlinearen Analyse mit aktiver-Materie-Systeme verknüpft werden, wie erst kürzlich gezeigt [64].

In diesem Kapitel werden die allgemeinen Grundlagen zu Systemen mit Erhaltungseigenschaften im stationären Fall beschrieben. Zunächst wird der Begriff Erhaltung erläutert und anschließend die klassischen CH-Gleichung als generischer Vertreter für stationäre Übergänge der Phasenseparation beschrieben. Darauffolgend werden verschiedene mikroskopische Modelle aus dem Bereich der aktiven Materie aufgezeigt und beschrieben, wie diese mit einer kontinuierlichen Modellbeschreibung in Verbindung stehen. Anhand der eingeführten Gleichungen wird gezeigt, warum diese Charakteristiken von Typ II^c enthalten, obwohl eine Erhaltene mit einer nicht erhaltenen Größe koppelt.

7.1.1. Nichtoszillatorische Vergrößerungsphänomene der Klasse II_S^C

Für ein Dichtefeld $\rho(\mathbf{r},t)$ kann man die allgemeine Erhaltung des Feldes durch die Gleichung

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho(\mathbf{r},t) d\mathbf{r} = 0$$

ausdrücken. Unter Zuhilfenahme des Divergenz-Theorems kann man dies zur dynamischen Gleichung für lokal erhaltene Felder $\rho(\mathbf{r},t)$ und den zugehörigen Massenfluss $\mathbf{j}(\mathbf{r},t)$ umformen und erhält [77]

$$\partial_t \rho(\mathbf{r},t) = -\nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r},t). \quad (7.1)$$

Diese Gleichung ist auch wichtig bei der Beschreibung klassischer Separations-Phänomene von binären Mischungen, wobei die Dichtedifferenz durch die CH-Gleichung beschrieben wird [212]. Der Fluss \mathbf{j} kann ausgedrückt werden als

$$\mathbf{j} = M \nabla \frac{\delta F}{\delta \rho}$$

mit dem Funktional der Energie

$$F = \int d\mathbf{r} \left[\frac{\kappa |\nabla \rho|^2}{2} + f_0(\rho) \right]$$

sowie der Mobilität M [210, 213]. Die freie Energie kann verschiedene Formen annehmen. In einem einfachen Beispiel wird sie durch ein Doppelmuldenpotential beschrieben, welches die Form [210, 213]

$$f_0 = -\frac{\varepsilon}{2} \rho^2 + \frac{c}{4} \rho^4 \quad (7.2)$$

hat. Für $\varepsilon > 0$ besitzt dieses Potential zwei lokale Minima, welche dafür verantwortlich sind, dass sich die Phasen mit hoher und niedriger Dichte voneinander absetzen: Es definiert zwei energetische Senken, eines mit höherer und eines mit niedrigerer Konzentration ρ , in welchen sich das System bevorzugt befindet. In Abwesenheit weiterer Einflüsse stellt sich das System folglich gemäß dieser Potential-Landschaft ein. Wählt man $\varepsilon < 0$, so existiert nur ein globales Minimum. Dementsprechend wird das System auch in den Zustand relaxieren, der eine einzige, homogene Dichte beschreibt. Neben dem hier beschriebenen Fall Gl. (7.2) können auch Terme mit ungeraden Exponenten in der Dichte auftreten. Für

den symmetrischen Fall erhält man den Fluss [210, 213]

$$\mathbf{j} = \nabla \left(\varepsilon \rho + \kappa \nabla^2 \rho - c \rho^3 \right) . \quad (7.3)$$

Dies ergibt, nach der Reskalierung mit dem hier konstant angenommenen Mobilitätsfaktor M , schließlich die dynamische Gleichung für Phasenseparation [210, 213]

$$\partial_t \rho(\mathbf{r}, t) = -\nabla^2 \left(\varepsilon \rho + \kappa \nabla^2 \rho - c \rho^3 \right) , \quad (7.4)$$

welche auch häufig (klassische) Cahn-Hilliard-Gleichung genannt wird. Diese Gleichung beschreibt Phasenseparationsdynamik, wie zum Beispiel in Abb. 7.1 für ein zweidimensionales System dargestellt. Startet man wie in Abb. 7.1(a) gezeigt mit einem Rauschen als Startbedingung und stellt den Kontrollparameter überkritisch (d.h. $\varepsilon > 0$) ein, so vergrößert sich die Struktur mit der Zeit, bis schließlich die dominierende Längenskala des Musters der Systemgröße entspricht. Die Flanken an den Übergängen zwischen niedriger und hoher Konzentration weisen ein tanh-Profil auf. Dieses besitzt im Fourierraum ein breites Modenspektrum, weshalb eine Einmoden-Approximation für die Lösung häufig nicht ausreichend ist.

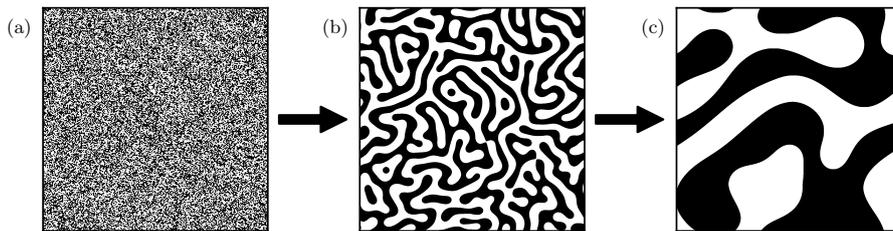


Abb. 7.1.: Typische Vergrößerungs-Dynamik (oder auch englisch *Coarsening* genannt) der CH-Gleichung von einem anfänglichen Rauschens zu einer phasen-separierten Lösung.

Im Kontext der Strukturbildung ist es geläufig, eine lineare Stabilitätsanalyse für kleine Störungen $\propto e^{\lambda t + i \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}$ des homogenen Grundzustands $\rho = 0$ durchzuführen. Dies liefert für Gl. (7.4)

$$\lambda = \varepsilon q^2 - \kappa q^4 . \quad (7.5)$$

Diese spezifische Charakteristik der Instabilität, bei der der Eigenwert für $q = 0$ verschwindet, gehört zum Typ II [65] und hat eine typische Form der Wachstumsrate $\text{Re}(\lambda)(q)$ erhaltener Systeme wie in Abb. 7.2(a) gezeigt [65, 214]. Trotz der linear erhaltenen Charakteristik können auch nichtlineare Senken und Quellen vorhanden sein. Deshalb kann man zusätzlich Systeme unterscheiden, welche eine gesamte Erhaltung des Feldes enthalten (hier als Typ

II^c bezeichnet) oder nicht erhaltene Felder aufgrund von Nichtlinearitäten beschreiben (hier II''). Ein Beispiel für nicht erhaltene Vertreter des Typs II'' ist die Kuramoto-Shivashinsky Gleichung [215], bei dem die Nichtlinearität eine Verletzung der Erhaltungsbedingung enthält. In dieser Arbeit werden vornehmlich Systeme des Typs II^c untersucht, weshalb manchmal der hochgestellte Buchstabe zur Übersichtlichkeit weggelassen wird.

Anhand der Form von Gl. (7.5) wird klar, warum ε auch Kontrollparameter genannt wird: Für $\varepsilon = 0$ findet ein Übergang von der stabilen homogenen Lösung ($\varepsilon < 0$) zum Fall anwachsender Störungen ($\varepsilon > 0$) statt. Der Kontrollparameter entscheidet darüber, ob das Doppelmulden-Potential ein einzelnes Maximum bei $\rho = 0$ hat oder zwei Minima $\rho_{\pm} \neq 0$ aufweist. Der anwachsende Ast $\propto q^2$ wird für $\kappa > 0$ durch den Beitrag $-\kappa q^4$ gedämpft und sorgt für eine Begrenzung des Modenwachstums größerer Wellenzahl. Bei der Betrachtung der Dispersionsrelation fallen einige typische Merkmale für Typ II Übergänge auf: Der Einsatz der Instabilität ($\varepsilon = 0$) findet bei einer verschwindenden kritischen Wellenzahl q_c statt. Für einen überkritischen Kontrollparameter $\varepsilon > 0$ existiert ein endliches Band an überkritischen Moden $0 < q < q_0$ für welche $\text{Re}(\lambda)(q) > 0$, wobei $q_0 \propto \sqrt{\varepsilon}$ aus der Bedingung $\lambda = 0$ folgt. Diese Charakteristik kann in vielen verschiedenen Systemen beobachtet werden. Im Allgemeinen kann man die lineare Stabilität auch in höherer Ordnung durchführen. Dabei zeigt sich, dass die Dispersion dem generischen Muster

$$\lambda = G_2 q^2 + G_4 q^4 + G_6 q^6 + O(q^8) \quad (7.6)$$

folgt. Dies liegt daran, dass in Gl. (7.1) nur Gradienten von Flusstermen auftauchen. Deshalb besitzt die lineare Dispersion keinen konstanten Anteil. Zusätzlich besitzen die betrachteten Systeme eine Spiegelsymmetrie $\pm r$ und daher treten in der Dispersionsrelation nur gerade Potenzen von q auf. Wenn man ein System einer erhaltenen Größe vorliegen hat, welche mit schnellen, nicht erhaltenen Moden gekoppelt sind, kann die Dispersion auch mehrere Eigenwerte aufweisen, von denen einige einen konstanten negativen Wert bei $q \rightarrow 0$ aufweisen, besitzen. Dominiert in solchen Systemen der größte Eigenwert und zeigt dieser Erhaltung, kann man nahe des kritischen Punktes die Dynamik eventuell auf eine ähnliche Form bringen, wie in Abschnitt 12 gezeigt wird. Falls auf der Ordnung $\propto q^4$ keine Dämpfung stattfindet, so kann das System auch für den Fall $\text{Re}(G_2) < 0$ instabil werden. Dies ist in Abb. 7.2(b) gezeigt. In diesem Fall ist das überkritische Modenband bei endlichen Wellenzahlen und es können Muster mit endlicher Modenzahl auftreten.

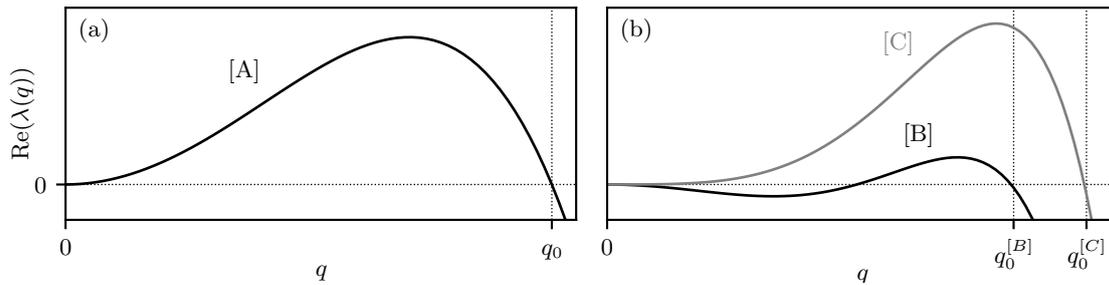


Abb. 7.2.: Gezeigt ist die typische Form der Dispersionsrelation Gl. (7.6) für erhaltene Systeme. Falls eine Dämpfung in der Ordnung $\propto q^4$ vorliegt ($G_4 < 0$), so entscheidet das Vorzeichen des quadratischen Vorfaktors $\text{Re}(G_2)$, ob homogene Lösungen instabil werden oder anwachsen, wie in (a) gezeigt. Ein Vertreter mit diesem Dispersionsverlauf ist die klassische CH Gleichung, welche Phasenseparations-Dynamik zeigt. Es kann auch vorkommen, dass die Dämpfung erst in höherer Ordnung auftritt, wie in (b) für $G_4 > 0, G_6 < 0$ gezeigt. Diese Dispersion kann die Bildung von Mustern bei endlicher Wellenzahl hervorrufen.

7.2. Beispiele von Erhaltungseigenschaften in Systemen aktiver Materie

In den folgenden Kapiteln werden Kontinuumsmodelle auf Basis von allgemeinen Transportgleichungen untersucht. Diese können verschiedenste Modelle repräsentieren und sind meist zu mikroskopischen Modellen auf der Ebene einzelner Teilchen über die sogenannte Langevin-Gleichung sowie adiabatische Reduktionsschemata verknüpfbar [55, 216, 217]. Nachfolgend soll ein Überblick über verschiedene mikroskopische Modelle gegeben werden, wie sie zum Beispiel in aktiver Materie zu finden sind. Hierbei wird anhand verschiedener Literatur motiviert, wie das mikroskopische Bild zu den Kontinuumsgleichungen verknüpft werden kann [61, 218–220]. Dabei wird auch das Modell chemotaktisch interagierender Objekte gezeigt, welches in Abschnitt 12 für den Fall einer Kopplung verschiedener Spezies näher untersucht wird.

Die dynamische Beschreibung (passiver) mikroskopischer Teilchen kann durch die Langevin-Gleichungen erfolgen [216]. Sie beschreiben die Bewegung eines *Brownschen Teilchens* i durch ein Volumen, welches mit einer großen Anzahl von (kleineren) Stoßteilchen gefüllt ist, wie zum Beispiel ein Staubkorn in einer Flüssigkeit. Durch die Interaktion eines Teilchens i am Ort \mathbf{R}_i in Form von Stößen mit den kleineren Teilchen wird dessen Geschwindigkeit $\frac{d\mathbf{R}_i}{dt}$ beeinflusst, wobei man einen mittleren Reibungsterm und einen stochastischen Fluktuationssterm abspalten kann, was durch die sogenannte Langevin-Gleichung beschrieben wird [216]. Analog ist auch die Orientierung θ_i diesen Einflüssen ausgesetzt. Für ein isotropes

Teilchen gilt dabei die Beziehung (siehe z. B. [55, 217])

$$m \frac{d^2 \mathbf{R}_i}{dt^2} = -\gamma_T \frac{d \mathbf{R}_i}{dt} - \nabla_x V + \xi_i^T(t),$$

$$J \frac{d^2 \theta_i}{dt^2} = -\gamma_R \frac{d \theta_i}{dt} + \xi_i^R,$$

mit der Teilchenmasse m , dem Trägheitsmoment J , den Reibungskoeffizienten für Translation γ_T und Rotation γ_R , eventuell vorherrschenden Potential-Einflüssen V sowie den Rausch-Termen für Translation $\xi_i^T(t)$ und Rotation $\xi_i^R(t)$. Die Fluktuationsterme gehorchen einem weißen Rauschen gemäß [55, 217, 221]

$$\langle \xi_i(t) \xi_j(t') \rangle = \mathbf{I} 2k_B T \gamma_T \delta_{\alpha\beta} \delta(t - t'),$$

$$\langle \xi_i(t) \xi_j(t') \rangle = 2k_B T \gamma_R \delta_{ij} \delta(t - t'),$$

wobei \mathbf{I} die Einheitsmatrix, k_B die Boltzmann Konstante und T die Temperatur ist. Im Falle kleiner Massen oder starker Dämpfung vereinfacht sich die Langevin-Gleichung im überdämpften Limes zu

$$\gamma_T \frac{d \mathbf{R}_i}{dt} = -\nabla_x V + \xi_i^T(t), \quad (7.7a)$$

$$\gamma_R \frac{d \theta_i}{dt} = \xi_i^R. \quad (7.7b)$$

Manchmal findet man in der Literatur auch die Repräsentation mit der Mobilität $\mu_i = \gamma_i^{-1}$ gemäß

$$\frac{d \mathbf{R}_i}{dt} = -\nabla_x U + \eta_i^T(t), \quad (7.8a)$$

$$\frac{d \theta_i}{dt} = \eta_i^R. \quad (7.8b)$$

wobei

$$\langle \eta_i(t) \eta_j(t') \rangle = \mathbf{I} 2k_B T \mu_T \delta_{\alpha\beta} \delta(t - t'),$$

$$\langle \eta_i(t) \eta_j(t') \rangle = 2k_B T \mu_R \delta_{ij} \delta(t - t').$$

Die Kontinuumsgleichung wird im Fall externer Potentiale durch die zugehörige Fokker-

Planck Gleichung

$$\partial_t \rho(\mathbf{r}, t) = \nabla \left[\mu_R \rho \nabla U'_e + D \nabla \rho \right] , \quad (7.9a)$$

$$\partial_t \mathbf{p}(\mathbf{r}, t) = - \nabla (D \nabla \mathbf{p}) - D_r \mathbf{p} . \quad (7.9b)$$

beschrieben.

7.2.1. Aktive, Brownsche Teilchen in Kontakt

Die bisherigen Beschreibungen gelten für passive *Brownsche* Teilchen. Führt man für diese eine intrinsische Aktivität ein, so können spannende, neue Effekte und Übergänge auftreten [61, 219, 222]. Bei deren Beschreibung kommt in der Langevin-Gleichung (7.8a) noch ein gerichteter Bewegungsterm $v_0 \mathbf{e}_i$ mit der Aktivität v_0 in Richtung \mathbf{e}_i hinzu. Oft wird die Bewegung in einer quasi zwei-dimensionalen Ebene untersucht, wie sie auch in experimentellen oder numerischen Realisierungen vorkommt [218, 219, 222], womit für den Orientierungsvektor gilt $\mathbf{e}_i = (\cos(\theta_i), \sin(\theta_i)^T)$. Die überdämpfte Langevin-Gleichung hat in diesem Fall die Form [61, 218, 219]

$$\frac{d\mathbf{R}_i}{dt} = v_0 \mathbf{e}_i - \nabla U + \boldsymbol{\eta}_i^T(t) .$$

Befindet man sich nicht im verdünnten Limes, kommen sich die untersuchten Objekte im Mittel häufig nahe. In diesem Fall muss die Wechselwirkung der Brownschen Teilchen untereinander berücksichtigt werden. Um zu verhindern, dass zwei Teilchen i und i' überlappen, kann zum Beispiel eine abstoßende Paar-Wechselwirkung $u(r)$ im Potential U in Form von $U = \sum_{i < i'} u(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i'}|)$ angenommen werden [219]. Beim Übergang zur Phasenraum-Wahrscheinlichkeitsdichte $f_N(\mathbf{r}, \phi, t)$ kann man die dynamische Gleichung der reduzierten Dichte $\partial_t f_1(\mathbf{r}_1, \phi_1, t)$ in Form einer BBGKY herleiten (siehe Gleichungen (3.8) und (3.9)) . Für eine geschlossene Beschreibung wird eine Zwei-Körper Wechselwirkung angenommen. In [219] werden zum Beispiel die Annahmen der räumlichen und zeitlichen Unabhängigkeit eines Zwei-Körper Streuprozesses getroffen, welche für die Beschreibung des Übergangs aus einem homogenen Zustand motiviert sind. Hierbei wird die effektive Schwimmggeschwindigkeit

$$v = v_0 - \bar{\rho} \zeta$$

berücksichtigt, wobei ζ die Projektion der Kraft auf die Orientierung ist [219]. Diese wird als anisotrope Wirkung der Verarmungszone hinter und der gedrängten Zone vor einem sich

bewegenden Teilchen interpretiert. Die daraus resultierende Beschreibung der dynamischen Wahrscheinlichkeitsdichte wird anschließend über Momentenbildung auf die Teilchendichte ($\int f_1 d\phi$) und die Polarisation ($\int \mathbf{e} f_1 d\phi$) projiziert und es folgen die kontinuierlichen Gleichungen für die Teilchendichte $\rho(\mathbf{r}, t)$ und Polarisation $\mathbf{p}(\mathbf{r}, t)$ gemäß [219]

$$\partial_t \rho(\mathbf{r}, t) = -\nabla \cdot [v \mathbf{p}(\mathbf{r}, t) - D \nabla \rho(\mathbf{r}, t)] , \quad (7.10a)$$

$$\partial_t \mathbf{p}(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{2} \nabla (v \rho) + D \nabla^2 \mathbf{p} - D_r \mathbf{p} . \quad (7.10b)$$

Hierbei ist $D_{(r)}$ der (Rotations-)Diffusionskoeffizient (siehe [219]). Anhand der Kontinuums-Gleichungen kann man bereits einen interessanten Einfluss der Aktivität (welche in dem Faktor v steckt) auf die Dynamik des Systems erkennen. Ohne den ersten Term in Gl. (7.10b) würde die Polarisation einfach abklingen, da sowohl der diffusive Term $\nabla^2 \mathbf{p}$ als auch der Zerfallsterm $D_r \mathbf{p}$ für ein Abklingen der Polarisation sorgen. In Anwesenheit der Aktivität kann sich jedoch lokal eine Polarisation aufbauen, wodurch nicht nur der homogene Zustand eine Lösung ist, sondern auch andere Effekte, wie zum Beispiel Phasentrennung, auftreten können (siehe [61, 195, 219]).

7.2.2. Teilchen im verdünnten Limes unter Berücksichtigung von Taxis

Nicht nur die Nahfeld-Wechselwirkung zwischen aktiven, Brownschen Teilchen wie in Abschnitt 7.2.1 kann zu interessanten Effekten führen. Bakterien oder andere mikroskopische Teilchen können ihre Bewegung entsprechend der Konfiguration ihrer Umgebung anpassen. Neben der im ersten Abschnitt beschriebenen Phototaxis gibt es bspw. den Effekt der Chemotaxis, die bei Bakterien wie *Escheria coli* [223, 224], bei Amöben wie den zellulären Schleimpilzen *Dictyostelium discoideum* [225] und vielen mehr zu finden sind. Die beteiligten Komponenten nehmen dabei meist räumliche Unterschiede bestimmter Substanzen wahr und bewegen sich entlang derer Gradienten. In [220] wird ein solches Verhalten auf Basis eines generellen, aktiven Teilchenmodells untersucht. Die Teilchen werden ohne Orientierung modelliert, allerdings wird eine zweite dynamische Gleichung für den Botenstoff eingeführt. Hierfür wird in [220] angenommen, dass ein Teilchen am Ort \mathbf{R}_i mit konstanter Rate (hier als eins pro Zeiteinheit gewählt) einen Botenstoff $c(\mathbf{r}, t)$ produziert, welcher selbst mit der Rate b zerfällt. Die Formulierung eines solchen Systems auf Ebene der Gleichungen (7.9) kann wie folgt beschrieben werden: Die Teilchen bewegen sich entlang des Gradienten von $c(\mathbf{r}, t)$ und man erhält für die mikroskopische Bewegungsgleichungen von

N Teilchen die Beziehung [220]

$$\frac{d\mathbf{R}_i}{dt} = -\mu_T \nabla c|_{\mathbf{R}_i} + \boldsymbol{\eta}_i^T(t), \quad (7.11a)$$

$$\frac{\partial c(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -bc(\mathbf{r}, t) + \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i(t)) + D_c \nabla^2 c(\mathbf{r}, t). \quad (7.11b)$$

Für den Übergang in die kontinuierliche Beschreibung wird in [220] anschließend die Transformation

$$\sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i(t)) \rightarrow Nf(\mathbf{r}, t) \rightarrow \rho(\mathbf{r}, t)$$

vorgenommen, womit man schließlich die Fokker-Planck Gleichung auf Teilchenebene und eine Reaktions-Diffusions Gleichung für den Botenstoff erhält [220]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= \nabla [\mu \rho(\mathbf{r}, t) \nabla c(\mathbf{r}, t) + D_\rho \nabla \rho(\mathbf{r}, t)], \\ \frac{\partial c(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= D_c \nabla^2 c(\mathbf{r}, t) + \rho(\mathbf{r}, t) - bc(\mathbf{r}, t). \end{aligned}$$

Neben dem von Schweitzer und Schimansky-Geier untersuchten SSG-Modell [220, 226] gibt es zur Beschreibung von chemotaktisch interagierenden Spezies zahlreiche Varianten von dynamischen Gleichungssätzen, welche zusätzliche Sättigungen von Rezeptoren oder der vermittelnden Substanz annehmen [225–229]. Ein weit verbreitetes Modell ist dabei das Keller-Segel Modell [225, 227]. Die allgemeine Form der Gleichungen lässt sich meist unter folgender, allgemeiner Regel zusammenfassen [228]:

$$\begin{aligned} \partial_t \rho(\mathbf{r}, t) &= \nabla [k_1(\rho, c) \nabla \rho - k_2(\rho, c) \rho \nabla c] + k_3(\rho, c), \\ \partial_t c(\mathbf{r}, t) &= D_c \Delta c + k_4(\rho, c) - k_5(\rho, c) c. \end{aligned}$$

Ein ähnliches System wurde in [64] verwendet und gezeigt, dass aktive Phasentrennung ein generisches Phänomen in Nichtgleichgewichtssystemen ist. In Abschnitt 12 wird eine spezielle Form dieser Gleichungen herangezogen, um die Erkenntnisse der vorherigen Abschnitte 9 und 10.6 auf ein explizites System anzuwenden.

7.2.3. Adiabatische Reduktion

Ist in einem System die Dynamik auf einer langsamen Zeitskala von Interesse, kann man die Dynamik eines Feldes f auf einer schnellen Zeitskala durch einen adiabatischen Ansatz

$\partial_t f = 0$ vereinfachen. Für Systeme mit einem einzelnen, erhaltenen Feld ist diese Prozedur bspw. in [64, 195] gezeigt. Für das Beispiel der aktiven, Brownschen Teilchen aus Gleichungen (7.10) kann unter der adiabatischen Annahme $\partial_t \mathbf{p} = 0$ die Gleichung für die Polarisation nach \mathbf{p} aufgelöst werden [195]. Für bestimmte Konfigurationen ist dies auch für die chemotaktischen Modelle Gleichungen (7.11) für die Dichte c möglich [64]. Im Allgemeinen können bei Systemen mit stationärer Π_s^c Phasenseparation N Felder beteiligt sein, die dynamisch gekoppelt sind. Von diesen ist mindestens eine kritische Mode erhalten und weist eine zeitliche, langsame Dynamik auf.

Die Lösung der Dichte schneller Dynamik kann man schließlich in die Gleichung der erhaltenen, langsamen Größe ρ einsetzen. Als Resultat erhält man eine einzelne beschreibende Gleichung für ρ gemäß

$$\partial \rho(\mathbf{r}, t) = \nabla (\dots) ,$$

welche die Form einer Erhaltungsgleichung hat. Somit lässt sich die Dynamik des langsamen Feldes, was mit anderen schnellen Dichten gekoppelt ist, auf die Form einer Erhaltungsgleichung überführen.

8. Methoden

In diesem Kapitel wird eine Einführung in die PSM gegeben [230, 231]. Diese Methode ist ein effizientes Werkzeug zur Untersuchung der später vorgestellten Gleichungssysteme. Sie wird in Abschnitten 9, 10 und 12 in Kombination mit dem semi-impliziten Verfahren verwendet, um die Kontinuumsgleichungen der verschiedenen Beschreibungshierarchien numerisch zu lösen. Neben der Pseudo-Spektral Methode (PSM) werden in diesem Kapitel zudem noch Methoden zur Darstellung und Auswertung der durch die PSM berechneten Daten vorgestellt.

8.1. Numerische Berechnungsmethoden

Die in Abschnitten 7.1, 9, 10 und 12 beschreiben im Allgemeinen einen K -dimensionalen Vektor

$$\mathbf{w} = \begin{pmatrix} w_1 \\ \vdots \\ w_K \end{pmatrix}$$

der Felder w_k mit $w_k \in \mathbb{C}$. In den dynamischen Gleichungen für \mathbf{w} entkoppelt zeitliche und räumliche Ableitungen und die Systeme haben im Allgemeinen die Form

$$\partial_t \mathbf{w} = \mathbf{L} \mathbf{w} + \mathbf{N}(\mathbf{w}), \quad (8.1)$$

definiert auf dem Gebiet $\Omega = \{(r_1, \dots, r_d) | r_i \in (0, L_i)\}$ für Zeiten $t \in [0, T]$ und Anfangsbedingung $w_k(\mathbf{r}, 0) = w_{k,0}(\mathbf{r})$. Hierbei enthält die linke Seite nur Ableitungen nach der Zeit t und ist linear in \mathbf{w} , während sich auf der rechten Seite sowohl der in w_k lineare Operator \mathbf{L} als auch der in w_k nichtlineare Operator \mathbf{N} befindet.

Für die numerische Behandlung werden Zeit ($t \rightarrow t_i \Delta t$) und Ort ($\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}_i \delta x$) diskretisiert. Hierbei muss die jeweilige Diskretisierung Δt und Δx hinreichend klein gewählt werden um eine numerische Stabilität zu gewährleisten. Die in dieser Arbeit behandelten

Gleichungen haben gemein, dass der lineare Operator Beiträge $\propto \nabla^2$ und $\propto \nabla^4$ des Nabla-Operators $\nabla := (\partial_{r_1}, \dots, \partial_{r_d})^T$ enthält. Für einen einfachen Lösungsansatz auf Basis einer expliziten Finite-Differenzen Berechnung bedeutet dies eine Skalierung des Zeitschrittes Δt als Abhängigkeit der Ortsdiskretisierung Δx gemäß $\Delta t \propto \Delta x^4$ [231]. Folglich muss der Zeitschritt sehr klein gewählt werden, um stabile Simulationen zu ermöglichen. Zum anderen muss auch die Ortsdiskretisierung hinreichend klein gewählt werden, damit keine numerischen Artefakte bei einem Finite-Differenzen Ansatz auftreten. Aufgrund dieser Nachteile der Finiten-Differenzen Methode wird in dieser Arbeit die im Folgenden dargestellte PSM verwendet.

8.1.1. Pseudo-Spektral Methode

Eine etablierte Methode für die effiziente Berechnung der vorliegenden Gleichungen ist die Verwendung der PSM, welche aufbauend auf den Ausführungen in [230, 231] hier näher erläutert wird. Der Grundgedanke ist dabei, das System auf eine der Problemstellung angepassten Funktionsbasis abzubilden und die rechte Seite von Gl. (8.1) in der transformierten Basis zu lösen. In dieser Arbeit werden sowohl periodische als auch homogene Neumann (oder engl. auch *no-flux*) Randbedingungen verwendet, weshalb sich eine Fourierbasis für die spektrale Representation von Gl. (8.1) eignet. Ziel ist es, den Zeitschritt im transformierten System durchzuführen, in welchem er die Form

$$\widehat{\partial_t \mathbf{w}} = \partial_t \widehat{\mathbf{w}} = \widehat{\mathbf{L} \mathbf{w}} + \widehat{\mathbf{N}(\mathbf{w})}. \quad (8.2)$$

besitzt. Hierbei ist $\mathcal{F}(\cdot) = \widehat{(\cdot)}$ die Fourier-Transformation bezüglich $f(\mathbf{r}, t) \mapsto f(\mathbf{q}, t)$ und \mathcal{F}^{-1} die zugehörige inverse definiert durch

$$\mathcal{F}^{-1} [\mathcal{F}(f)] = f. \quad (8.3)$$

Für die weitere Umformung werden nun Berechnungsschemen für den linearen und nicht-linearen Operator erläutert.

Berechnung des linearen Operators

Der lineare Operator enthält nur räumliche Ableitungen der Felder w_k , wobei für alle Gleichungen in Teil II die Beiträge der Ortsableitungen ∇ in \mathbf{L} eine gerade Potenz aufweisen.

Für die Fourier-Transformierte der räumlichen Ableitungen einer Funktion h gilt

$$\mathcal{F} [\nabla^l h(\mathbf{r}, t)] = (i\mathbf{q})^l \widehat{h}(\mathbf{q}, t), \quad (8.4)$$

wobei i die imaginäre Einheit ist. Für gerade Potenzen der Ableitung eines linearen Feldes w_k erhält man folglich

$$\mathcal{F} [\nabla^{2l} w_k(\mathbf{r}, t)] = (i\mathbf{q})^{2l} \widehat{w}_k(\mathbf{q}, t) = (-1)^l q^{2l} \widehat{w}_k(\mathbf{q}, t) \text{ mit } l \in \mathbb{Z},$$

was bedeutet, dass die Terme des linearen Operators im Fourierraum zu einer Multiplikation mit einem Vorfaktor $\propto (-1)^l q^{2l}$ werden. Für die Terme $L_{m,n} = \eta_{m,n} \nabla^{2k_{m,n}} w_{l_{m,n}}$ des linearen Operators mit

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} L_{1,1} & L_{1,2} & \dots \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ L_{d,1} & \dots & L_{d,d} \end{pmatrix}$$

mit konstanten Vorfaktor $\eta_{m,n} \in \mathbb{C}$ gilt folglich

$$\mathcal{F} [L w_k(\mathbf{r}, t)] = \eta \mathcal{F} [\nabla^{2l} w_k(\mathbf{r}, t)] = \eta (-1)^l q^{2l} \widehat{w}_k(\mathbf{q}, t) := \widehat{L} \widehat{w}_k.$$

Hierbei wurde die explizite Abhängigkeit der Indizes m, n jeweils zur Übersichtlichkeit ausgelassen.

Behandlung des nichtlinearen Operators

Bei der Behandlung der nichtlinearen Anteile muss beachtet werden, dass die Multiplikation mehrerer ortsabhängiger Felder $w_i w_j \dots$ im Normalraum einer Faltung im Fourierraum entspricht. Da die numerische Berechnung einer Faltung sehr hohe Berechnungskosten beinhaltet, ist es sinnvoll, diese zu vermeiden. Hierfür wird die Transformations-Methode nach Orszag verwendet [230]. Nach dieser Methode werden Faltungen vermieden, indem die Multiplikationen von Feldern im Ortsraum ausgeführt werden und anschließend das Produkt beider Faktoren in den Fourierraum transformiert wird. Enthält dabei ein Faktor eine räumliche Ableitung, so wird das Argument der Ableitung zuerst in den Fourierraum transformiert, dort wird die Ableitung gebildet und anschließend wird das Resultat wieder in den Ortsraum transformiert, wo weitere Multiplikationen ausgeführt werden können.

Ziel ist es wieder, den Operator \mathbf{N} in Fourierdarstellung zu erhalten, um Gl. (8.2) anwenden zu können. Die Komponenten des nichtlinearen Operators können im Allgemeinen

geschrieben werden als

$$\mathbf{N}(\mathbf{w}) = \begin{pmatrix} \sum_{n_1} N_{1,n_1}(\mathbf{w}) \\ \sum_{n_2} N_{2,n_2}(\mathbf{w}) \\ \vdots \\ \sum_{n_d} N_{d,n_d}(\mathbf{w}) \end{pmatrix},$$

wobei sich jeder Term $N_{m,n}$ aus einem konstanten Vorfaktor $\chi_{m,n} \in \mathbb{C}$ und einer beliebigen Anzahl an Ableitungen auf multiplikative Kombinationen g der Felder w_k (d.h. $g = w_{k_1}^{l_1} w_{k_2}^{l_2} \dots w_{k_d}^{l_d}$ mit $l_1, \dots, l_d \in \mathbb{N}_0$) zusammensetzt. Somit hat jeder Term $N_{m,n}$ die Form

$$N = \chi \left(\nabla^{l_1} g_1 \right) \cdot \left(\nabla^{l_2} g_2 \right) \cdot \dots, \quad (8.5)$$

wobei jeweils die explizite Abhängigkeit der Indizes m,n zur besseren Übersichtlichkeit ausgelassen wurde. Um die Vorteile der PSM zu nutzen und Gl. (8.5) effizient ohne die Berechnung einer Faltung zu lösen, werden nun Identitätsoperationen gemäß Gleichungen (8.3) eingefügt [230]. Für \widehat{N} aus Gleichungen (8.5) erhält man unter Zuhilfenahme der Beziehung aus Gl. (8.4) schließlich

$$\begin{aligned} \widehat{N} &= \mathcal{F}(N) \\ &= \chi \mathcal{F} \left\{ \mathcal{F}^{-1} \left[\mathcal{F} \left(\nabla^{l_1} g_1 \right) \right] \cdot \mathcal{F}^{-1} \left[\mathcal{F} \left(\nabla^{l_2} g_2 \right) \right] \cdot \dots \right\} \\ &= \chi \mathcal{F} \left\{ \mathcal{F}^{-1} \left[(i\mathbf{q})^{l_1} \widehat{g}_1 \right] \cdot \mathcal{F}^{-1} \left[(i\mathbf{q})^{l_2} \widehat{g}_2 \right] \cdot \dots \right\}. \end{aligned}$$

Durch diese Technik werden alle Ortsableitungen durch Multiplikationen mit Vorfaktoren $(i\mathbf{q})^l$ und zugehörigen Fourier-Transformationen ersetzt. Dies erlaubt es die Auflösungsvorteile der PSM auch für den nichtlinearen Operator zu erhalten und umgeht hierbei die kostenintensive Berechnung einer Faltung.

Diese Methode kann noch zur Optimierung im Bezug auf Speichernutzung und Anzahl der benötigten Fourier-Transformationen erweitert werden. So können bspw. Terme der Form $\nabla(f_i g_i)$ unter Zuhilfenahme der Produktregel

$$\nabla(f_i g_i) = f_i \nabla(g_i) + g_i \nabla(f_i) \quad (8.6)$$

vereinfacht werden. Bei rekursiver Anwendung der Produktregel bei höheren Ableitungen oder Exponenten der Felder w_k erhält man letztendlich nur noch Terme, welche Ableitungen von Funktionen linear in w_k^1 enthalten. Da die linearen Felder w_k^1 aufgrund des Integrations-

schrittes Gl. (8.2) bereits im Fourierraum berechnet und gespeichert werden müssen, können somit zusätzliche Fourier-Transformationen bzw. Speicherbelegungen teilweise vermieden werden.

Randbedingungen

Für die numerische Behandlung der PSM wird eine spezielle Implementierung [232] der schnellen Fourier-Transformation (engl. *Fast Fourier-Transformation*) verwendet, welche eine effiziente Umsetzung der diskreten Fourier-Transformation ist [233]. Diese hat die Eigenschaft, bei verkleinerter Frequenzauflösung Δq und somit steigender Stützstellenzahl N_q nur proportional zu $O(N \log N)$ zu skalieren. Dies erlaubt es sehr große Felder bzw. sehr hochaufgelöste Simulationen effizient zu berechnen. Für Systeme mit periodischen Rändern wird hierbei die Standard-Basis der diskreten Fourier-Transformation gewählt. Für *no-flux* Ränder werden hingegen die Felder \widehat{w}_k durch auf eine Kosinus-Basis im Frequenzraum abgebildet [232], welche verschwindende Ableitungen an den Rändern sicherstellt, wobei jeweils nur die erste Hälfte des Ortsraumes ausgewertet wird.

8.1.2. Zeitliche Integration

Die in den folgenden Abschnitten beschriebenen Systeme mit intrinsischer Erhaltung enthalten Dynamiken auf verschiedenen Zeitskalen, was besondere Anforderungen an die numerische Behandlung stellt. Eine effektive Methode zur zeitlichen Integration solcher Systeme stellt die Semi-Implicite Methode, wie zum Beispiel in [231, 234] beschrieben, dar, welche im Folgenden beschrieben werden soll. Im Unterschied zum expliziten Euler-Verfahren wird hier der lineare Teil der Berechnung in impliziter Form $\widehat{\mathbf{L}}\mathbf{w}^{(k+1)}$ berücksichtigt, während nichtlineare Anteile weiterhin explizit dargestellt werden, wobei der diskrete Zeitschritt $f(t) \rightarrow f^{(k)}$ für Zeiten $t_k = k\Delta t$ und Schrittweite Δt eingeführt wurde. Somit wird aus Gl. (8.2) zunächst die zeitlich diskretisierte Formulierung

$$\widehat{\mathbf{w}}_i^{(k+1)} = \widehat{\mathbf{w}}_i^{(k)} + \Delta t \left[\widehat{\mathbf{L}}\widehat{\mathbf{w}}^{(k+1)} + \widehat{\mathbf{N}}^{(k)} \right]. \quad (8.7)$$

Um den Zustand des Systems im nächsten Zeitschritt $\mathbf{w}^{(k+1)}$ zu bestimmen, wird Gl. (8.7) nach $\mathbf{w}^{(k+1)}$ aufgelöst und man erhält [231]

$$\widehat{\mathbf{w}}_i^{(k+1)}(\mathbf{Q}_i) = [\mathbf{I} - \Delta t \widehat{\mathbf{L}}(\mathbf{Q}_i)]^{-1} \left[\widehat{\mathbf{w}}^{(k)}(\mathbf{Q}_i) + \Delta t \widehat{\mathbf{N}}^{(k)}(\mathbf{Q}_i) \right] \quad (8.8)$$

mit dem Einheitsoperator \mathbf{I} . Die Inverse $[\mathbf{I} - \Delta t \mathbf{L}(\mathbf{Q}_i)]^{-1}$ mit Dimension $K \times K$ muss nur einmalig vor Beginn der Simulation an jedem Ort berechnet werden und ist während der Simulation konstant.

8.1.3. Bestimmung der charakteristischen Länge

Bei der Simulation von dynamischen Gleichungen ist die charakteristische Länge der numerischen Lösung eine interessante Größe [235, 236]. Als Maß für die typische Systemlänge gibt es verschiedene Möglichkeiten [62, 213], wobei in dieser Arbeit aufgrund der schnelleren Konvergenz das Maß

$$\mathcal{L}(t) = 2\pi \frac{\int S(q,t) dk}{\int q S(q,t) dq}$$

verwendet wird, bei dem über Kugelschalen $q = \|\mathbf{q}\|$ des Wellenvektors gemäß

$$S_k(q,t) = \langle (\widehat{\mathbf{w}}_k(\mathbf{q},t) \widehat{\mathbf{w}}_k(-\mathbf{q},t))^2 \rangle_q$$

gemittelt wird.

8.2. Numerische Umsetzung

Für die vorliegende Arbeit wurde ein eigenständiges Programm zur Simulation der zeitlichen Entwicklung partieller Differentialgleichungs-Systeme in der Sprache C++ entwickelt und dem Lehrstuhl zur Verfügung gestellt. Es ermöglicht die numerische Lösung ein und zwei-dimensionaler gekoppelter, homogener, komplexer, partieller Differentialgleichungen mit periodischen und Neumann Randbedingungen. Der Kern des Programms ist dafür zuständig, dynamische Gleichungssysteme mithilfe der in Gl. (8.8) beschriebenen Vorschrift numerisch zu integrieren, wobei für die Berechnung der Inversen die lineare Algebra Bibliothek LAPACK [237] und für die Fourier-Transformation die Bibliothek fftw3 verwendet wird, welche eine *fft*-Implementierung mit Skalierung $\mathcal{O}(N \log(N))$ realisiert [232]. Der Code ist mit OpenMP parallelisiert. Da verschiedene Gleichungssysteme untersucht werden, wurde ein ASCII-Mathe Parser entwickelt. Er ermöglicht die Eingabe des zu simulierenden Gleichungssystems in Form von Texteingaben. Die Eingabe einer CH-Gleichung hat zum Beispiel die Form wie in Code 8.1 gezeigt.

Code 8.1: Eingabe der CH-Gleichung für den internen ASCII-Parser

```
equation 0 "N^2(epsilon*rho+kappa*N^2(rho)-c*rho^3)"
```

Die Gleichung wird nach dem Einlesen intern durch den Parser in eine Baumstruktur umgewandelt. Anschließend wird das Gleichungssystem durch eine hierfür ebenfalls entwickelte symbolische Algebra-Bibliothek gemäß Gl. (8.6) symbolisch analysiert und umgeformt (Ausmultiplizieren, Differenzieren durch Anwenden der Produktregel, Zusammenfassen gleicher Terme zur Reduktion der Berechnungszeit, Umwandlung bzw. Berechnung symbolisch definierter Konstanten,...). Der Input des Beispiels Code 8.1 wird intern auf die Form

$$\begin{aligned}\partial_t \rho &= \nabla^2 (\varepsilon \rho + \kappa \nabla^2 \rho - c \rho^3) \\ &= \varepsilon \nabla^2 \rho + \kappa \nabla^4 \rho - 6c \rho (\nabla \rho)^2 - 3c \rho^2 \nabla^2 \rho.\end{aligned}$$

gebracht, anschließend werden die symbolischen Konstanten ersetzt und das Gleichungssystem an den Solver übergeben. Das entwickelte Programm wurde für alle Simulationen in Teil II verwendet.

8.3. Programm-Tests

8.3.1. Cahn-Hilliard Gleichung

Als Programmtest wurden numerische Lösungen der CH-Gleichung

$$\partial_t \rho = \nabla^2 (\rho + \nabla^2 \rho - \rho^3) \quad (8.9)$$

untersucht.

Eindimensionale Simulation — Zunächst wurde eine eindimensionale Simulation getestet. Als Randbedingung wurden *no-flux* Ränder, mit einer Systemlänge von $L = 20$ und einer Stützstellenzahl von $N = 128$, simuliert. Die stationäre Lösung für Neumann Randbedingungen der CH-Gleichung aus Gl. (8.9) ist gegeben durch

$$\rho_s(x) = \tanh\left(\frac{x - \frac{L}{2}}{\sqrt{2}}\right).$$

In Abb. 8.1 sind zwei Schnappschüsse der numerischen Simulation dieses Problems dargestellt. Die Startbedingung ist in Abb. 8.1(a) gezeigt, welche aus einem weißen Rauschen mit

Amplitude 0.05 und einem überlagerten Kosinus-Profil mit Amplitude $A = 0.05$ und halber Systemlänge als Wellenlänge besteht. Die Überlagerung des Rauschprofils mit einem Kosinus beschleunigt die Konvergenz der Lösung zur stationären Form. Dies ist besonders im eindimensionalen Fall hilfreich, da die eindimensionale CH-Gleichung nur logarithmisch konvergiert. In Abb. 8.1(b) ist die stationäre Lösung (schwarze Kurve) des Programms zusammen mit der theoretisch berechneten Lösung (grau, strichpunktiert) gezeigt. Beide stimmen sehr gut überein.

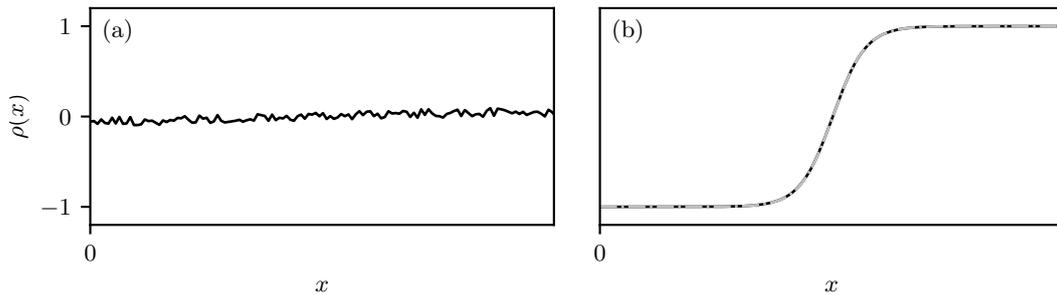


Abb. 8.1.: Darstellung der Schnappschüsse des Feldes $\rho(x)$ (schwarz) in einem System mit Länge $L = 20$. Das Feld $\rho(x)$ wurde mit einem Sinus mit Amplitude 0.05 und Rauschamplitude 0.1 initialisiert, wie in (a) gezeigt. (b) Die Resultierende Lösung des Programms (schwarze, durchgezogene Linie) nach 40000 Zeitschritten deckt sich mit einer angefitteten Lösung (grau, strichpunktiert) einer tanh-Flanke.

Zweidimensionale Simulation — Auch für die zweidimensionale CH-Gleichung wurden Tests durchgeführt. Für die zweidimensionale Simulation wurden periodische Randbedingungen verwendet, sowie eine Systemlänge von $L_x = L_y = 256$ und eine Stützstellenzahl von $N_x = N_y = 256$. Die Startbedingung für $\rho(x, y, t = 0)$ ist durch ein weißes Rauschen mit Amplitude 0.05 gegeben (siehe Abb. 8.2(a)). Für den zwidimensionalen Fall ist bekannt, dass die charakteristische Länge des CH-Systems mit Potenzgesetz gemäß $\sim t^{1/3}$ skaliert [238]. Das resultierende Skalenverhalten der Simulation ist in Abb. 8.2(e) gezeigt, was mit der erwarteten Skalierung übereinstimmt.

In Abb. 8.2(a)-(d) werden einige Schnappschüsse der Lösung während des Coarsening-Vorgangs dargestellt. Man erkennt das typische Vergrößerungsverhalten während der Phase-separation der Gebiete mit hoher und niedriger Konzentration.

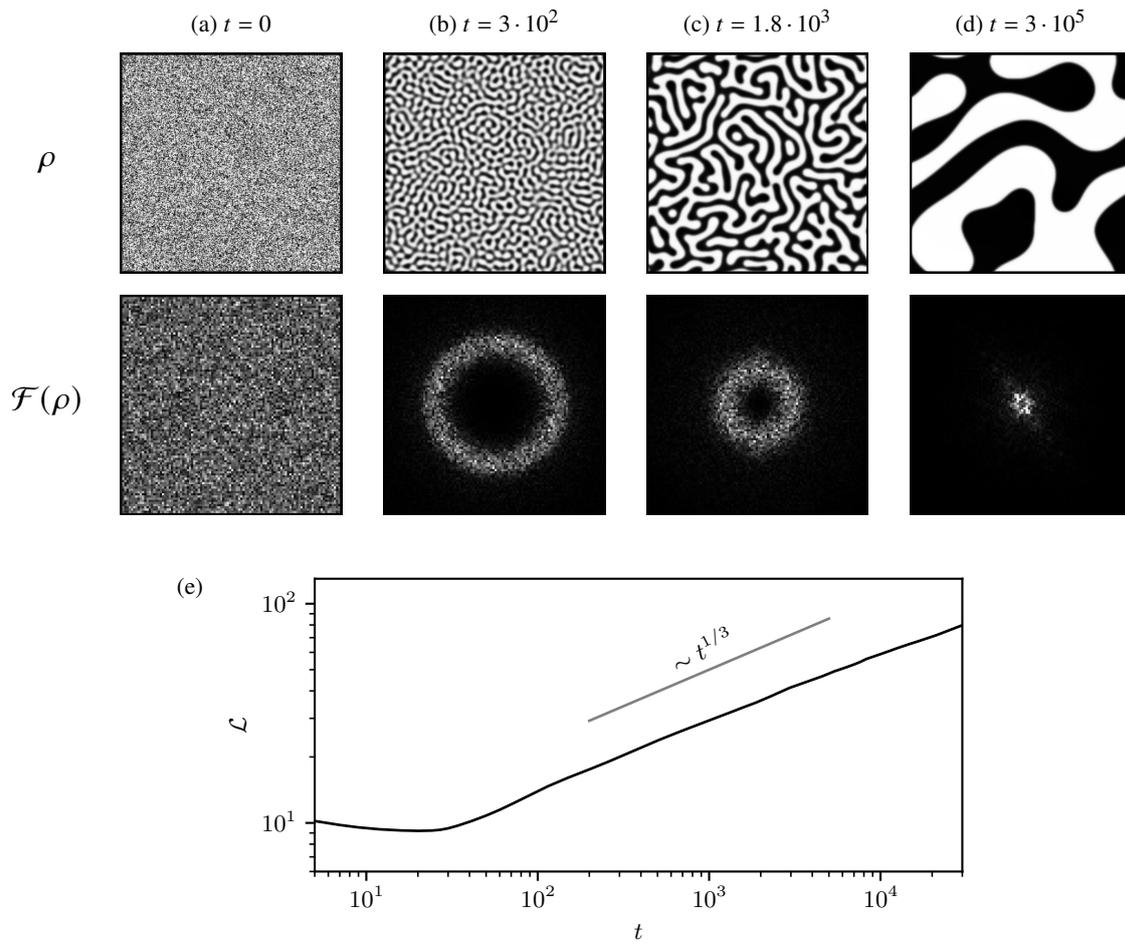


Abb. 8.2.: Simulationsergebnisse der zweidimensionalen CH-Gleichung. (a)-(d) Schnappschüsse der Simulation zu verschiedenen Zeiten, wobei das obere Bild jeweils die Dichte ρ im Ortsraum und das untere Bild die Dichte $\mathcal{F}(\rho)$ im Fourierraum zeigt. Man erkennt das typische Separationsverhalten mit wachsenden Längenskalen. (e) Die charakteristische Länge des Systems als Funktion der Zeit skaliert $\sim t^{1/3}$.

8.4. Darstellung der Ergebnisse zweidimensionaler Datensätze

Zur besseren Darstellung zweidimensionaler Datensätze werden im Folgenden verschiedene Techniken verwendet. Falls nicht anders angegeben, wird die Darstellung der Dichte als kontinuierliche Funktion, wie in Abb. 8.3(a) gezeigt, verwendet. Hierbei entsprechen hellere Farben höheren Funktionswerten und die Achsenausrichtung ist nach rechts für die x -Achse und nach oben für die y -Achse. Abb. 8.3(b) zeigt die Binärdarstellung, bei der zwei diskrete Farben für Werte oberhalb (weiß) und unterhalb (schwarz) des Nullwertes verwendet werden. In Abb. 8.3(c) ist die Konturdarstellung abgebildet, bei der das Feld als Konturlinien bei Nulldurchgängen gezeichnet wird.

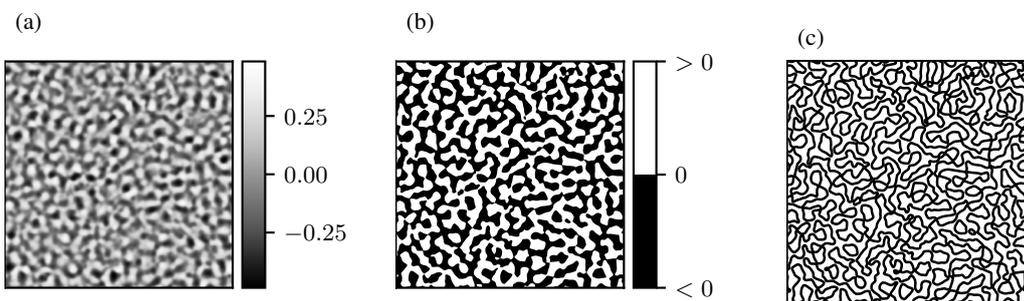


Abb. 8.3.: Verschiedene Darstellungsmöglichkeiten zweidimensionaler Dichtefelder. (a) Normale Darstellung der kontinuierlichen Dichte. (b) Binärdarstellung mit zwei diskreten Farben für Werte oberhalb (weiß) und unterhalb (schwarz) des Nullwertes. (c) Konturdarstellung mit Linien bei Nulldurchgängen des Feldes.

9. Stationäre und oszillatorische Übergänge in gekoppelten Systemen

9.1. Einleitung

In Abschnitt 7.1 wurden Beispiele von binären Mischungen sowie Beispiele von aktiver Materie mit Erhaltungseigenschaften gegeben. In diesem Zusammenhang wurde die CH Gleichung beschrieben, welche die generische OPG für die genannten Systeme des Typs II_s^c mit typischer linearer Dispersion der Form, wie in Abb. 7.2 gezeigt, darstellt.

In der Strukturbildung gibt es im Allgemeinen neben den stationären Übergangsszenarien auch die Möglichkeit eines oszillatorischen Übergangs mit dynamischen Strukturen. Wie bereits erwähnt, beschäftigte sich eine frühe Arbeit von Frommherz bereits Ende der 1980er Jahre mit einem System gekoppelter, diffusiver Gleichungen, welche dynamische Lösungen in Systemen mit Erhaltung zeigen [197]. Dort wurde ein Modell aus gekoppelten, Ionenkanälen erhaltener Dichte beschrieben, welches bei einer nicht-symmetrischen Wechselwirkung oszillatorische Muster zeigt. Dieses Themengebiet der gekoppelten Erhaltungsgleichungen findet man in verschiedenen Feldern aktueller Forschung, wie zum Beispiel im Bereich der Medizin bei der Wechselwirkung von Tumorzellen und Makrophagen, oder in der Biologie bei der Wechselwirkung von Bakterien über ein Transmitterfeld wieder [206, 207, 239–241]. Aber auch Systeme von linear gekoppelten CH Gleichungen mit antisymmetrischer sowie symmetrischer Kopplung wurden untersucht. Hierbei kann die Erhaltung verschiedener Natur sein und entweder für jedes einzelne Feld gelten oder nur im Ensemble eine Erhaltung aufweisen [199–202, 205, 242]. Dabei zeigen erhaltene Systeme, welche miteinander gekoppelt sind, interessante Phänomene, so können zum Beispiel zeitlich dynamische, stabile Muster entstehen, wobei hierfür eine hinreichend antisymmetrische Wechselwirkung erforderlich ist, wie in [198] diskutiert, welche die Variationssymmetrie bricht.

In diesem Abschnitt werden zwei allgemeine, gekoppelte Transportgleichungen für zwei erhaltene Felder vorgestellt, die sowohl einen Übergang zur nicht-oszillatorischen also auch oszillatorischen zur Phasentrennung beschreiben. Diese beiden gekoppelten Erhaltungsgleichungen enthalten eine systematische Beschreibung bis zur kubischen Ordnung und schließen damit im Gegensatz zu anderen Modellen [199–202, 205] auch nichtlineare Kopplungen zwischen den beiden Feldern ein. Die beiden gekoppelten Transportgleichungen sind auch der Startpunkt zur Ableitung einer universellen OPG für oszillatorische Phasenseparation in Abschnitt 10.6. Dort zeigt sich, dass die nichtlinearen Kopplungen wichtige Beiträge liefern und eine Vernachlässigung eine Einschränkung der Systemdynamik bedeutet. Weiterhin wird in Abschnitt 12 ein explizites System gekoppelter Bakterien auf die Form der GTOPS nahe des kritischen Punktes reduziert. Auch dort kommen Beiträge der nichtlinearen Kopplung zum Tragen und sind essentiell für deren Beschreibung. Eine Diskussion der linearisierten GTOPS zeigt mögliche lineare Dispersionscharakteristiken der GTOPS. Anschließend wird das prototypische Modell der MiMo eingeführt. Dieses ist bei der Reduktion noch grundlegender als zwei linear gekoppelter CH Gleichungen. Es ermöglicht die Untersuchung des II_o^c Übergangs in verschiedenen Bereichen und erfasst trotz seiner Einfachheit viele Szenarien der GTOPS und dient somit zur modellhaften Untersuchung von II_o Übergängen.

9.2. Gekoppelte Transport-Gleichungen für oszillatorische Phasenseparation

Bei der Entwicklung eines Modells für zwei erhaltene, gekoppelte Dichten, die Phasenseparation bei einer Typ II^c Instabilität zeigen, ist es zunächst hilfreich, nochmals die zentralen Eigenschaften des CH - Modells für die klassische Phasenseparation in Erinnerung zu rufen. Die Beschreibung von phasenseparierenden Systemen kann im stationären Fall durch eine verschiedene Anzahl gekoppelter Gleichungen erfolgen.

Im Gegensatz zum stationären Pendant müssen für eine oszillatorische Dynamik mindestens zwei gekoppelte Felder vorliegen, welche erhaltene Charakteristiken auf einer vergleichbar langsamen Zeitskala aufweisen. So können zum Beispiel vier gekoppelte Gleichungen vorliegen, von denen zwei schnelle Dynamiken adiabatisch eliminiert werden können (vgl. hierzu Abschnitt 12). Auch andere Szenarien wie drei gekoppelte Felder mit einer langsamen Dynamik [197], sowie zwei einzelne erhaltene Felder sind möglich [200]. Für die allgemeinen Überlegungen bedeutet dies, dass mindestens zwei gekoppelte, erhaltene Felder $\rho(\mathbf{r}, t)$ und $\psi(\mathbf{r}, t)$ benötigt werden. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit seien diese

beschrieben durch

$$\begin{aligned}\tilde{\rho}(\mathbf{r},t) &= \rho_0 + \rho(\mathbf{r},t) & \text{mit} & \int_V d\mathbf{r} \rho(\mathbf{r},t) = 0, \\ \tilde{\psi}(\mathbf{r},t) &= \psi_0 + \psi(\mathbf{r},t) & \text{mit} & \int_V d\mathbf{r} \psi(\mathbf{r},t) = 0,\end{aligned}$$

wobei ρ_0 und ψ_0 die räumlich und zeitlich konstanten Anteile enthalten und das Integral über den ganzen Ortsraum V gebildet wird. Unter der Annahme einer lokalen Massenerhaltung können die dynamischen Gleichungen durch die Kontinuums-Gleichungen (siehe (7.1) bzw. [77]) durch

$$\partial_t \tilde{\rho}(\mathbf{r},t) = \partial_t \rho(\mathbf{r},t) = -\nabla \mathbf{j}_\rho(\rho, \psi), \quad (9.2a)$$

$$\partial_t \tilde{\psi}(\mathbf{r},t) = \partial_t \psi(\mathbf{r},t) = -\nabla \mathbf{j}_\psi(\rho, \psi) \quad (9.2b)$$

ausgedrückt werden. Dies ist zunächst die allgemeine Formulierung gekoppelter, erhaltener Felder, ähnlich wie die Ausgangsform der CH-Gleichung in (7.1). Für die weitere Analyse ist nun die allgemeine Struktur der Flussterme $j_{\rho, \psi}(\rho, \psi)$ zentral. Die klassische CH-Gleichung weist zum einen eine lineare Stabilisierung durch den Ableitungsterm vierter Ordnung, als auch eine Begrenzung durch die kubische Nichtlinearität auf und ist nicht auf lineare, irreversible Thermodynamik beschränkt [243, 244]. Folglich sollten auch die Kopplungen der interagierenden Systeme nicht nur linear erfolgen, sondern diese grundlegende, nichtlineare Eigenschaft widerspiegeln, um auch die Szenarien von [197] oder auch in Abschnitt 12 vollständig beschreiben zu können. Somit können in der Formulierung nahe des Übergangs die Ströme $\mathbf{j}_{\rho, \psi}(\rho, \psi)$ äquivalent zu Gl. (7.3) auch Kreuz-Kopplungen mit nichtlinearen Termen in der Ordnung konsistent mit der Selbstkopplung enthalten. Mit der Annahme eines superkritischen Bifurkation, motiviert durch bekannte Szenarien (siehe z. B. [64, 195]) nahe des Phasen-Separations Überganges für beide Felder, erhält man im Allgemeinen eine Skalierung gemäß

$$\rho, \psi \propto \sqrt{\varepsilon}, \quad \nabla \propto \sqrt{\varepsilon},$$

wobei ε den Abstand zum Einsatzpunkt der Phasenseparation angibt. Mit diesen Annahmen ergibt sich für die Formulierung der beiden Ströme

$$\mathbf{j}_\rho = [f_1(\rho, \psi) + c_1 \nabla^2] \nabla \rho + [f_2(\rho, \psi) + c_2 \nabla^2] \nabla \psi, \quad (9.3a)$$

$$\mathbf{j}_\psi = [g_1(\rho, \psi) + d_3 \nabla^2] \nabla \rho + [g_2(\rho, \psi) + d_2 \nabla^2] \nabla \psi. \quad (9.3b)$$

wobei f_i, g_i, c_i, d_i mit $i = 1, 2$ Abhängigkeiten von ρ und ψ enthalten. Die klassische

CH Gleichung enthält auf erster nichtlinearer Ordnung Abhängigkeiten bis $O(\varepsilon^{\frac{5}{2}})$. Unter Berücksichtigung dieser Bedingung für den vorliegenden Fall müssen folglich f_i, g_i, c_i, d_i Kombinationen von ρ und ψ bis zur dritten Ordnung enthalten. Schreibt man diese aus, erhält man in expliziter Form letztendlich die GTOPSs

$$\begin{aligned} \partial_t \rho = & -\nabla^2 [\alpha_1 \rho + \alpha_2 \nabla^2 \rho + \alpha_3 \rho^3 - \alpha_4 \rho^3] - \nabla^2 [K_1 \psi + K_2 \nabla^2 \psi + K_3 \psi^2 - K_4 \psi^3] \\ & - \nabla [\psi \nabla (\alpha_6 \rho - \alpha_5 \rho^2) - \alpha_7 \psi^2 \nabla \rho] - \nabla [\rho \nabla (K_6 \psi - K_5 \psi^2) - K_7 \rho^2 \nabla \psi] \end{aligned} \quad (9.4a)$$

$$\begin{aligned} \partial_t \psi = & -\nabla^2 [\beta_1 \psi + \beta_2 \nabla^2 \psi + \beta_3 \psi^3 - \beta_4 \psi^3] - \nabla^2 [L_1 \rho + L_2 \nabla^2 \rho + L_3 \rho^2 - L_4 \rho^3] \\ & - \nabla [\rho \nabla (\beta_6 \psi - \beta_5 \psi^2) - \beta_7 \rho^2 \nabla \psi] - \nabla [\psi \nabla (L_6 \rho - L_5 \rho^2) - L_7 \psi^2 \nabla \rho] \end{aligned} \quad (9.4b)$$

mit $\alpha_i, \beta_i, K_i, L_i \in \mathbb{R}$. Dies ist die allgemeine Beschreibung zweier gekoppelter, erhaltener Größen. In diesen Gleichungen beschreiben die Konstanten $(\alpha_{1,\dots,4}, \beta_{1,\dots,4})$ Terme der Selbstkopplung. Die Parameter $(K_{1,\dots,4}, L_{1,\dots,4})$ sind der Kreuzkopplung zuzuordnen und $(\alpha_{5,6,7}, \beta_{5,6,7}, K_{5,6,7}, L_{5,6,7})$ beschreiben gemischte Kopplungsterme. Falls $\alpha_{5,6,7} \neq \beta_{5,6,7}$ oder $L_i \neq K_i$ ist die Kopplung nicht symmetrisch, wobei in diesem Zusammenhang auch von nicht-reziproker Wechselwirkung (engl. *non-reciprocal* [198, 201, 202]) gesprochen wird.

Wie bereits in anderen Bereichen mit oszillatorischen Phänomenen [65, 200, 245–250] ist auch in diesem Fall eine notwendige Bedingung, dass die Kopplung hinreichend asymmetrisch ist [197, 198]. Im Folgenden wird eine lineare Stabilitätsanalyse durchgeführt, um die möglichen Übergangsszenarien zu veranschaulichen. Anschließend führen wir ein MiMo ein, um auf möglichst elementare Weise schon wesentliche Züge der oszillatorischen Phaseseparation zu Beschreiben.

Für die folgenden Betrachtungen wird die Vektorschreibweise

$$\mathbf{w} = \begin{pmatrix} \rho \\ \psi \end{pmatrix} \quad (9.5)$$

verwendet. Das linearisierte Gleichungssystem zu Gleichungen (9.4) ist gegeben durch

$$\partial_t \mathbf{w} = -\nabla^2 [\mathbf{M}_0 + \nabla^2 \mathbf{M}_2] \mathbf{w}$$

mit

$$\mathbf{M}_0 = \begin{pmatrix} \alpha_1 & K_1 \\ L_1 & \beta_1 \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad \mathbf{M}_2 = \begin{pmatrix} \alpha_2 & K_2 \\ L_2 & \beta_2 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \mathbf{M} := \mathbf{M}_0 - q^2 \mathbf{M}_2. \quad (9.6)$$

Die lineare Form kann durch einen Ansatz

$$\mathbf{w} = \begin{pmatrix} \bar{\rho} \\ \bar{\psi} \end{pmatrix} e^{\lambda t + i\mathbf{q}\mathbf{r}}$$

gelöst werden. Nach Einsetzen in Gleichungen (9.4) erhält man

$$\lambda \mathbf{w} = [q^2 \mathbf{M}_0 - q^4 \mathbf{M}_2] \mathbf{w}$$

mit $q = \|\mathbf{q}\|$. Hierbei handelt es sich um ein gekoppeltes, zweidimensionales, lineares Gleichungssystem, welches im Allgemeinen die Eigenwerte

$$\lambda^\pm(\mathbf{q}) = q^2 \mathbf{M} \mathbf{w} = \frac{q^2}{2} \left[\text{Tr}(\mathbf{M}) \pm \sqrt{\text{Tr}(\mathbf{M})^2 - 4 \text{Det}(\mathbf{M})} \right]. \quad (9.7)$$

besitzt. Für das vorliegende System erhält man für die Spur $\text{Tr}(\mathbf{M})$ und Determinante $\text{Det}(\mathbf{M})$ die Lösungen

$$\text{Tr}(\mathbf{M}) = \alpha_1 + \beta_1 - (\alpha_2 + \beta_2)q^2, \quad (9.8a)$$

$$\begin{aligned} \text{Det}(\mathbf{M}) &= (-\alpha_1 + \alpha_2 q^2)(-\beta_1 + \beta_1 q^2) - (-L_1 + L_2 q^2)(-K_1 + K_2 q^2) \\ &= \alpha_1 \beta_1 - \alpha_2 \beta_1 q^2 - \alpha_1 \beta_2 q^2 + \alpha_2 \beta_2 q^4 - L_1 K_1 + L_1 K_2 q^2 + \\ &\quad L_2 K_1 q^4 - L_2 K_2 q^4. \end{aligned} \quad (9.8b)$$

Das Einsetzen von Gleichungen (9.8) in Gl. (9.7) liefert

$$\lambda^\pm(\mathbf{q}) = \frac{q^2}{2} \left[\alpha_1 + \beta_1 - q^2(\alpha_2 + \beta_2) \pm \sqrt{R_0 + q^2 R_2 + q^4 R_4} \right] \quad (9.9a)$$

$$:= \frac{q^2}{2} \left[\alpha_1 + \beta_1 - q^2(\alpha_2 + \beta_2) \pm \sqrt{R(q)} \right] \quad (9.9b)$$

mit

$$R(q) = R_0 + q^2 R_2 + q^4 R_4, \quad (9.10a)$$

$$R_0 = (\alpha_1 - \beta_1)^2 + 4K_1 L_1, \quad (9.10b)$$

$$R_2 = -2\alpha_1 \alpha_2 - 2\beta_1 \beta_2 + 2\alpha_1 \beta_2 + 2\alpha_2 \beta_1 - 4L_1 K_2 - 4L_2 K_1, \quad (9.10c)$$

$$R_4 = (\alpha_2 - \beta_2)^2 + 4L_2 K_2. \quad (9.10d)$$

Aufgrund der Form der Erhaltungsgleichungen (9.2) tauchen nur Beiträge $\propto q^2$ auf und die Eigenwerte sind symmetrisch zu $q = 0$, d.h. $\lambda^\pm(\mathbf{q}) = \lambda(q)^\pm$, weshalb im nachstehend häufig nur der positive Ast der Moden diskutiert wird. Weiterhin existiert kein konstanter Anteil

für λ , was bedeutet, dass der homogene Anteil der Lösungen mit $q = 0$ nicht anwächst. Dies spiegelt die Erhaltungseigenschaft in der Dispersion wieder.

Die Typisierung in stationäres und oszillatorisches Verhalten erfolgt über den Imaginärteil des Eigenwertes $\text{Im}(\lambda^\pm)(q)$. Dieser ist bestimmt durch das Vorzeichen des Radikanden und kann verschiedene Übergangsszenarien hervorrufen, welche im Folgenden diskutiert werden.

Die verschiedenen Übergangsarten der GTOPS umfasst viele in der Strukturbildung bekannte Szenarien der Dispersionsverläufe [200, 206, 207, 214, 242, 251] und ist bestimmt durch die Eigenwerte aus Gl. (9.9). Zunächst wird der Fall

$$\alpha_2, \beta_2 > 0 \tag{9.11}$$

untersucht. Dieser Parameterbereich liegt auch in [197] sowie Abschnitt 12 vor und gibt an, dass die lineare Selbstkopplung eine Dämpfung in der vierten Ableitung aufweist. Liegt in Gleichungen (9.9) der Fall $\text{Re}(\lambda) < 0$ vor, so klingen etwaige Störungen des homogenen Grundzustandes mit der Zeit ab und das System liefert nur homogene Lösungen. Für $\text{Re}(\lambda) > 0$ können Störungen des homogenen Grundzustandes anwachsen, wobei $\text{Re}(\lambda)$ gemäß $\sim q^2$ anwächst und aufgrund Gl. (9.11) mit $\sim q^4$ gedämpft ist. Folglich existiert ein Wellenzahl-Band mit positiver Wachstumsrate im Bereich $0 < q < q_0$, was, wie bereits in Abschnitt 7.1 beschrieben, eine typische Eigenschaft von Instabilitäten des Typs II ist. Die nichtlineare q -Abhängigkeit von $R(q)$ gibt dabei vor, um welche Art des Überganges es sich handelt. Daraus kann die folgende Kategorisierung abgeleitet werden.

Stationäre Übergänge des Typs II_s

Falls $R(q) > 0$ für alle Wellenzahlen ist, erhält man $\lambda(q) \in \mathbb{R} \forall q$ und es handelt sich somit in diesem Fall um einen stationären Übergang des Typs II_s. Dies entspricht der Dispersion der klassischen CH-Gleichung. Das Verhalten der Lösungen ist in diesem Fall durch stationäre Lösungstypen bestimmt, wobei Moden mit großen Wellenzahlen gedämpft sind. Die typische Form dieser Dispersionsrelation ist in Abb. 9.1(a) gezeigt.

Oszillatorische Übergänge des Typs II_o

Falls $R(q) < 0$ für alle Wellenzahlen ist, gilt $\text{Im}(\lambda)(q) \neq 0, \forall q$ und es handelt es sich um einen rein oszillatorischen Übergang des Typs II_o. In diesem Fall sind zeitlich-dynamische Lösungen zu erwarten, wobei die Dispersion eine Form, wie in Abb. 9.1(b) dargestellt,

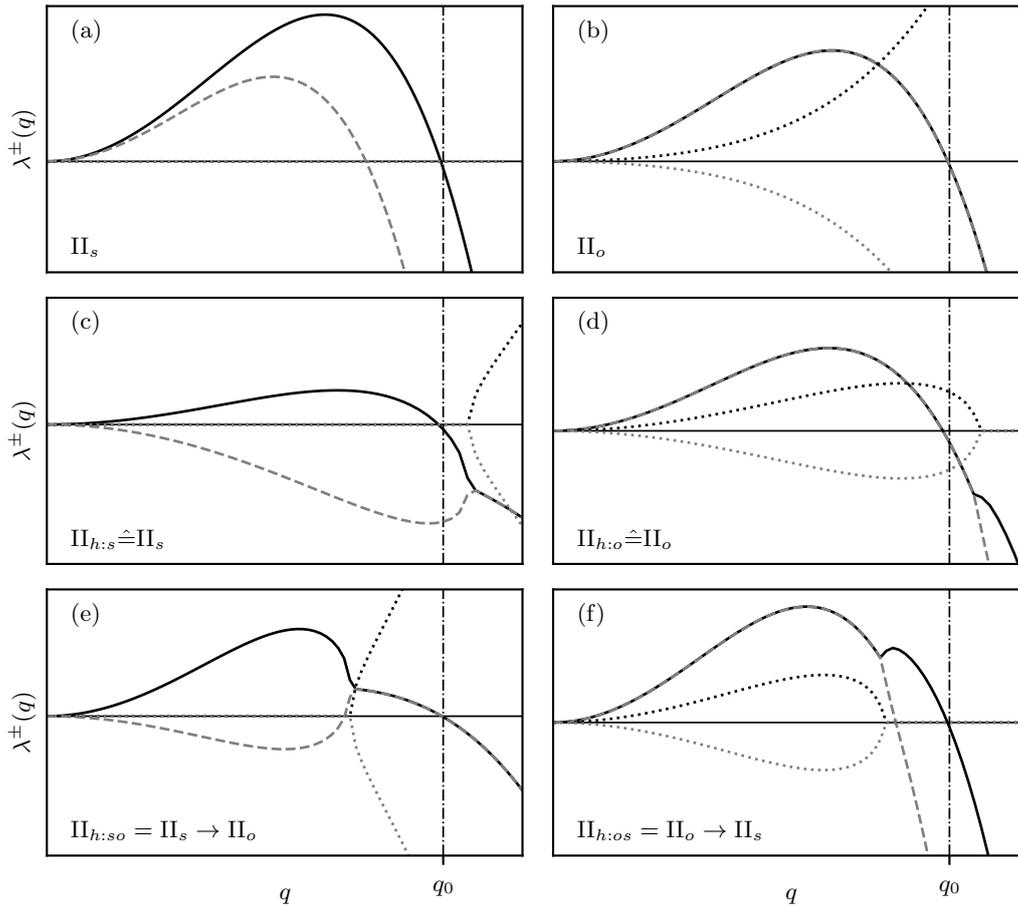


Abb. 9.1.: Verschiedene q -Abhängigkeiten der beiden Eigenwerte λ^\pm mit dem Realteil (schwarz, durchgezogen sowie grau, gestrichelt) und den Imaginärteilen (gepunktet) als Funktion von q . Für $0 < q < q_0$ ist $\text{Re}(\lambda)(q) > 0$ und somit wachsen die Amplituden dieser Moden gemäß der linearisierten Gleichung an. Die jeweilige Kategorisierung in Π_s oder Π_o erfolgt gemäß des Auftretens eines Imaginäranteiles $\text{Im}(\lambda)(q)$, hervorgerufen durch einen negativen Radikanden $R(q)$ aus Gl. (9.10a). Da dieser ein Polynom vierter Ordnung ist, können mehrere Übergänge $\text{Im}(\lambda)(q) \neq 0 \leftrightarrow \text{Im}(\lambda)(q) = 0$ erfolgen. Neben dem vollständig stationären (a) oder oszillatorischen Übergang (b) können auch hybride Übergänge mit einem Wechsel des Typs $\Pi_s \leftrightarrow \Pi_o$ für $q > q_0$ außerhalb des instabilen Bandes mit $0 < q < q_0$ (siehe (c) und (d)) oder innerhalb dessen (siehe (e) und (f)) auftreten.

annimmt.

Wechselnde dynamische Charakteristik $\Pi_s \leftrightarrow \Pi_o$ für endliche Wellenlängen q

Aufgrund der Form des Radikanden $R(q) = R_0 + q^2 R_2 + q^4 R_4$ kann das Vorzeichen von $R(q)$ wechseln und sich somit die Dynamik zwischen stationär und oszillatorischer Charakteristik

als Funktion von q ändern. Diese werden hier als hybride Zustände bezeichnet (Index h). In Abb. 9.1(c)-(f) sind vier exemplarische Fälle eines einzelnen Vorzeichenwechsels von $R(q)$ dargestellt. In Abb. 9.1(c) ist bspw. die Dispersion im kompletten überkritischen Band $0 < q < q_0$ reell. Erst oberhalb $q > q_0$ verzweigt die Dispersion in einem hinreichend unterkritischen Bereich und der imaginäre Anteil wird endlich. Da die Systemdynamik hauptsächlich durch das überkritische Modenband bestimmt ist, ist für diesen Fall zu erwarten, dass die Dynamik derer eines klassischen Überganges ohne Wechsel ähnelt, also $\Pi_{h:s} \hat{=} \Pi_s$. Auch das umgekehrte Szenario kann eintreten, bei dem ein oszillatorisches System in hinreichendem Abstand oberhalb von q_0 stationär wird. In diesem Fall deutet die lineare Dispersion auf eine vornehmlich oszillatorische Dynamik hin und somit gilt $\Pi_{h:o} \hat{=} \Pi_o$. Auch ein Übergang $\Pi_s \leftrightarrow \Pi_o$ innerhalb von $0 < q < q_0$ ist möglich. Eine lineare Analyse würde in diesem Fall nahelegen, dass die bestimmende Modenzahl mit ausgezeichnetem Amplitudenwachstum die Systemdynamik dominiert [200, 202, 207]. Hier ist jedoch die nichtlineare Natur des GTOPS-Gleichungssystems zu beachten. Im Allgemeinen sind Lösungen des Typs Π_s nicht durch eine einzelne Mode bestimmt, sondern entsprechen einer Überlagerung vieler verschiedener Moden endlicher Amplitude, auch wenn das Maximum des Amplitudenwachstums bei einer endlichen Modenzahl liegt. Dies ist eine essentielle Eigenschaft dieser Systeme, wie später am Beispiel des Minimal-Modells (vgl. Abschnitt 9.3) gezeigt wird und ist für eine erfolgreiche Reduzierung der Ordnungsparametergleichung in Abschnitt 10 eines der Kernelemente. Für die dynamische Charakteristik hat dies zur Folge, dass sich die Moden mit stationärer und oszillatorischer Charakteristik koppeln und somit aufgrund der linearen Analyse keine einfache Aussage über die resultierende Dynamik möglich ist.

Weitere lineare Charakterisierungen

Neben den bereits genannten Beispielen sind weitere Szenarien möglich. Falls mehrere Wechsel zwischen stationären und oszillatorischen Bereichen stattfinden, können bspw. mehrere überkritische Modenbänder mit verschiedenen Kombinationen an stationären und oszillatorischen Bereichen entstehen. (siehe zum Beispiel [242, 251]). Ein exemplarisches Beispiel einer solchen Dispersionsrelation der GTOPS ist in Abb. 9.2(a) abgebildet.

Lässt man die Bedingung Gl. (9.11) fallen, so kann auch ein stabiles Band bei endlichen Wellenlängen ohne Wechsel zwischen stationärer und oszillatorischer Charakteristik entstehen, wie für verschiedene erhaltene Systeme mit Kopplungen in [200, 252] diskutiert. Dies tritt auf, wenn die Dispersion mit negativer Steigung $\sim q^2$ an $q = 0$ anbindet. Mit einem positiven Wert von Beiträgen $\sim q^4$ wird ein überkritischer Modenbereich für endliche

q ermöglicht, welcher durch die Beiträge $\sim q^6$ (oder höhere Potenzen) gedämpft werden muss. Der entsprechende Dispersionsverlauf ist in Abb. 9.2(b) dargestellt und entspricht dem Fall [B] in Abb. 7.2.

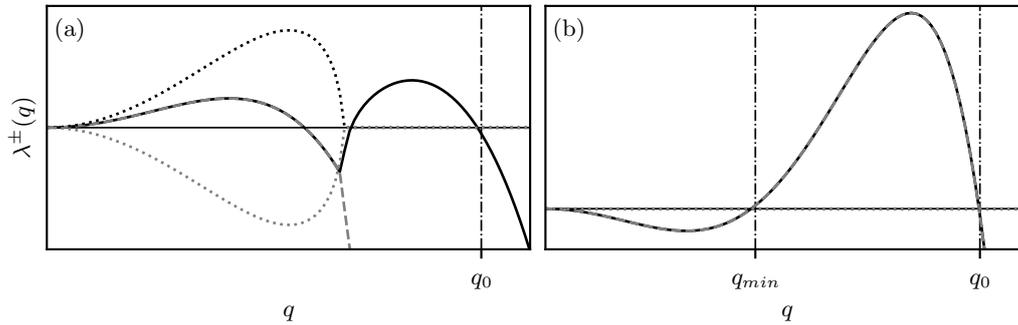


Abb. 9.2.: Weitere mögliche Dispersionsrelationen der GTOPS wie zum Beispiel: (a) Inseln überkritischer Modenbänder in der Dispersionsrelation mit unterschiedlichen Charakteristiken (II_o und II_s). (b) Ein überkritisches Modenband bei endlicher Wellenzahl, wie sie auch in anderen Systemen zu finden sind [200, 242].

9.3. Minimal Modell für (oszillatorische) Phasenseparation

Mit den generischen Transportgleichungen der GTOPS aus Gleichungen (9.4) werden in unterschiedlichen Parameterbereichen oszillatorische und nicht oszillatorische Phasenübergänge beschrieben. In diesem Abschnitt wird ein stark reduziertes System, welches in dieser Arbeit MiMo genannt wird, vorgestellt, welches Aspekte sowohl von den Typen II_o als auch II_s Charakteristiken beinhaltet, jedoch mit nur noch drei Parameter enthält. Dieses Modell enthält trotz der stark reduzierten Form und einfachen Beschreibung durch drei Parameter den Übergangsbereich von stationärer zu oszillatorischer Phasenseparation und kann als prototypisches Gleichungssystem für die Beschreibung oszillatorischer Phasenübergangsphänomene dienen. Hierfür wird eine klassische CH-Gleichung mit quadratischem Term gewählt. Diese wird an ein lineares, zweites Feld gekoppelt. Die dynamischen Gleichungen des MiMo haben die Form

$$\partial_t \rho = -\nabla^2 [\rho + \nabla^2 \rho + \psi - g\rho^2 - \rho^3], \quad (9.12a)$$

$$\partial_t \psi = -\nabla^2 [(2\varepsilon - 1)\psi - (1 + \theta)\rho], \quad (9.12b)$$

und können aus den GTOPS Gleichungen (9.4) mit $\alpha_{1,2,4} = K_1 = 1$, $\beta_1 = -(1 - 2\varepsilon)$, $L_1 = -(1 + \theta)$ erhalten werden (sonstige Parameter sind zu null gewählt).

9.3.1. Einsatz der Phasenseparation im MiMo

Eine lineare Stabilitätsanalyse der Gleichungen (9.12) liefert die Eigenwerte

$$\lambda^\pm(q) = \frac{q^2}{2} \left[2\varepsilon - q^2 \pm \sqrt{(2\varepsilon + q^2)^2 - 4(\theta + 2\varepsilon + q^2)} \right] \quad (9.13a)$$

$$= \frac{q^2}{2} [2\varepsilon - q^2 \pm i\omega^M], \quad (9.13b)$$

mit der Frequenz

$$\omega^M(q) = \sqrt{-(2\varepsilon + q^2)^2 + 4(\theta + 2\varepsilon + q^2)}.$$

Für sehr negative Werte von θ sind die Eigenwerte für den relevanten Wellenzahlbereich reellwertig und Gl. (9.13a) entspricht dem Fall II_s aus Abb. 9.1(a) bzw. (c), äquivalent zur Dispersion der klassischen CH Gleichung. Auch der Fall vollständiger oszillatorischer Übergänge II_o aus Abb. 9.1(b) bzw. (d) ist für große Werte von θ enthalten. Dieser Fall wird für die Amplitudengleichung in Abschnitt 10.6 näher untersucht.

Wählt man einen kleinen Wert $\varepsilon > 0$, so kann man durch Variation des Parameters θ den Übergang von stationärer zu oszillatorischer Phasenseparation in der Nähe des CTP untersuchen, bei dem zwei Eigenwerte einen entarteten Übergang aufzeigen [208]. In Abb. 9.3 sind Dispersionen für diesen Übergang mit Wechsel der Typ $\text{II}_s \leftrightarrow \text{II}_o$ Charakteristik gezeigt. Die gewählten Parameter sind $g = 0$ und $\varepsilon = 0.05$. Zur besseren Beschreibung wurde zusätzlich die Modenzahl l exemplarisch für eine Systemlänge von $L = 128$, passend zu den Simulationen der nichtlinearen Analyse in Abschnitt 9.3.2, eingezeichnet. Der Kontrollparameter ist positiv gewählt, man findet somit ein Band überkritischer Moden $\text{Re}(\lambda)(q) > 0$ im Bereich $0 < q < q_0$ (bzw. $0 < l < l_0$ für die Modenzahlen). In Abb. 9.3(a) ist der Fall $\theta = -0.2$ dargestellt. Dieser Wert für θ ist hinreichend negativ, dass die Eigenwerte im gesamten Bereich $0 < q < q_0$ bzw. $0 < l < l_0$ einen positiven R besitzen und somit reellwertig sind. Aus Gl. (9.13a) kann unter der Annahme eines positiven Radikanden die obere Schranke für q_0^s berechnet werden. Für diese muss mit $q_0^s \neq 0$ die Beziehung

$$2\varepsilon - (q_0^s)^2 \pm \sqrt{[2\varepsilon + (q_0^s)^2]^2 - 4[\theta + 2\varepsilon + (q_0^s)^2]} = 0$$

gelten. Durch Auflösen nach q_0^s erhält man

$$q_0^s(\varepsilon, \theta) = \pm \frac{\sqrt{(2\varepsilon - 1)(2\varepsilon + \theta)}}{2\varepsilon - 1} \quad \text{bzw.} \quad l_0^s(\varepsilon, \theta) = q_0^s \frac{L}{2\pi}.$$

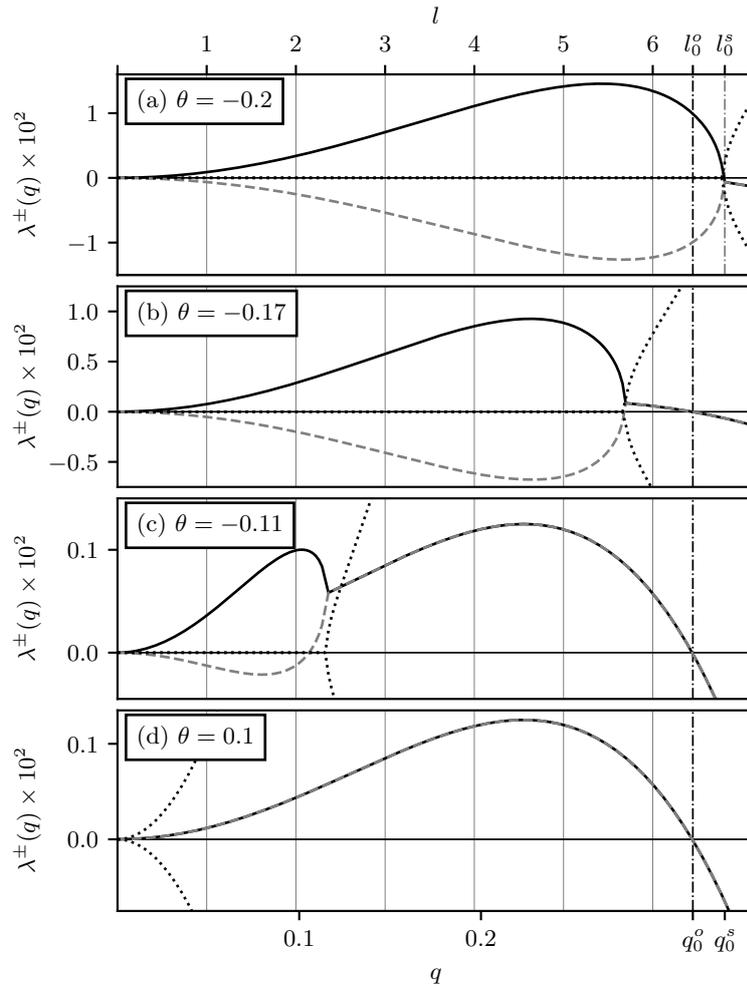


Abb. 9.3.: Dispersionsrelation des MiMo mit $\varepsilon = 0.05$ für verschiedene Werte θ . Dargestellt sind die Realteile (schwarz, durchgezogen und grau, gestrichelt) sowie die Imaginärteile (gepunktet) der beiden Eigenwerte $\lambda^\pm(q)$. Für stark negative Werte von θ sind die Eigenwerte für das gesamte überkritische Modenband $0 < q < q_0$ reell (siehe (a)). Mit Erhöhen von θ nähert sich ein Übergangsgebiet mit $\Pi_s \leftrightarrow \Pi_o$ der Grenze q_0 von rechts an, bis schließlich innerhalb von $0 < q < q_0$ der Übergang von $\Pi_s \rightarrow \Pi_o$ stattfindet (siehe (b) und (c)). Bei weiterem Erhöhen des Wertes θ verschwindet der Π_s Bereich vollständig und die Eigenwerte sind im gesamten Bereich oszillatorisch (siehe (d)). Zum Vergleich mit den späteren nichtlinearen Diskussionen wurden zusätzlich die Modenzahlen $l = q \frac{L}{2\pi}$ für ein System mit Länge $L = 128$ eingezeichnet.

Für die Werte aus Abb. 9.3(a) ist $q_0^s(0.05, -0.2) = 0.3$. Knapp oberhalb von q_0^s erkennt man in Abb. 9.3(a) bereits, dass die beiden reellen Eigenwerte zu einem komplex konjugierten Paar an Eigenwerten abzweigen. Der Wert für q , bei dem dieser Übergang stattfindet, ist definiert durch $q = q_t$, für den der Radikand verschwindet:

$$[2\varepsilon + (q_t)^2]^2 - 4[\theta + 2\varepsilon + (q_t)^2] = 0.$$

Auflösen nach q_t ergibt den Übergang $\text{II}_s \leftrightarrow \text{II}_o$

$$q_t = \pm \sqrt{2 \left(1 \pm \sqrt{\theta + 1} - \varepsilon \right)} .$$

Erhöht man den Wert für θ , so verschiebt sich der erste Übergang $\text{II}_s \leftrightarrow \text{II}_o$ zu kleineren Werten für q , bis er schließlich innerhalb des stabilen Bandes $0 < q < q_0$ liegt. Das kritische θ_t , ab dem der Übergang innerhalb von $0 < q < q_0^s$ liegt, liefert

$$\theta_t = 4 \left(\varepsilon^2 - \varepsilon \right) . \quad (9.14)$$

Mit $\varepsilon = 0.05$ in Abb. 9.3 erhält man den Wert $\theta_t = -0.19$. Man kann auch umgekehrt den kritischen Wert für ε_t in Abhängigkeit des Wertes θ angeben und erhält

$$\varepsilon_t = \frac{1}{2} \left(1 \pm \sqrt{\theta + 1} \right) . \quad (9.15)$$

In Abb. 9.3(b) mit $\theta = -0.17 > \theta_t$ ist der Übergang von stationären zu oszillatorischen Moden somit innerhalb des überkritischen Modenbandes. Für die Berechnung der oberen Schranke q_0^o des positiven Wellenbandes muss in Gl. (9.13a) ein negativer Radikand berücksichtigt werden. Die obere Schranke des überkritischen Bandes q_0^o im oszillatorischen Fall wird durch $\text{Re}(q_0^o) = 0$ berechnet, wobei die Wurzel als imaginär angenommen wird. Dies liefert die Bedingung

$$2 \varepsilon - (q_0^o)^2 = 0$$

und somit

$$q_0^o(\varepsilon) = \pm \sqrt{2 \varepsilon} \quad \text{bzw.} \quad l_0^o = q_0^o \frac{L}{2\pi} .$$

Durch weiteres Erhöhen des Wertes θ kann man den Bereich der stationären Moden immer weiter verkleinern. In Abb. 9.3(c) ist mit $\theta = -0.11$ nur noch ein kleiner Bereich nahe $q = 0$ stationär, während für Moden mit größerer Wellenzahl komplexe Eigenwerte vorliegen. Der Übergangswert θ_o , ab dem alle Moden komplexe Eigenwerte besitzen und die Dispersion vollständig oszillatorisch ist, kann bestimmt werden durch $R(0) = 0$. Dies ist gegeben für

$$\theta_o = \varepsilon^2 - 2 \varepsilon \quad \text{bzw.} \quad \varepsilon_o = 1 \pm \sqrt{\theta + 1} . \quad (9.16)$$

Da θ in Abb. 9.3(b) nur wenig größer als θ_t gewählt ist, sind die Eigenwerte der meisten überkritischen Moden immer noch reell. Für klassische Typ II_s Systeme ist bekannt, dass

die charakteristische Länge sich vergrößert und Phasenseparation eintritt. Deshalb wird erwartet, dass sich hier die Mode mit der kleinsten Wellenzahl als dominante Mode einstellen. Für Abb. 9.3(b) könnte man erwarten, dass die dominante Mode bei $q \rightarrow 0$, $q \neq 0$ eine stationäre Charakteristik aufweist. Erst bei Vergrößern von θ erhalten die Eigenwerte dieser Mode imaginäre Anteile und wird oszillatorisch. Aufgrund der linearen Überlegungen bzw. unter der Annahme eines Einmoden-Ansatzes würde man deshalb erwarten, dass für Abb. 9.3(b) und Abb. 9.3(c) stationäre Muster vorliegen und erst wenn die dominante Mode $l = 1$ oszillatorisch wird, dynamische Lösungen auftreten. Wie sich jedoch in der numerischen, nichtlinearen Analyse zeigt, ist dies nicht der Fall. Aufgrund der nichtlinearen Wechselwirkung und des überkritischen Modenbandes, welches typisch für II Übergänge ist, erhält man ein oszillatorisches Verhalten, obwohl die dominante Mode noch stationär ist.

9.3.2. Charakterisierung des dynamischen, nichtlinearen Verhaltens

Nach der Beschreibung des Einsatzpunktes der Phasenseparation mithilfe der linearen Stabilitätsanalyse im vorherigen Kapitel werden nun numerische Lösungen des vollen MiMo aus Gl. (9.12) untersucht. Hierbei wird zunächst für periodische Randbedingungen im symmetrischen Fall $g = 0$ der Übergang von stationären zu oszillatorischen Lösungen nahe des CTP bei $\theta \approx 0$ betrachtet. Anschließend wird durch θ -Variation untersucht, wie die oszillatorischen Anteile die Lösung sowohl im Ein- als auch im Zweidimensionalen beeinflussen. Weiterhin wird das Verhalten im nicht symmetrischen Fall ($g \neq 0$) aufgezeigt. Zudem wird die Veränderung des Lösungsverhaltens mit Neumann-Randbedingungen getestet.

Eindimensionales Verhalten im symmetrischen Fall $g = 0$

In Abb. 9.4 ist der Übergang von stationärer zu oszillatorischer Phasenseparation gezeigt. Dort sind für den eindimensionalen Fall und $g = 0$ die Profile von ρ und ψ für drei verschiedene Werte von θ zu sehen. Für den Fall $\theta = -0.2$ (schwarze Linien) erkennt man die aus den Lösungen der klassischen CH bekannte Form eines ausgecoarsten Zustandes mit zwei tanh-Flanken. Für den gekoppelten Fall des MiMo mit zwei erhaltenen Größen ergibt sich eine Überlagerung zweier solcher Lösungstypen, welche phasenversetzt auftreten, wobei die Nulldurchgänge an der selben Position zu finden sind. Dies ist ähnlich zu dem Verhalten zweier linear gekoppelter CH Gleichungen [200, 205]. In diesem Fall ist die lineare Dispersion im Bereich der überkritischen Moden vollständig reell, wie in Abb. 9.3(a) zu

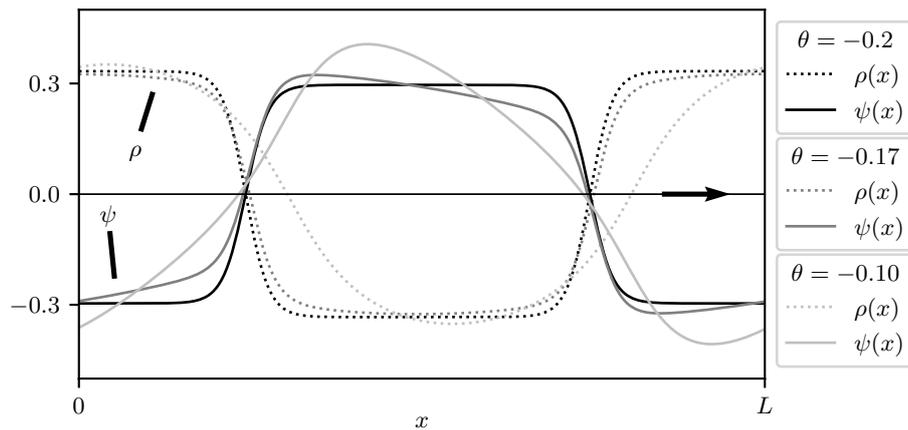


Abb. 9.4.: Schnappschüsse der numerischen Lösungen des MiMo aus Gleichungen (9.12) mit Parametern $\varepsilon = 0.05$, $g = 0$, $L = 128$. Man erkennt den Übergang des für II_s Systeme charakteristischen Plateaus mit tanh-Flanken bei $\theta = -0.2$ (schwarze Linien, nicht propagierend) zu einem verformten tanh-Profil mit höheren Werten für θ . Die Lösungen in grau propagieren mit Laufrichtung entsprechend des schwarzen Pfeils. Die zugehörigen Dispersionsrelationen sind in Abb. 9.3 gezeigt, während die Einordnung in das $\varepsilon - \theta$ Phasendiagramm in Abb. 9.6 zu finden ist.

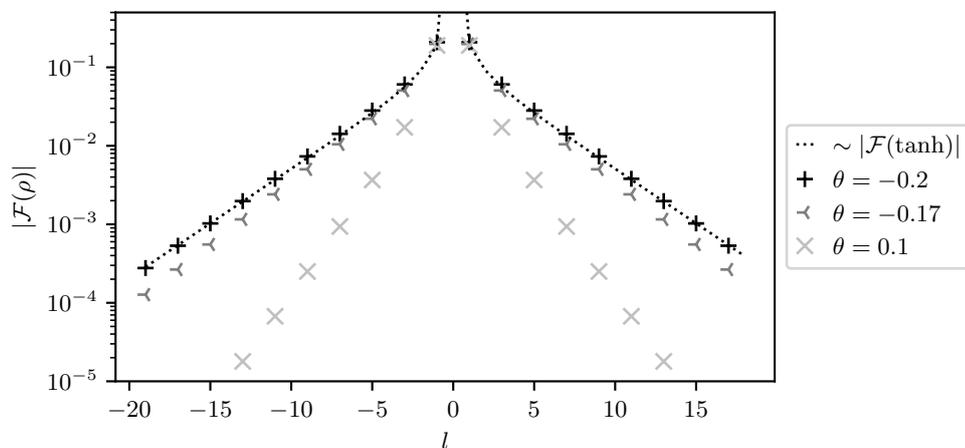


Abb. 9.5.: Abgebildet sind die Absolutbeträge der Lösungen für ρ im Fourierraum entsprechend der Schnappschüsse in Abb. 9.4 für Modenzahlen $l = \frac{qL}{2\pi}$. Man erkennt die mit zunehmender Modenzahl abfallenden Amplituden. Für den stationären Fall (schwarze-+ Symbole) ist zusätzlich ein angefitetes Fouriertransformiertes tanh-Profil gezeigt (schwarzgestrichelte Linie).

sehen. Erhöht man den Wert von θ zu $\theta = -0.17$, so ergeben sich dynamische Profile für ρ und ψ , welche sich mit einer konstanten Geschwindigkeit in eine Richtung bewegen. Im Vergleich zum vorherigen Wert $\theta = -0.2$ sieht man eine leichte Verformung der Plateaus, welche asymmetrisch zu $\pm x$ auftritt. Auch eine leichte Phasenverschiebung der beiden Profile zueinander und eine Abweichung der Nulldurchgänge ist zu beobachten. Für den Fall noch größerer Werte mit $\theta = 0.1$ wird die Laufgeschwindigkeit sowie die Asymmetrie der Profile größer.

Bei dem Übergang von stationären zu oszillatorischen Verhalten ist bemerkenswert, dass dieser bereits bei Werten $\theta \leq -0.17$ auftritt. Dieser Wert ist größer als der Schwellwert θ_t aus Gl. (9.14) für das Auftreten kurzweiliger oszillatorischer Moden, aber immer noch unterhalb der Grenze θ_o in Gl. (9.16), ab der auch langwellige Moden oszillatorisch sind. Die entsprechende Dispersion ist in Abb. 9.3(b) gezeigt. Für klassische Phasenseparationsdynamiken ist bekannt, dass die charakteristische Länge in einer Dimension logarithmisch skaliert. Dabei werden Lösungen bevorzugt, welche die Anzahl der Domänenwände reduzieren und somit im stationären Zustand langwellige Moden dominant sind. Dies ist auch für das MiMo mit $\theta = -0.2$ der Fall, was das Fourierspektrum in Abb. 9.5 (vgl. +-Symbole) bestätigt. Es zeigt ein breites Spektrum an beteiligten Moden, welches der Form der zusätzlich eingezeichneten Kurve $|\mathcal{F}(\tanh)|$ (gestrichelte Linie) entspricht, die wiederum die größten Beiträge bei $l = 1$ aufweist. Auch im Fall $\theta = -0.17$ sind die dominierenden Beiträge bei langwelligen Moden, welche jedoch eine stationäre Charakteristik aufweisen, wie im Fourierspektrum (Y-Symbole) zu sehen ist. Dies liegt an der nichtlinearen Kopplung: Die oszillatorischen, kurzweiligen Moden besitzen kleine Amplituden und haben somit zunächst einen kleinen Beitrag zur Gesamtlösung. Beginnen diese zu laufen, verschiebt sich ihre Phasenlage relativ zu den stationären, langwelligen Moden. Durch die nichtlineare Kopplung interagieren oszillatorische und stationäre Moden und die Gleichgewichtslage des gesamten Musters verschiebt sich aufgrund der neuen Phasenbeziehung. Die langwelligen, stationären Moden müssen diesen Phasenversatz ausgleichen und verschieben ebenfalls ihre Phasenlage, um eine neue Gleichgewichtslage entsprechend der verschobenen kurzweiligen Moden zu finden. Da diese sich jedoch kontinuierlich bewegen und sich somit die Phasenlage ständig ändert, müssen sich die linear stationären Moden mit kleinen Modenzahlen immer wieder neu anpassen. Daher beginnen sie den oszillierenden Moden aufgrund der nichtlinearen Wechselwirkung zu folgen. Da Moden mit verschiedenen Wellenlängen unterschiedliche Laufgeschwindigkeiten besitzen, verformt sich das tanh Profil im Ortsraum aufgrund der sich neu einstellenden Phasenlage der verschiedenen Moden Beiträge und es entsteht ein verformtes Plateau. Dies sorgt auch für eine asymmetrische Lage der Nulldurchgänge der Plateaus. Mit steigendem Wert θ wird der Imaginäranteil größer

und das Profil des propagierenden Musters immer stärker deformiert, wie in Abb. 9.4 für $\theta = 0.1$ zu sehen.

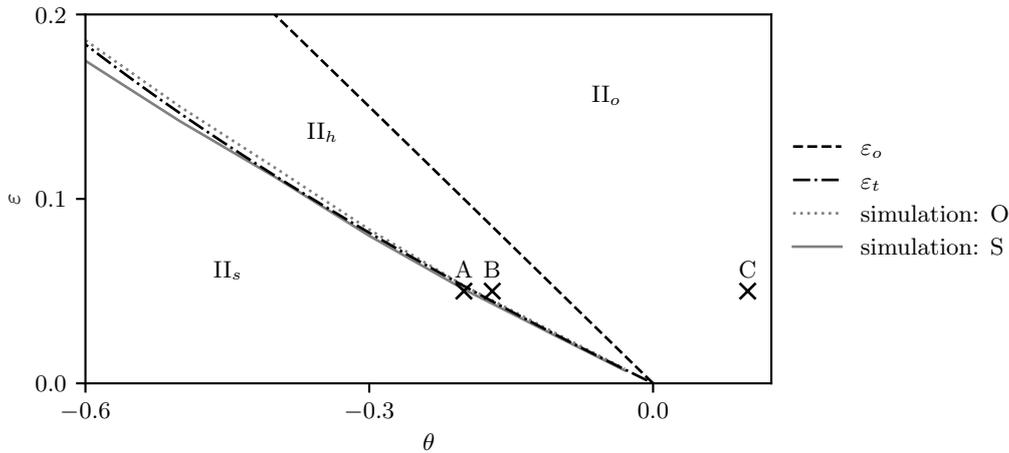


Abb. 9.6.: Phasendiagramm des MiMo nahe des Übergangs von stationärer II_s zu oszillatorischer II_o Dispersionscharakteristik. Im linken Phasengebiet II_s besitzen alle Moden innerhalb des überkritischen Bandes $0 < q < q_0$ reelle Eigenwerte. Es ist durch die Übergangslinie ε_t (schwarz strich-punktierte Linie, vgl. Gl. (9.15)) vom hybriden Regime $\text{II}_{h:s \rightarrow o}$ abgetrennt, welches einen Übergang von reellen zu komplexen Eigenwerten innerhalb des Modenbandes $0 < q < q_0$ besitzt. Für sehr große Werte von θ erreicht man schließlich rechts neben der zweiten Übergangslinie ε_t (schwarze, gestrichelte Linie, vgl. Gl. (9.16)) das II_o Gebiet. Die entlang der grauen Linien durchgeführten Simulationen weisen stationäre Charakteristik für $\varepsilon < \varepsilon_t$ (graue durchgezogene Linie) bzw. dynamische Lösungen für $\varepsilon > \varepsilon_t$ auf (graue gepunktete Linie). Die Kreuze markieren die Simulationsparameter aus Abb. 9.4 mit (A) $\theta = -0.2$, (B) $\theta = -0.17$ und (C) $\theta = 0.1$.

In Abb. 9.6 ist der von θ und ε aufgespannte Phasenraum dargestellt, an dem die bisherigen Erläuterungen noch einmal verdeutlicht werden können. Startet man bei sehr negativen Werten von θ , so befindet man sich im stationären II_s Bereich, bei dem alle überkritischen Moden innerhalb $0 < q < q_0$ reelle Eigenwerte besitzen (vgl. Abb. 9.3(a)). Bewegt man sich auf einer Horizontalen in der $\varepsilon - \theta$ Ebene bei konstantem ε und zunehmenden θ , so verschiebt sich der Übergang $\text{II}_s \rightarrow \text{II}_o$ zu kleineren Werten von q . Überschreitet man die schwarz strich-punktierte Linie $\varepsilon_o(\theta)$ nach rechts, gelangt man in das hybride Regime, in welchem ein Übergang $\text{II}_s \rightarrow \text{II}_o$ innerhalb $0 < q < q_0$ liegt (siehe auch Abb. 9.3(b) und (c)). Mit zunehmenden Werten von θ überschreitet man schließlich die schwarz gestrichelte Schwellwert-Linie $\varepsilon_o(\theta)$ und man gelangt in das oszillatorische Regime II_o . Entlang der gepunkteten, grauen Linie wurden Simulationen jeweils knapp oberhalb bzw. an der durchgezogenen, grauen Linie knapp unterhalb der Schwelle $\varepsilon_t(\theta)$ ausgewertet. Es zeigt sich, dass für alle Simulationen der grauen Linien mit $\varepsilon(\theta) > \varepsilon_t(\theta)$ dynamische Lösungen ausbilden, obwohl nur ein kleiner Teil an kurzwelligen Moden Eigenwerte mit imaginären Anteilen besitzt. Für $\varepsilon(\theta) < \varepsilon_t(\theta)$ erhält man stationäre Profile mit dem für II_s charakteristischen

tanh Profil.

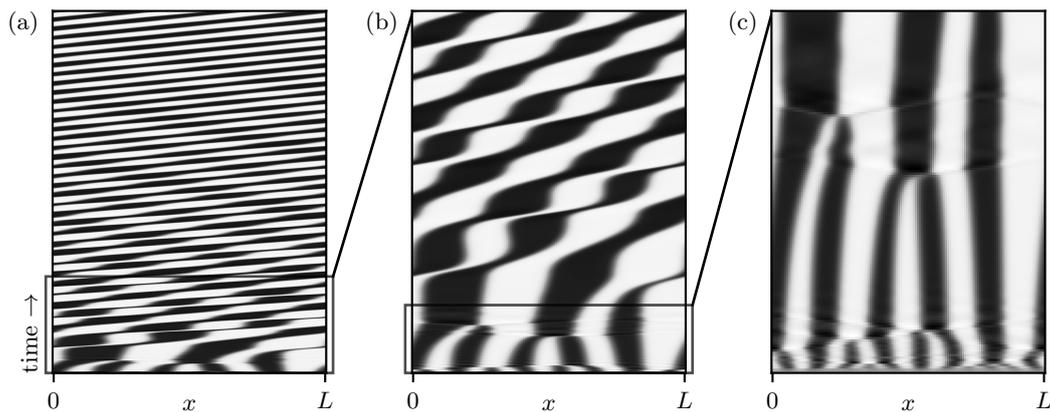


Abb. 9.7.: Dargestellt ist die zeitliche Entwicklung der Dichte $\rho(x)$, welche mit Rauschen initialisiert wurde. Die Parameter sind knapp oberhalb des oszillatorischen Einsatzpunktes mit $\varepsilon = 0.05$, $\theta = -0.18$ und einer Systemlänge von $L = 256$ gewählt. (a) Zeigt den gesamten zeitlichen Verlauf, während (b) und (c) jeweils vergrößerte Ausschnitte des jeweils vorherigen Bildes zeigen. Man erkennt, dass für kurze Zeiten das System Phasenseparation ausbildet (siehe (c)). Nach einer Übergangsphase (b) bilden sich schließlich stabile, laufende Muster aus, wie im oberen Teil von (a) zu sehen ist.

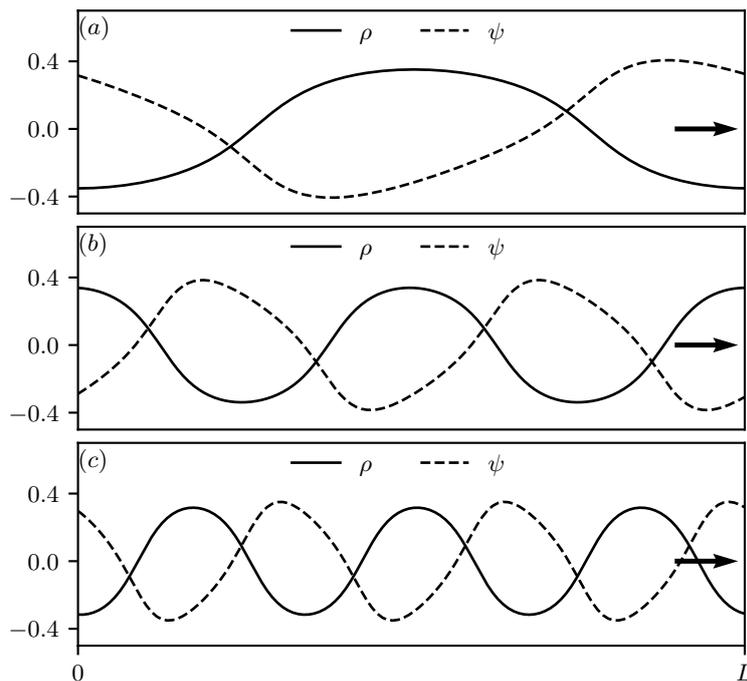


Abb. 9.8.: In (a), (b) und (c) sind laufende Wellen (LW) Lösungen des MiMo aus Gl. (9.12) mit $\varepsilon = 0.05$, $\theta = 0.1$, und $L = 128$ gezeigt. Für gleiche Parameter, aber unterschiedliche Anfangsbedingungen bilden sich Moden mit der dominierenden Wellenzahl $q = \frac{2\pi}{L}, \frac{4\pi}{L}, \frac{6\pi}{L}$ aus.

Andere Unterschiede zwischen Phasenseparation der klassischen CH Gleichung und der

Dynamik gekoppelter Transportgrößen des MiMo sind in Abb. 9.7 und Abb. 9.8 zu sehen. In Abb. 9.7 ist die zeitliche Dynamik der Dichte $\rho(x)$ gezeigt, welche mit Rauschen initialisiert wurde. Die Abbildungen (b) und (c) sind Vergrößerungen von Bereichen der jeweils vorherigen Unterabbildung. In Abb. 9.7(c) ist deutlich zu erkennen, dass für kurze Zeiten die Systemdynamik von einer schnellen Vergrößerungsdynamik geprägt ist. Für die klassische CH Gleichung vergrößert sich die charakteristische Länge bis zur Systemlänge und skaliert für eindimensionale Systeme logarithmisch [213, 253]. Wie in Abb. 9.7 zu sehen ist, bildet sich im vorliegenden oszillatorischen Fall des MiMo hingegen nach einer schnellen Phasenseparationsdynamik eine stabile dynamische Lösung, welche je nach Systemlänge bzw. Abstand zum Einsatzpunkt der homogenen Instabilität endliche Wellenlängen ausbilden kann (erkennbar im oberen Teil der Unterabbildung Abb. 9.7(a)). Die Übergangsphase ist in Abb. 9.7(b) zu erkennen.

Je nach Anfangsbedingung und Systemlänge findet man hier LW mit verschiedenen Wellenlängen als stabile Lösungen des MiMo in Gl. (9.12). In Abb. 9.8 sind Schnappschüsse der stabilen Zustände der Felder $\rho(x)$ (durchgezogene Linien) und $\psi(x)$ (gestrichelte Linien) für Simulationen mit $\varepsilon = 0.05, \theta = 0.1$ und $L = 128$ gezeigt, wobei bei den Unterabbildungen nur die Anfangsbedingungen verschieden gewählt wurde. Man erkennt, dass hier eine Multistabilität der Lösungen vorliegt. Dies ist ein wichtiges Merkmal von Systemen gekoppelter erhaltener Felder wie z.B dem MiMo und steht im Gegensatz zu der Phasentrennungsdynamik der einkomponentigen, klassischen CH-Gleichung [200, 242].

Dynamische Lösungen des symmetrischen Falls $g = 0$ in zwei Dimensionen

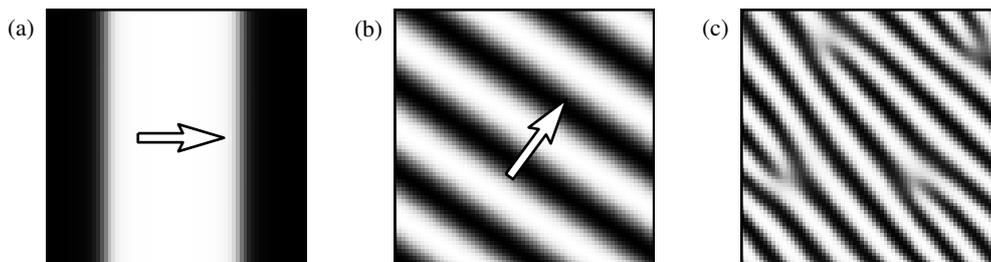


Abb. 9.9.: Schnappschüsse des Feldes $\rho(x,y)$ des MiMo mit $\varepsilon = 0.05, g = 0$ in zwei-dimensionalen Gebieten. Neben den aus eindimensionalen Systemen bekannten Lösungstypen der LW (siehe (a) mit $\theta = -0.18, L_{x,y} = 128$ und (b) mit $\theta = 0.1, L_{x,y} = 128$) sind auch Überlagerungen mehrerer LW mit einer rekombinierenden Defektdynamik für lange Zeiten stabil (siehe (c) mit $\theta = 0.1, L = 512$).

Die Untersuchung des zweidimensionalen Falls liefert in der Nähe des Übergangs von stationärer zu oszillatorischer Dynamik ähnliche Ergebnisse wie in eindimensionalen Systemen. In Abb. 9.9 sind drei Schnappschüsse der Dichte $\rho(x,y)$ mit den Parametern $\varepsilon = 0.05$ zu

sehen. In Abb. 9.9(a) ist zunächst ein System mit Länge $L_{x,y} = 128$ in beiden Raumrichtungen gezeigt, welches mit $\theta = -0.18$ in kleinem Abstand oberhalb der gestrichelten Linie des Phasendiagrammes in Abb. 9.6 lokalisiert ist. Ähnlich dem eindimensionalen System bildet sich für diese Systemlänge eine stabile Lösung mit größtmöglicher Wellenlänge als charakteristische Längenskala aus. Erhöht man den Wert von θ sind auch hier wieder Muster endlicher Wellenlänge möglich (siehe Abb. 9.9(b) für $\theta = 0.1$). Für den zweidimensionalen Fall kommen im Vergleich zu eindimensionalen Systemen weitere interessante Lösungstypen vor, welche in den nachfolgenden Bildern gezeigt sind.

In Abb. 9.9(c) ist der Schnappschuss einer Simulation mit gleichen Parametern wie in Abb. 9.9(b) gezeigt, jedoch ist die Systemgröße von $L = 128$ auf $L = 512$ erhöht worden. Mit diesen Parametern bilden sich unabhängig laufende Wellen aus, welche dynamisch rekombinierende Defekte ausbilden. Dieser Zustand ist für lange Zeiten stabil und kann eventuell nach einem langen Transienten in eine einzelne LW übergehen.

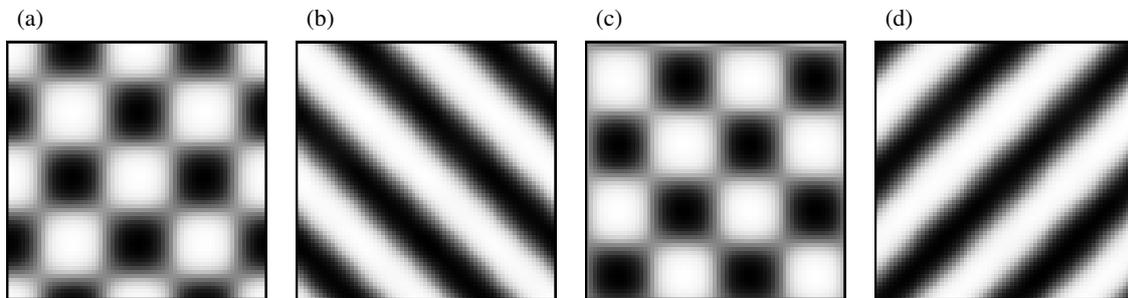


Abb. 9.10.: Gezeigt sind vier Schnappschüsse der Dichte $\rho(x,y)$ des MiMo in einem zweidimensionalen System mit $\varepsilon = 0.05$, $g = 0$, $\theta = -0.05$, $L_{x,y} = 128$ zu verschiedenen Zeiten. Es bildet sich im Vergleich zum eindimensionalen Fall ein neuer Lösungstyp der oszillierenden, stehenden Quadrate OSQ aus, welcher aus zwei orthogonalen stehenden Wellen SW besteht (siehe (b) und (d)), die zeitlich versetzt oszillieren. Die Überlagerung ergibt Zwischenlösungen, die einem Schachbrett-Muster ähneln (siehe (a) und (c)).

Auch ein völlig neuer Lösungstyp ist im zweidimensionalen Fall zu beobachten. Es ist möglich, dass stehende Welle (SW) mit verschiedenen Richtungen stabile Lösungen bilden. In Abb. 9.10 sind vier Schnappschüsse der Dichte $\rho(x,y)$ für $\theta = -0.05$ und sonst identischen Parametern zu Abb. 9.9(a) und (b) gezeigt. Man sieht, dass sich zwei SW, die senkrecht zueinander ausgerichtet sind, ausbilden (Abb. 9.10(b) und (d)). Diese oszillieren mit einem zeitlichen Phasenversatz, was in der Überlagerung zu schachbrettartigen Mustern führt (Abb. 9.10(a) und (c)). Dieser Lösungstyp, der hier als OSQ bezeichnet wird, kommt auch als Lösungstyp der Ordnungsparametergleichungen für gekoppelte, erhaltene Systeme vor und wird in Abschnitt 10 näher diskutiert.

Der zusätzliche Freiheitsgrad im zweidimensionalen System birgt auch überraschende Mus-

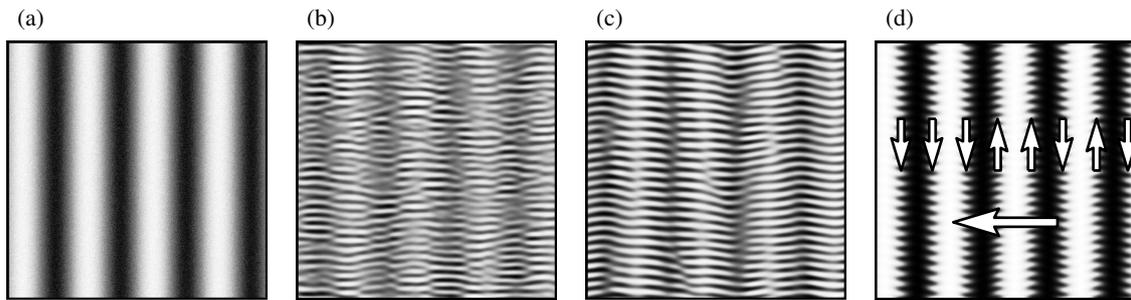


Abb. 9.11.: Schnappschüsse der Dichte $\rho(x,y)$ des MiMo mit Parametern identisch zu Abb. 9.9(b) und (c), aber vergrößerter Systemlänge $L_{x,y} = 1024$ zu verschiedenen Zeiten. Die anfängliche LW Lösung entlang der x -Richtung in (a) geht nach einer Übergangsphase in (b) und (c) in eine LW in x -Richtung über, welche an den Flanken orthogonal laufende LW kürzerer Wellenlänge aufzeigt. Für die Laufrichtungen der LW in y Richtung zeigt sich, dass diese unabhängig voneinander sind.

ter wie die in Abb. 9.11 dargestellten Lösungen. Dort sind vier Schnappschüsse der Dichte $\rho(x,y)$ einer Simulation mit Parametern identisch zu Abb. 9.9(b) und (c) gezeigt, bei der die Länge auf $L_{x,y} = 1024$ erhöht wurde. Aus der initialisierten LW mit Laufrichtung entlang der x -Achse, wie in Abb. 9.11 (a) zu sehen, bildet sich zunächst ein Übergangsmuster aus, welches in Abb. 9.11(b) und (c) gezeigt ist. Aus diesem geht schließlich ein stabiles Muster hervor, welches aus der ursprünglichen LW entlang der x -Richtung besteht, auf dem entlang der Flanken der Wellenberge senkrecht in y -Richtung laufende Wellen mit kurzer Wellenlänge ausgebildet sind. Diese kurzwelligen LW der verschiedenen Flanken haben unterschiedliche Laufrichtungs-Vorzeichen, wie in Abb. 9.11(d) durch die Pfeile angedeutet. Diese Instabilität ähnelt der bekannten Zigzag-Instabilität [65, 209, 254, 255], bei der eine Welle instabil gegenüber einer Störung in einer überlagerten Richtung zur Ausgangswelle wird. Typischerweise ist die Wellenlänge der stabilen Lösung nach dem Übergang der Zigzag-Instabilität nicht mehr identisch mit der des Ausgangssystems. Im Fall des MiMo bildet sich allerdings nach den Übergangsmustern (siehe Abb. 9.11(c)) eine Welle in x -Richtung mit unveränderter Wellenlänge aus, die durch senkrechte Wellen überlagert wird (siehe Abb. 9.11(d) im Vergleich zu Abb. 9.11(a)).

Auch das Skalierungsverhalten des MiMo enthält interessante Effekte. In Abb. 9.12 ist der zeitliche Verlauf der charakteristischen Länge \mathcal{L} für ein System mit $\varepsilon = 0.05$ und $\theta = -0.18$ knapp oberhalb der Linie ε_t (äquivalent zu den Parametern der Schnappschüsse in Abb. 9.9(a)) zu sehen. Man erkennt, dass sich die charakteristische Länge der Struktur jeweils bis zur maximalen Systemlänge vergrößert und mit einem Potenzgesetz skaliert. Der Exponent der Skalierung wurde für Abb. 9.12(a) und Abb. 9.12(b) an die Mittelung von sechs individuellen Simulationsläufen gefittet. Es zeigt sich, dass der Exponent für

$\theta = -0.18$, also nahe am Übergang zu stationärer Charakteristik, einen Wert von $\approx \frac{1}{3}$ einnimmt. Diesen Skalierungsexponenten findet man auch bei stationärer Entmischungsdynamik der klassischen CH-Gleichung wieder [213, 253]. Für das MiMo ist der Exponent für verschiedene Werte der Systemlänge konstant, hier bspw. Abb. 9.12(a) $L_{x,y} = 128$ und (b) $L_{x,y} = 256$.

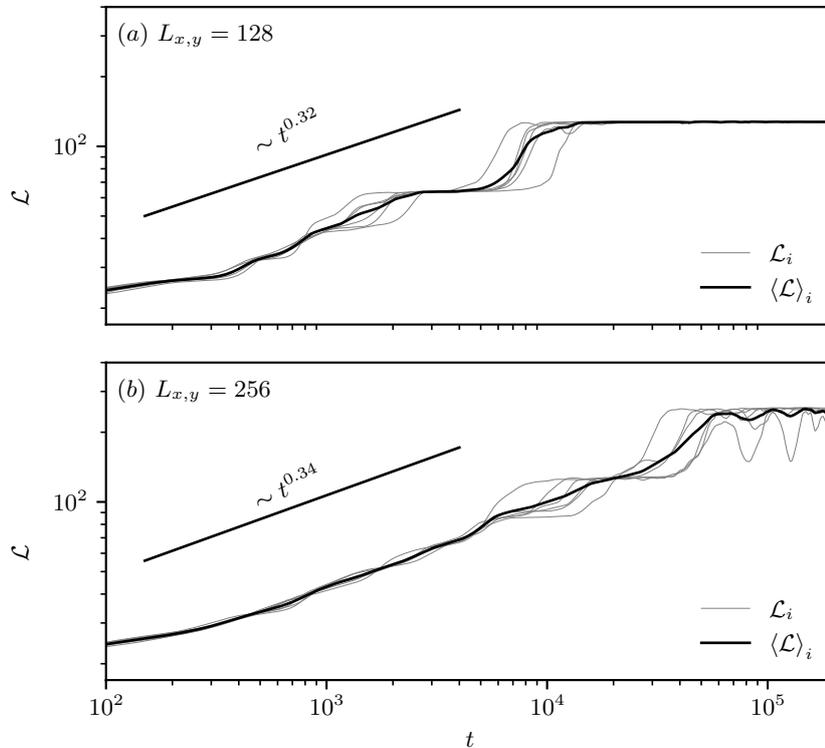


Abb. 9.12.: Zeitliches Skalierungsverhalten der charakteristischen Länge \mathcal{L} der MiMo Lösungen in zweidimensionalen Systemen mit $g = 0$, $\varepsilon = 0.05$, $\theta = -0.18$ und (a) $L = 128$ und (b) $L = 256$. Die schwarzen Linien sind die gemittelten Verläufe über $i = 1, \dots, 6$ Simulationen (graue Linien). Die zeitlichen Verläufe für diese Parameter haben eine Skalierung von $\mathcal{L}(t) \sim t^{1/3}$, wie es auch bei der klassischen CH in zwei Dimensionen zu finden ist.

Wählt man θ größer und entfernt sich somit von der Linie ε_t , was bedeutet, dass mehr Moden einen komplexen Eigenwert aufweisen, ergibt sich ein neues Skalierungsverhalten. In Abb. 9.13 ist der zeitliche Verlauf der charakteristischen Länge für $\varepsilon = 0.05$ und $\theta = 0.1$ für verschiedene Längen ($L_{x,y} = \{256, 512, 1024\}$) gezeigt. Die dazugehörigen Schnappschüsse sowohl im Orts- als auch Fourierraum sind in Abb. 9.14 für vier verschiedene Zeiten zu sehen. Das System wird mit Rauschen initialisiert (siehe Abb. 9.14(a)). Für kurze Zeiten $t \lesssim t_1$ wächst die Strukturlänge zunächst mit einem Exponenten $\mathcal{L}(t) \sim t^{\frac{1}{3}}$, ähnlich zu der Phasenseparations-Skalierung. Im Fourierraum besteht noch ein breites Spektrum, was im Schnappschuss Abb. 9.14(b) zu sehen ist. Auf diese Vergrößerungsdynamik folgt ein

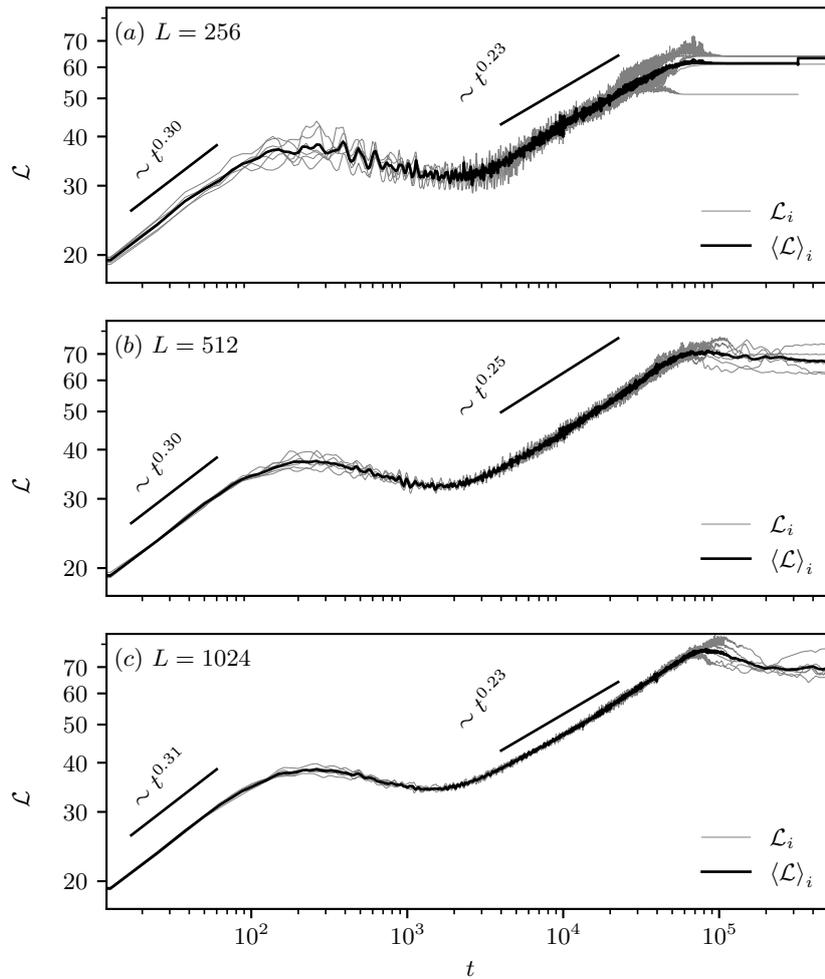


Abb. 9.13.: Zeitliches Skalierungsverhalten der charakteristischen Länge \mathcal{L} des MiMo in zweidimensionalen Systemen mit $g = 0$, $\varepsilon = 0.05$, $\theta = 0.1$ und (a) $L = 256$, (b) $L = 512$ und (c) $L = 1024$. Die schwarzen Linien sind die gemittelten Verläufe über $i = 1, \dots, 6$ Simulationen (graue Linien). Die zeitlichen Verläufe für diese Parameter haben für kurze Zeiten einen für Phasenseparation typischen Skalierungs-Exponenten $\mathcal{L}(t) \sim t^{1/3}$, welcher nach einem Übergangsbereich in eine Skalierung $\mathcal{L}(t) \sim t^{1/4}$ übergeht, wie es auch bei strukturbildenden Systemen zu finden ist.

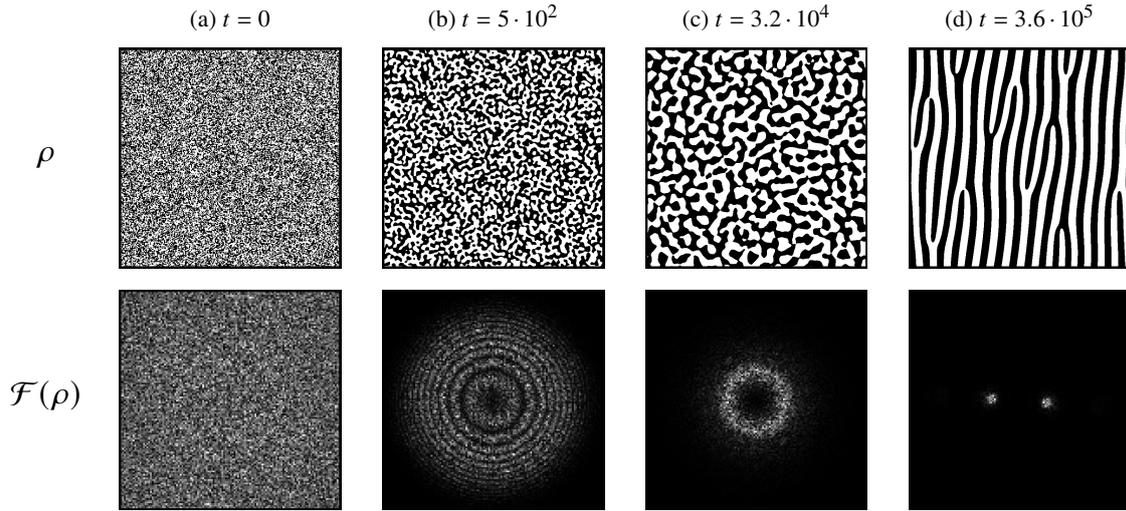


Abb. 9.14.: Schnappschüsse des Feldes $\rho(x,y)$ im Ortsraum (obere Reihe in Binärdarstellung, $x,y \in [0, 1024]$) und der Absolutbeträge im Fourierraum (untere Reihe, $q_x, q_y \in [-0.4, 0.4]$) simuliert mit dem MiMo mit Parametern aus Abb. 9.13(c). Die Unterabbildungen (a)-(d) sind zu Zeiten $t = 0, 500, 32 \cdot 10^3, 36 \cdot 10^4$ aufgenommen. Das initialisierte Rauschen aus (a) vergrößert sich und die charakteristische Länge wächst gemäß $\mathcal{L}(t) \sim t^{\frac{1}{3}}$ zu einer Struktur in (b) bei $t = 500$. Anschließend durchläuft es eine Übergangsphase, in der sich eine bevorzugte, ungerichtete Wellenlänge (c) ausbildet. Nach dieser kommt es zu einer Richtungsphase $\mathcal{L}(t) \sim t^{\frac{1}{4}}$, welche zu Strukturen (d) führt.

Übergangsbereich bei $t_1 \lesssim t \lesssim t_2$ in dem sich das breite Spektrum verschmälert und sich ein Ring im Fourierraum ausbildet (siehe Abb. 9.14(c)). Dies ähnelt der Phasenseparationsdynamik in der klassischen CH-Gleichung. Nach diesem Übergangsbereich entsteht anschließend für $t_2 \lesssim t \lesssim t_3$ eine neue Dynamik. In dieser Phase ändert die Struktur es bildenden sich Bereiche mit Streifen, welche in begrenzten Bereichen parallel verlaufen (Abb. 9.14(d) deutlich wird). Das Wachstum dieser Struktur erfolgt mit einer Skalierung von $\mathcal{L} \sim t^{\frac{1}{4}}$. Dieser Exponent in der Skalierung ist von strukturbildenden Systemen mit Lösungen endlicher Wellenlänge wie z. B. verschiedene Varianten des Swift-Hohenberg Modells bekannt [256, 257] Im Vergleich zu Abb. 9.14(c) fällt auf, dass im Fourierraum nicht mehr eine Schale an Moden beteiligt ist, sondern die Moden eine bevorzugte Richtung ausbilden. Für große Zeiten $t \gtrsim t_3$ bildet sich schließlich eine stabile Wellenlänge aus.

Verhalten des MiMo im nicht-symmetrischen Fall $g \neq 0$

Erlaubt man quadratische Beiträge in Gl. (9.12), indem man $g \neq 0$ wählt, so kann es aufgrund der gebrochenen \pm -Symmetrie der Felder ρ zu neuen Mustern kommen [253, 258]. Zunächst wird das Verhalten knapp oberhalb der Linie $\varepsilon_t(q_0^o, \theta)$ in Abb. 9.6 untersucht, wie

es auch schon zuvor im symmetrischen Fall betrachtet wurde. Für $g = 0.5$, $\varepsilon = 0.1$ und $\theta = -0.33$ zeigt sich, dass eine Phasenseparation der Felder ρ und ψ auftritt und sie sich jeweils in einem zusammenhängenden, ellipsoidalen Gebiet mit hoher Dichte zusammenfinden. Dieser Effekt ist in Abb. 9.15(a) und (b) dargestellt. Legt man die Konturen der Nulldurchgänge beider Dichten übereinander, erkennt man einen leichten Phasenversatz in Abb. 9.15(c). Aufgrund der entgegengesetzten Kopplung der beiden Felder sorgt dieser Phasenversatz, wie schon im symmetrischen Fall zuvor, zu einer langsamen Dynamik des Gesamtmusters, welche durch die Pfeile in Abb. 9.15 gekennzeichnet ist. Das Fourierbild von ρ und ψ in Abb. 9.15(d) und (e) ähnelt dem eines hexagonalen Gitters, das sich um die kleinst mögliche Wellenzahl zentriert hat.

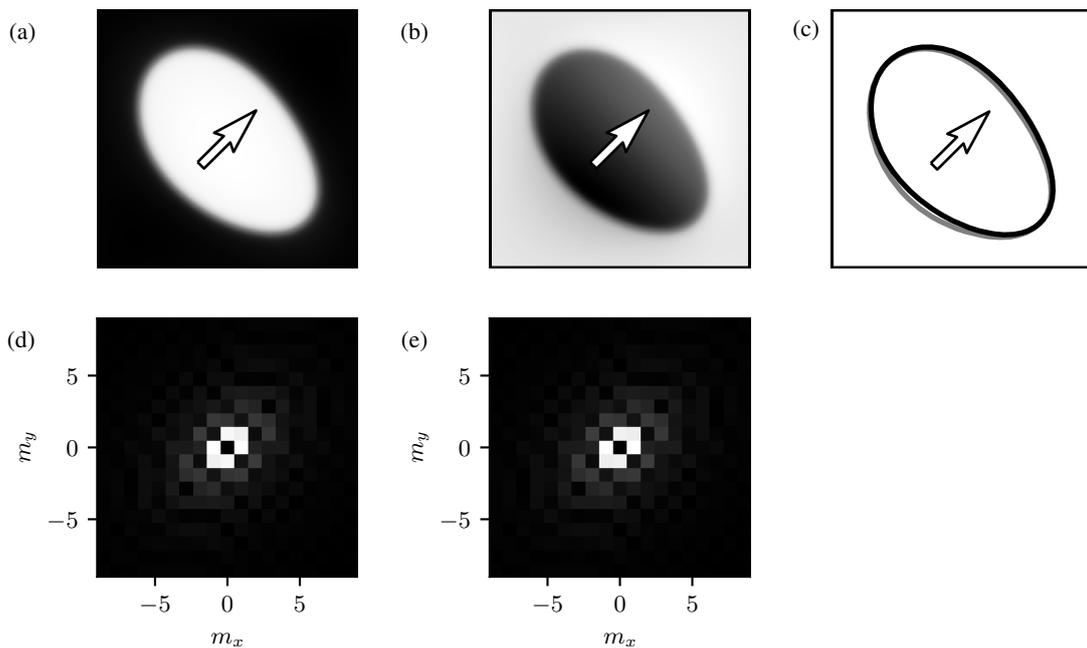


Abb. 9.15.: Schnappschüsse einer Simulation des MiMo mit $\varepsilon = 0.1$, $\theta = -0.33$, $L_{x,y} = 128$ und gebrochener \pm -Symmetrie ($g = 0.5$). Dargestellt sind die Dichten ρ und ψ jeweils im Ortsraum ((a)+(b)) sowie die Absolutbeträge im Fourierraum ((d)+(e)). (c) zeigt die Kontur des Nulldurchgangs für ρ (schwarz) und ψ (grau).

Erhöht man den Abstand zum Einsatzpunkt der oszillatorischen, linearen Dispersionslinie ε_l , so hatte der symmetrische Fall gezeigt, dass sich Strukturen mit endlicher Wellenzahl ausbilden. Auch im nicht symmetrischen Fall für $g \neq 0$ kann man dieses Verhalten beobachten. Erhöht man im Vergleich zu Abb. 9.15 den Wert θ auf 0.1, so erhält man ein bewegtes Gittermuster wie in Abb. 9.16 gezeigt, bei dem die einzelnen Zellen der Form des vorherigen Falls entsprechen. Auch der Absolutbetrag der Felder ρ und ψ im Fourierraum in Abb. 9.16(d) und (e) ist ähnlich zu dem vorherigen Szenario, jedoch ist der Abstand der angeregten Moden zum Ursprung vergrößert und es entsteht ein Gitter mit unterliegender

Substruktur.

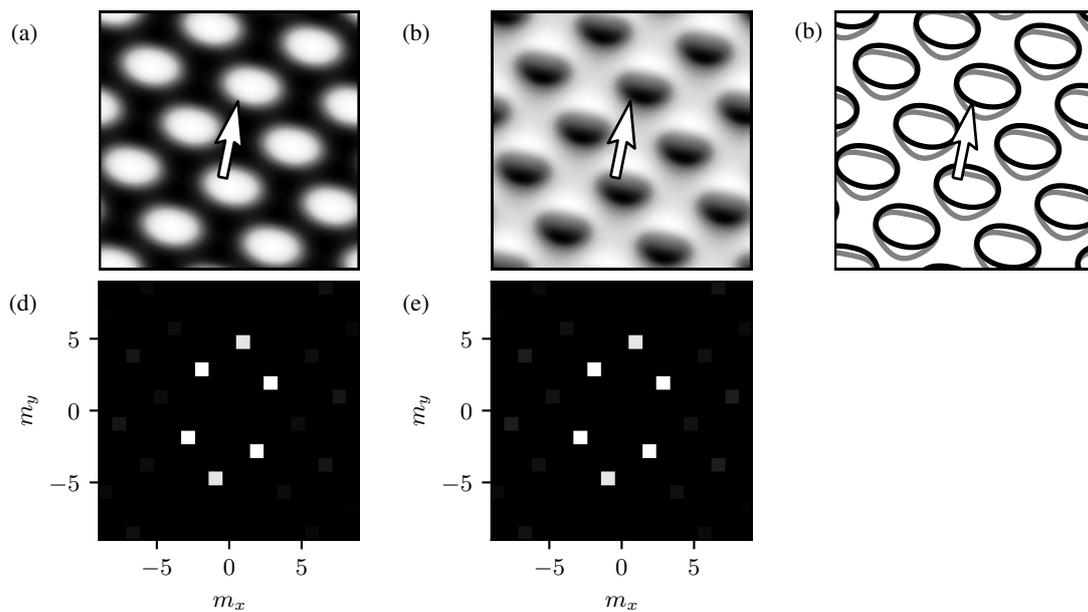


Abb. 9.16.: Schnappschüsse der Simulationen des MiMo mit $\varepsilon = 0.1$, $\theta = 0.1$, $L_{x,y} = 128$ und gebrochener \pm -Symmetrie ($g = 0.5$). Dargestellt sind die Dichten ρ und ψ jeweils im Ortsraum ((a)+(b)) sowie im Fourierraum ((d)+(e)). (c) Zeigt die Kontur des Nulldurchgangs für ρ (schwarz) und ψ (grau).

Erhöht man den Wert des Parameters θ weiter, ergeben sich neue, komplexe Dynamiken. Für $\theta = 10$ findet man bspw. ein laufendes Gittermuster, welches allerdings durch eine orthogonale Oszillation überlagert wird. Vier Schnappschüsse dieses dynamischen Musters sind in Abb. 9.17 gezeigt. Man erkennt, dass das System neben der globalen Laufrichtung entlang der negativen y -Achse (siehe eingezeichnete Pfeile) eine schwankende Bewegung zwischen den beiden Zuständen Abb. 9.17(a) und (c) vollzieht.

Verhalten mit Neumann-Randbedingungen

Bisher wurden Systeme mit periodischen Randbedingungen diskutiert. Wie sich in den vorherigen Kapiteln zeigt, findet im MiMo für kleine Abstände zur Linie ε_l im schwach oszillatorischen Bereich eine Vergrößerung der Strukturen bis hin zur längsten möglichen Längenskala statt. Dieses Verhalten ist auch für die klassische CH bekannt. Für Neumann-Randbedingungen (oder engl. auch *no-flux* Randbedingungen) wird in der CH-Gleichung durch die Systemlänge das dynamische Verhalten kaum geändert, lediglich die maximale Länge wird begrenzt. Im Fall oszillatorischer Lösungen ist jedoch zu beobachten, dass durch die Begrenzung der Systemlänge die bewegten Muster auf die *no-flux* Ränder treffen

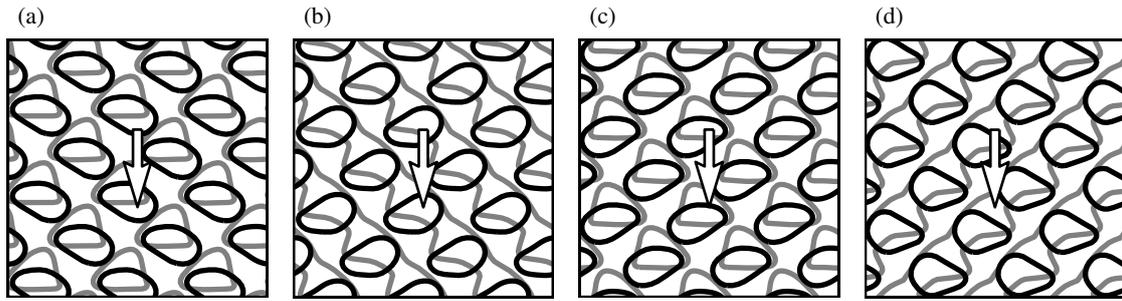


Abb. 9.17.: Schnappschüsse des MiMo mit $\varepsilon = 0.1$, $\theta = 10$, $L_{x,y} = 256$ und gebrochener \pm -Symmetrie ($g = 0.5$). Gezeigt sind die Konturlinien der Nulldurchgänge für ρ (schwarz) und ψ (grau). Es bildet sich ein laufendes hexagonales Muster aus, welches zwischen den Konfigurationen (a) und (c) schwankt. Die Bilder (b) und (d) stellen die Zwischenkonfigurationen dar.

und somit die Dynamik des Systems beeinflusst wird. Aus anderen Teilgebieten der Strukturbildung weiß man, dass diese Art der Randbedingungen bspw. die laufenden Muster reflektieren können [259–264].

In diesem Kapitel wird das MiMo im symmetrischen Fall ($g = 0$) mit no-flux Rändern (Neumann-Randbedingungen) untersucht.

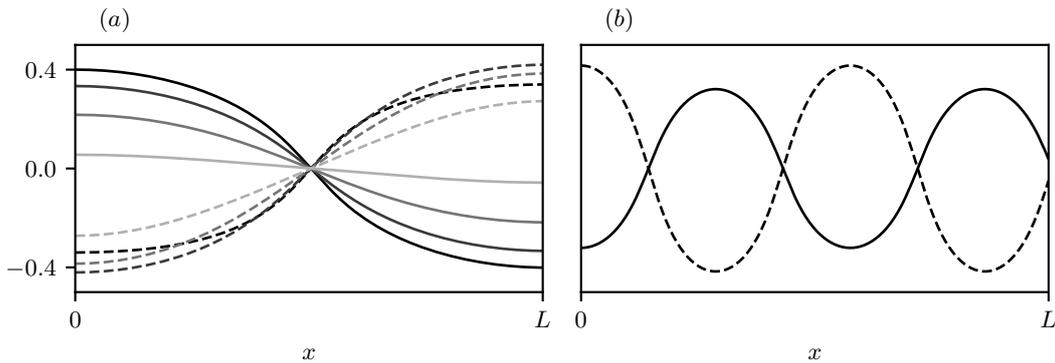


Abb. 9.18.: Schnappschüsse der Felder ρ (durchgezogene Linie) und ψ (gestrichelte Linie) des MiMo in einem System mit no-flux Rändern bei $x = 0,512$ mit Parametern $\varepsilon = 0.05$, $\theta = 0.1$. (a) Initialisiert man die Felder mit einer periodischen Lösung der Wellenzahl $l = \frac{1}{2}$, so bildet sich eine stehende Welle mit dieser Periodizität aus. Der Verlauf der Graustufen zeigt die Lösung zu verschiedenen Zeiten. (b) Wählt man eine periodische Lösung mit $l = 14$, so ergibt sich eine stabile SW Lösung mit $l_f = 2$ Moden.

In Abb. 9.18(a) ist das zeitliche Verhalten des eindimensionalen MiMo für $\varepsilon = 0.05$ und $\theta = 0.1$ in einem System mit no-flux Rändern bei $L = 0,512$ gezeigt. Die beiden Felder ρ (durchgezogen) und ψ (gestrichelt) sind mit einer Wellenlänge von $l = \frac{1}{2}$ mit zusätzlichem überlagertem Rauschen kleiner Amplitude initialisiert. Es bildet sich eine stehende Welle (SW) aus, deren zeitlicher Verlauf in Graustufen dargestellt sind. Mit periodischen Rand-

bedingungen findet man für dieses System LW vor. Die no-flux Randbedingungen sorgen folglich für eine Änderung des dynamischen Typs.

Auch für die no-flux Ränder findet man, wie im periodischen Fall, multistabile Lösungen. In Abb. 9.18(b) ist das finale Muster für eine Initialisierung mit $l = 14$ Moden gezeigt. Nach einer Transienten bildet sich eine SW mit $l_f = 2$ Moden aus.

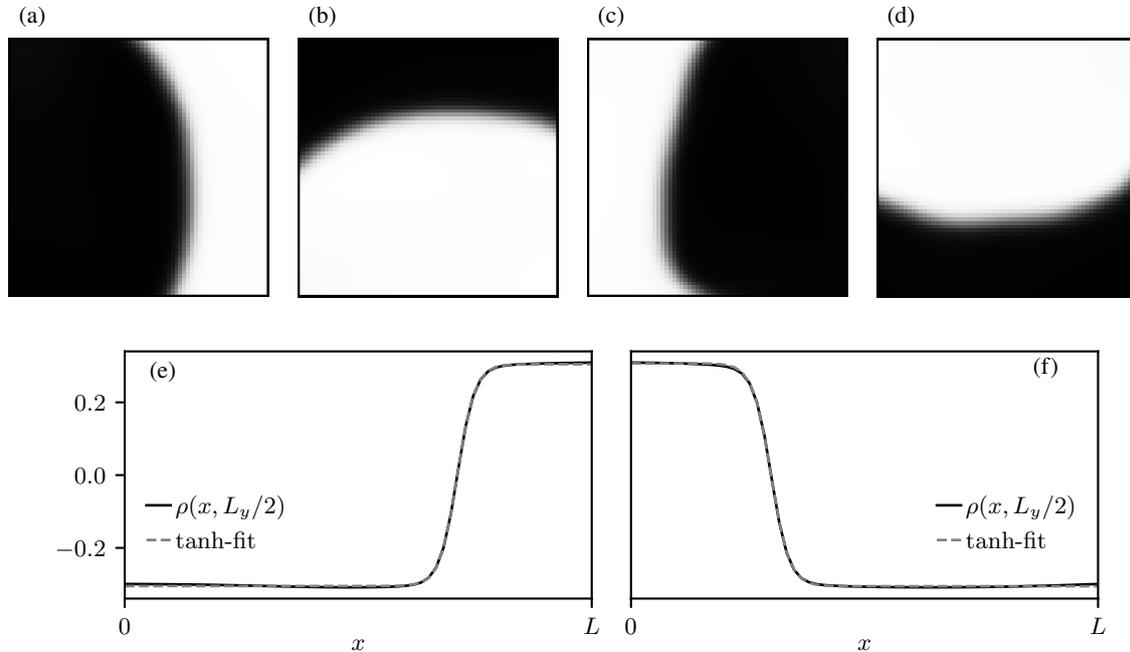


Abb. 9.19.: Schnappschüsse des Feldes ρ (MiMo) in einem System mit no-flux Rändern bei $x, y = 0, 128$ mit Parametern $\varepsilon = 0.05$, $\theta = -0.18$. Die Bilder (a)-(d) zeigen das zweidimensionale Profil des Feldes, welches einer Phasenfront entspricht, die im Uhrzeigersinn rotiert. Die Bilder (e) und (f) zeigen den Querschnitt der Zeitpunkte (a) und (c) bei $y = 64$. Man erkennt ein tanh-Profil, welches aus den Lösungen der klassischen CH Gleichung bekannt ist.

Für den zweidimensionalen Fall ändert sich ebenfalls das Lösungsverhalten. Im vorherigen Kapitel wurde gezeigt, dass nahe an der Linie ε_t vornehmlich LW oder auch oszillierende stehende Quadrate (OSQ) auftreten. Für no-flux Randbedingungen sind in Abb. 9.19 Schnappschüsse der dynamischen Lösung von $\rho(x, y)$ für Parameter identisch mit denen aus Abb. 9.9(a) dargestellt ($\varepsilon = 0.05$, $\theta = -0.18$ und $L_{x,y} = 128$). Die Bilder Abb. 9.19(a)-(d) stellen dabei das weidimensionale Profil von ρ für verschiedene Zeitpunkte der Simulation dar. Man erkennt, dass sich für no-flux Ränder eine Phasenfront ausbildet, welche im Uhrzeigersinn rotiert. Diese Änderung des Verhaltens der LW, welche durch Reflexion an den Rändern induziert wird, steht im Einklang mit den Ergebnissen aus [264]. In (e) und (f) sind die Querschnitte bei $y = 64$ für die beiden Zeitpunkte entsprechend Abb. 9.19(a) und (c) gezeigt. Man erkennt das für Phasenseparation typische tanh-Profil.

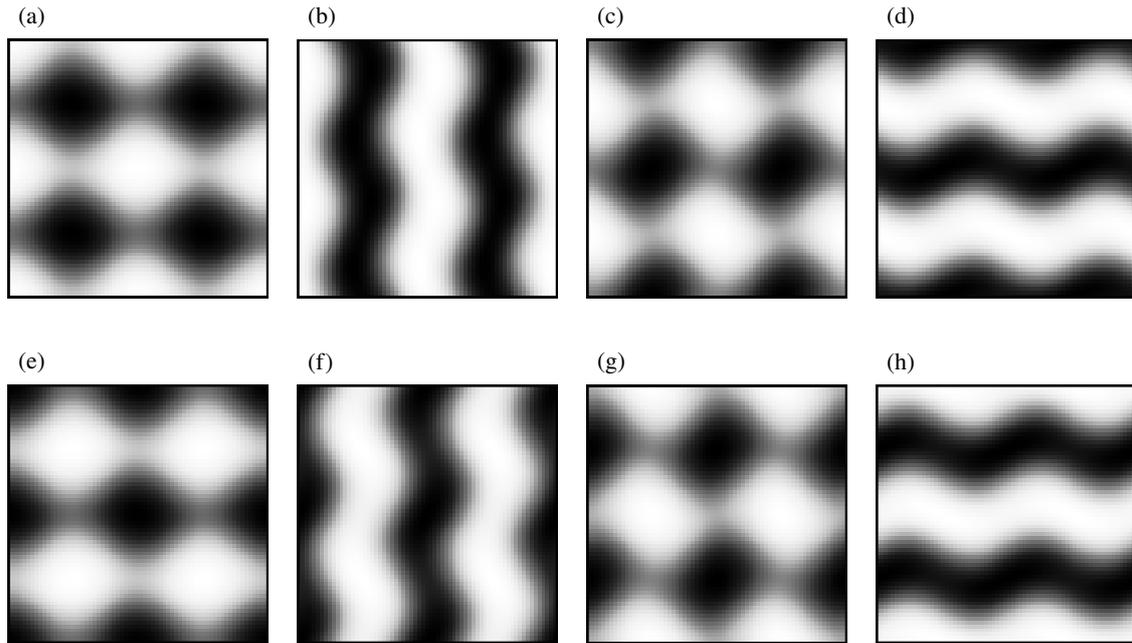


Abb. 9.20.: Schnappschüsse des Feldes $\rho(x,y)$ mit no-flux Randbedingungen bei $x,y = 0,128$ und sonst identischen Parametern wie Abb. 9.9(b). Die für periodische Ränder beobachteten LW-Lösungen werden durch die Wechselwirkung mit den Rändern zu einer Überlagerung zwischen SW und OSQ verändert.

Entfernt man sich etwas weiter von der ε_I -Linie, hatte sich für periodische Ränder in Abb. 9.9(b) eine LW mit endlicher Wellenlänge eingestellt. In Abb. 9.20 sind Schnappschüsse von $\rho(x,y)$ mit identischen Parametern, jedoch no-flux Rändern gezeigt. Dort bildet sich ein stabiles, dynamisches Muster, welches einer gewellten SW-Front ähnelt. Dieses wechselt sich mit einem Muster, welches durch OSQ beschrieben wird, ab. Auch hier verursacht die Wechselwirkung der Wellen mit den Rändern eine Änderung des dynamischen Typs.

9.4. Diskussion und Fazit

In diesem Abschnitt wurden gekoppelte Transportgleichungen untersucht. Zunächst wurden Überlegungen getroffen, welche generelle Form ein System gekoppelter Transportgleichungen besitzen muss, um oszillatorischer Phasenübergänge des Typs II_0^c aufzuweisen. In Analogie zur klassischen CH Gleichung, welche stationäre Phasenübergänge mit nichtlinearen Stromtermen fern des thermodynamischen Gleichgewichts beschreibt, muss

auch der oszillatorische Fall die nichtlineare Charakteristik enthalten. In diesem Zusammenhang wird die GTOPS eingeführt, welches nichtlineare Kopplungen der erhaltenen Größen berücksichtigt. Diese Eigenschaft ist essentiell, um die adiabatisch reduzierten Fälle des chemotaktischen Modells aus Abschnitt 12 oder auch der gekoppelten Ionenkanäle [197] beschreiben zu können. Anhand einer linearen Stabilitätsanalyse wurden anschließend mögliche Übergangsszenarien der GTOPS charakterisiert, welche viele aus der Literatur bekannte Fälle der Dispersionsverläufe enthält [200, 242]. Dieses beinhaltet zum einen Phasenübergänge mit vollkommen stationärer Charakteristik, weist jedoch auch die Möglichkeit von oszillatorischen und gemischten Dispersionen auf.

Anschließend wird das reduzierte MiMo eingeführt. Die Form des MiMo entspricht einer klassischen CH Gleichung, welche an ein lineares Feld gekoppelt ist und nur drei freie Parameter enthält. Wie sich zeigt ist dieses Modell bereits ausreichend, um oszillatorische Typ II^c Phänomene zu zeigen. Trotz der stark reduzierten Form deckt es das Regime nahe des CTP ab und erlaubt somit eine prototypische Untersuchung des Verhaltens während des Übergangs von stationärer zu oszillatorischer Charakteristik, was komplementär zum stark oszillatorischen Bereich ist, das in Abschnitt 10.6 diskutiert wird.

Für das MiMo wurde gezeigt, dass die beiden Komponenten jeweils eine Plateau mit zwei hyperbolischen Flanken annehmen können. Dies ist ähnlich zu den Ergebnissen zweier linear gekoppelter CH Gleichungen oder Brownscher Teilchen [200, 205, 242]. Die Plateaus stellen phasenversetzt zueinander ein, wobei die Nulldurchgänge am selben Ort liegen. Für den $II_s \leftrightarrow II_o$ Übergang zeigt sich, dass die spezielle Charakteristik der Typ II Systeme mit einem überkritischen Modenband zum Tragen kommt. Sobald eine Mode komplexe Eigenwerte enthält, beginnt das gesamte Muster, einschließlich der stationären Moden, zu oszillieren. Dies geschieht, auch wenn diese oszillatorischen Moden nur einen kleinen Beitrag im Vergleich zu den dominanten, langwelligen Moden liefern. Verantwortlich hierfür ist die nichtlineare Kopplung der Moden untereinander, welche bei der Verschiebung von einzelnen Moden eine Anpassung des gesamten Profils bedingt und somit mit einer kontinuierlichen Anpassung zu einer dynamischen Gesamtstruktur führt. Um diese Dynamik abbilden zu können, ist eine Einmoden-Approximation wie in [202] eine zu große Einschränkung und zur Beschreibung nicht mehr ausreichend.

Weiterhin werden die charakteristischen Merkmale der oszillatorischen Phasenseparation im Vergleich zum stationären Pendant sichtbar. Zum einen erhält man eine asymmetrische Verformung im Vergleich zu den stationären Plateaus. Diese ist bedingt durch die nicht reziproke Wechselwirkung. Zudem können auch Muster endlicher Wellenlänge auftreten, die Multistabilität aufweisen und ein generisches Merkmal gekoppelter Transportgleichungen

sind, welches auch im stationären Fall für lineare gekoppelte CH zu finden ist [200].

Auch im zweidimensionalen Fall zeigt das MiMo interessante Effekte, wobei auch neue Dynamiken aufgrund der veränderten Dimension hinzukommen. Neben laufenden Wellen sind ebenso OSQ Muster (ähnlich zu [202]), rekombinierende Defektmuster oder auch LW Muster mit überlagerter Instabilität kurzwelliger LW in senkrechter Laufrichtung möglich. Oberhalb der Linie θ_t bzw ε_t , ab der das hybride Regime $\Pi_{h:so}$ beginnt, skaliert die charakteristische Länge gemäß $\propto t^n$ mit $n \approx 1/3$. Auch die klassische CH Gleichung in zwei Dimensionen zeigt ein Skalierungsverhalten mit diesem Exponenten [213, 253]. Erhöht man den oszillatorischen Parametereinfluss durch Vergrößerung von θ , kann sich das Skalierungsverhalten ändern. In diesem Fall wird die für Phasenseparation charakteristische Skalierung überraschenderweise nach einem Übergangsregime abgelöst durch eine Dynamik mit $n \approx 1/4$. Ein solches Verhalten ist von stationären strukturbildenden Systemen mit endlicher Wellenlänge, wie dem Swift-Hohenberg Modell bekannt [256, 257] und wurde für zwei linear gekoppelte CH Gleichungen in [201] beschrieben, was andeutet, dass sich Typ II Systeme mit erhaltenen Komponenten wie strukturbildende Systeme verhalten können. Für das MiMo wurde hier ein gemischtes Skalierungsverhalten mit $n \approx 1/3$ und anschließendem Übergang zu $n \approx 1/4$ gefunden. Dies könnte durch die gemischte Dispersion des hybriden Zustanden bedingt sein.

Unter Berücksichtigung des Terms $g \neq 0$, der die $\pm\rho$ -Symmetrie bricht, können zudem weitere interessante Muster für das MiMo auftreten. Hierbei wurden sowohl laufende *Cluster* nahe des $\varepsilon_t(\theta)$ -Übergangs, als auch hexagonale Strukturen beobachtet, welche bereits aus anderen strukturbildenden Systemen unter dem Einfluss gebrochener \pm -Symmetrie der Dichtefelder bekannt sind [253, 265].

Für oszillatorische Phasenseparation sind die Randbedingungen von besonderem Interesse. Da sich die charakteristische Länge bei Phasenseparation kontinuierlich vergrößert, kommen Effekte der Ränder besonders zum Tragen. Auch die dynamischen Aspekte sorgen dafür, dass bei laufenden Mustern eine Wechselwirkung mit den Rändern wichtig wird. Neben den periodischen Rändern, welche schwerpunktmäßig in dieser Arbeit diskutiert werden, sind somit auch die Einflüsse von *no-flux* Randbedingungen, speziell für Vergleiche mit experimentellen Fragestellungen, interessant.

Für das MiMo zeigt sich, dass im Falle von *no-flux* Randbedingungen die Dynamik stark verändert wird. In einer Dimension werden hier laufende Wellen von stehenden Wellen abgelöst. Dies bestätigt die Resultate in [264], wo beschrieben wird, dass die Reflektion von Mustern an *no-flux* Rändern eine Änderung der LW Dynamik zu SW Mustern induzieren kann. Die induzierten SW Lösungen zeigen weiterhin die für gekoppelte Transportgleichun-

gen typischen Charakteristiken wie endliche Wellenlängeninstabilität oder auch Multistabilität. In zweidimensionalen Systemen kann durch den erhöhten räumlichen Freiheitsgrad auch ein dynamisches Muster einer zirkulierenden Wellenfront entstehen.

10. Cahn-Hilliard Modell für oszillatorische Phasenseparation

10.1. Einleitung

Im vorherigen Kapitel wurde, motiviert durch aktive Materiesysteme, das Verhalten von gekoppelten Erhaltungsgleichungen im oszillatorischen Regime untersucht. Aktive Materiesysteme können eine Vielzahl verschiedener Strukturen aufweisen. In der Natur gibt es neben aktiver Materie noch zahlreiche weitere Systeme, welche geordnete Strukturen hervorbringen können. So sind zum Beispiel während der Morphogenese strukturbildende Mechanismen wichtig für die Entwicklung von Organismen, aber auch in Wetterphänomenen wie bei Wolkenstraßen oder im Tierreich in Form von gemusterten Fellen oder Panzern sind sie anzutreffen [266, 267]. Häufig erfolgt dabei der Übergang zu Strukturen aus einem homogenen Zustand heraus [65, 214]. Ausgehend von diesem geordneten Zustand können sich verschiedenste Muster wie Streifen, hexagonale Gitter oder auch dynamische Formen wie Wanderwellen ausbilden, wobei die resultierende Form abhängig von den hervorrufenden Wechselwirkungen ist, aber auch der jeweilige Zustand kann das Resultat beeinflussen [65, 214, 253, 265].

Um Nutzen aus diesen Phänomenen ziehen zu können wäre es hilfreich, eine Vorhersage über die Form des entstehenden Musters zu treffen oder vorherzusagen, wann diese Übergänge auftreten, d.h. welche Systemparameter verändert werden müssen, um Strukturen zu forcieren. Aufgrund der Gleichungstypen, welche diese nichtlinearen Prozesse beschreiben, ist dies jedoch im Allgemeinen eine schwierige Aufgabe [65]. Die Methodik der Störungstheorie ist hierbei ein bewährtes Werkzeug. Es erlaubt diese komplexen Zusammenhänge zu vereinfachen, indem die Komplexität der Probleme auf die Dynamik in der Nähe bekannter Szenarien, wie z. B. der Lösung in der Nähe des Einsatzpunktes einer Instabilität, reduziert wird [65, 214, 268, 269]. Das Resultat ist eine reduzierte Gleichung, häufig eines einzelnen skalaren Feldes, welche die essentiellen Eigenschaften und Dynamiken im gewünschten Bereich des Parameterraumes widerspiegelt [65, 214].

Diese Methodik hat sich im Laufe der Zeit in verschiedensten Gebieten als nützlich erwiesen [65, 214]. Obwohl die zugrundeliegenden Anwendungsfälle unterschiedlichster Natur sind stellt sich heraus, dass sie in eine kleine Gruppe universeller Gleichungen zurückzuführen sind, welche durch die lineare Typisierung der Typ I, Typ II und Typ III Übergänge bestimmt ist [65, 214]. Jede Kategorie zeigt für die jeweilige Klasse und Symmetrie charakteristische Dynamiken, wobei die Strukturen stationär (Index s) oder oszillatorisch (Index o) auftreten können.

Bei Typ I und III Phasenübergängen bestimmt eine ausgezeichnete, kritische Mode die Periodizität des Systems, welche entweder räumlich ($q_c \neq 0$) und/oder zeitlich ($\omega_c \neq 0$) auftreten kann. Jenseits des Einsatzpunktes der Instabilität können die Lösungen durch die Einhüllende der Grundlösung beschrieben werden, welche eine kleine Modulation mit langsamer Dynamik aufweisen. Diese Lösungen werden häufig *Amplituden-* oder *Ginzburg-Landau* Gleichungen genannt [65]. Die Störungsentwicklung zur Bestimmung der allgemeinen Gleichungen ist für diese beiden Fälle eine bewährte Methode, um eine Analyse der Gleichungen nahe des Einsatzpunktes vorzunehmen [65, 214, 268, 269].

Für erhaltene Systeme des Typs II_s^c ohne zeitliche Dynamik zeigte sich, dass die klassische CH Gleichung auch für Nicht-Gleichgewichtssysteme die allgemeine Entwicklungsgleichung darstellt [64, 195, 196, 270]. Allerdings liegt diese Formulierung bis jetzt nur für entkoppelte, einzelne erhaltene Felder vor. In diesem Kapitel wird die dynamische Ordnungsgleichung für Typ II^c Systeme im oszillatorischen Fall aufgestellt. Diese umfassen somit auch gekoppelte Systeme von Erhaltungsgleichungen und geben folglich das generische Verhalten zeitlich dynamischer Systeme in der Nähe des kritischen Punktes wieder.

Im Folgenden wird zunächst der Formalismus des Reduktionsschemas aus [64] auf gekoppelte, erhaltene Systeme im oszillatorischen Fall erweitert. Dieser wird auf die GTOPS-Gleichungen angewandt, um die Ordnungsgleichung für zwei gekoppelte, erhaltene Felder im oszillatorischen Fall zu erhalten. Im Gegensatz zu den GTOPS, welche sowohl stationäre als auch oszillatorische Dynamiken beinhaltet, ist die OPG reduziert auf die oszillatorische Dynamik und enthält somit die für oszillatorische Typ II_o^c Dynamik generische Struktur. Hierbei werden zum einen analytische Lösungen eines reduzierten Modelles vorgestellt und anschließend auch Lösungsszenarien des vollen Modells diskutiert. Das vorgestellte Reduktionsschema ist auch geeignet, um die gekoppelten Gleichungen der GTOPS im stationären Fall auf die entsprechende OPG zu reduzieren. Dies ist in Abschnitt 11.1 beschrieben.

10.2. Analyse der linearisierten Transportgleichungen im oszillatorischen Fall

Zunächst werden die GTOPS aus Abschnitt 9.2 unter Verwendung der Abkürzungen aus Gl. (9.6) in die einfache Schreibweise

$$\partial_t \mathbf{w} = - [\mathbf{M}_0 \nabla^2 + \mathbf{M}_2 \nabla^4] \mathbf{w} + \mathbf{N}(\nabla, \mathbf{w}) \quad (10.1)$$

gebracht, wobei $\mathbf{w} = (\rho, \psi)^T$ den Vektor der Dichten ρ und ψ , wie in Gl. (9.5) definiert, darstellt und $\mathbf{N}(\nabla, \mathbf{w})$ alle nichtlinearen Beiträge enthält. Die Nichtlinearität beinhaltet dabei alle auftretenden Kombinationen von ρ und ψ sowie die Ortsableitungen, was durch das Argument (∇, \mathbf{w}) von \mathbf{N} angedeutet wird.

Wie bereits in Abschnitt 9 aufgezeigt, erfolgt die Typisierung in stationäres und oszillatorisches Verhalten über den Imaginärteil des Eigenwertes $\text{Im}(\lambda^\pm)$. Dieser ist bestimmt durch den Radikanten R (siehe in der Definition Gl. (9.10)) und man erhält folglich im Allgemeinen

$$\lambda^\pm(q) \in \mathbb{C} \quad \text{für } R(q) < 0.$$

Mit der Definition

$$\sqrt{R} = i\omega$$

wird somit Gl. (9.9b) für oszillatorische Übergänge beschrieben als

$$\lambda^\pm(q) = \frac{q^2}{2} [\alpha_1 + \beta_1 - q^2(\alpha_2 + \beta_2) \pm i\omega].$$

Die Frequenz ist hierbei gegeben durch

$$\omega = \sqrt{-(R_0 + q^2 R_2 + q^4 R_4)} \quad (10.2a)$$

$$= \sqrt{-(\alpha_1 - \beta_1)^2 - 4K_1 L_1 - q^2 \gamma - q^4 [(\alpha_2 - \beta_2)^2 - 4L_2 K_2]}, \quad (10.2b)$$

mit

$$\gamma := R_2 = -2\alpha_1 \alpha_2 - 2\beta_1 \beta_2 + 2\alpha_1 \beta_2 + 2\alpha_2 \beta_1 - 4L_1 K_2 - 4K_1 L_2.$$

Durch Einführen der Abkürzung

$$P := \alpha_1 + \beta_1 - q^2(\alpha_2 + \beta_2)$$

folgt schließlich für die Eigenwerte die einfache Schreibweise

$$\lambda^\pm = \frac{q^2}{2} [P + i\omega] . \quad (10.3)$$

Die Eigenvektoren \mathbf{e}^\pm bestimmen das Verhältnis der linearen Amplituden $\bar{\rho}$ und $\bar{\psi}$. Sie sind gegeben durch die Gleichungen

$$[q^2 \mathbf{M}_0 - q^4 \mathbf{M}_2 - \lambda^\pm] \mathbf{e}^\pm(q) = 0 \quad \text{mit} \quad \mathbf{e}^\pm(q) = \begin{pmatrix} 1 \\ e^\pm(q) \end{pmatrix} .$$

Nach Einsetzen der Definition von \mathbf{M}_0 und \mathbf{M}_2 aus Gl. (9.6) ergibt dies

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 q^2 - \alpha_2 q^4 - \lambda^\pm & K_1 q^2 - K_2 q^4 \\ L_1 q^2 - L_2 q^4 & \beta_1 q^2 - \beta_2 q^4 - \lambda^\pm \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ e^\pm(q) \end{pmatrix} = 0 . \quad (10.4)$$

Das Auswerten von Gl. (10.4) liefert mit der Definition von λ^\pm gemäß Gl. (10.3) folgende Beziehung für die erste Zeile:

$$0 = \alpha_1 q^2 - \alpha_2 q^4 - \frac{q^2}{2} (P \pm i\omega) + (K_1 q^2 - K_2 q^4) e^\pm(q) .$$

Hieraus lassen sich nun die Komponenten e^\pm bestimmen und man erhält

$$\begin{aligned} e^\pm(q) &= \frac{-\alpha_1 + \alpha_2 q^2 + (P \pm i\omega) \frac{1}{2}}{K_1 - K_2 q^2} \\ &= \frac{(-\alpha_1 + \beta_1) + q^2(\alpha_2 - \beta_2) \pm i\omega}{2K_1 - 2K_2 q^2} \end{aligned} \quad (10.5a)$$

$$= \frac{2L_1 - 2L_2 q^2}{(\alpha_1 - \beta_1) + q^2(-\alpha_2 + \beta_2) \pm i\omega} . \quad (10.5b)$$

Für die letzte Umformung zu Gl. (10.5b) kann man entweder die Definition von ω aus Gl. (10.2b) verwenden, oder die zweite Zeile von Gl. (10.4) auswerten. Auch die Linkseigenvektoren werden in der späteren Herleitung benötigt. Diese erhält man analog zu den

vorherigen Schritten über die Bestimmungsgleichungen

$$[q^2 \mathbf{M}^T - \lambda^\pm] \mathbf{f}^\pm(q) = 0 \quad \text{mit} \quad \mathbf{f}^\pm(q) = \begin{pmatrix} 1 \\ f^\pm(q) \end{pmatrix}$$

beziehungsweise

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 q^2 - \alpha_2 q^4 - \lambda^\pm & L_1 - L_2 q^4 \\ K_1 q^2 - K_2 q^4 & \beta_1 q^2 - \beta_2 q^4 - \lambda^\pm \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ f^\pm(q) \end{pmatrix} = 0$$

und letztendlich die Linkseigenwerte

$$f^\pm(q) = \frac{(-\alpha_1 + \beta_1) + q^2 (\alpha_2 - \beta_2) \pm i\omega}{2L_1 - 2L_2 q^2} \quad (10.6a)$$

$$= \frac{2K_1 - 2K_2 q^2}{(\alpha_1 - \beta_1) + q^2 (-\alpha_2 + \beta_2) \pm i\omega} . \quad (10.6b)$$

10.3. Kontrollparameterwahl

Es ist hilfreich, die Eigenwerte λ^\pm durch σ^\pm gemäß

$$\lambda^\pm(q) = q^2 \sigma^\pm(q)$$

mit

$$\sigma^\pm(q) = \frac{1}{2} [\alpha_1 + \beta_1 - q^2 (\alpha_2 + \beta_2) \pm i\omega]$$

auszudrücken. Der kritische Punkt wird durch die Eigenschaft $\text{Re}(\sigma^\pm)|_{q \rightarrow 0} = 0$ bestimmt. Für kleine Abstände zum kritischen Punkt wird nun die Parametrisierung gemäß

$$\alpha_1 = \alpha_{1,0} + \varepsilon \alpha_{1,2} \quad , \quad \beta_1 = \beta_{1,0} + \varepsilon \beta_{1,2}$$

eingeführt, wobei

$$\alpha_{1,2} = \left. \frac{d\alpha_1(\varepsilon)}{d\varepsilon} \right|_{\varepsilon=0} \quad , \quad \beta_{1,2} = \left. \frac{d\beta_1(\varepsilon)}{d\varepsilon} \right|_{\varepsilon=0} .$$

Die kritische Bedingung für den Übergang $\operatorname{Re}(\sigma^\pm)|_{q \rightarrow 0} < 0 \rightarrow \operatorname{Re}(\sigma^\pm)|_{q \rightarrow 0} > 0$ soll gegeben sein für $\varepsilon = 0$. Dies liefert

$$\operatorname{Re}(\sigma^\pm)(q)|_{q \rightarrow 0, \varepsilon=0} = \alpha_{1,0} + \beta_{1,0},$$

womit man die Bedingung am kritischen Punkt

$$\alpha_{1,0} = -\beta_{1,0} \tag{10.7}$$

erhält. Nach Einsetzen in die Eigenwerte erhält man unter Verwendung von Gl. (10.7) die Eigenwerte in der Nähe des Phasenübergangs

$$\sigma^\pm(q) = \frac{1}{2} \left[\varepsilon(\alpha_{1,2} + \beta_{1,2}) - q^2(\alpha_2 + \beta_2) \pm i\omega \right]. \tag{10.8}$$

Bei der Wahl des Kontrollparameters ist anzumerken, dass dieser so gewählt ist, dass für $\varepsilon = 0$ das System einen Phasenübergang aus dem homogenen stabilen Zustand durchläuft. Die Wahl des Kontrollparameters gibt an, auf welchem Pfad man sich vom kritischen Punkt entfernt. Allgemein können auch andere Parameter $\alpha_i, \beta_i, K_i, L_i$ von ε abhängen. Aufgrund der Diskussion in den folgenden Kapiteln zeigt sich, dass auf der in dieser Arbeit beschriebenen Ordnung in ε nur noch K_1 und L_1 Beiträge auf der betrachteten Ordnung liefern. Diese könnten ebenfalls hier berücksichtigt werden. Da an diese keine Einschränkungen außer dem Vorliegen eines Π_o -Phasenübergangs gestellt werden, ist die Wahl dieser Parameter immer noch frei. Falls eine ε -Abhängigkeit dieser Parameter berücksichtigt werden sollte, müsste dies einzig im Schritt der ε -Hierarchie geschehen und würde lediglich zu einer Korrektur der später eingeführten ξ_i -Parameter führen, aber keine Änderungen an der generellen Form der OPG zur Folge haben.

10.4. Spezielle Eigenschaften der gekoppelten Transportgleichungen für oszillatorische Übergänge

Die GTOPS als System gekoppelter Gleichungen mit Erhaltung besitzen einige spezielle Eigenschaften, welche für die späteren Überlegungen wichtig sind. Wie zuvor in Abschnitt 9 geschildert sind die Eigenwerte symmetrisch in $\pm q$. Dies hat zur Folge, dass sowohl die Zeitabhängigkeiten in Form der Frequenzen ω , als auch die (Links-)Eigenvektoren $\mathbf{f}^\pm(q)$

und $\mathbf{e}^\pm(q)$ eine $\pm q$ Symmetrie aufweisen. Weiterhin gilt für die Eigenvektoren die Beziehung

$$[\mathbf{e}^\pm(q)]^* = \mathbf{e}^\mp(q) \quad , \quad [\mathbf{f}^\pm(q)]^* = \mathbf{f}^\mp(q) .$$

Für die Komponenten der (Links-)Eigenvektoren ergibt sich gemäß Gleichungen (10.5) und Gleichungen (10.6) $e^\pm(q)f^\mp(q) = -1$ und somit folgt, dass das Skalarprodukt

$$\mathbf{f}^\mp(q) \cdot \mathbf{e}^\pm(q) = 0$$

verschwindet.

Aus Gl. (10.8) lässt sich die obere Beschränkung q_0^o des Bandes mit positiver Wachstumsrate $\text{Re}(\sigma)(q) > 0$ für $0 < q < q_0^o$ bestimmen. Dies ist gegeben durch

$$q_0 = \varepsilon^{\frac{1}{2}} \frac{\sqrt{(\alpha_2 + \beta_2)(\alpha_{1,2} + \beta_{1,2})}}{\alpha_2 + \beta_2} . \quad (10.9)$$

Somit sieht man, dass das positive Band mit $q \propto \varepsilon^{\frac{1}{2}}$ verschwindet und der kritische Punkt des Einsatzes der Phasentrennung durch $\varepsilon = 0$ gegeben ist.

10.5. Vorüberlegungen für das Reduktionsschema

Aufbauend auf den bisherigen Überlegungen soll nun das Reduktionsschema für II_o Übergänge entwickelt werden. Dies stellt eine Generalisierung der bekannten Reduktionsschemas, wie zum Beispiel der aktiven Phasenseparation [64] oder das für oszillatorische Übergänge des Typs III_o bekannten Schema zur Herleitung der komplexen Ginzburg-Landau Gleichung [65, 209], dar.

Für die beteiligten Moden wurde in Gl. (10.9) gezeigt, dass die obere Schranke des überkritischen Bandes mit $q_0 \propto \varepsilon^{\frac{1}{2}}$ skaliert. Für kleine Werte des Kontrollparameters ε sind somit auch die beteiligten Wellenlängen q klein. Dies legt eine Entwicklung der Eigenwerte und Eigenvektoren nach der Wellenlänge q nahe. Eine Entwicklung der Eigenwerte σ liefert die Abhängigkeit (siehe explizite Entwicklung in Abschnitt 10.6)

$$\lambda^\pm(q) = q^2 \left[\sigma_0^\pm + q^2 \sigma_2^\pm + \mathcal{O}(q^4) \right] .$$

Dies entspricht der für Typ II typischen Form der Dispersion äquivalent zu Gl. (7.6) aus Abschnitt 7.1. Für einen Kontrollparameter oberhalb des Einsatzpunktes der Instabilität des homogenen Zustandes erhält man einen positiven Beitrag $q^2 \text{Re}(\sigma_0)$ und einen dämpfenden

Term gemäß $q^4 \operatorname{Re}(\sigma_2)$, was zu einer Dispersion wie in Abb. 7.2(a) führt. Würde man die Entwicklung bereits früher abbrechen, wäre das System linear nicht gedämpft und somit instabil. Für die Ordnungsparametergleichung bedeutet dies, dass sie die Entwicklung der Dispersionsrelation $\lambda^\pm(q)$ bis zur Ordnung $\propto q^4 \hat{=} \varepsilon^{\frac{4}{2}}$ korrekt reproduzieren muss. Bei den Amplituden wird der Fall eines superkritischen Übergangs beschrieben, welcher gemäß $\mathbf{w} \propto \varepsilon^{\frac{1}{2}}$ skaliert.

Die generalisierte Ordnungsparametergleichung skaliert gemäß $\lambda^\pm \mathbf{w}$. Ausgehend von den bisherigen Vorüberlegungen bedeutet dies, dass diese die Ordnungen $\lambda^\pm \mathbf{w} = \mathcal{O}\left(\varepsilon^{\frac{5}{2}}\right)$ einschließen muss. Wie sich später zeigt, ist dies auch die Ordnung, in der die Nichtlinearität die ersten, nicht verschwindenden Beiträge liefert. Für den stationären Fall liefert eine Skalierungsanalyse äquivalente Ergebnisse [64, 195, 196].

10.6. Reduktion auf die Ordnungsparametergleichung

Nun werden die allgemeinen GTOPS auf eine zugehörigen Ordnungsparametergleichung reduziert, welche das generische Verhalten in der Nähe des kritischen Punktes beschreibt. Hierfür wird zunächst das Ausgangssystem der GTOPS nach kleinen Wellenzahlen entwickelt. Für die Eigenwerte erhält man

$$\sigma^\pm = \sigma_0^\pm + q^2 \sigma_2^\pm + \mathcal{O}(q^4),$$

wobei

$$\begin{aligned} \sigma_0^\pm &= \frac{1}{2} [\alpha_1 + \beta_1 \pm i\omega_0] \quad \text{mit} \quad \omega_0 = \sqrt{-4K_1L_1 - (\alpha_1 - \beta_1)^2} \quad \text{und} \\ \sigma_2^\pm &= \frac{1}{2} [-\alpha_2 - \beta_2 \pm i\omega_2] \quad \text{mit} \quad \omega_2 = \frac{4K_1L_2 + 4K_2L_1 + 2\alpha_1\alpha_2 - 2\alpha_1\beta_2 - 2\alpha_2\beta_1 + 2\beta_1\beta_2}{2\omega_0}. \end{aligned}$$

Für die Eigenvektoren \mathbf{e}^\pm erhält mit der Entwicklung die Form

$$\mathbf{e} \approx \mathbf{e}_0^\pm + q^2 \mathbf{e}_2^\pm + \mathcal{O}(q^4) := \begin{pmatrix} 1 \\ e_0^\pm \end{pmatrix} + q^2 \begin{pmatrix} 0 \\ e_2^\pm \end{pmatrix}$$

mit den Faktoren

$$e_0^\pm = \frac{-\alpha_1 + \beta_1 \pm i\omega_0}{2K_1} = \frac{2L_1}{\alpha_1 - \beta_1 \pm i\omega_0}, \quad (10.11a)$$

$$e_2^\pm = \frac{2K_2 e_0^\pm + \alpha_2 - \beta_2 \pm i\omega_2}{2K_1} \quad (10.11b)$$

Für die Linkseigenvektoren $\mathbf{f}^\pm = (1, f^\pm)^T$ gilt analog

$$\mathbf{f}^\pm = \mathbf{f}_0^\pm + q^2 \mathbf{f}_2^\pm + O(q^4) := \begin{pmatrix} 1 \\ f_0^\pm \end{pmatrix} + q^2 \begin{pmatrix} 0 \\ f_2^\pm \end{pmatrix},$$

mit

$$f_0^\pm = \frac{-\alpha_1 + \beta_1 \pm i\omega_0}{2L_1} = \frac{2K_1}{\alpha_1 - \beta_1 \pm i\omega_0}, \quad (10.12a)$$

$$f_2^\pm = \frac{2L_2 f_0^\pm + \alpha_2 - \beta_2 \pm i\omega_2}{2L_1} \quad (10.12b)$$

Hierbei ist zu beachten, dass die in Abschnitt 10.4 beschriebenen Eigenschaften weiterhin gültig sind, das heißt

$$[\mathbf{e}_0^\pm(q)]^* = \mathbf{e}_0^\mp(q) \quad , \quad [\mathbf{f}_0^\pm(q)]^* = \mathbf{f}_0^\mp(q).$$

Ferner gilt

$$f_0^\mp e_0^\pm = -1 \quad (10.13a)$$

$$(\mathbf{f}_0^\mp)^T \mathbf{e}_0^\pm = 0 \quad (10.13b)$$

$$f_0^+ e_2^- + f_2^+ e_0^- = 0. \quad (10.13c)$$

sowie

$$\mathbf{M}_0 \mathbf{e}_0^\pm = \sigma_0^\pm \mathbf{e}_0^\pm \quad , \quad (\mathbf{f}_0^\pm)^T \mathbf{M}_0 = \sigma_0^\pm (\mathbf{f}_0^\pm)^T .$$

Nach den Vorüberlegungen zu den Eigenschaften der linearisierten GTOPS sollen nun die gekoppelten Transportgleichungen auf ein komplexes Ordnungsparameterfeld zurückgeführt werden. Dieses soll die generischen Eigenschaften der oszillatorischen Phasenseparation für kleine Kontrollparameter beschreiben. Hierbei ist zu beachten, dass im Gegensatz zu Instabilitäten des Typs I oder III [65] im vorliegenden Fall keine kritische Wellenlänge oder Frequenz ausgezeichnet ist. Aufgrund der Charakteristik wird der homogene Zustand für $\varepsilon > 0$ in einem Wellenzahlband mit Breite $q_0 \propto \sqrt{\varepsilon}$, ähnlich zur CH Gleichung, instabil.

Hier liegen jedoch, im Gegensatz zum Fall der klassischen CH Gleichung, zwei gekoppelte Gleichungen mit einer oszillatorischen Charakteristik vor. Daher wird für den Vektor $\mathbf{w}(\mathbf{r}, t)$ zunächst eine Fourier-Darstellung in der Form

$$\mathbf{w}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{q}} \left[\mathbf{e}^+(q) A_{\mathbf{q}}(t) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} + \mathbf{e}^-(q) A_{\mathbf{q}}^*(t) e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \right] \quad (10.14)$$

gewählt, welche die Systemeigenschaften widerspiegelt und sowohl links- als auch rechtslaufende Wellen-Lösungen ($\pm \mathbf{q}$) enthält. Die Zeitabhängigkeit wird durch die Amplituden $A_{\mathbf{q}}(t)$ beschrieben. Hierbei ist $\mathbf{e}^{\pm}(q)$ der Eigenvektor, der das Verhältnis der Komponenten des zugrundeliegenden Gleichungssystems (hier der GTOPS) angibt. Bei den weiteren Überlegungen ist es wichtig, dass der Ansatz den Anforderungen aus Abschnitt 10.5 gerecht wird. Deshalb darf der Eigenvektor $\mathbf{e}^{\pm}(q)$ nicht an einer ausgezeichneten Wellenzahl q_c (und somit auf Ordnung $\mathcal{O}(1)$) ausgewertet werden, wie es bei anderen Reduktionen der Fall ist, sondern muss die Systemdynamik auf der Skala $\mathcal{O}(\varepsilon^{\frac{5}{2}})$ korrekt wiedergeben. Unter diesen Voraussetzungen erhält man für die Entwicklung des Ansatzes

$$\mathbf{w}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{q}} \left\{ \left[\sum_{n=0}^{N_O} q^{2n} \mathbf{e}_{2n}^+(q) \right] A_{\mathbf{q}}(t) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} + \text{c.c.} \right\} .$$

Hierbei entspricht N_O der Ordnung der Reihenentwicklung, für welche im vorliegenden Fall $N_O = 1$ gilt (siehe Abschnitt 10.5). Diese obere Grenze ist systemspezifisch und muss für das jeweilige Problem angepasst werden. Für das weitere Vorgehen wird eine Ersetzung von $\mathbf{q} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}$ durch Ableitungen gemäß $i\nabla e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}$ auf den Ansatz angewandt (wobei $\mathcal{O}(\mathbf{q}) = \mathcal{O}(\nabla)$) und man erhält

$$\begin{aligned} \mathbf{w}(\mathbf{r}, t) &= \sum_{n=0}^{N_O} (-1)^n \mathbf{e}_{2n}^+ \nabla^{2n} \sum_{\mathbf{q}} (A_{\mathbf{q}}(t) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} + \text{c.c.}) \\ &= \sum_{n=0}^{N_O} (-1)^n \mathbf{e}_{2n}^+ \nabla^{2n} A(\mathbf{r}, t) + \text{c.c.} \\ &:= \mathbf{Y}^+ A(\mathbf{r}, t) + \mathbf{Y}^- A^*(\mathbf{r}, t) . \end{aligned} \quad (10.15a)$$

Hierbei überträgt der Eigenvektor-Operator

$$\mathbf{Y}^{\pm} = \sum_{n=0}^{N_O} (-1)^n \mathbf{e}_{2n}^{\pm} \nabla^{2n} \quad (10.16)$$

die Beiträge der Komponenten des GTOPS aus dem Fourierraum in die Ortsraum-Darstellung. Der zugehörige Links-Eigenvektor ist gegeben durch

$$\mathbf{Z}^\pm = \sum_{n=0}^{N_O} (-1)^n \mathbf{f}_{2n}^\pm \nabla^{2n}. \quad (10.17)$$

Dieser wird nun von links an die nichtlineare Gl. (10.1) der GTOPS multipliziert, um eine Lösbarkeitsbedingung [65] zu erhalten, was zu der Beziehung

$$\mathbf{Z}^+ \cdot \partial_t \mathbf{w} = -\mathbf{Z}^+ \cdot [\mathbf{M}_0 \nabla^2 \mathbf{w} + \mathbf{M}_2 \nabla^4 \mathbf{w} - \mathbf{N}(\mathbf{w})] \quad (10.18)$$

führt. Die linke Seite von Gl. (10.18) kann durch die Definition aus den Gleichungen (10.15a, 10.16, 10.17) und mit Hilfe von den Gleichungen (10.13b, 10.13c) weiter vereinfacht werden und man erhält

$$\begin{aligned} \mathbf{Z}^+ \cdot \partial_t \mathbf{w} &= \mathbf{Z}^+ \cdot \partial_t (\mathbf{Y}^+ A + \mathbf{Y}^- A^*) \\ &= (\mathbf{Z}^+ \cdot \mathbf{Y}^+) \partial_t A + (\mathbf{Z}^+ \cdot \mathbf{Y}^-) \partial_t A^* \\ &= [\mathbf{f}_0^+ \cdot \mathbf{e}_0^+ - (\mathbf{f}_0^+ \cdot \mathbf{e}_2^+ + \mathbf{f}_2^+ \cdot \mathbf{e}_0^+) \nabla^2] \partial_t A + \\ &\quad \underbrace{[\mathbf{f}_0^+ \cdot \mathbf{e}_0^- - (\mathbf{f}_0^+ \cdot \mathbf{e}_2^- + \mathbf{f}_2^+ \cdot \mathbf{e}_0^-) \nabla^2]}_{=0} \partial_t A^* + \mathcal{O}(\nabla^4) \\ &:= (\kappa_0 - \kappa_2 \nabla^2) \partial_t A + \mathcal{O}(\nabla^4), \end{aligned} \quad (10.19)$$

mit den Relaxationszeiten

$$\kappa_0 = \mathbf{f}_0^+ \cdot \mathbf{e}_0^- \quad , \quad \kappa_2 = \mathbf{f}_0^+ \cdot \mathbf{e}_2^+ + \mathbf{f}_2^+ \cdot \mathbf{e}_0^+.$$

Durch Dividieren der Relaxationszeit in Gl. (10.18) und den Definitionen aus Gleichungen (10.15a, 10.16, 10.17, 10.19) erhält für die Ordnung $\mathcal{O}(\nabla^6)$ den Zwischenschritt

$$\begin{aligned} \partial_t A &= \left[\frac{1}{\kappa_0} + \frac{\kappa_2}{\kappa_0^2} \nabla^2 \right] [\mathbf{f}_0^+ - \mathbf{f}_2^+ \nabla^2] \cdot \left[-\mathbf{M}_0 (\mathbf{e}_0^+ - \mathbf{e}_2^+ \nabla^2) \nabla^2 A - \mathbf{M}_2 \mathbf{e}_0^+ \nabla^4 A \right. \\ &\quad \left. - \mathbf{M}_0 (\mathbf{e}_0^- - \mathbf{e}_2^- \nabla^2) \nabla^2 A^* - \mathbf{M}_2 \mathbf{e}_0^- \nabla^4 A^* + \mathbf{N}(A, \mathbf{e}^\pm) \right] + \mathcal{O}(\nabla^6) \\ &:= (\mathcal{L}_0 + \mathcal{L}_2) A + (\mathcal{L}'_0 + \mathcal{L}'_2) A^* + \mathbf{T} \cdot \mathbf{N}(A, \mathbf{e}^\pm) + \mathcal{O}(\nabla^6). \end{aligned} \quad (10.20)$$

Die einzelnen Parameter aus Gl. (10.20) sind

$$\begin{aligned}
 \mathcal{L}_0 &= -\tau_0 \mathbf{f}_0^+ \cdot \mathbf{M}_0 \mathbf{e}_0^+ \nabla^2 = -\sigma_0^+ \nabla^2 \\
 \mathcal{L}'_0 &= -\tau_0 \mathbf{f}_0^+ \cdot \mathbf{M}_0 \mathbf{e}_0^- \nabla^2 = 0 \\
 \mathcal{L}_2 &= (-\tau_2 \mathbf{f}_0^+ \cdot \mathbf{M}_0 \mathbf{e}_0^+ + \tau_0 \mathbf{f}_0^+ \cdot \mathbf{M}_0 \mathbf{e}_2^+ + \tau_0 \mathbf{f}_2^+ \cdot \mathbf{M}_0 \mathbf{e}_0^+ - \tau_0 \mathbf{f}_0^+ \cdot \mathbf{M}_2 \mathbf{e}_0^+) \nabla^4 \\
 \mathcal{L}'_2 &= (-\tau_2 \mathbf{f}_0^+ \cdot \mathbf{M}_0 \mathbf{e}_0^- + \tau_0 \mathbf{f}_0^+ \cdot \mathbf{M}_0 \mathbf{e}_2^- + \tau_0 \mathbf{f}_2^+ \cdot \mathbf{M}_0 \mathbf{e}_0^- - \tau_0 \mathbf{f}_0^+ \cdot \mathbf{M}_2 \mathbf{e}_0^-) \nabla^4 \\
 \mathbf{T} &= \tau_0 \left(1 + \tau_2 \nabla^2 \right) \left(\mathbf{f}_0^+ - \mathbf{f}_2^+ \nabla^2 \right) \\
 &= \tau_0 \left[\mathbf{f}_0^+ + \left(\frac{\kappa_2}{\kappa_0} \mathbf{f}_0^+ - \mathbf{f}_2^+ \right) \nabla^2 \right] + \mathcal{O}(\nabla^4) \\
 \tau_0 &= \frac{1}{\kappa_0} \\
 \tau_2 &= \frac{\kappa_2}{\kappa_0^2}.
 \end{aligned}$$

Hierbei ist zu beachten, dass bislang eine Entwicklung nach kleinen Wellenzahlen bzw. Ortsabhängigkeiten in allen Beiträgen zu Gl. (10.18) durchgeführt wurde und Gl. (10.20) somit noch keine konsistente Ordnung in ε aufweist. Hierfür müssen die in den Ortsabhängigkeiten, Amplituden, Eigenvektoren sowie den Parametern $\alpha_i, \beta_i, K_i, L_i$ und den Zeitkonstanten κ enthaltenen Abhängigkeiten explizit berücksichtigt und skaliert werden [64, 196, 270]. Für die Ortsabhängigkeit wird die bereits vorher diskutierte Skalierung $q \propto \varepsilon^{\frac{1}{2}}$ bzw. $\nabla \propto \varepsilon^{\frac{1}{2}}$ verwendet. Für A wird entsprechend der Annahme eines superkritischen Phasenübergangs eine Entwicklung nach Abhängigkeiten $\propto \varepsilon^{\frac{1}{2}}$ durchgeführt. Die nichtlineare Form der Ausgangsgleichungen Gl. (9.4) zusammen mit der Skalierung des Eigenwertes bzw. des Ortes ergeben für die zeitliche Umformung eine Entwicklung in Einheiten von $\propto \varepsilon^{\frac{1}{2}}$.

Die Ausführung der ε -Entwicklung mit $\nabla \rightarrow \varepsilon^{\frac{1}{2}} \nabla'$ unter Berücksichtigung der Gültigkeit $\partial_t A \propto \mathcal{O}(\varepsilon^{\frac{5}{2}})$ liefert folgende Beziehungen:

$$\begin{aligned}
 \sigma_0^\pm &= \sigma_{0,0}^\pm + \varepsilon \sigma_{0,2}^\pm + \mathcal{O}(\varepsilon^{\frac{4}{2}}), \\
 \tau_0 &= \tau_{0,0} + \varepsilon \tau_{0,2} + \mathcal{O}(\varepsilon^{\frac{4}{2}}), \\
 \mathbf{f}_0^\pm &= \begin{pmatrix} 1 \\ f_{0,0}^\pm \end{pmatrix} + \varepsilon \begin{pmatrix} 0 \\ f_{0,2}^\pm \end{pmatrix} + \mathcal{O}(\varepsilon^{\frac{4}{2}}) := \mathbf{f}_{0,0}^\pm + \varepsilon \mathbf{f}_{0,2}^\pm + \mathcal{O}(\varepsilon^{\frac{4}{2}}), \\
 \mathbf{e}_0^\pm &= \begin{pmatrix} 1 \\ e_{0,0}^\pm \end{pmatrix} + \varepsilon \begin{pmatrix} 0 \\ e_{0,2}^\pm \end{pmatrix} + \mathcal{O}(\varepsilon^{\frac{4}{2}}) := \mathbf{e}_{0,0}^\pm + \varepsilon \mathbf{e}_{0,2}^\pm + \mathcal{O}(\varepsilon^{\frac{4}{2}}),
 \end{aligned}$$

$$\mathbf{e}_2^\pm = \begin{pmatrix} 0 \\ e_{2,0}^\pm \end{pmatrix} + \mathcal{O}(\varepsilon) \quad , \quad \mathbf{f}_2^\pm = \begin{pmatrix} 0 \\ f_{2,0}^\pm \end{pmatrix} + \mathcal{O}(\varepsilon) ,$$

mit

$$\omega_{0,0} = \sqrt{-4K_1L_1 - 4\beta_{1,0}^2} , \quad (10.22a)$$

$$\gamma_{1,0} = (-4\alpha_2 + 4\beta_2) \beta_{1,0} + 4K_1L_2 + 4K_2L_1 , \quad (10.22b)$$

$$\omega_{2,0} = \frac{\gamma_{1,0}}{2\omega_{0,0}} , \quad (10.22c)$$

$$\sigma_{0,0}^\pm = \frac{i}{2}\omega_{0,0} , \quad (10.22d)$$

$$\sigma_{0,2}^\pm = \left(\frac{1}{2} + \frac{i\beta_{1,0}}{\omega_{0,0}} \right) \alpha_{1,2} + \left(\frac{1}{2} - \frac{i\beta_{1,0}}{\omega_{0,0}} \right) \beta_{1,2} , \quad (10.22e)$$

$$\sigma_{2,0}^\pm = \frac{1}{2} [-\alpha_2 - \beta_2 \pm i\omega_{2,0}] , \quad (10.22f)$$

$$e_{0,0}^\pm = \frac{2\beta_{1,0} \pm i\omega_{0,0}}{2K_1} , \quad (10.22g)$$

$$e_{0,2}^\pm = \frac{\alpha_{1,2} - \beta_{1,2}}{K_1} \left[-\frac{1}{2} \pm i \frac{\beta_{1,0}}{\omega_{0,0}} \right] , \quad (10.22h)$$

$$e_{2,0}^\pm = \frac{K_2(2\beta_{1,0} \pm i\omega_{0,0}) + K_1(\alpha_2 - \beta_2 \pm i\omega_{2,0})}{2K_1^2} , \quad (10.22i)$$

$$f_{0,0}^\pm = \frac{2\beta_{1,0} \pm i\omega_{0,0}}{2L_1} , \quad (10.22j)$$

$$f_{0,2}^\pm = \frac{\alpha_{1,2} - \beta_{1,2}}{L_1} \left[-\frac{1}{2} \pm \frac{\beta_{1,0}}{i\omega_{0,0}} \right] , \quad (10.22k)$$

$$f_{2,0}^\pm = \frac{L_2(2\beta_{1,0} \pm i\omega_{0,0}) + L_1(\alpha_2 - \beta_2 \pm i\omega_{2,0})}{2L_1^2} , \quad (10.22l)$$

$$\tau_{0,0} = \frac{1}{1 + e_{0,0}^+ f_{0,0}^+} = \frac{1}{2} + i \frac{\beta_{1,0}}{\omega_{0,0}} , \quad (10.22m)$$

$$\tau_{2,0} = -\frac{2i}{\omega_{0,0}^3} [K_1L_1(\alpha_2 - \beta_2) + \beta_1(K_1L_2 + K_2L_1)] \quad (10.22n)$$

und für die Operatoren

$$\mathcal{L}_0 = -\varepsilon \sigma_{0,0}^+ \Delta' - \varepsilon^{\frac{4}{2}} \sigma_{0,2}^+ \Delta' + \mathcal{O}\left(\varepsilon^{\frac{6}{2}}\right) ,$$

$$\mathcal{L}_2 = \varepsilon^{\frac{4}{2}} \mathcal{L}_{2,0} + \mathcal{O}\left(\varepsilon^{\frac{6}{2}}\right) ,$$

$$\mathcal{L}'_2 = \varepsilon^{\frac{4}{2}} \mathcal{L}'_{2,0} + \mathcal{O}\left(\varepsilon^{\frac{6}{2}}\right) ,$$

$$\begin{aligned}
 \mathcal{L}_{2,0} &= \left[\tau_{2,0} \mathbf{f}_{0,0}^+ \cdot \mathbf{M}_{0,0} \mathbf{e}_{0,0}^+ + \tau_{0,0} \mathbf{f}_{0,0}^+ \cdot \mathbf{M}_{0,0} \mathbf{e}_{2,0}^+ \right. \\
 &\quad \left. + \tau_{0,0} \mathbf{f}_{2,0}^+ \cdot \mathbf{M}_{0,0} \mathbf{e}_{0,0}^+ - \tau_{0,0} \mathbf{f}_{0,0}^+ \cdot \mathbf{M}_{2,0} \mathbf{e}_{0,0}^+ \right] \Delta'^2 \\
 &= \sigma_{2,0}^+ \Delta'^2, \\
 \mathcal{L}'_{2,0} &= \left[\tau_{2,0} \mathbf{f}_{0,0}^+ \cdot \mathbf{M}_{0,0} \mathbf{e}_{0,0}^- + \tau_{0,0} \mathbf{f}_{0,0}^+ \cdot \mathbf{M}_{0,0} \mathbf{e}_{2,0}^- \right. \\
 &\quad \left. + \tau_{0,0} \mathbf{f}_{2,0}^+ \cdot \mathbf{M}_{0,0} \mathbf{e}_{0,0}^- - \tau_{0,0} \mathbf{f}_{0,0}^+ \cdot \mathbf{M}_{2,0} \mathbf{e}_{0,0}^- \right] \Delta'^2 \\
 &= 0, \\
 \mathbf{T}_{0,0} &= \tau_{0,0} \left(\mathbf{f}_{0,0}^+ \right)^T, \\
 \mathbf{TN} &= \mathbf{T}_{0,0} \left(\varepsilon^{\frac{4}{2}} \mathbf{N}_4 + \varepsilon^{\frac{5}{2}} \mathbf{N}_5 \right) + \mathcal{O}\left(\varepsilon^{\frac{6}{2}}\right) \\
 &:= \varepsilon^{\frac{4}{2}} \mathcal{N}_4 + \varepsilon^{\frac{5}{2}} \mathcal{N}_5 + \mathcal{O}\left(\varepsilon^{\frac{6}{2}}\right),
 \end{aligned}$$

mit

$$\mathbf{M}_{0,0} = \begin{pmatrix} -\beta_{1,0} & K_1 \\ L_1 & \beta_{1,0} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{M}_{0,2} = \begin{pmatrix} \alpha_{1,2} & 0 \\ 0 & \beta_{1,2} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{M}_{2,0} = \mathbf{M}_2.$$

Die entwickelten Parameter werden in die intermediäre Gleichung Gl. (10.20) eingesetzt. Da der Ansatz für A nur Moden $\propto e^{+i\omega_q t}$ (mit $\omega_q > 0$) enthält, werden für die Dynamik irrelevante Beiträge $\propto (A^*)^2$ und $(A^*)^3$, welche nur zu $\propto e^{-i\omega_q t}$ Dynamiken beitragen, ausgelassen. Nach Invertierung der ε -Aufspaltung [64, 196, 270] erhält man schließlich die Ordnungsgleichung für das Feld A in Form von

$$\begin{aligned}
 \partial_t A &= -\Delta \left(\xi_1 A + \xi_2 \Delta A + \xi_3 A^2 - \xi_4 A^3 \right) - \nabla \left[\xi_5 A \nabla (A^*) + \xi_6 A^* \nabla (A) \right] \\
 &\quad + \nabla \left[\xi_7 A^2 \nabla (A^*) + \xi_8 A^* \nabla (A^2) \right] + \nabla \left[\xi_9 A \nabla (A^{*2}) + \xi_{10} A^{*2} \nabla (A) \right] \quad (10.23)
 \end{aligned}$$

mit

$$\xi_1 = \sigma_{0,0}^+ + \varepsilon \sigma_{0,2}^+, \quad (10.24a)$$

$$\xi_2 = -\sigma_{2,0}^+, \quad (10.24b)$$

$$\begin{aligned}
 \xi_3' &= (\alpha_3 + L_3 f_{0,0}^+) + e_{0,0}^{+2} (K_3 + \beta_3 f_{0,0}^+) \\
 &\quad + (e_{0,0}^+/2) (\alpha_6 + L_6 f_{0,0}^+ + K_6 + \beta_6 f_{0,0}^+), \quad (10.24c)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \xi_4' &= (\alpha_4 + L_4 f_{0,0}^+) + e_{0,0}^{+3} (K_4 + \beta_4 f_{0,0}^+) \\
 &\quad + [2e_{0,0}^+ (\alpha_5 + L_5 f_{0,0}^+) + 2e_{0,0}^{+2} (K_5 + \beta_5 f_{0,0}^+) \\
 &\quad + e_{0,0}^{+2} (\alpha_7 + f_{0,0}^+ L_7) + e_{0,0}^+ (K_7 + \beta_7 f_{0,0}^+)] / 3, \quad (10.24d)
 \end{aligned}$$

$$\xi_5' = 2 \left[(\alpha_3 + L_3 f_{0,0}^+) + e_{0,0}^+ e_{0,0}^- (K_3 + \beta_3 f_{0,0}^+) \right]$$

$$+ e_{0,0}^+(\alpha_6 + L_6 f_{0,0}^+) + e_{0,0}^-(K_6 + \beta_6 f_{0,0}^+), \quad (10.24e)$$

$$\begin{aligned} \xi'_6 = & 2 \left[(\alpha_3 + L_3 f_{0,0}^+) + e_{0,0}^- e_{0,0}^+ (K_3 + \beta_3 f_{0,0}^+) \right] \\ & + e_{0,0}^-(\alpha_6 + L_6 f_{0,0}^+) + e_{0,0}^+(K_6 + \beta_6 f_{0,0}^+), \end{aligned} \quad (10.24f)$$

$$\begin{aligned} \xi'_7 = & 3 \left[(\alpha_4 + L_4 f_{0,0}^+) + e_{0,0}^- e_{0,0}^+ (K_4 + \beta_4 f_{0,0}^+) \right] \\ & + 2 \left[e_{0,0}^+(\alpha_5 + L_5 f_{0,0}^+) + e_{0,0}^- e_{0,0}^+ (K_5 + \beta_5 f_{0,0}^+) \right] \\ & + e_{0,0}^+ (\alpha_7 + L_7 f_{0,0}^+) + e_{0,0}^- (K_7 + \beta_7 f_{0,0}^+), \end{aligned} \quad (10.24g)$$

$$\begin{aligned} \xi'_8 = & 3 \left[(\alpha_4 + L_4 f_{0,0}^+) + e_{0,0}^- e_{0,0}^+ (K_4 + \beta_4 f_{0,0}^+) \right] + (e_{0,0}^+ + e_{0,0}^-)(\alpha_5 + L_5 f_{0,0}^+) \\ & + (e_{0,0}^+ + e_{0,0}^- e_{0,0}^+)(K_5 + \beta_5 f_{0,0}^+) + e_{0,0}^+ e_{0,0}^- (\alpha_7 + L_7 f_{0,0}^+) \\ & + e_{0,0}^+(K_7 + \beta_7 f_{0,0}^+), \end{aligned} \quad (10.24h)$$

$$\begin{aligned} \xi'_9 = & 3 \left[(\alpha_4 + L_4 f_{0,0}^+) + e_{0,0}^+ e_{0,0}^- (K_4 + \beta_4 f_{0,0}^+) \right] + (e_{0,0}^- + e_{0,0}^+)(\alpha_5 + L_5 f_{0,0}^+) \\ & + (e_{0,0}^- + e_{0,0}^- e_{0,0}^+)(K_5 + \beta_5 f_{0,0}^+) + e_{0,0}^- e_{0,0}^+ (\alpha_7 + L_7 f_{0,0}^+) \\ & + e_{0,0}^-(K_7 + \beta_7 f_{0,0}^+), \end{aligned} \quad (10.24i)$$

$$\begin{aligned} \xi'_{10} = & 3 \left[(\alpha_4 + L_4 f_{0,0}^+) + e_{0,0}^+ e_{0,0}^- (K_4 + \beta_4 f_{0,0}^+) \right] \\ & + 2 \left[e_{0,0}^-(\alpha_5 + L_5 f_{0,0}^+) + e_{0,0}^+ e_{0,0}^- (K_5 + \beta_5 f_{0,0}^+) \right] \\ & + e_{0,0}^- (\alpha_7 + L_7 f_{0,0}^+) + e_{0,0}^+ (K_7 + \beta_7 f_{0,0}^+), \end{aligned} \quad (10.24j)$$

wobei $\xi'_i = \frac{\xi_i}{\tau_{0,0}}$. Für die weitere Diskussion erweist es sich als hilfreich, die Real- und Imaginärteile der Parameter ξ_i wie folgt zu definieren

$$\zeta_i := \operatorname{Re}(\xi_i) \quad , \quad \chi_i := \operatorname{Im}(\xi_i). \quad (10.25)$$

10.6.1. Diskussion der Ordnungsparametergleichung (Gl. (10.23))

Die Gleichung Gl. (10.23) ist nun die allgemeine Ordnungsparametergleichung für Π_0^c Übergänge in Form einer komplexen, einkomponentigen, partiellen Differentialgleichung für gekoppelte, erhaltene Gleichungssysteme der Form der GTOPS. Die komplexen Vorfaktoren ξ_i geben dabei die Beziehung zwischen den Systemparametern $\alpha_i, \beta_i, K_i, L_i$ und der Ordnungsparametergleichung an. Für die linearisierte Darstellung der Gl. (10.23) erhält man

$$\partial_t A = -\Delta (\xi_1 + \Delta \xi_2) A \quad (10.26)$$

und reproduziert mit einem Ansatz $A = F_{\mathbf{q}} e^{\lambda_{\mathbf{q}} t + i \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}$ das lineare Problem der zugrundeliegenden GTOPS in führender Ordnung. Würde man im Gegensatz zur vorgestellten Methode

die Eigenvektoren $\mathbf{e}^\pm(q)$ bzw. $\mathbf{f}^\pm(q)$ an einer expliziten Stelle für q in Gl. (10.14) auswerten, wären Beiträge von $\mathbf{e}_{2,0}^\pm, \mathbf{f}_{2,0}^\pm$ nicht vorhanden und das lineare Problem wäre bereits in der hier beschriebenen Ordnung von ε nicht korrekt gelöst.

Für Gl. (10.26) ergibt sich die eindimensionale Dispersion von Gl. (10.23) zu

$$\lambda_l^{(A)} = q_l^2 \left(\xi_1 - \xi_2 q_l^2 \right),$$

mit der oberen Beschränkung

$$q_0 = \sqrt{\zeta_1/\zeta_2} \quad (10.27)$$

des überkritischen Wellenbandes. Bei periodischen Randbedingungen in einem System der Länge L sind die Moden in diskreten Abständen δq gegeben und es gilt $q_l = l2\pi/L$. Die obere Schranke q_0 legt damit auch die Zahl l_0 der überkritischen Moden fest, welche durch

$$l_0 = \left\lfloor \frac{L}{2\pi} \sqrt{\frac{\zeta_1}{\zeta_2}} \right\rfloor \quad (10.28)$$

gegeben ist, wobei $\lfloor \cdot \rfloor$ die abrundenden Gaußklammern darstellen. Für $0 < l < l_0$ sind somit die zugehörigen Wellenzahlen im überkritischen Band $0 < q < q_0$.

Der Übergang von stabilen, homogenen Lösungen $A = 0$ zu anwachsenden Störungen $A(x,t) \neq 0$ ist durch $\text{Re}(\lambda_l^{(A)}) \Big|_{q \rightarrow 0} = 0$ gegeben. Dieser Punkt ist definiert durch $\text{Re}(\xi_1) = \zeta_1 = 0$ und somit (unter Verwendung von Gleichungen (10.24a, 10.22d, 10.22e)) durch $\varepsilon \frac{1}{2}(\alpha_{1,2} + \beta_{1,2})$. Daher ergibt sich der Übergang, wie durch die Definition in Abschnitt 10.3 gefordert, am Punkt $\varepsilon = 0$. Die Beschreibung für zwei Dimensionen erfolgt analog.

Lineare Kopplung auf Ebene der GTOPS — Für linear-gekoppelte, erhaltene Gleichungen auf Ebene der GTOPS wie sie zum Beispiel in [200–202] untersucht werden, entfallen Beiträge von

$$\begin{aligned} &\alpha_5, \alpha_6, \alpha_7, \\ &\beta_5, \beta_6, \beta_7, \\ &K_2, K_3, K_4, K_5, K_6, K_7, \\ &L_2, L_3, L_4, L_5, L_6, L_7. \end{aligned}$$

Auf Ebene der Ordnungsgleichung Gl. (10.23) hat dies folgende Auswirkungen

auf die Vorfaktoren

$$\begin{aligned}\xi_5 &= \xi_6 =: \xi_s, \\ \xi_7 &= \xi_8 =: \xi_{c,1}, \\ \xi_9 &= \xi_{10} =: \xi_{c,2}.\end{aligned}$$

Somit sind die Vorfaktoren der quadratischen Terme $\propto \xi_5, \xi_6$, sowie der kubischen Terme $\propto \xi_7, \xi_8$ und $\propto \xi_9, \xi_{10}$ identisch und es ergibt sich für linear gekoppelte Systeme die reduzierte Form

$$\partial_t A_{lc} = -\Delta \left(\xi_1 A + \xi_2 \Delta A + \xi_3 A^2 - \xi_4 A^3 - \xi_s |A|^2 + \xi_{c,1} |A|^2 A + \xi_{c,2} |A|^2 A^* \right) \quad (10.29)$$

Übersetzung der Gl. (10.23) auf das MiMo — Das in Abschnitt 9.3 vorgestellte MiMo ist eine reduzierte Form der allgemeinen GTOPS. Es erstreckt sich auch über den Parameterbereich nahe des CTP. Für die hier aufgestellten Annahmen kann ein Vergleich zwischen MiMo und Ordnungsparametergleichung Gl. (10.23) nur für Bereiche mit $\theta > 0$ in hinreichender Entfernung des CTP getroffen werden. Für diesen Fall können die Parameterbeziehungen zwischen MiMo und Gl. (10.23) angegeben werden. Man sieht, dass bereits für das reduzierte Modell der MiMo alle Parameter $\xi_{1,\dots,10}$ endlich sind und somit alle Terme in Gl. (10.23) Beiträge liefern. Die Vereinfachungen des MiMo im Vergleich zu den GTOPS spiegeln sich in dem reduzierten Parameterraum wieder, welcher beschrieben wird durch die drei Größen ε, θ, g gemäß

$$\xi_1^{(m)} = \sqrt{\theta} + \varepsilon \left(1 + \frac{i}{\sqrt{\theta}} \right), \quad (10.30a)$$

$$\xi_2^{(m)} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{i}{\sqrt{\theta}} \right), \quad (10.30b)$$

$$\xi_4^{(m)} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{i}{\sqrt{\theta}} \right), \quad (10.30c)$$

$$\xi_3^{(m)} = g \xi_4^{(m)}, \quad \xi_{5,6}^{(m)} = 2g \xi_4^{(m)}, \quad \xi_{7,8,9,10}^{(m)} = 4\xi_4^{(m)}. \quad (10.30d)$$

Weitere Reduktion aufgrund von Modenselektion — Wegen des zugrundeliegenden, allgemeinen Ansatzes Gl. (10.14) erlaubt das hier beschriebene Modell Gl. (10.23) auch Lösungen mit verschiedenen Modenbeiträgen zu beschreiben. Liegt ein System vor, von dem bekannt ist, dass nur wenige oder bestimmte Moden einen Beitrag liefern, so lässt sich die allgemeine Beschreibung in Gl. (10.23) weiter durch Modenprojektionen vereinfachen.

Hierbei ist auszuwerten, welche Komponenten der rechten Seite Beiträge zu den Moden im Ansatz liefern können und nichtrelevante Beiträge können durch eine Projektion auf die relevanten Terme eliminiert werden. Auch kann eine getrennte Formulierung der dynamischen Gleichung für die jeweiligen Moden erfolgen und somit eventuelle Lösungskriterien für verschiedene Beiträge separat behandelt werden.

10.7. Ausgewählte Lösungsszenarien

Die beschriebene Ordnungsparametergleichung Gl. (10.23) enthält eine vielfältige Menge möglicher Lösungsszenarien. Die vollständige Beschreibung dieser Vielfalt geht über die Grenzen dieser Arbeit hinaus. Daher wird nur auf ausgewählte Szenarien eingegangen: Zum einen wird ein reduziertes Modell Gl. (10.31) in Abschnitt 10.7.1 vorgestellt, welches sowohl analytisch als auch in Abschnitt 10.7.2 numerisch auf mögliche Lösungstypen untersucht wird. Basierend auf diesem reduzierten Modell werden anschließend weitere Terme in Abschnitt 10.7.2 in numerischen Untersuchungen hinzugenommen und gezeigt, wie sich die vorher aufgestellten Lösungstypen bei zusätzlichen Parametern verhalten. Hierbei zeigt sich, dass das reduzierte Modell als Ausgangspunkt für die Einordnung der Lösungen des vollen Modells aus Gl. (10.23) dienen kann.

10.7.1. Reduziertes Modell der Gl. (10.23)

Um eine erste Typisierung der Lösungslandschaft zu erhalten, wird ein reduziertes Modell untersucht:

$$\partial_t A = -\nabla^2 \left(\xi_1 A + \xi_2 \nabla^2 A \right) + \nabla \left[\xi_7 A^2 \nabla (A^*) + \xi_8 A^* \nabla (A^2) \right], \quad (10.31)$$

welches man aus der vollständigen Beschreibung Gl. (10.23) mit der Wahl

$$\xi_4 = \xi_5 = \xi_6 = \xi_9 = \xi_{10} = 0$$

erhält. Der Spezialfall von Gl. (10.31) mit $\xi_7 = \xi_8$ wurde bereits in früheren Arbeiten [271, 272] als Modell für II_o Dynamiken aufgestellt und untersucht. Es ist durch die komplexen Ginzburg-Landau Gleichung [269] motiviert, welche mit einer Erhaltungseigenschaft erweitert wurde. Durch die unabhängige Wahl von ξ_7 und ξ_8 ist es möglich, zu den in [271] beschriebenen Lösungsszenarien von LW weitere Typen dynamischer Strukturen zu erhalten, die im Folgenden sowohl analytisch als auch numerisch untersucht werden.

Für die Analyse von Gl. (10.31) wird der Ansatz von vier getrennten LW-Lösungen mit gleicher Wellenzahl q und synchroner Frequenz Ω verwendet mit

$$A = \bar{B}_1 e^{i(\Omega_1 t + qx)} + \bar{B}_2 e^{i(\Omega_2 t + qy)} + \bar{B}_3 e^{i(\Omega_3 t - qx)} + \bar{B}_4 e^{i(\Omega_4 t - qy)}, \quad (10.32)$$

$$=: B_1(\mathbf{r}, t) + B_2(\mathbf{r}, t) + B_3(\mathbf{r}, t) + B_4(\mathbf{r}, t).$$

Dieser enthält als Spezialfall sowohl LW ($\bar{B}_2 = \bar{B}_3 = \bar{B}_4 = 0$), SW ($\bar{B}_1 = \bar{B}_3 = B_{sw}$, $\bar{B}_2 = \bar{B}_4 = 0$), LQ ($\bar{B}_1 = \bar{B}_2 = B_{lq}$, $\bar{B}_3 = \bar{B}_4 = 0$) oder auch OSQ ($\bar{B}_1 = \bar{B}_3 = \bar{B}_x$, $\bar{B}_2 = \bar{B}_4 = \bar{B}_y$) als Lösungen. Die Laufrichtung kann dabei durch eine Rotation des Gesamtsystems unabhängig von den genannten Lösungsansätzen beliebig gewählt werden. Nach Einsetzen des Ansatzes Gl. (10.32) in Gl. (10.31) schwingen nicht nur die angesetzten Moden $\pm qx, \pm qy$, sondern auch höhere Harmonische an. Nach Projektion der erhaltenen Gleichung auf die einzelnen Moden B_1, B_2, B_3, B_4 kann man deren Einfluss selektieren.

Anhand der resultierenden Gleichungssysteme können anschließend die analytischen Eigenschaften der jeweiligen angenommenen Lösungen mit Standardmethoden der Strukturbildung (siehe z. B. [65, 214, 250, 269]) untersucht werden.

Laufende Wellen-Lösungen — Für die Existenz von LW-Lösungen werden in (10.32) die Modenanteile B_2, B_3, B_4 gleich null gesetzt. Der Lösungsansatz reduziert sich somit zu

$$A = \bar{B}_1 e^{i(\Omega t + qx)} =: F_{lw} e^{i(\Omega_{lw} t + qx)}.$$

Nach Einsetzen in Gl. (10.31) erhält man

$$\partial_t B_1 = q^2 B_1 \left[\left(\xi_1 - q^2 \xi_2 \right) - (\xi_7 - 2\xi_8) |B_1|^2 - i\Omega_{lw} \right]. \quad (10.33)$$

Eine Stabilitätsanalyse des homogenen Zustands $B_1 = 0 + \delta F e^{\sigma_{lw} t}$ mit kleinen Störungen in Gl. (10.33) zeigt, dass

$$\zeta_1 - q^2 \zeta_2 > 0 \quad (10.34)$$

erfüllt sein muss, damit LW-Lösungen anwachsen. Dies entspricht der Bedingung für überkritische Moden der linearen Dispersion der vollen Gl. (10.23) und ist somit äquivalent zu der Forderung, dass ein Übergang aus dem homogenen Grundzustand heraus erfolgen kann. Diese Bedingung taucht auch bei späteren analytischen Betrachtungen auf und wird für die Lösungsuntersuchungen implizit als erfüllt angenommen.

Aus dem Real- und Imaginärteil der eingeschwungenen Lösungen von Gl. (10.33) kann man

nun die Amplitude F_{lw} und Frequenz Ω_{lw} dieses Lösungstyps bestimmen [250] und man erhält

$$F_{lw}^2 = \frac{\zeta_1 - q^2 \zeta_2}{2\zeta_8 - \zeta_7}, \quad (10.35a)$$

$$\Omega_{lw} = q^2 \left[\chi_1 - q^2 \chi_2 - (2\chi_8 - \chi_7) F_{lw}^2 \right]. \quad (10.35b)$$

Da F_{lw}^2 positiv und die Amplitude reel ist, muss zu Gl. (10.34) zusätzlich die Bedingung

$$2\zeta_8 - \zeta_7 > 0 \quad (10.36)$$

für LW Lösungen erfüllt sein, die in diesem Parameterbereich superkritisch aus dem homogenen Zustand entstehen.

Stehende Welle-Lösungen — Für stehende Wellen setzt man zwei laufende Wellen mit gleicher Amplitude an. Dies erreicht man, indem man im Ansatz Gl. (10.32) die Beiträge zweier paralleler Wellen wie z. B. B_2 und B_4 zu Null setzt. Die verbleibenden Wellen mit Amplituden $B_L := \bar{B}_1$, $B_R := \bar{B}_3$ und Frequenzen $\Omega_1 = \Omega_2 = \Omega_{sq}$ ergeben den Ansatz

$$A = B_L e^{i(\Omega_{sw} t + qx)} + B_R e^{i(\Omega_{sw} t - qx)},$$

und erzeugen das Gleichungssystem

$$\partial_t B_1 = q^2 B_1 \left[\left(\xi_1 - q^2 \xi_2 \right) - 2\xi_7 \left(|B_3|^2 \right) + (\xi_7 - 2\xi_8) |B_1|^2 - i\Omega_{sw} \right], \quad (10.37a)$$

$$\partial_t B_3 = q^2 B_3 \left[\left(\xi_1 - q^2 \xi_2 \right) - 2\xi_7 \left(|B_1|^2 \right) + (\xi_7 - 2\xi_8) |B_3|^2 - i\Omega_{sw} \right]. \quad (10.37b)$$

Für den SW-Ansatz mit gleicher Amplitude $F_{sw} := |B_R| = |B_L|$ erhält man, nach Auflösen der stabilen Lösungen von Gleichungen (10.37), die Amplitude und Frequenz

$$F_{sw}^2 = \frac{\zeta_1 - q^2 \zeta_2}{2\zeta_8 + \zeta_7}, \quad (10.38a)$$

$$\Omega_{sw} = q^2 \left[\chi_1 - q^2 \chi_2 - (2\chi_8 + \chi_7) F_{sw}^2 \right]. \quad (10.38b)$$

Anhand der Lösungen in (10.38) erkennt man, dass SW als Lösungen superkritisch im Bereich

$$2\zeta_8 + \zeta_7 > 0 \quad (10.39)$$

aus dem homogenen Zustand abzweigen.

Um die Stabilität der bereits erhaltenen LW-Lösungen gegenüber SW-Lösungen zu testen, verwendet man den Störungsansatz (siehe z. B. [65, 214]) $B_1 = F_{sw} + \delta B$, $B_3 = \delta B$, bei dem die LW-Lösung mit einem kleinen Offset in Form der SW-Lösung gestört wird. Dieser Ansatz wird in Gl. (10.37) eingesetzt und gemäß der kleinen Störungen δB linearisiert. Die linearisierten Gleichungen können dann mit einem Ansatz der Form $\delta B \propto \delta \tilde{B} e^{\sigma_{sw} t}$ gelöst werden, wobei σ der Eigenwert des linearisierten Problems ist. Falls der Realteil $\text{Re}(\sigma)$ positiv ist, wachsen Störungen der Form des Ansatzes (SW) aus dem Grundzustand (LW) an. Die LW sind dann instabil gegen die Störung der SW. Für das vorliegende System erhält man als Eigenwerte

$$\text{Re}(\sigma_{sw}^{(1)}) = 2 \left(q^2 \zeta_2 - \zeta_1 \right) q^2, \quad (10.40a)$$

$$\text{Re}(\sigma_{sw}^{(2)}) = - \frac{q^2 (\zeta_2 - \zeta_1) (3\zeta_7 - \zeta_8)}{\zeta_7 - 2\zeta_8}. \quad (10.40b)$$

Der erste Eigenwert liefert die Bedingung $-\zeta_1 + q^2 \zeta_2 > 0$, was nur unterkritische Moden einschließt und somit nicht relevant ist. Für den zweiten Eigenwert ergibt sich die Bedingung

$$\zeta_8 > \frac{3}{2} \zeta_7. \quad (10.41)$$

Diese Bedingung gibt an, für welche Parameter LW Lösungen gegenüber SW-Lösungen instabil werden.

Laufende Quadrate-Lösungen — Für laufende Quadrate sind Amplituden B_1 und B_2 mit $\Omega_1 = \Omega_2 = \Omega_{lq}$ relevant und die entgegengesetzt laufenden Beiträge verschwinden ($B_3 = B_4 = 0$). Mit diesem Ansatz wird Gl. (10.31) zu

$$\partial_t B_1 = q^2 B_1 \left[\left(\xi_1 - q^2 \xi_2 \right) - 2\zeta_8 \left(|B_2|^2 \right) + (\xi_7 - 2\zeta_8) |B_1|^2 - i\Omega_{lq} \right], \quad (10.42a)$$

$$\partial_t B_2 = q^2 B_2 \left[\left(\xi_1 - q^2 \xi_2 \right) - 2\zeta_8 \left(|B_1|^2 \right) + (\xi_7 - 2\zeta_8) |B_2|^2 - i\Omega_{lq} \right]. \quad (10.42b)$$

Für den SW-Ansatz mit gleicher Amplitude $F_{lq} := |\bar{B}_1| = |\bar{B}_2|$ erhält man, nach Auflösen der stabilen Lösungen von Gleichungen (10.42) die Amplitude und Frequenz

$$F_{lq}^2 = \frac{\zeta_1 - q^2 \zeta_2}{4\zeta_8 - \zeta_7}, \quad (10.43a)$$

$$\Omega_{lq} = q^2 \left[\chi_1 - q^2 \chi_2 - (4\chi_8 + \chi_7) F_{lq}^2 \right]. \quad (10.43b)$$

Anhand der Lösungen Gleichungen (10.43) erkennt man, dass laufende Quadrate (LQ) superkritisch im Bereich

$$4\zeta_8 - \zeta_7 > 0$$

aus dem homogenen Zustand abzweigen. Zum Testen der Stabilität von LW gegenüber LQ-Lösungen, wird der Störungsansatz $B_1 = F_{sq} + \delta B$, $B_2 = \delta B$ verwendet. Dieser Ansatz liefert für die linearisierte Form der Gleichungen (10.42) für $\delta B \propto \delta \tilde{B} e^{\sigma_{lq} t}$ die Eigenwerte

$$\operatorname{Re}(\sigma_{lq}^{(1)}) = 2 \left(q^2 \zeta_2 - \zeta_1 \right) q^2, \quad (10.44a)$$

$$\operatorname{Re}(\sigma_{lq}^{(2)}) = - \frac{q^2 \zeta_7 (q^2 \zeta_2 - \zeta_1)}{\zeta_7 - 2\zeta_8}. \quad (10.44b)$$

Ein positiver Realteil der Eigenwerte entspricht einer Bedingung $-(\zeta_1 - q^2 \zeta_2) > 0$ oder $\zeta_1 - q^2 \zeta_2 < 0$. Diese Bedingung steht im Widerspruch zur Bedingung der linearen Stabilitätsanalyse, dass eine Störung des homogenen Grundzustandes anwachsen kann. Das bedeutet, dass für diese Bedingung nur linear gedämpfte Moden eingeschlossen sind und die Beiträge somit nicht relevant sind. Für den zweiten Eigenwert ergibt sich die Bedingung

$$2\zeta_8 \geq \zeta_7 \quad , \quad \text{für } \zeta_7 \leq 0.$$

Diese Bedingung zeigt, für welche Parameter LW Lösungen gegenüber LQ-Lösungen instabil werden.

Oszillierende stehende Quadrate-Lösungen — Der Lösungstyp von OSQ besteht aus zwei orthogonalen, stehenden Wellen, welche mit einem Phasenversatz ϕ oszillieren. Der Ansatz der OSQ enthält zwei senkrecht zueinander orientierte stehende Wellen und ist gegeben durch

$$A = \bar{B}_x e^{i\Omega_1 t} (e^{iqx} + e^{-iqx}) + \bar{B}_y e^{i\Omega_2 t} (e^{iqy} + e^{-iqy}).$$

Dies liefert für Gl. (10.31) das Gleichungssystem

$$\begin{aligned} \partial_t B_x = & \left[q^2 (\xi_1 - \xi_2 q^2) - i\Omega_1 \right] B_x - 2q^2 \xi_7 B_1^* |B_y|^2 \\ & - \left[(2\xi_8 + \xi_7) |B_x|^2 + 4\xi_8 |B_y|^2 \right] q^2 B_x, \end{aligned} \quad (10.45a)$$

$$\begin{aligned} \partial_t B_y = & \left[q^2 (\xi_1 - \xi_2 q^2) - i\Omega_2 \right] B_y - 2q^2 \xi_7 B_y^* |B_x|^2 \\ & - \left[(2\xi_8 + \xi_7) |B_y|^2 + 4\xi_8 |B_x|^2 \right] q^2 B_y. \end{aligned} \quad (10.45b)$$

Zur weiteren Analyse wird die Lösung einer SW in x -Richtung angenommen, mit $|B_1| = F_{sw}$, $\Omega_1 = \Omega_{sw}$, welche durch eine orthogonale SW $B_2 = \delta B \propto \delta \tilde{B} e^{\sigma t} e^{i\phi}$ im Phasenversatz ϕ gestört wird. Der erste Eigenwert liefert erneut nur die SW-Bedingungen, wohingegen der zweite Wert σ_2 die Stabilität der SW gegenüber OSQ mit

$$\sigma_2 = 1 - \frac{4\zeta_8 + 2(\zeta_7 \cos(2\phi) + \chi_7 \sin(2\phi))}{2\zeta_8 + \zeta_7}$$

angibt. Für die Grenzfälle $\phi = \{0, \pi/2\}$ erhält man

$$\begin{aligned} \sigma_2|_{\phi=0} &= \zeta_7 - 2\zeta_8, \\ \sigma_2|_{\phi=\pi/2} &= 3\zeta_7 - 2\zeta_8, \end{aligned}$$

was mit den Grenzen für Stabilität von SW gegenüber der homogenen Lösung bzw. der Stabilität von LW gegenüber SW Störungen übereinstimmt (vgl. Gleichungen (10.41, 10.36)). Das Maximum der Wachstumsrate als Funktion des Phasenversatzes kann über $\left. \frac{\partial}{\partial \phi} \sigma_2 \right|_{\phi_m} = 0$ berechnet werden und liegt bei

$$\phi_m = -\frac{1}{2} \operatorname{atan} \left(\frac{\chi_7}{\zeta_7} \right).$$

Die Wachstumsrate, für welche SW Lösungen zuerst instabil gegenüber einer OSQ Lösung werden, kann schließlich nach ζ_8 aufgelöst werden und man erhält

$$\zeta_8^{(n)} = \frac{\zeta_7}{2} + \sqrt{\zeta_7^2 + \chi_7^2}. \quad (10.46)$$

Für Werte von $\zeta_8 < \zeta_8^{(n)}$ werden SW Lösungen instabil gegen OSQ Störungen mit einem Phasenversatz ϕ , für den die Wachstumsrate als erstes positiv wird. Das Gebiet der OSQ Lösungen ist dabei nach unten für $\zeta_7 > 0$ durch die LW Instabilität zu SW ($\zeta_8 > 3\zeta_7/2$) und für negative $\zeta_7 < 0$ durch die Instabilität von homogenen Lösungen zu SW ($\zeta_8 > \zeta_7/2$) begrenzt. Für $\chi_7 \rightarrow 0$ fällt der Übergang aus Gl. (10.46) von SW zu OSQ mit diesen

Beschränkungen zusammen und das OSQ Gebiet verschwindet.

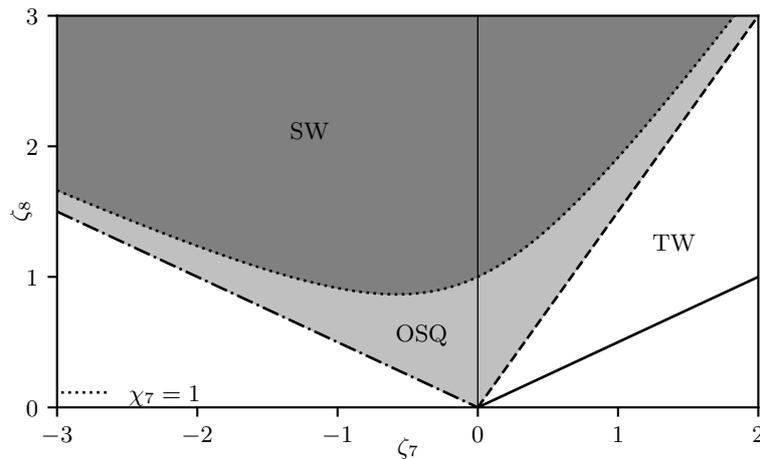


Abb. 10.1.: Phasendiagramm für analytische Einmoden-Lösungen des reduzierten Modells aus Gl. (10.31) als Funktion der Realanteile von $\zeta_7 = \text{Re}(\xi_7)$ und $\zeta_8 = \text{Re}(\xi_8)$. Oberhalb der durchgezogenen Linie für $\zeta_8 > \zeta_7/2$ mit $\zeta_7 > 0$ werden homogene Lösungen gegenüber LW Lösungen instabil. Der Bereich der LW Lösungen ist nach oben durch die gestrichelte Linie $\zeta_8 = 3\zeta_7/2$ begrenzt. Dort werden die LW Lösungen gegenüber SW Lösungen instabil. Diese sind für $\zeta_7 < 0$ durch $\zeta_8 > -\zeta_7/2$ begrenzt. Für $\zeta_7 \neq 0$ werden Lösungen des SW Gebiets (dunkelgrau gefüllt) für kleine ζ_8 an der gepunkteten Linie instabil gegenüber OSQ Lösungen. Der eingezeichnete Wert entspricht einer Phasengrenze für $\chi_7 = 1$. Im Fall $\chi_7 \rightarrow 0$ verschwindet das Gebiet der OSQ (hellgrau gefüllt) vollständig, alle anderen Grenzen bleiben unverändert. Die gepunktete, graue Linie gibt den Spezialfall $\zeta_7 = \zeta_8$ (siehe [271]) wieder und stellt keine Phasengrenze dar.

Phasendiagramm — Das aus den Überlegungen in Abschnitt 10.7.1 resultierende Phasendiagramm für Gl. (10.31) ist in Abb. 10.1 dargestellt. Für $\zeta_7 > 0$ wird dort der Übergang der homogenen Lösung zu den superkritisch bifurkierenden LW Lösungen durch die schwarze durchgezogene Linie abgegrenzt. Oberhalb dieser Linie befindet sich das Gebiet, in dem LW Lösungen entstehen können. Die graue, gestrichelte Linie gibt den Spezialfall $\zeta_7 = \zeta_8$ an, welcher bereits in [271] diskutiert wurde und linearen Kreuzkopplungen auf Ebene der GTOPS entspricht, welche zum Beispiel in [200–202] angenommen wurden (siehe hierzu auch Abschnitt 10.6.1). An der schwarzen, gestrichelten Linie werden die LW Lösungen instabil gegenüber SW Lösungen. Das Gebiet der SW Lösungen erstreckt sich bis in den Bereich $\zeta_7 < 0$ und wird durch die schwarze, strichpunktierte Linie mit $\zeta_8 = -\zeta_7/2$ begrenzt, an welcher SW Lösungen superkritisch verzweigen. Der SW Bereich ist selbst unterteilt in einen Bereich mit SW (dunkelgrau) und einen Bereich, in dem SW Lösungen gegenüber OSQ Mustern instabil werden (hellgrau). Der Übergang findet an der schwarz gepunkteten Linie statt, welche von χ_7 abhängt. In Abb. 10.1 ist der Übergang für $\chi_7 = 1$ eingezeichnet. Für $\chi_7 \rightarrow 0$ verschwindet der OSQ Bereich vollständig, da die Grenzlinie mit den SW

Begrenzungen zusammenfällt.

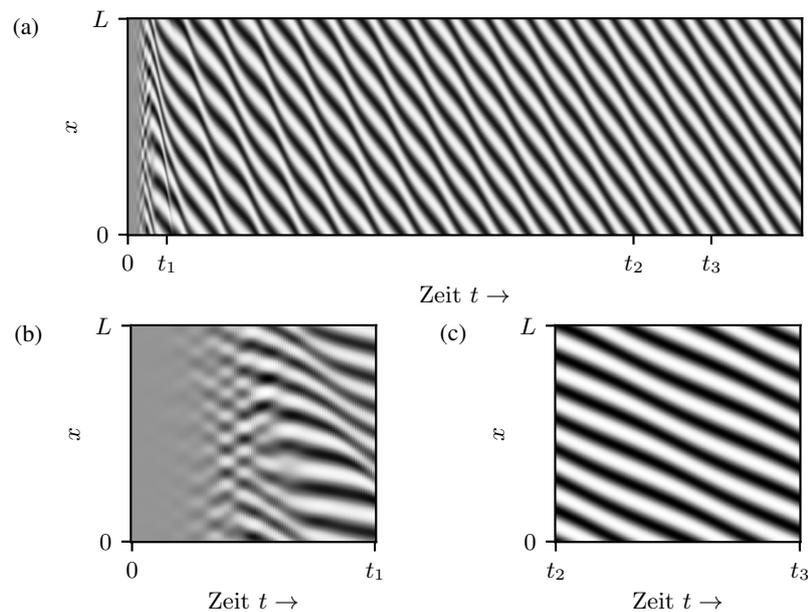


Abb. 10.2.: Ergebnisse für $\text{Re}(A)$ des reduzierten Modells Gl. (10.31) in einer Dimension für Rauschen als Startbedingung mit Parametern $\xi_1 = 0.8$, $\xi_2 = 1 + 2i$, $\xi_7 = \xi_8 = 1$ und einer Systemlänge von $L = 90$ und somit $l_0 = 12$ überkritischen Moden. (a) Zeigt den gesamten zeitlichen Verlauf, bei dem aus dem Rauschen eine LW Lösung entsteht. (b) und (c) sind vergrößerte Abschnitte zu verschiedenen Zeiten.

10.7.2. Numerische Lösungen

Die Ordnungsparametergleichung Gl. (10.23) enthält eine enorme Bandbreite an verschiedenen Lösungsszenarien und Dynamiken, weshalb eine allumfassende Kategorisierung in dieser Arbeit nicht vorgenommen wird. In diesem Abschnitt werden vielmehr ausgewählte Lösungsszenarien numerisch bestimmt. Hierbei wird zunächst das reduzierte Modell Gl. (10.31) auch im Vergleich zu den analytischen Ergebnissen aus Abschnitt 10.7.1 untersucht. Aufgrund der vereinfachten Form lassen sich einige prototypische Szenarien identifizieren. Ausgehend von diesen Erkenntnissen werden anschließend verschiedene Terme hinzugeschaltet und die Veränderung der Dynamik beobachtet. Dies ermöglicht Rückschlüsse der analytischen Lösungstypen aus Abschnitt 10.7.1 auf die allgemeine Form Gl. (10.23). Zusätzlich können Strategien zur Identifikation und Vorhersage anhand des vereinfachten Modells umgesetzt werden. Anschließend werden weitere, selektierte Beispiele

von interessanten Effekten der Gl. (10.23) gezeigt.

Allgemeines — In den folgenden Erläuterungen wird der Parametersatz

$$\xi_1 = 0.8 \quad , \quad \xi_2 = 1 + 2i \quad , \quad \xi_7 = 1 \quad , \quad \xi_8 = 1, \quad (10.47)$$

falls nicht anders angegeben, als Standardparametersatz verwendet. Nicht aufgeführte Parameter sind dabei zu Null gewählt. Für die Vorfaktoren ξ_i wird die Konvention aus Gl. (10.25) für den Realteil (ζ_i) und den Imaginärteil (χ_i) verwendet. Außerdem wird die Definition Gl. (10.27) und Gl. (10.28) der oberen Begrenzung des überkritischen Modenbandes der linearen Dispersion herangezogen, wobei l_0 die Anzahl überkritischer Moden angibt. Dabei ist zu beachten, dass bei zunehmender Systemlänge L nur eine neue überkritische Mode l_0 hinzukommt, falls l_0 durch die vergrößerte Länge einen ganzzahligen Wert überschreitet. Somit können verschiedene Systemlängen die selbe Anzahl an überkritischen Moden l_0 aufweisen.

Parameterbereich des analytischen Phasendiagramms Abb. 10.1 — Als Ausgangspunkt der numerischen Untersuchungen wird zuerst der Parameterbereich der LW untersucht. Hierfür wird der Parametersatz aus Gl. (10.47) verwendet, welcher $\xi_7 = \xi_8$ enthält und somit den Spezialfall der erhaltenen Ginzburg-Landau Gleichung aus [271] beschreibt. Zunächst wird die Dynamik mit Rauschen als Startbedingung für A behandelt. In Abb. 10.2 ist der zeitliche Verlauf der eindimensionalen Lösung von $\text{Re}(A)$ des reduzierten Modells Gl. (10.31) dargestellt. Hierbei wurde ein System mit einer Länge von $L = 90$ gewählt und somit sind $l_0 = 12$ Moden im überkritischen Bereich $0 < l < l_0$ der linearen Dispersion. In der Darstellung Abb. 10.2 (a) ist der komplette zeitliche Verlauf der Amplitude als Funktion der Zeit t und des Ortes x gezeigt, ausgehend von der Startbedingung bei $t = 0$. Für kurze Zeiten sieht man in der vergrößerten Darstellung Abb. 10.2 (b), dass das System ähnlich wie bei der stationären CH Gleichung eine Vergrößerung der Struktur durchläuft. Diese Vergrößerung zu Beginn läuft allerdings nicht bis zur größten Systemlänge, sondern wird für $t \rightarrow t_1$ von einer dynamischen Strukturformung abgelöst. Zwischen t_1 und t_2 erkennt man einen Übergangsbereich, in dem sich eine LW Lösung ausbildet, welche sich für $t > t_3$ in der Simulation stabilisiert (vgl. Abb. 10.2 (c)).

Startet man verschiedene Simulationen mit unterschiedlichen Zufallswerten des Rauschens als Startbedingung, so bilden sich LW mit verschiedenen Wellenlängen als stabile Muster aus. Diese Multistabilität zeigt, dass die OPG Gl. (10.23) die Charakteristik der oszillatorischen Phasenseparation mit stabilen Lösungen verschiedener Modenzahlen beinhaltet. Für $\xi_7 = \xi_8$ ist folglich die Dynamik von Gl. (10.31) ähnlich zu Systemen, welche klassische

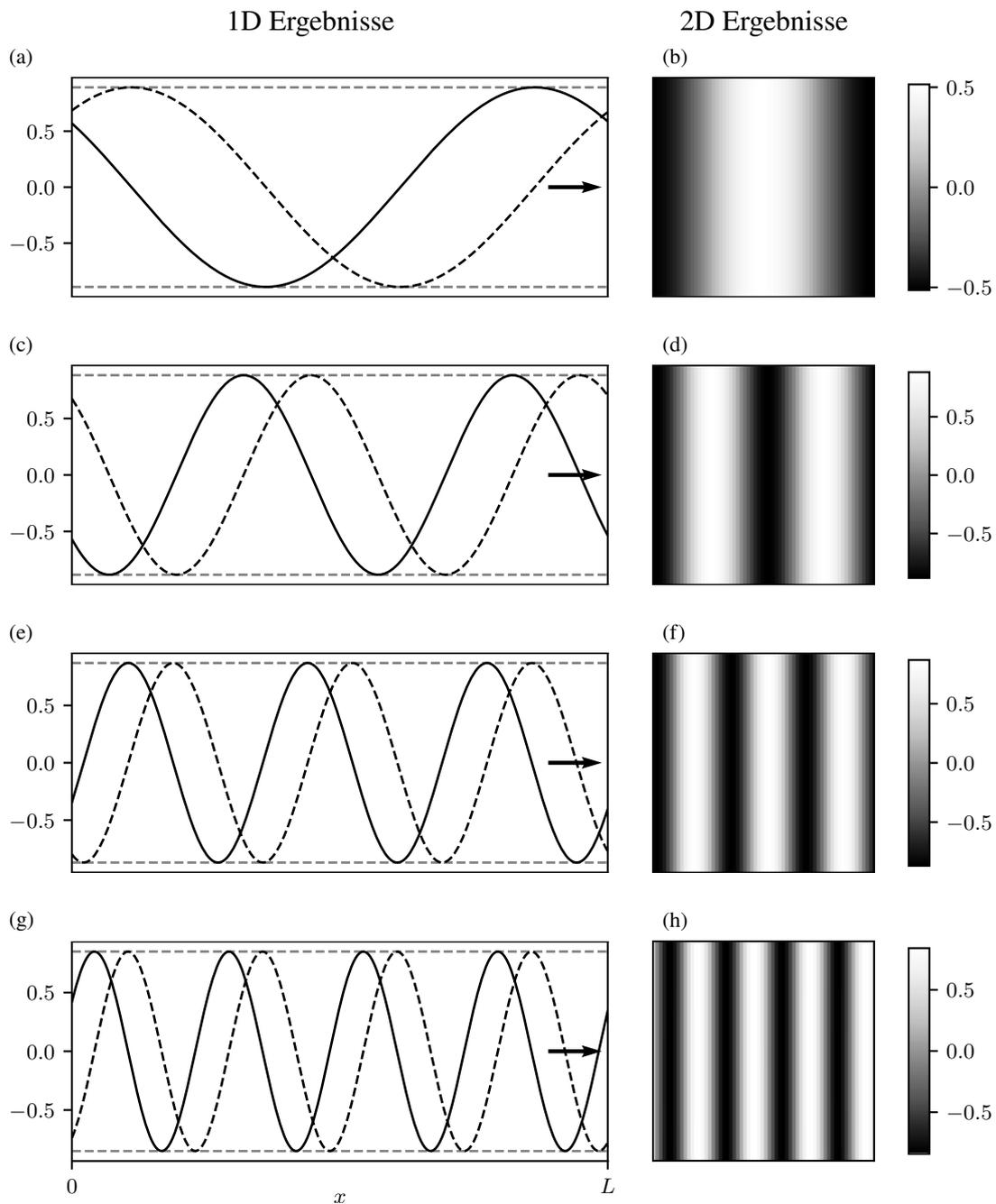


Abb. 10.3.: Ergebnisse des reduzierten Modells Gl. (10.31) mit Parametern $\xi_1 = 0.8$, $\xi_2 = 1 + 2i$, $\xi_7 = \xi_8 = 1$ und einer Systemlänge von $L = 90$ (für 2D-Simulationen $L_{x,y} = 90$) und somit $l_0 = 12$ überkritischen Moden. Die linke Spalte (a),(c),(e),(g) zeigt die Ergebnisse für $\text{Re}(A)$ (durchgezogene, schwarze Linie) und $\text{Im}(A)$ (gestrichelte, schwarze Linie) der eindimensionalen Simulationen. Es sind verschiedene Wellenlängen, einschließlich der längsten Mode stabil. Die Amplituden stimmen mit den analytisch berechneten Werten (gestrichelte, graue Linie) aus Gl. (10.35) überein. Die rechte Spalte mit (b),(d),(f),(h) zeigt $\text{Re}(A)$ der entsprechenden zweidimensionalen Simulationen.

Musterbildung aufweisen. Hierbei kann die finale Wellenlänge durch Startbedingungen mit einem Wellenansatz und überlagerter Rauschamplitude forciert werden.

In Abb. 10.3 sind einige finale Lösungen von eindimensionalen (linke Spalte mit Bildern (a),(c),(e),(g)) und zweidimensionalen Simulationen (rechte Spalte mit (b),(d),(f),(h)) gezeigt. In den eindimensionalen Simulationen ist der Phasenversatz zwischen $\text{Re}(A)$ (schwarze, durchgezogene Linie) und $\text{Im}(A)$ (schwarze, gestrichelte Linie) zu sehen. Die Laufrichtung wird durch den schwarzen Pfeil angezeigt. Zusätzlich ist der analytisch berechnete Wert der Amplitude F_{lw} aus Gl. (10.35a) als gestrichelte, graue Linie eingezeichnet, welcher übereinstimmt mit der sich tatsächlich einstellenden Amplitude. Die Ergebnisse lassen sich auch in zweidimensionalen Simulationen finden, wie in der rechten Spalte von Abb. 10.3 von zweidimensionalen Schnappschüssen der finalen Lösungen von $\text{Re}(A)$ gezeigt.

Wählt man $\xi_7 \neq \xi_8$ aber weiterhin im Bereich des LW Gebietes in Abb. 10.1, so formen sich zunächst LW Lösungen, welche allerdings instabil sind gegenüber LW Lösungen anderer Wellenlänge. Für die analytische Bestimmung der finalen stabilen Wellenlänge sind weitere Untersuchungen, die über diese Arbeit hinausgehen, erforderlich. Da $\xi_7 \neq \xi_8$ durch nichtlineare Kopplungen auf Ebene der GTOPS hervorgerufen wird, zeigt dies, dass nichtlineare Kopplungen nicht nur für Korrekturen, sondern zu einem geänderten Lösungsverhalten führen können und somit bei der Berücksichtigung einer konsistenten Beschreibung wichtig sind. Die Parameterbereiche $\xi_7 \neq \xi_8$ können nicht durch linear gekoppelte Transportgleichungen abgedeckt werden.

Für den Bereich der LW in Abb. 10.1 mit $\xi_7 \neq \xi_8$ zeigt sich weiterhin, dass die Ergebnisse sensitiv gegenüber der gewählten Systemlänge L bzw. der überkritischen Modenanzahl l_0 werden. Für Parameter aus Gl. (10.47) mit $\xi_8 = 2$ befindet man sich oberhalb der gestrichelten schwarzen Linie in Abb. 10.1 und somit im Gebiet der SW Lösungen. Für die numerische Untersuchung wird zunächst ein System mit Länge $L = 8$ und daher einer überkritischen Mode $l_0 = 1$ gewählt. Die zeitliche Dynamik für Rauschen als Startamplitude von A ist in Abb. 10.4 gezeigt. Bei genauer Betrachtung der Dynamik sieht man, dass sich aus dem Rauschen zunächst eine Welle ausbildet, welche für sehr kurze Zeit (ca. eine halbe Schwingungsperiode) in positive x -Richtung läuft und anschließend in eine SW Struktur übergeht. Dies entspricht dem analytisch vorhergesagten Verhalten des Einmoden-Ansatzes.

Wählt man ein System mit $L = 90$ und einer einhergehenden erhöhten Anzahl $l_0 = 12$ der beteiligten, linear ungedämpfter Moden, so ergibt sich ein Verhalten wie in Abb. 10.5 gezeigt. Hier wird mit einem LW Profil als Startbedingung begonnen. Dieses ist nach den analytischen Einmoden-Lösungen instabil gegenüber SW Mustern. Im vergrößerten Bereich Abb. 10.5 (b) sieht man, dass die LW Lösung tatsächlich zunächst einen Übergang zu einer

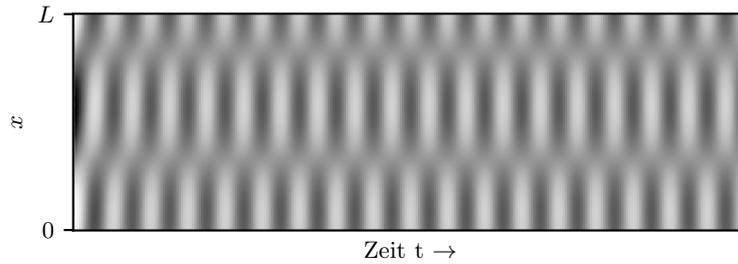


Abb. 10.4.: Ergebnisse für $\text{Re}(A)$ des reduzierten Modells Gl. (10.31) in einer Dimension mit Rauschen als Startbedingung und Parametern $\xi_1 = 0.8, \xi_2 = 1 + 2i, \xi_7 = 1, \xi_8 = 2$ bei einer Systemlänge von $L = 8$ und somit einer überkritischen Mode ($l_0 = 1$). Aus dem Rauschen wächst zunächst eine Welle mit der längsten Wellenlänge an. Diese läuft für eine halbe Periode und wird dann von einer SW abgelöst, wie in der analytischen Einmoden-Approximation bestimmt (siehe auch Phasendiagramm Abb. 10.1).

SW zwischen $0 < t < t_1$ vollzieht. Diese SW ist allerdings erneut instabil und man findet einen weiteren Übergang der SW zu einem langwelligen Muster innerhalb $t_3 < t < t_4$ mit phasenversetzten Anteilen der links bzw. rechts laufenden Welle, was einer schwankenden LW Lösung ähnelt. Das bedeutet, dass die Hinzunahme beteiligter Moden bzw. das Ändern der Systemgröße die Dynamik der Lösungen verändert.

Auch im Gebiet der OSQ Muster ist die Abhängigkeit der Systemgröße zu erkennen. In Abb. 10.6 sind Parameter aus Gl. (10.47), allerdings mit $\xi_7 = i$ und $\xi_8 = 0.8$ gewählt. Dort sind Schnappschüsse der zweidimensionalen Lösung von $\text{Re}(A)$ des reduzierten Modells Gl. (10.31) für drei verschiedene Systemlängen (obere Reihe) $L_{x,y} = 10$, (mittlere Reihe) $L_{x,y} = 32$, (untere Reihe) $L_{x,y} = 40$ mit jeweils vier Zuständen einer Periode gezeigt. Im Fall $L_{x,y} = 10$ mit $l_0 = 1$ sieht man in der oberen Reihe Abb. 10.6 (a)-(d), dass sich zwei phasenversetzte SW senkrecht zueinander ausbilden, was der vorhergesagten OSQ Lösung entspricht. Erhöht man die Anzahl der beteiligten überkritischen Moden auf $l_0 = 5$ bei sonst gleichen Parametern, so sieht man in der mittleren Spalte Abb. 10.6 (e)-(h), dass die nichtlineare Kopplung verschiedener Modenbeiträge ein komplexeres Muster hervorruft, die Grunddynamik allerdings noch der OSQ ähnelt. Bei weiterer Erhöhung der Systemlänge folgt schließlich ein Übergang zu einem anderen, quasi eindimensionalen Lösungstyp, wie in Abb. 10.6 (i)-(l) gezeigt.

Reduzierte Gleichung Gl. (10.31) mit $\xi_7 \neq i_8$: Einfluss der Systemlänge — Neben den analytisch behandelten Lösungsszenarien existieren noch andere Möglichkeiten für entstehende Muster der reduzierten Gleichung Gl. (10.31), wenn man eine größere Systemlänge wählt bzw. die Anzahl überkritischer Moden erhöht. In Abb. 10.7 und Abb. 10.8 sind einige Beispiele aufgeführt. Für die Parameter aus Gl. (10.47) mit $\xi_8 = 0.8$, also unterhalb der

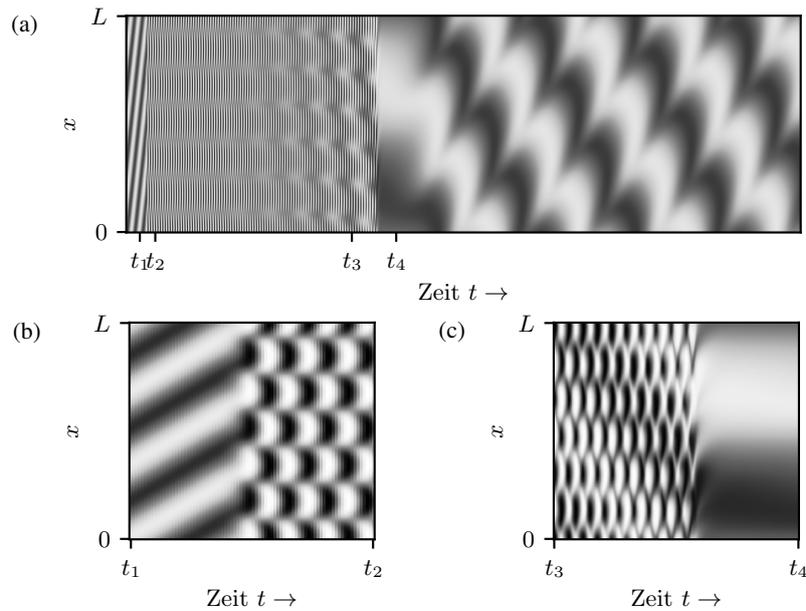


Abb. 10.5.: Ergebnisse für $\text{Re}(A)$ des reduzierten Modells Gl. (10.31) in einer Dimension mit einem LW Profil als Startbedingung und Parametern $\xi_1 = 0.8$, $\xi_2 = 1 + 2i$, $\xi_7 = 1$, $\xi_8 = 2$ bei einer Systemlänge von $L = 90$ und somit $l_0 = 12$ überkritischen Moden. (a) Zeigt den gesamten zeitlichen Verlauf. (b) und (c) sind vergrößerte Abschnitte. Zuerst wird das initiale LW Muster instabil gegenüber eines SW Musters, wie in Gl. (10.39) analytisch in der Einmoden-Approximation bestimmt (siehe auch Phasendiagramm Abb. 10.1). Die Wechselwirkung verschiedener überkritischer Moden sorgt allerdings dafür, dass die SW instabil gegenüber einem neuen Muster wird, was nicht durch die Einmoden-Approximation abgedeckt wird.

Linie $\zeta_7 = \zeta_8$, findet man in einem System der Länge $L = 64$ mit Rauschen als Anfangsbedingung für A , dass sich eine LW mit großer Wellenlänge ausbildet (siehe Abb. 10.7 (a)). Für größere Systemlängen sorgt die Interaktion der erhöhten Anzahl linear ungedämpfter Moden zu einer zeitlich komplexen Dynamik, von welcher ein Schnappschuss in Abb. 10.7 (b) für $L = 256$ zu sehen ist.

Bei Wahl der selben Parameter, jedoch oberhalb der Identität $\zeta_7 = \zeta_8$, findet man im System mit $L = 64$ und $\zeta_8 = 1.2$ anstatt einer LW Lösung eine dynamische Lösung bestehend aus zwei entgegengesetzt drehenden Spiralen. Diese Lösung ändert sich bei Erhöhen der Systemgröße zu $L = 90$ zu einem OSQ ähnlichen Muster mit einer Spiralstruktur (Abb. 10.8). Bei weiterem Erhöhen der Systemgröße bildet sich auch hier eine komplexe Zeitdynamik (Abb. 10.7 (d)) aus.

Einfluss der Imaginäranteile für $\zeta_7 = \zeta_8$ — Auch für den Fall $\zeta_7 = \zeta_8$ sind weitere Lösungstypen möglich. In [271] wurde bereits beschrieben, dass LW Lösungen, ähnlich zur BFR für nicht erhaltene Ordnungsparametergleichungen mit Raum-Zeit Chaos (RZC)[269,

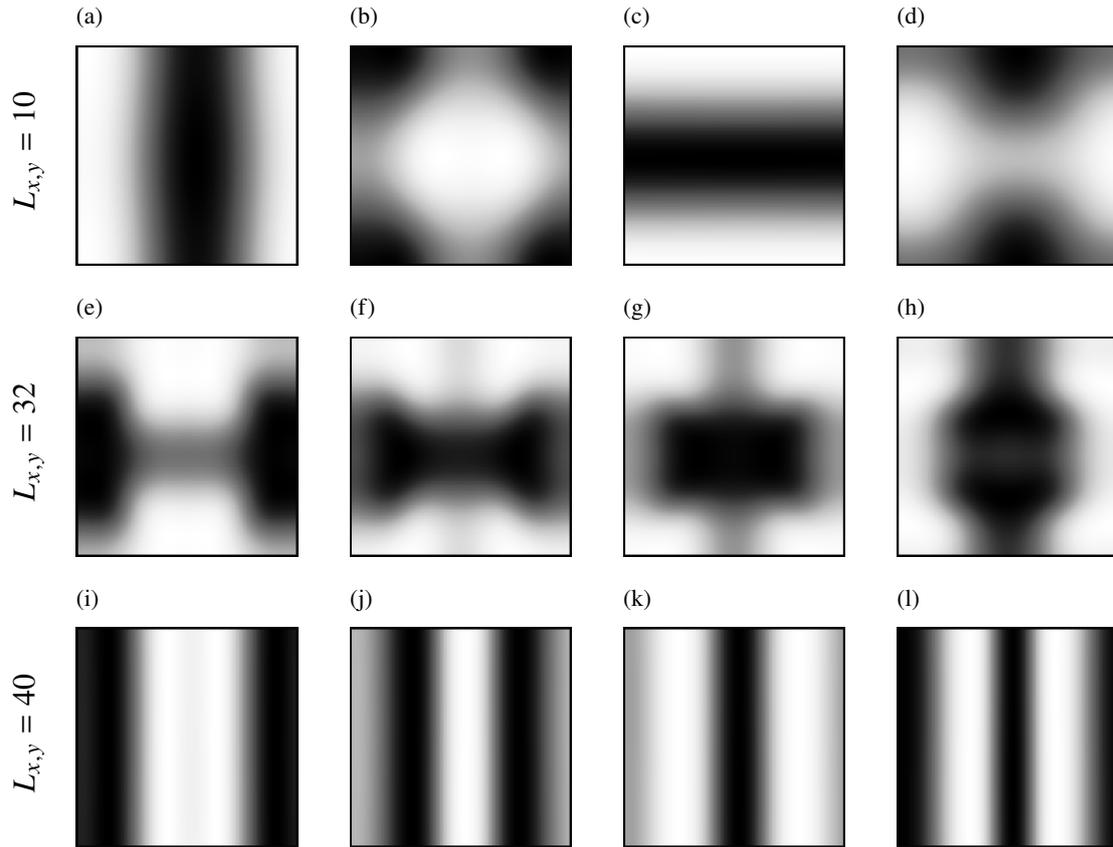


Abb. 10.6.: Schnappschüsse $\text{Re}(A)$ des reduzierten Modells Gl. (10.31) in 2D mit $\xi_1 = 0.8$, $\xi_2 = 1 + 2i$, $\xi_7 = i$, $\xi_8 = 0.8$. Jede Zeile hat verschiedene Systemlängen: (obere Reihe) $L_{x,y} = 10, l_0 = 1$, (mittlere Reihe) $L_{x,y} = 32, l_0 = 4$ und (untere Reihe) $L_{x,y} = 40, l_0 = 5$. Für den Fall einer überkritischen Mode (a)-(d) erhält man eine OSQ Lösung, wie durch die analytische Einmoden-Approximation vorhergesagt. Sind mehrere Moden überkritisch, wie z. B. in (e)-(h) mit $l_0 = 4$, so wird das entstehende Muster zunächst komplexer, aber die OSQ-Form ist noch vorhanden. Erhöht man weiterhin die Anzahl beteiligter Moden auf $l_0 = 5$ (e)-(h), so wird die OSQ Lösung von anderen Mustern abgelöst, welche nicht durch die Einmoden-Approximation abgedeckt werden.

273, 274], instabil gegen Wellenlösungen aller Wellenlängen $0 < q < q_0$ werden können. Wie aus [271] bekannt, muss hierfür das Produkt der Imaginärteile $\chi_2\chi_7$ hinreichend negativ werden. In Abb. 10.9 sind Schnappschüsse für $\text{Re}(A)$ der Ergebnisse der zweidimensionalen Gl. (10.31), mit den Parametern $\xi_1 = 0.5$, $\xi_2 = 1 - 2.75i$, $\xi_7 = \xi_8 = 1 + 2.75i$ gezeigt. Das Produkt der ausschlaggebenden Imaginärteile ist hier $\chi_2\chi_7 = -(2.75)^2$, was nach [271] im Bereich der Instabilität gegenüber allen Moden liegt. Die obere Reihe Abb. 10.9 (a)-(d) zeigt vier Schnappschüsse einer langsamen Periode mit $L_{x,y} = 128, l_0 = 18$. Für diese Parameterwahl bildet sich eine langsame, langwellige Dynamik ähnlich zu einer OSQ aus. Diese langsame Dynamik ist überlagert von einer schnellen, kurzwelligen Dynamik,

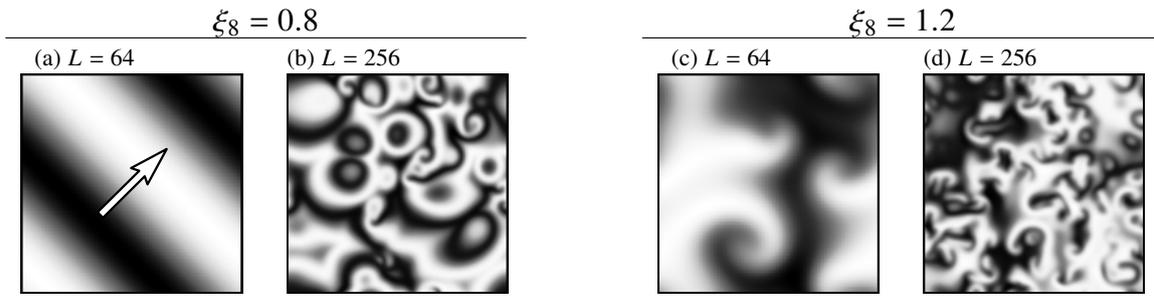


Abb. 10.7.: Schnappschüsse $\text{Re}(A)$ des reduzierten Modells Gl. (10.31) in 2D mit $\xi_1 = 0.8, \xi_2 = 1 + 2i, \xi_7 = 1$ und (a)+(b) $\xi_8 = 0.8$ bzw. (c)+(d) $\xi_8 = 1.2$. Sind mehrere Moden linear ungedämpft, so können sich neben den in Abschnitt 10.7.1 analytisch beschriebenen Lösungen auch noch andere, komplexe Dynamiken, wie in (b) und (d) gezeigt, ausbilden.

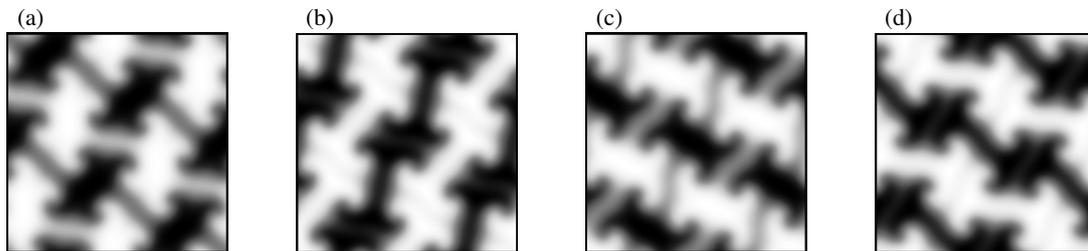


Abb. 10.8.: Schnappschüsse $\text{Re}(A)$ des reduzierten Modells Gl. (10.31) in 2D mit $\xi_1 = 0.8, \xi_2 = 1 + 2i, \xi_7 = 1, \xi_8 = 1.2$ und einer Systemlänge von $L_{x,y} = 90, l_0 = 1$. Es bildet sich ein komplexes Muster mit Ähnlichkeiten zu Spiralmustern, welches als Basis eine OSQ Dynamik enthält.

ähnlich zu RZC. Eine solche Kombination von langsamer, deterministischer Dynamik und schneller, unbestimmter Dynamik unterscheidet sich zu klassischen Benjamin-Feir Resonanz (BFR) Phänomenen nicht erhaltener Ordnungsparametergleichungen [269]. Dies ist auch für größere Systeme zu beobachten. In Abb. 10.9 (e)-(h) wurde die Systemlänge verdoppelt und es bildet sich wieder eine langwellige, langsame Dynamik mit überlagerter chaotischer Dynamik aus.

Koexistenz von Lösungstypen — Sowohl das reduzierte, als auch das volle Modell enthält eine Koexistenz verschiedener Parameter für hinreichend große Systeme. Für Parameter Gl. (10.47) im LW Bereich des reduzierten Modells und zusätzlichen Beiträgen ξ_3 und ξ_5 sind in Abb. 10.12 Schnappschüsse für $\text{Re}(A)$ der zweidimensionalen Gl. (10.23) zu sehen. Die erste Spalte links (Abb. 10.12 (a) und (e)) zeigt jeweils die Startkonfiguration zur Zeit $t = 0$. In der oberen Reihe wurde Rauschen, in der unteren Reihe eine Wellenform mit $m = 8$ Wellen gewählt. Startet man mit einer Lösung nahe an einer LW-Lösung des Systems, so bildet sich eine LW aus. Für eine zufällige Startbedingung bildet sich jeweils eine komplexe Dynamik aus. Der Einfluss der Parameter $\xi_{3,5}$ sorgt dabei dafür,

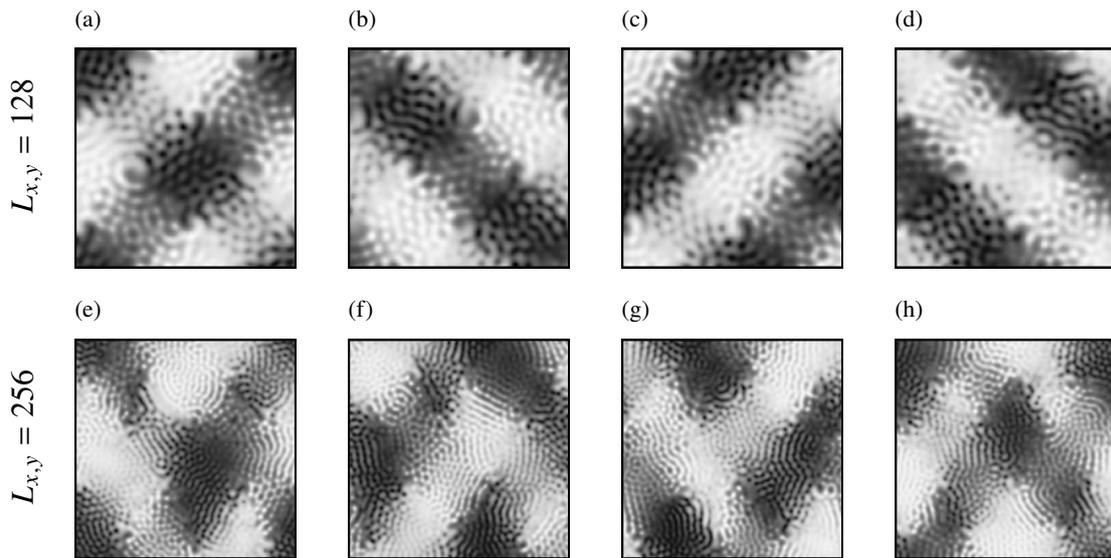


Abb. 10.9.: Schnappschüsse $\text{Re}(A)$ des reduzierten Modells Gl. (10.31) in 2D mit $\xi_1 = 0.5$, $\xi_2 = 1 - 2.75i$, $\xi_7 = \xi_8 = 1 + 2.75i$. Jede Zeile hat verschiedene Systemlängen: (obere Reihe) $L_{x,y} = 128$, $l_0 = 18$, (untere Reihe) $L_{x,y} = 256$, $l_0 = 36$.

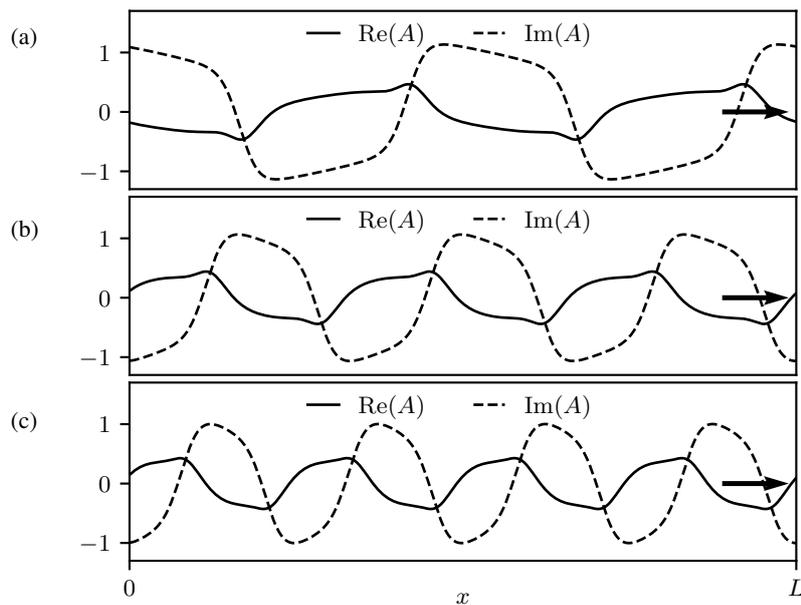


Abb. 10.10.: Ergebnisse der eindimensionalen Gl. (10.23) mit Parametern entsprechend dem LW Regime $\xi_1 = 0.8$, $\xi_2 = 1 + 2i$, $\xi_7 = \xi_8 = 1$ des reduzierten Modells mit zusätzlich $\xi_{10} = -i$ bei einer Systemlänge von $L = 90$, $l_0 = 12$. Obwohl der zusätzliche Beitrag von ξ_{10} nicht im reduzierten Modell Gl. (10.31) enthalten ist, liefern die Ergebnisse der analytischen Überlegungen eine Vorhersage für das Basismuster der LW, welches durch den zusätzlichen Beitrag nur abgeändert, aber nicht abgelöst wird.

dass sich die charakteristische Länge der Lösungen ändert. So ist für $\xi_{3,5} = 0.3 + 0.1i$ das System vollständig phasensepariert, wobei sich am Rand der Phase mit hoher Dichte eine Unterstruktur ausbildet. Für $\xi_{3,5} = 0$ ist in Abb. 10.12 (b) ein zeitlich dynamisches Muster mit charakteristischer Länge kleiner als die Systemlänge zu erkennen.

Veränderung der Muster des reduzierten Systems durch Hinzunehmen zusätzlicher Terme — Um einen Einblick in mögliche Dynamiken der vollen Ordnungsgleichung Gl. (10.23) zu erhalten, werden nun ausgewählte Variationen der reduzierten Form analysiert. Dabei wird untersucht, wie sich das Verhalten durch Hinzunehmen weiterer Terme des reduzierten Modells aus dem Parameterraum der vollen Gl. (10.23) verändert oder sogar abgelöst wird.

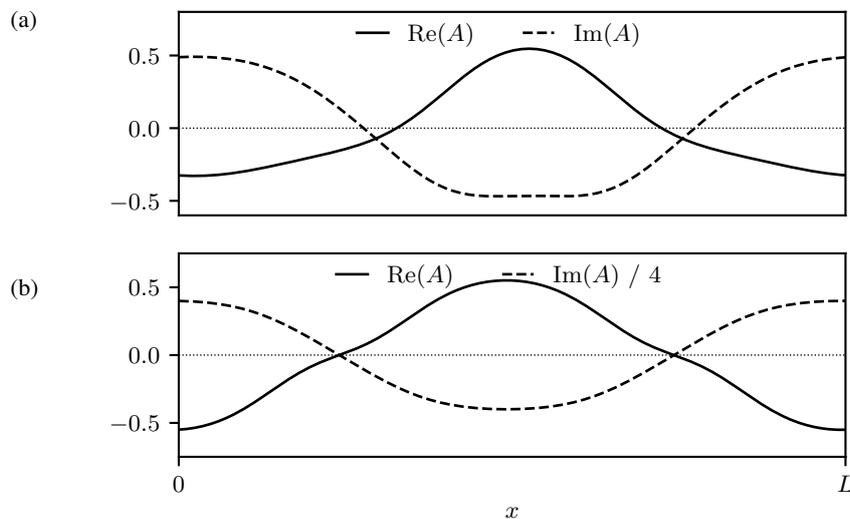


Abb. 10.11.: Stationäre Muster der vollen Gl. (10.23) für $L = 15$ mit $\xi_1 = 0.8, \xi_2 = 1 + 2i, \xi_7 = \xi_8 = 1$ (siehe Abb. 10.4) und zusätzlich (a) $\xi_{4,5} = 1 + i$ bzw. (b) $\xi_{9,10} = 1 + i$. Die zusätzlichen Terme für $\xi_{4,5}$ und $\xi_{9,10}$ sorgen durch nichtlineare Effekte für ein Einfrieren der dynamischen SW Lösung.

In Abb. 10.3 wurde mit $\xi_7 = \xi_8$ gezeigt, dass die analytisch vorhergesagten LW Lösungen mit einer Mode stabil sind. Die Abbildung Abb. 10.10 zeigt das resultierende, stabile Lösungsprofil für den selben Parametersatz, jedoch unter Hinzunahme von $\xi_{10} = -i$. Man erkennt, dass das sich einstellende stabile Profil nicht mehr einem reinen LW Profil wie im Fall der reduzierten Gleichung entspricht. Die Form der Kurven ist anharmonisch und es sind mehrere Wellenlängen am Lösungsbild beteiligt. Eine solche Form von anharmonischen LW Lösungen ist bereits vom MiMo bekannt, welches auch Terme $\xi_{4,9,10}^{(m)} \neq 0$ über das reduzierte Modell Gl. (10.31) hinaus enthält und in diesem Fall die Anharmonizität der LW hervorrufen. Auch im Fall $\xi_{10} = i \neq 0$ findet man wie im reduzierten Modell eine Multistabilität verschiedener Wellenlängen.

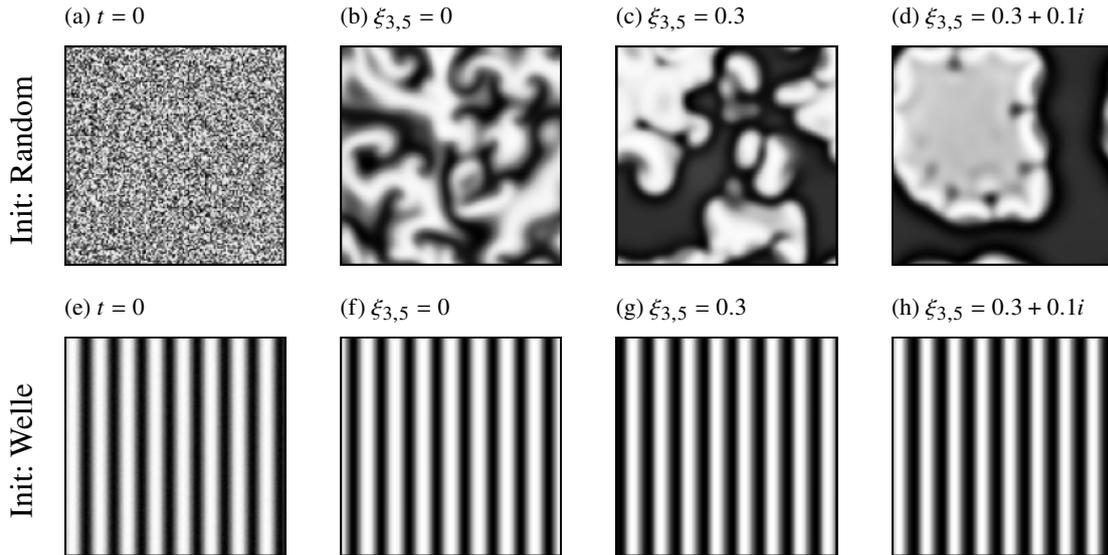


Abb. 10.12.: Schnappschüsse von $\text{Re}(A)$ der zweidimensionalen Gl. (10.23) mit $\xi_1 = 0.8, \xi_2 = 1 + 2i, \xi_7 = \xi_8 = 1$ und einer Systemlänge von $L = 128$. Das linke Bild zeigt jeweils die Startbedingung mit (obere Reihe) Rauschen oder (untere Reihe) einer Welle mit $m = 8$ Wellenzügen. Die weiteren Bilder zeigen das Muster zu einem späteren Zeitpunkt mit verschiedenen Werten für $\xi_{3,5}$. Man erkennt, dass die Entwicklung verschiedener Muster möglich ist, wobei die Startbedingung die dynamische Bildung beeinflusst.

Ein Beispiel für das Ablösen der im reduzierten Modell gefundenen Lösungstypen ist in Abb. 10.11 (a) gezeigt. Dort wurden für die eindimensionale Gl. (10.23) die Parameter identisch zu Abb. 10.4 mit $L = 15$ gewählt, wobei die Terme $\xi_{4,5} = 1 + i$ hinzukommen. Diese Parameter liefern quadratische Beiträge in der Ordnungsparametergleichung und sorgen somit für eine gebrochene $\pm A$ -Symmetrie. Im reduzierten Modell zeigt sich für diese Systemlänge eine SW. Diese wird durch die Beiträge in Abb. 10.11 von einem stationären Muster abgelöst und das Muster friert ein. Dabei ist zu bemerken, dass bei der Wahl eines kleineren Kontrollparameters (und somit ζ_1) bei angepasster Systemlänge L , um die Anzahl l_0 gleichzuhalten, der Effekt des Einfrierens aufgelöst wird und das Muster wieder zu oszillieren beginnt. Der Effekt des Einfrierens ist somit durch die nichtlineare Frequenzdispersion hervorgerufen. Auch ist er nicht auf Beiträge, welche die $\pm A$ Symmetrie brechen, beschränkt. In Abb. 10.11 (b) tritt der Übergang zu stationären Lösungstypen auch für $\xi_{4,5} = 0$, jedoch mit $\xi_{9,10} = 1 + i$ auf.

Weitere Lösungstypen der vollen Gl. (10.23) — In Abb. 10.13 ist zunächst der zeitliche Verlauf von $\text{Re}(A)$ der eindimensionalen Gl. (10.23) gezeigt, bei dem die Parameter entsprechend der klassischen CH-Gleichung mit $\xi_1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{4}i, \xi_2 = 1, \xi_4 = -\frac{1}{4}, \xi_{7,8} = \frac{1}{4}, \xi_{9,10} = \frac{1}{8}$ gewählt sind, wobei der zusätzliche Imaginäranteil $\chi_1 = \frac{1}{4}i$ verwendet wird. In Abb. 10.13(a)

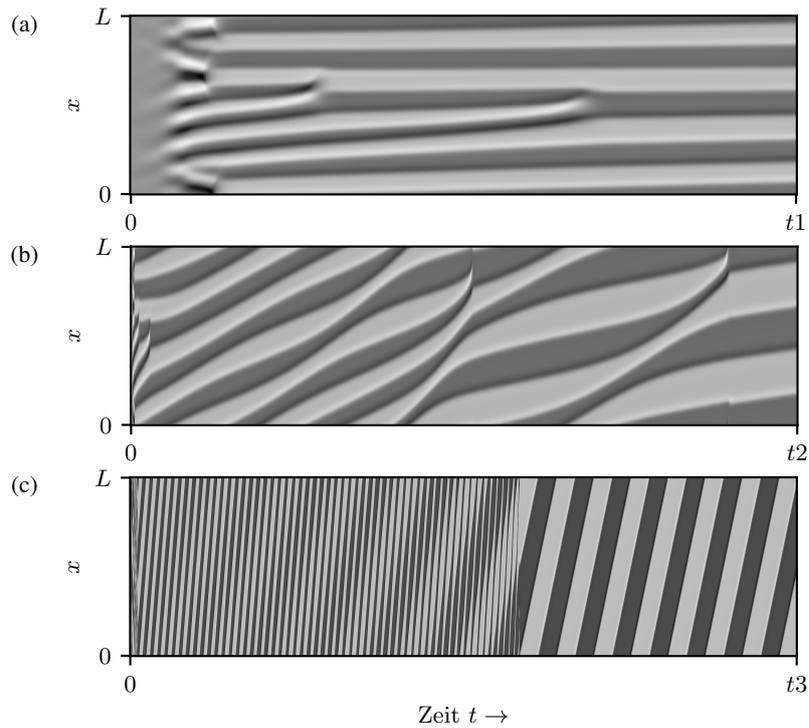


Abb. 10.13.: Zeitlicher Verlauf von $\text{Re}(A)$ der vollen Gl. (10.23) in einer Dimension mit $\xi_1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{4}i$, $\xi_2 = 1$, $\xi_4 = -\frac{1}{4}$, $\xi_{7,8} = \frac{1}{4}$, $\xi_{9,10} = \frac{1}{8}$ in einem System mit Länge $L = 90$ und Rauschen als Startbedingung. Gezeigt sind verschiedene Ausschnitte mit $t_2 = 24t_1$ und $t_3 = 2 \cdot 10^3 t_1$.

ist der Beginn der Simulation dargestellt, bei dem mit einem Rauschen als Anfangsbedingung gestartet wurde, wobei nach rechts die Zeit und nach oben der Ort aufgetragen ist. Man erkennt, dass sich aus dem anfänglichen Rauschen eine Vergrößerung der Struktur ausbildet. Die gesamte Struktur scheint hierbei noch stationär zu sein. In Abb. 10.13(b) ist die selbe Simulation, jedoch für einen größeren Bereich $0 < t < t_2$ mit $t_2 \gg t_1$ gezeigt. Die anfängliche, stationäre Vergrößerungs-Dynamik ist in Abb. 10.13(b) noch für kleine t zu erkennen, wird jedoch für mittlere Zeiten von einer dynamischen Vergrößerungsdynamik abgelöst. In Abb. 10.13(c) ist ein noch größerer Zeitbereich abgebildet. Nachdem die Systemdynamik vollständig phasensepariert ist, bildet sich eine laufende Struktur mit konstantem Profil und Geschwindigkeit aus. Das finale Profil dieser Simulation ist in Abb. 10.14(a) zu sehen. Es gleicht dem von der klassischen CH Gleichung bekannten tanh Profil, besitzt jedoch asymmetrische Überschwinger an den Flanken.

Durch Erhöhen des imaginären Beitrags χ_1 auf $\chi_1 = 0.5$, wird die wandernde Domänenlösung instabil gegenüber einer zeitlich komplexen Dynamik. Anhand des örtlichen Amplitudenverlaufs in Abb. 10.14 (b) bzw. des Betrags des Fourierpektrums von $\text{Re}(A)$ in Abb. 10.15 (b) wird ersichtlich, dass sich keine bevorzugte Wellenlänge einstellt, da der gewählte Parame-

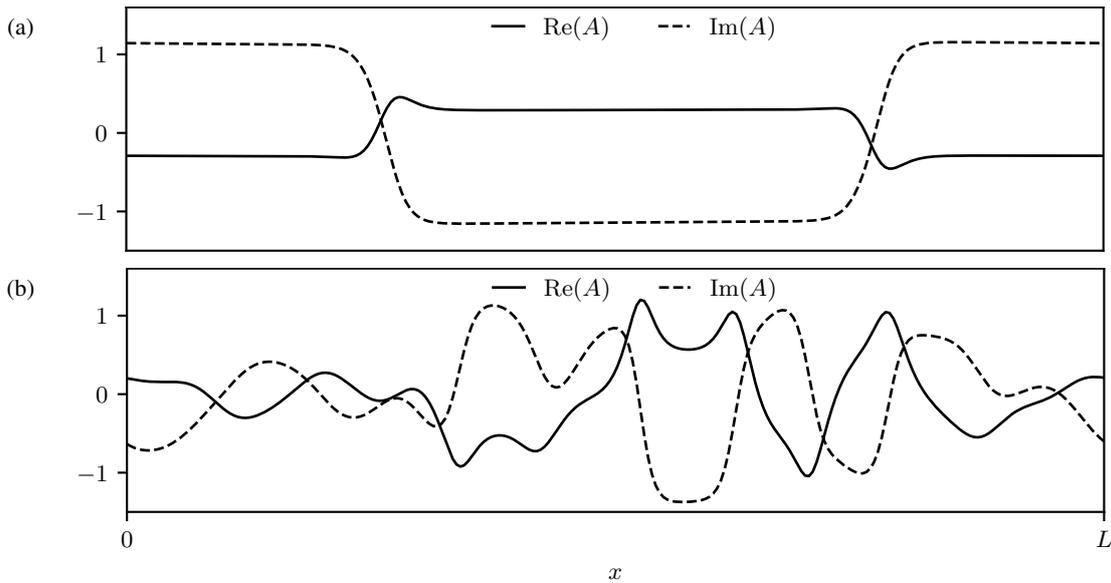


Abb. 10.14.: Schnappschüsse von $\text{Re}(A)$ der vollen Gl. (10.23) in einer Dimension mit $\zeta_1 = \frac{1}{2}, \xi_2 = 1, \xi_4 = -\frac{1}{4}, \xi_{7,8} = \frac{1}{4}, \xi_{9,10} = \frac{1}{8}$ in einem System mit Länge $L = 90$ und Rauschen als Startbedingung. In (a) ist $\chi_1 = \frac{1}{4}$ wie in Abb. 10.13 und man erkennt, dass sich eine separierte Lösung ähnlich wie bei der stationären CH Gleichung einstellt, welche allerdings in eine Richtung läuft. Wählt man nur den Imaginärteil des linearen Terms $\chi_1 = \frac{1}{2}$, so stellt sich eine chaotische Lösung ein.

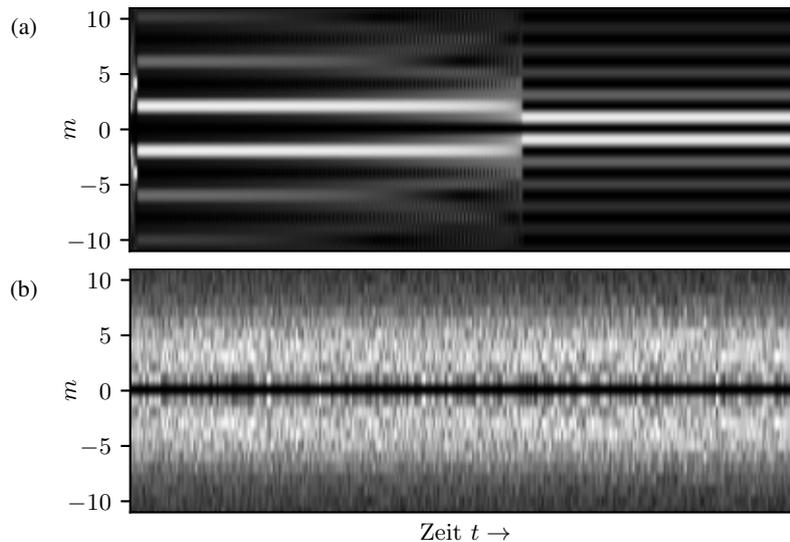


Abb. 10.15.: Zeitlicher Verlauf des Absolutbetrags der Fourieramplitude $|\mathcal{F}(\text{Re}(A))|$ der vollen Gl. (10.23) in einer Dimension mit $\zeta_1 = \frac{1}{2}, \xi_2 = 1, \xi_4 = -\frac{1}{4}, \xi_{7,8} = \frac{1}{4}, \xi_{9,10} = \frac{1}{8}$ in einem System mit Länge $L = 90$ und Rauschen als Startbedingung. In (a) ist $\chi_1 = \frac{1}{4}i$ wie in Abb. 10.13 sowie Abb. 10.14(a) und man erkennt das Einschwingen einer stabilen Einhüllenden des Musters. In (b) ist $\chi_1 = \frac{1}{2}$ zugehörig zu Abb. 10.14(b). Man erkennt eine zeitlich komplexe Dynamik.

tersatz nur lineare imaginär Anteile enthält. Daher ist für jede Mode ein Ansatz ähnlich zu Gl. (10.32) möglich. Die nichtlineare Kopplung in Gl. (10.23) sorgt dafür, dass die linearen Moden nichtlinear interagieren und komplexe Raum-Zeit-Lösungen möglich werden, was durch eine Einmoden Approximation oder durch das Vernachlässigen von nichtlinearen Kopplungen unterdrückt werden könnte.

10.8. Diskussion und Ausblick

In diesem Abschnitt wurde die Methodik der Störungsentwicklung zur Bestimmung der komplexen Ginzburg-Landau-Gleichung für III_o Systeme [65, 269] für den Fall der Typ II_o^c Übergänge der GTOPS, erweitert. Hierfür wurde das GTOPS System unter der Annahme einer superkritischen, oszillatorischen Bifurkation nach dem Kleinheitsparameter ε entwickelt. Bei dem vorgeschlagenen Reduktionsschema ist essentiell, dass die Typ II_o^c typischen Eigenschaften eines endlichen, überkritischen Modenbandes berücksichtigt werden. Führt man eine Entwicklung an einer kritischen Mode q_c oder Frequenz ω_c durch, wird das lineare Problem GTOPS in führender Ordnung nicht mehr korrekt reproduziert. Das Resultat des vorgestellten Schemas, angewandt auf die GTOPS, ist schließlich die generische Ordnungsgleichung Gl. (10.23) für gekoppelte Transportgleichungen der Form der GTOPS. Die Vorfaktoren der verschiedenen Terme der OPG sind durch die Entwicklung mit den Systemparametern der GTOPS verknüpfbar. Im Gegensatz zu den GTOPS auf Ebene der Transportgleichungen, welche sowohl stationäre als auch oszillatorische Übergänge beinhalten, liefert die OPG die generische Dynamik oszillatorischer von Phasenübergängen erhaltener gekoppelter Felder.

Auf der Ebene der OPG wurde der Einfluss der nichtlinearen Kopplungen in Gl. (9.4) diskutiert. Begrenzt man die Kopplung auf lineare Terme wie in [199–202, 205], so reduziert sich die Anzahl möglicher Terme der OPG und man findet eine Beschränkung der Gleichungsstruktur wieder (siehe Gl. (10.29)). Wie in den numerischen Betrachtungen gezeigt, bedeutet dies auch eine mögliche Reduktion des Lösungsraums, da z.B. $\xi_7 \neq \xi_8$ nicht abgebildet werden können.

Bei der Identifikation möglicher Lösungszenarien der allgemeinen OPG für II_o^c Systeme zeigt sich ein enormes Spektrum verschiedener dynamischer Strukturen.

Um eine erste Kategorisierung und Einordnung grundlegender Lösungstypen zu erhalten, wurde ein reduziertes Modell Gl. (10.31) mit $\xi_{4,5,6,9,10} = 0$ eingeführt. Es entspricht der Beschreibung einer erhaltenen Ginzburg-Landau Gleichung wie in [271], allerdings mit ξ_7 unabhängig von ξ_8 wählbar im Unterschied zu [271]. Dieses reduzierte Modell

ermöglicht eine analytische Abschätzungen von grundlegenden Lösungstypen. Anhand des reduzierten Modells wurden verschiedene Lösungsszenarien analytisch mithilfe einer Einmoden-Approximation bestimmt, bei dem sowohl laufende Wellen, stehende Wellen als auch schwankende, oszillierende Quadrate identifiziert wurden. Das Parametergebiet der superkritisch bifurkierenden, anwachsenden Störungen der getesteten Lösungen aus dem homogenen Grundzustand ist dabei begrenzt durch $\zeta_8 > |\zeta_7/2|$. In diesem Bereich enthält das Phasendiagramm ein Gebiet mit laufenden Wellen, welches für $\zeta_8 > 3\zeta_7/2$ von stehenden Wellen bzw. für endliche Anteile von χ_7 auch von schwankenden, oszillierenden Quadraten abgelöst wird.

Die analytisch bestimmten Lösungen wurden auch numerisch für kleine Systeme oder wenige, überkritische Moden verifiziert. Für Simulationen mit nur einer überkritischen Mode wurden sowohl die multistabilen LW Lösungen, als auch SW und OSQ Lösungen, entsprechend des vorhergesagten Phasenraumdiagramms gefunden. Die resultierenden Lösungen hängen dabei von der Anzahl überkritischer, wechselwirkenden Moden ab. Wenn mehrere Moden im dynamischen Prozess beteiligt sind, werden die gefundenen Muster komplexer. Dies kann zu einer Veränderung des Amplitudenprofils führen, bei der die Grundstruktur weiterhin der analytischen Einmoden-Lösung ähnelt, oder eine komplette Ablösung durch neue Lösungsszenarien hervorrufen. Die Muster, die bei zunehmender Systemgröße auftreten, sind vielfältig und man findet eine Vielzahl interessanter Muster wie zum Beispiel ein Paar rotierender Spiralen.

Zu dem reduzierten Modell Gl. (10.31) wurden weitere Terme der vollen OPG hinzugekommen und die Veränderung der zuvor identifizierten Lösungen des Phasendiagramms beobachtet. Hierbei zeigt sich, dass die analytisch bestimmten Lösungen für manche Parameter nur eine Veränderung des Amplitudenprofils, das grundlegende Muster jedoch über das berechnete reduzierte Regime hinaus bestehen bleibt. Beispielsweise die Parameterkombination $\xi_7 = \xi_8 = 1$ liefert laufende Wellenlösungen im reduzierten Modell. Durch Hinzunahme von Beiträgen von $\xi_{4,5,9,10}$ bleiben die laufenden Wellen weiter bestehen, das Amplitudenprofil wird jedoch anharmonisch.

Diese Ergebnisse zeigen, dass das analytisch bestimmte Phasendiagramm als Ausgangspunkt für Untersuchungen erweiterter Szenarien dienen kann, obwohl es nur Einmoden-Lösungen berücksichtigt und nur eine reduzierte Anzahl an Parametern enthält. So können durch Hinzukommen zusätzlicher Moden oder Parametern in manchen Situationen die grundlegenden Muster des Phasendiagrammes weiter bestehen und es kommt lediglich zu einer Veränderung der Form der Muster.

Neben den im reduzierten Modell gefundenen Lösungstypen können durch den Einfluss der

Terme $\xi_{4,5,9,10}$ auch neue Muster hinzukommen, wie zum Beispiel ausgecoarste Cluster mit interner Dynamik oder das Einfrieren von dynamischen Strukturen. Die OPG Gl. (10.23) für Typ II_o sind dabei auf den Bereich der linear oszillatorischen Lösungen beschränkt. Dennoch kann die OPG für Typ II_o^c Systeme stationäre Lösungstypen aufweisen. Diese sind durch nichtlineare Effekte bedingt und gehen in oszillatorische Lösungen über, wenn man den Einfluss der linearen Beiträge erhöht, indem man ζ_1 vergrößert. Dieses Verhalten ist auch dann festzustellen, wenn man die Systemlänge L dementsprechend anpasst, dass die Anzahl der überkritischen Moden gleich bleibt.

In [271] wurde bereits ein Spezialfall der generischen OPG untersucht. Dort wurde beschrieben, dass ein Parameterbereich mit RZC existiert, bei dem die auftretenden Moden eine Instabilität gegen Störungen mit Anteilen aller möglichen Wellenlängen aufzeigt, ähnlich zur BFR [269, 273, 274]. Das hier vorgestellte, reduzierte Modell der OPG wurde in dem Bereich untersucht, für welchen in [271] RZC vorhergesagt wurde. Dieser Parameterbereich ergibt sich für $\zeta_7 = \zeta_8$ mit hinreichend negativem Produkt der Imaginärteile $\chi_2\chi_7$. Die gefundene Dynamik ist dabei zusammengesetzt aus einer langwelligen, geordneten Dynamik mit einer OSQ Struktur, auf welcher kurzwellige Überlagerungen, ähnlich zu RZC, existieren. Diese Kombination aus langwelliger, langsamer Dynamik und kurzwelliger, schneller Dynamik ist unterschiedlich zu RZC der klassischen Ginzburg-Landau Gleichung ohne Erhaltung [269].

Das in diesem Kapitel beschriebene Reduktionsschema nicht nur auf oszillatorische Gleichungen oder den Fall von $N = 2$ gekoppelten Gleichungen wie die GTOPS beschränkt. Aufbauend auf den hier gefundenen Erkenntnissen können somit auch andere Systeme mithilfe des Reduktionsschemas auf eine allgemeine OPG in der Nähe der Instabilität des homogenen Grundzustands erfolgen, wie zum Beispiel drei oder mehr gekoppelte Felder. Durch die systematische Reduktion ist es zudem möglich, explizite Systeme mit Erhaltungseigenschaft auf die allgemeine OPG zurückzuführen. Ein Beispiel dieser Prozedur wird in Abschnitt 12 gezeigt.

11. Weitere Anwendungen des Reduktionsschemas

11.1. Beschreibung stationärer Übergänge der GTOPS

Wie bereits in Abschnitt 7.1.1 beschrieben, wurde die klassische CH Gleichung ursprünglich für die Beschreibung von Systemen im thermischen Gleichgewicht eingeführt. Erst kürzlich wurde gezeigt, dass sie auch für aktive-Materie Systeme fern vom thermischen Gleichgewicht die beschreibende Gleichung ist [64, 196]. Auch linear gekoppelte CH Gleichungen wurden im stationären Bereich untersucht [199].

In diesem Abschnitt wird gezeigt, wie die in Abschnitt 10 für Π_o beschriebene Methodik auf den stationären Fall der GTOPS angewandt werden kann und die zugehörige OPG für Typ Π_s^c Übergänge erhält. Zur Abgrenzung der Parameter des oszillatorischen Falls werden Parameter, die einen stationären Übergang beschreiben, mit einem Überstrich ($\bar{\cdot}$) gekennzeichnet. Stationäre Übergänge sind durch einen positiven Radikanden R bestimmt (siehe Abschnitt 9 und die Definition Gl. (9.10)) und man erhält

$$\lambda^\pm(q) \in \mathbb{R} \quad \text{für } R(q) > 0.$$

Mit der Definition

$$S := \sqrt{R}$$

wird somit Gl. (9.9b) für stationäre Übergänge beschrieben als

$$\bar{\lambda}^\pm(q) = \frac{q^2}{2} [\alpha_1 + \beta_1 - q^2(\alpha_2 + \beta_2) \pm S], \quad (11.1a)$$

$$:= q^2 \bar{\sigma}^\pm. \quad (11.1b)$$

Die Eigenvektoren im stationären Fall sind

$$\bar{\mathbf{e}} = \begin{pmatrix} 1 \\ \bar{e}^\pm \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad \bar{e}^\pm = \frac{-\alpha_1 + \beta_1 + q^2(\alpha_2 - \beta_2) \pm S}{2(K_1 - q^2 K_2)}, \quad (11.2a)$$

$$\bar{\mathbf{f}} = \begin{pmatrix} 1 \\ \bar{f}^\pm \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad \bar{f}^\pm = \frac{-\alpha_1 + \beta_1 + q^2(\alpha_2 - \beta_2) \pm S}{2(L_1 - q^2 L_2)}. \quad (11.2b)$$

Die weitere Vorgehensweise zur Ordnungsparametergleichung erfolgt analog zu den oszillatorischen Überlegungen in Abschnitt 10. Hierfür wird zunächst der Eigenwert nach kleinen Wellenzahlen q entwickelt. Dies liefert

$$\begin{aligned} \bar{\sigma}^\pm &= \bar{\sigma}_0^\pm + q^2 \bar{\sigma}_2^\pm + \mathcal{O}(q^4), \\ \bar{\mathbf{e}}^\pm &= \begin{pmatrix} 1 \\ \bar{e}_0^\pm \end{pmatrix} + q^2 \begin{pmatrix} 0 \\ \bar{e}_2^\pm \end{pmatrix} + \mathcal{O}(q^4), \\ \bar{\mathbf{f}}^\pm &= \begin{pmatrix} 1 \\ \bar{f}_0^\pm \end{pmatrix} + q^2 \begin{pmatrix} 0 \\ \bar{f}_2^\pm \end{pmatrix} + \mathcal{O}(q^4), \end{aligned}$$

mit

$$\bar{\sigma}_0^\pm = \frac{1}{2}(\alpha_1 + \beta_1 \pm S_0), \quad (11.4a)$$

$$\bar{\sigma}_2^\pm = \frac{1}{2}(-\alpha_2 - \beta_2 \pm S_2), \quad (11.4b)$$

$$\bar{e}_0^\pm = \frac{-\alpha_1 + \beta_1 \pm S_0}{2K_1}, \quad (11.4c)$$

$$\bar{e}_2^\pm = \frac{2K_2 \bar{e}_0^\pm \pm S_2 + \alpha_2 - \beta_2}{2K_1}, \quad (11.4d)$$

$$\bar{f}_0^\pm = \frac{K_1}{L_1} \bar{e}_0^\pm, \quad (11.4e)$$

$$\bar{f}_2^\pm = \frac{K_1}{L_1} \bar{e}_2^\pm \quad (11.4f)$$

und

$$S_0 = \sqrt{4K_1 L_1 + (\alpha_1 - \beta_1)^2}, \quad (11.5a)$$

$$S_2 = \frac{-4K_1 L_2 - 4K_2 L_1 - 2\alpha_1 \alpha_2 + 2\alpha_1 \beta_2 + 2\alpha_2 \beta_1 - 2\beta_1 c b_2}{2S_0}. \quad (11.5b)$$

Für die Kontrollparameterwahl werden wieder α_1 und β_1 als Abhängigkeiten für die

Entwicklung nach dem Kleinheitsparameter gewählt. Eine Auswertung analog zu Abschnitt 10.3 liefert für die Bedingung am kritischen Punkt die Beziehung

$$\bar{\beta}_{1,0} = \frac{K_1 L_1}{\bar{\alpha}_{1,0}}. \quad (11.6)$$

Hierbei ist anzumerken, dass die Auswertung des linearen Problems mit der kritischen Beziehung Gl. (11.6) zeigt, dass es nur dann einen stationären, superkritischen Übergang geben kann, wenn die Bedingung $\text{sign}(K_1 L_1 + (\bar{\alpha}_{1,0})^2) \text{sign}(\bar{\alpha}_{1,0}) < 0$ gilt. Die kritischen Bedingungen für die Parameter $\bar{\beta}_{1,0}$ und $\bar{\alpha}_{1,0}$ unterscheiden sich vom oszillatorischen Fall und erhalten deswegen ebenfalls einen Überstrich. Bei der Wahl des Ansatzes für \mathbf{w} bei einem stationären Übergang wird nun der typische Fall angenommen, dass der Eigenwert mit größtem Realteil nicht entartet ist. Für diesen Fall ist für Gl. (10.1) ein adäquater Ansatz durch

$$\mathbf{w} = \sum_{\mathbf{q}} \bar{\mathbf{e}}^+ F_{\mathbf{q}}(t) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}$$

gegeben. Analog zu Abschnitt 10 kann man den Ansatz durch die Entwicklung der Eigenvektoren umformen und erhält

$$\mathbf{w}(\mathbf{r}, t) = \bar{\mathbf{Y}}^+ F(\mathbf{r}, t)$$

mit dem Eigenvektor $\bar{\mathbf{Y}}$ und zugehörigem Linkseigenvektor $\bar{\mathbf{Z}}$ in Operatorschreibweise

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{Y}}^+ &= \sum_{n=0}^1 \bar{\mathbf{e}}_{2n}^+ \nabla^{2n}, \\ \bar{\mathbf{Z}}^+ &= \sum_{n=0}^1 \bar{\mathbf{f}}_{2n}^+ \nabla^{2n}. \end{aligned}$$

Dieser Ansatz wird in die Ausgangsgleichung Gl. (10.1) eingesetzt und mit dem Linkseigenvektor multipliziert. Eine anschließende Entwicklung nach dem Kleinheitsparameter ε analog zu Abschnitt 10 und den entwickelten Parameterbeziehungen

$$\begin{aligned} \bar{f}_{0,0}^+ &= -\frac{K_1}{\bar{\beta}_{1,0}}, \\ \bar{e}_{0,0}^+ &= -\frac{L_1}{\bar{\beta}_{1,0}}, \\ \bar{e}_{0,0}^- &= \frac{\bar{\beta}_{1,0}}{K_1}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \bar{f}_{0,2}^+ &= -\frac{K_1(\alpha_{1,2} - \beta_{1,2})}{K_1 L_1 + \bar{\beta}_{1,0}^2}, \\
 \bar{e}_{0,2}^+ &= -\frac{L_1(\alpha_{1,2} - \beta_{1,2})}{K_1 L_1 + \bar{\beta}_{1,0}^2}, \\
 \bar{e}_{0,2}^- &= -\frac{(\alpha_{1,2} - \beta_{1,2}) \bar{\beta}_{1,0}^2}{K_1 (K_1 L_1 + \bar{\beta}_{1,0}^2)}, \\
 \bar{\sigma}_{0,0}^+ &= 0, \\
 \bar{\sigma}_{0,2}^+ &= \frac{K_1 L_1 \beta_{1,2} + \alpha_{1,2} \bar{\beta}_{1,0}^2}{K_1 L_1 + \bar{\beta}_{1,0}^2}, \\
 \bar{\sigma}_{2,0}^+ &= -\frac{K_1 L_1 \beta_2 - K_1 L_2 \bar{\beta}_{1,0} - K_2 L_1 \bar{\beta}_{1,0} + \alpha_2 \bar{\beta}_{1,0}^2}{K_1 L_1 + \bar{\beta}_{1,0}^2}, \\
 \bar{\tau}_{0,0} &= \frac{\bar{\beta}_{1,0}^2}{K_1 L_1 + \bar{\beta}_{1,0}^2}, \\
 \bar{\tau}_{0,2} &= -\frac{2 \bar{\beta}_{1,0}^3 (\alpha_{1,2} - \beta_{1,2}) K_1 L_1}{(K_1 L_1 + \bar{\beta}_{1,0}^2)^3}
 \end{aligned}$$

liefert schließlich nach Resubstitution der Entwicklung die Ordnungsgleichung für den stationären Fall

$$\partial_t F = -\Delta \left(\eta_1 F + \eta_2 \Delta F + \eta_3 F^2 - \eta_4 F^3 \right). \quad (11.8)$$

Die reellen Vorfaktoren η_i

$$\begin{aligned}
 \eta'_1 &= \varepsilon \bar{\sigma}_{0,2}^+, \\
 \eta'_2 &= \bar{\sigma}_{2,0}^+, \\
 \eta'_3 &= 2 \left(\alpha_3 \bar{e}_{0,0}^+ K_3 + \bar{f}_{0,0}^+ L_3 + \bar{e}_{0,0}^+ {}^2 \bar{f}_{0,0}^+ \beta_3 \right) \\
 &\quad + \bar{e}_{0,0}^+ \left(\alpha_6 + K_6 + \bar{f}_{0,0}^+ L_6 + \bar{f}_{0,0}^+ \beta_6 \right), \\
 \eta'_4 &= 4 \left[\alpha_4 + \bar{e}_{0,0}^+ {}^3 K_4 + \bar{f}_{0,0}^+ L_4 + \bar{e}_{0,0}^+ {}^3 \bar{f}_{0,0}^+ \beta_4 \right. \\
 &\quad \left. + \bar{e}_{0,0}^+ {}^2 \left(2K_5 + 2\bar{f}_{0,0}^+ \beta_5 + \alpha_7 + \bar{f}_{0,0}^+ L_7 \right) / 3 \right. \\
 &\quad \left. + \bar{e}_{0,0}^+ \left(2\alpha_5 + 2\bar{f}_{0,0}^+ L_5 + K_7 + \bar{f}_{0,0}^+ \beta_7 \right) / 3 \right],
 \end{aligned}$$

mit $\eta'_i = \frac{\eta_i}{\bar{\tau}_{0,0}}$ geben die Beziehungen der Ordnungsgleichung zum ursprünglichen

Gleichungssystem der GTOPS mit den Parametern $\alpha_i, \beta_i, K_i, L_i$ an. An der Form von Gl. (11.8) sieht man, dass diese der klassischen CH Gleichung mit quadratischen Termen entspricht.

12. Aktive Teilchen mit Kopplung durch Botenstoffe

12.1. Einleitung

In der Natur spielt Kommunikation zwischen verschiedenen Spezies auf unterschiedlichen Gebieten wie z. B. bei der Futtersuche, der Fortpflanzung, dem Erkennen von Feinden oder auch als Signalgebung für eine koordinierte Bewegung eine wichtige Rolle [180, 275–280]. Die Natur hat dabei verschiedenste Arten der Kommunikation hervorgebracht [276], welche zum Beispiel visuell basiert sind [277, 281], Vibrationen und Schwingungen ausnutzen [280] oder auch Boten- und Duftstoffen verwenden [275, 278, 282–284]. Betrachtet man Signalgebung auf sehr kleinen Längenskalen, so ist die Art der Informationsübertragung und Verarbeitung beschränkt, da komplexe Rezeptoren mit abnehmender Größe immer schwerer zu realisieren sind. Hier findet man häufig chemische Botenstoffe als Signalträger, welche von Rezeptoren detektiert werden. Somit kann die Umgebung analysiert werden oder auch Kommunikation stattfinden [223–225]. Beispiele für solche chemotaktisch wechselwirkenden Teilchen sind Bakterien wie *Escheria coli* [223, 224] oder auch der einzellige Schleimpilz *Dictyostelium discoideum* [225].

In diesem Kapitel wird ein Kontinuum-Modell beschrieben, welches zwei erhaltene Spezies beschreibt, die durch ein Signalfeld wie z. B. einem lokal ausgeschütteten Botenstoff interagieren. Ein ähnliches Modell wurde bereits vor kurzem für eine einzelne Spezies mit Chemotaxis untersucht [196] und gezeigt, dass dort Phasenseparation im Nichtgleichgewicht auftritt. Das in diesem Abschnitt vorgestellte Modell soll im Fall mehrerer, gekoppelter Spezies als Anknüpfungspunkt zwischen einem angewandten, mikroskopisch motivierten Modell und der Ebene der allgemeinen GTOPS aus Abschnitt 9.2 dienen. Hierfür wird zunächst ein chemotaktisch gekoppeltes Modell eingeführt. Dieses enthält sogenannte Quorum sensing Terme, welche die Dynamik stabilisiert und *BLow-Ups* verhindern kann. Das Modell wird in Bezug auf die Übergangsgebiete nahe des Einsatzpunktes der homogenen Instabilität analysiert. Danach wird eine systematische Reduktion der beiden Spezi-

es mit jeweiligem Botenstoff-Feld zur Ebene zweier gekoppelter, erhaltener, nichtlinearer Kontinuumsleichungen vollzogen. Dies erlaubt die Verknüpfung der mikroskopischen Parameter des chemotaktischen Modells mit den Kontinuumsleichungen aus Abschnitt 9.2 und schließlich der in Abschnitt 10 beschriebenen Ordnungsparametergleichung, womit ein anschließender Vergleich des selben Systems auf verschiedenen Ebenen der Reduktion durchgeführt wird. Anhand der Reduktion kann man anschließend Rückschlüsse auf den Einfluss der einzelnen Parameter, wie zum Beispiel der Dämpfungskonstanten, auf Ebene der Ordnungsparametergleichung ziehen.

12.2. Modell gekoppelter, chemotaktischer Spezies mit Quorum sensing

Die Thematik gekoppelter, erhaltener Signalgeber tauchte, wie bereits erwähnt, im Kontext der Strukturbildung bereits Ende der 80er Jahre auf. In einer Arbeit aus 1988 untersuchte Fromherz gekoppelte Ionenkanäle, wobei gezeigt wurde, dass eine nicht symmetrische Kopplung verschiedener erhaltener Spezies über ein Signalfeld einen oszillatorischen Übergang hervorruft. Die Thematik gekoppelter, erhaltener Systeme, welche über Transmitter kommunizieren, ist auch noch heute Bestandteil aktueller Forschung in verschiedenen Feldern wie zum Beispiel der Medizin oder auch der Biologie [206, 239, 240]. In [240] werden Makrophagen untersucht, welche mit Tumorzellen über eine Chemikalie wechselwirken. Dort wird zum einen ein Kontinuums-Modell verwendet, bei dem die Zellen durch ein Keller-Segel (KS)-Modell [220, 225, 227] beschrieben werden [240]. Auch wird in dieser Publikation auf Basis von linearer Stabilitätsanalysen der Parameterbereich der verschiedenen Phasen typisiert. Zudem werden dort Simulationen des Kontinuum-Modells durchgeführt, welche jedoch zur Bildung scharfer Spitzen in den Dichten neigen (engl. *Blow-Up*), was ein bekanntes Problem für solche Modelle ist [228, 240]. In [240] werden die Kontinuums-Modelle durch teilchenbasierte Simulationen ergänzt, bei denen die wechselwirkenden Teilchen einzeln aufgelöst werden, jedoch der Transmitter als Kontinuum behandelt wird. Da für die diskreten Teilchen eine Kontaktwechselwirkung enthalten ist, kann somit das divergente Verhalten der *Blow-Ups* verhindert werden [240]. In ähnlicher Weise wurden auch erst kürzlich gekoppelte Bakterien-Spezies behandelt [206, 207, 239, 241].

Es existieren auch erweiterte KS-Modelle, welche nichtlineare Zusammenhänge zwischen Teilchen und Transmitter-Dichte bzw. deren Produktionsraten enthalten [226, 228, 285–288]. Ein solches erweitertes Modell mit nichtlinearen Teilchendrift und Transmitter-

Produktion wurde erst in jüngeren Veröffentlichungen verwendet, um den stationären Phasenübergang der aktiven Phasenseparation zu untersuchen [196]. Die Erweiterungen sorgen für eine Stabilisierung der Kontinuums-Simulationen und können *Blow-Ups* verhindern.

In dieser Arbeit soll ein System, bestehend aus zwei erhaltenen Spezies $\rho(\mathbf{r},t)$ und $\psi(\mathbf{r},t)$ untersucht werden. Beide Spezies produzieren jeweils eine Chemikalie: $\rho(\mathbf{r},t) \rightarrow c(\mathbf{r},t)$, $\psi(\mathbf{r},t) \rightarrow d(\mathbf{r},t)$. Die Dichten gehorchen einer Entwicklungsdynamik in Form von gekoppelten KS-Gleichungen, wobei die lokale Teilchendichte die Transmitterproduktion beeinflusst. Die Berücksichtigung der Speziesdichte für die Transmitterproduktion kann zum Beispiel sogenannte Quorum sensing Effekte repräsentieren, welche in verschiedenen Zusammenhängen in der Natur vorkommen, bei denen Bakterien auf konzentrationsabhängige Wechselwirkungen mit anderen Bakterien reagieren, indem sie zum Beispiel die Transmitter-Produktion regulieren [289, 290]. In dem hier verwendeten Modell sättigt die Transmitter-Produktion an Orten mit hoher Teilchendichte gegen einen konstanten Wert [228, 285, 286]. Die gesamte Dynamik des erweiterten KS-Systems hat die Form

$$\partial_t \rho = D_\rho \nabla^2 \rho - s_c \nabla (\rho \nabla c) - s_d \nabla (\rho \nabla d) , \quad (12.1a)$$

$$\partial_t c = D_c \nabla^2 c + m_\rho \frac{\rho}{1 + a\rho} - \gamma_c c , \quad (12.1b)$$

$$\partial_t \psi = D_\psi \nabla^2 \psi - k_c \nabla (\psi \nabla c) - k_d \nabla (\psi \nabla d) , \quad (12.1c)$$

$$\partial_t d = D_d \nabla^2 d + m_\psi \frac{\psi}{1 + b\psi} - \gamma_d d . \quad (12.1d)$$

Die einzelnen Beiträge dieses gekoppelten Systems lassen sich wie folgt kategorisieren: Für die erhaltenen Dichten ρ und ψ sowie in den Transmitter-Dichten c und d gibt es jeweils einen Diffusionsterm mit Diffusionskonstanten $\propto D_\rho, D_\psi, D_c, D_d$. Die Teilchendichten weisen einen chemotaktischen Driftterm $\propto s_c, k_d$ für die Selbstkopplung und $\propto s_d, k_c$ für die Kreuzkopplung auf. Ein positives Vorzeichen bedeutet hierbei Anziehung der Teilchen durch das Transmitterfeld, während eine negative Kopplungskonstante eine abstoßende Wirkung aufweist. Die Signaldichten enthalten jeweils einen Zerfallsterm $\propto \gamma_c, \gamma_d$ sowie einen Produktionsterm $\propto m_\rho, m_\psi$, welche mit der jeweiligen Teilchendichte gekoppelt sind. Diese Sättigung spiegelt das Quorum sensing Verhalten wieder und kann über $a, b \rightarrow 0$ ausgeschaltet werden. Für endliche Werte von a und b konvergiert die Produktion der Chemikalien gegen einen Sättigungswert $\frac{m_\rho}{a}$ bzw. $\frac{m_\psi}{b}$. Für Systeme ohne Sättigung ist die Produktionsrate von c und d durch ρ und ψ nicht begrenzt. Dies führt häufig zu einem selbstverstärkenden Effekt, wobei an Orten hoher Teilchendichte die Transmitterproduktion ansteigt, welche für positive Kopplungskonstanten die Anhäufung der Teilchendichten begünstigt. Ist der Zerfall und die Diffusion nicht stark genug, kann dies zu Instabilitäten

und unphysikalischem Verhalten führen, welches durch Beiträge von a und b verhindert werden kann. Bei der späteren Reduktion auf die allgemeine Form der GTOPS bzw. bei der weiteren Reduktion auf die Ordnungsparametergleichung wird sichtbar, warum diese Terme die Dynamik stabilisieren.

12.3. Einsatzpunkt der Typ II_o Phasenseparation

Das Gleichungssystem (12.1) besitzt konstante, homogene Lösungen ρ_0, ψ_0, c_0, d_0 . Mit einem konstanten Ansatz

$$\begin{pmatrix} \rho(\mathbf{r}, t) \\ \psi(\mathbf{r}, t) \\ c(\mathbf{r}, t) \\ d(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho_0 \\ \psi_0 \\ c_0 \\ d_0 \end{pmatrix}$$

in Gl. (12.1) ergeben sich die Beziehungen für die konstanten Anteile der chemischen Botenstoffe c_0 und d_0 in Abhängigkeit von ρ_0 und ψ_0 gemäß

$$c_0 = \frac{gm_\rho \rho_0}{\gamma_c} \quad \text{und} \quad d_0 = \frac{hm_\psi \psi_0}{\gamma_d}.$$

Hier wurden die Abkürzungen

$$g := (1 + a\rho_0)^{-1} \quad \text{und} \quad h := (1 + b\psi_0)^{-1}$$

eingeführt. Um zu bestimmen, bei welchen Parametern die homogenen Lösungen instabil gegenüber räumlich variierenden Lösungen werden, wird eine lineare Stabilitätsanalyse durchgeführt. Dazu wird der homogene Anteil der jeweiligen Dichte von den inhomogenen Anteilen $\rho(\mathbf{r}, t), \psi(\mathbf{r}, t), c(\mathbf{r}, t), d(\mathbf{r}, t)$ mit

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}(\mathbf{r}, t) &= \rho_0 + \rho(\mathbf{r}, t) & , & \quad \tilde{\psi}(\mathbf{r}, t) = \psi_0 + \psi(\mathbf{r}, t) , \\ \tilde{c}(\mathbf{r}, t) &= c_0 + c(\mathbf{r}, t) & , & \quad \tilde{d}(\mathbf{r}, t) = d_0 + d(\mathbf{r}, t) \end{aligned}$$

abgespalten. Wenn die Störungen bzgl. des homogenen Zustandes anwachsen, wird der Grundzustand instabil. Zur Bestimmung des kritischen Punktes werden die Ausgangsgleichungen nach den Anteilen ρ, ψ, c, d linearisiert und man erhält das lineare Gleichungssystem

$$\partial_t \rho = D_\rho \Delta \rho - s_c \rho_0 \Delta c - s_d \rho_d \Delta d, \quad (12.2a)$$

$$\partial_t c = D_c \Delta c - \gamma_c c + \rho (gm_\rho - g^2 m_\rho \rho_0 a), \quad (12.2b)$$

$$\partial_t \psi = D_\psi \Delta \psi - k_c \psi_0 \Delta c - k_d \psi_0 \Delta d, \quad (12.2c)$$

$$\partial_t d = D_d \Delta d - \gamma_d d + \psi (hm_\psi - h^2 m_\psi \psi_0 b). \quad (12.2d)$$

Dieses Gleichungssystem kann durch einen Ansatz der Form

$$\mathbf{v} := \begin{pmatrix} \rho(\mathbf{r}, t) \\ \psi(\mathbf{r}, t) \\ c(\mathbf{r}, t) \\ d(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{\rho} \\ \bar{\psi} \\ \bar{c} \\ \bar{d} \end{pmatrix} e^{\Gamma t + i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \quad (12.3)$$

mit den konstanten Vorfaktoren $\bar{\rho}, \bar{\psi}, \bar{c}, \bar{d}$ gelöst werden. Mit dem Ansatz Gl. (12.3) ergibt sich die Eigenwertgleichung

$$\Gamma \mathbf{v} := \begin{pmatrix} -D_\rho q^2 & s_c \rho_0 q^2 & 0 & s_d \rho_0 q^2 \\ -g^2 m_\rho \rho_0 a + gm_\rho & -D_c q^2 - \gamma_c & 0 & 0 \\ 0 & k_c \psi_0 q^2 & -D_\rho q^2 & k_d \psi_0 q^2 \\ 0 & 0 & -h^2 m_\psi \psi_0 b + hm_\psi & -D_d q^2 - \gamma_d \end{pmatrix} \mathbf{v} \\ =: \mathbf{M}_c \mathbf{v}. \quad (12.4)$$

Das Gleichungssystem Gleichungen (12.4) enthält vier Eigenwerte $\Gamma_{1,2,3,4}(q)$. Die allgemeine Darstellung der Eigenwerte $\Gamma_{1,2,3,4}(q)$ kann unter Zuhilfenahme einer Algebra-Software wie zum Beispiel Maple oder Mathematica [291, 292] berechnet werden und wird aufgrund des Umfangs hier nicht explizit dargestellt. Im Folgenden werden einzelne Eigenschaften diskutiert, welche aus der allgemeinen Form abgeleitet werden können.

Wie bereits in den vorherigen Kapiteln beschrieben, wird der homogene Grundzustand instabil, wenn der größte reelle Anteil $\text{Re}(\Gamma_{max}) = \max(\text{Re}(\Gamma_1), \text{Re}(\Gamma_2), \text{Re}(\Gamma_3), \text{Re}(\Gamma_4))$ der Eigenwerte positiv wird. Hierbei ist es möglich, dass der Übergang stationär ($\Gamma \in \mathbb{R}$) oder oszillatorisch ($\Gamma \in \mathbb{C}$) ist. Für das vorliegende System zeigt sich, dass die Eigenwerte für $q = 0$ allgemein die Werte

$$\Gamma_{1,2,3,4}(0) = \{0, 0, -\gamma_c, -\gamma_d\}$$

annehmen. Da die Zerfallsraten der Chemikalien als positiv angenommen werden, erhält man folglich zwei Eigenwerte $\Gamma_{1,2}(q)$, welche aus dem Ursprung bei $q \rightarrow 0$ entspringen und zwei gedämpfte Eigenwerte $\Gamma_{3,4}(q)$ mit $\Gamma_{3,4}(0) < 0$.

Weil die Eigenwertgleichung nur Beiträge $\propto q^2$ enthält, entsprechen die beiden Eigenwerte $\Gamma_{1,2}(q)$ ohne konstantem Anteil in der Umgebung der Instabilität des homogenen Grundzustands der allgemeinen Form Gl. (7.6) einer Dispersionsrelation für erhaltene Systeme mit

$$\text{Re}(\Gamma_i)(q) = q^2 G_{2,i} + q^4 G_{4,i} + \mathcal{O}(q^6) \text{ mit } i \in \{1,2\},$$

wobei $G_{4,i} < 0$ die lineare Dämpfung ist und $\max(G_{2,i}) \geq 0$ angibt, ob der homogene Zustand stabil ist ($\max(G_{2,i}) < 0$) oder instabil gegenüber einer inhomogenen Störung wird ($\max(G_{2,i}) > 0$).

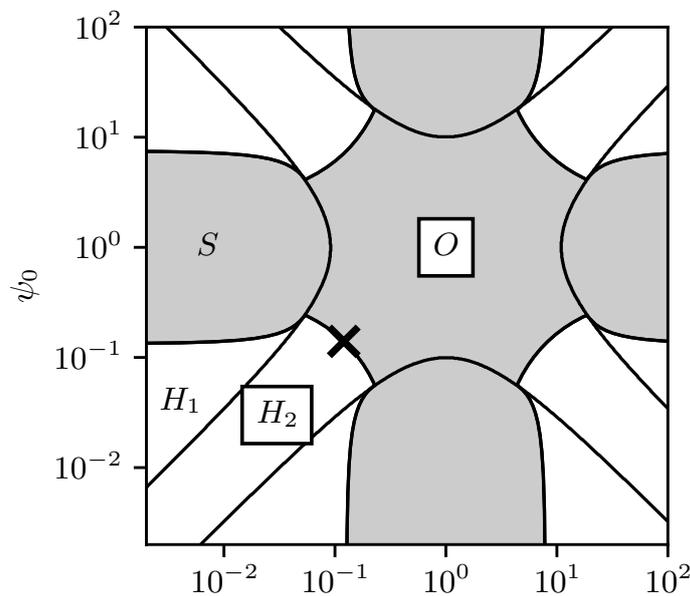


Abb. 12.1.: Phasendiagramm des chemotaktischen Systems Gleichungen (12.1) gekoppelter Bakterienstämme mit Quorum sensing. Die gewählten Parameter sind $D_\rho = D_\psi = 1$, $D_c = D_d = 2$, $m_\rho = m_\psi = 1$, $\gamma_c = \gamma_d = 1$, $a = b = 1$, $s_d = -7$, $k_c = 5$, $k_d = 10$, $s_c = 9.887 \hat{=} \varepsilon = 0.025$.

Je nach Kopplung können verschiedene Übergangsszenarien auftreten. In Abb. 12.1 ist ein exemplarisches Phasendiagramm gezeigt. Man sieht, dass das System neben stationären auch oszillatorische Phasenübergänge beinhaltet, ähnlich wie auch Systeme ohne Quorum sensing [201]. Die typische Form dieser Dispersionsrelation für einen ausgewählten Parametersatz ist in Abb. 12.2 gezeigt. Hierbei wurde ein Parametersatz gewählt, bei dem die Kopplung $s_d k_c < 0$ hinreichend antisymmetrisch ist und die Eigenwerte endliche Ima-

ginäranteile annehmen. Man erhält zwei komplex-konjugierte Eigenwerte, welche durch den Ursprung bei $\text{Re}(\Gamma_{1,2}) = 0$ für $q \rightarrow 0$ verlaufen. Für den unterkritischen Fall $\varepsilon < 0$ (Abb. 12.2, graue, gestrichelte Linien) sind die Eigenwerte $\text{Re}(\Gamma_{1,2})$ für alle q negativ. Wählt man $\varepsilon > 0$ (Abb. 12.2, schwarze, durchgezogene Linien), so ergibt sich ein positives Band an überkritischen Moden. Zudem erkennt man die gedämpften Eigenwerte $\Gamma_{3,4}$ mit $\Gamma_{3,4}(q=0) = -1$ (da $\gamma_c = \gamma_d = 1$), welche entartet sind.

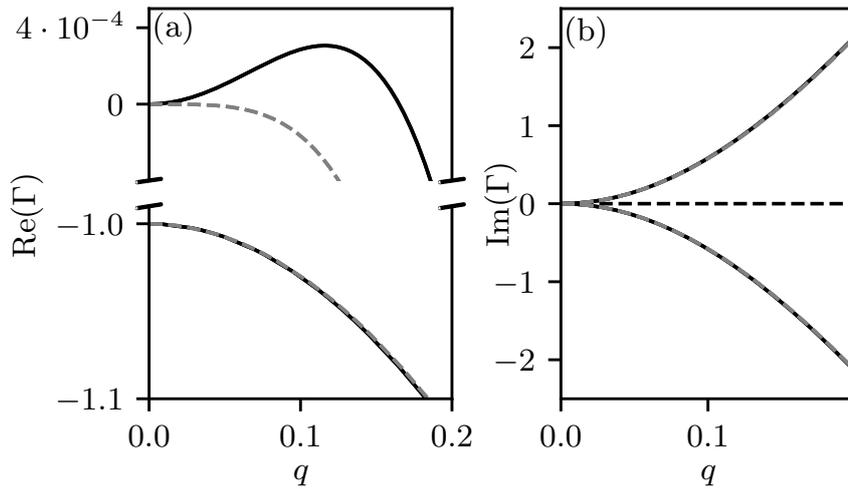


Abb. 12.2.: Exemplarische lineare Dispersionsrelation des Modells Gl. (12.1) mit $\rho_0 = 0.12$, $\psi_0 = 0.14$, $D_\rho = D_\psi = 1$, $D_c = D_d = 2$, $m_\rho = m_\psi = 1$, $\gamma_c = \gamma_d = 1$, $a = b = 1$, $s_d = -7$, $k_c = 5$, $k_d = 10$ für den unterkritischen (graue gestrichelte Linien mit $\varepsilon = -0.001$) und den überkritischen (schwarze, durchgezogene Linie $\varepsilon = 0.1$) Fall. Der Realteil $\text{Re}(\Gamma)$ enthält jeweils ein Set aus zwei entarteten Moden das stark gedämpft ist ($\text{Re}(\Gamma) \leq -1$) und eines, das durch den Ursprung verläuft.

Ob der Typ des Übergangs stationär oder oszillatorisch verläuft, ist abhängig von verschiedenen Systemparametern. Generell findet man oszillatorische Übergänge, wenn die Kreuzkopplung k_{ds_c} hinreichend negativ ist, wie bereits aus anderen Systemen bekannt [197, 206, 207, 241]. Hierbei spielen auch die anderen Systemparameter wie bspw. die Dichten ρ_0 und ψ_0 eine Rolle. Für einen ausgewählten Parametersatz ist das Phasendiagramm in Abb. 12.2 exemplarisch dargestellt. Für die Grenzfälle $\rho_0 \gg \psi_0$ und $\rho_0 \ll \psi_0$ erwartet man, dass die Kopplungseinflüsse verschwinden. Dies ist auch im Phasendiagramm Abb. 12.2 erkennbar, wo für ρ_0 stark verschieden von ψ_0 die Übergänge stationär werden, wie vom einkomponentigen Fall erwartet [195, 196].

Um den Abstand des Übergangs der Instabilität des homogenen Zustands anzugeben, wird als Kontrollparameter die Selbstkopplung $s_c = s_{c,c}(1 + \varepsilon)$ von ρ an die Transmitterdichte c gewählt. Der kritische Parameter $s_{c,c}$ wird so bestimmt, dass $\max(\text{Re}(\Gamma_1), \text{Re}(\Gamma_2)) = 0$ für

$\varepsilon = 0$ und man

$$s_{c,c} = \frac{-k_d \psi_0 \kappa_d + D_\psi + D_\rho}{\rho_0 \kappa_c}$$

mit

$$\kappa_c = \frac{m_\rho g^2}{\gamma_c}, \quad \kappa_d = \frac{m_\psi h^2}{\gamma_d}$$

erhält.

12.4. Verknüpfung des chemotaktischen Modells zu den verschiedenen Reduktionsebenen

Die lineare Auswertung aus dem vorherigen Abschnitt 12.3 zeigt, dass zwei Eigenwerte stark gedämpft sind. Dies lässt vermuten, dass die Dynamik der Botenstoffe der Speziesdynamik adiabatisch folgt und damit \dot{c} und \dot{d} durch eine systematische Entwicklung eliminiert werden können (siehe z. B. [195, 196]). Unter der Annahme eines superkritischen Übergangs $\rho, \psi, c, d \sim \sqrt{\varepsilon}$ werden die Chemikalien nach dem Kleinheitsparameter ε gemäß

$$\begin{aligned} c &= c_0 + \varepsilon^{\frac{1}{2}} c_1 + \varepsilon c_2 + \varepsilon^{\frac{3}{2}} c_3 + O\left(\varepsilon^{\frac{4}{2}}\right), \\ d &= d_0 + \varepsilon^{\frac{1}{2}} d_1 + \varepsilon d_2 + \varepsilon^{\frac{3}{2}} d_3 + O\left(\varepsilon^{\frac{4}{2}}\right), \end{aligned}$$

entwickelt. Die Ordnung ist dabei so gewählt, dass die Überlegungen von Abschnitt 10.5 für die Dichten ρ und ψ nach der adiabatischen Elimination erfüllt sind. Dies liefert die Entwicklungshierarchie für die Chemikalien wie folgt

$$\begin{aligned} c_0 &= m_\rho \rho_0 g \gamma_c^{-1}, \\ c_1 &= m_\rho \rho_1 g^2 \gamma_c^{-1}, \\ c_2 &= -m_\rho \rho_1^2 g^3 a \gamma_c^{-1}, \\ c_3 &= \left(\rho_1^3 a^2 \gamma_c g^2 + D_c \partial_X^2 \rho_1 \right) m_\rho g^2 \gamma_c^{-2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 d_0 &= m_\psi \psi_0 h \gamma_d^{-1}, \\
 d_1 &= m_\psi \psi_1 h^2 \gamma_d^{-1}, \\
 d_2 &= -m_\psi \psi_1^2 h^3 b \gamma_d^{-1}, \\
 d_3 &= \left(\psi_1^3 b^2 \gamma_d h^2 + D_d \partial_x^2 \psi_1 \right) m_\psi h^2 \gamma_d^{-2}.
 \end{aligned}$$

Eine sukzessive Ersetzung der jeweils niedrigeren Ordnungen von c_i und d_i für die höheren Ordnungen und anschließendes Resubstituieren der ε Entwicklung liefert die adiabatischen Gleichungen der Chemikalien bis $O\left(\varepsilon^{\frac{3}{2}}\right)$ gemäß

$$\begin{aligned}
 c_{a,3} &= \kappa_c \left(\rho - g \rho^2 + a^2 g^2 \rho^3 + D_c \partial_x^2 \rho \right) + O\left(\varepsilon^{\frac{4}{2}}\right), \\
 d_{a,3} &= \kappa_d \left(\psi - h \psi^2 + b^2 h^2 \psi^3 + D_d \partial_x^2 \psi \right) + O\left(\varepsilon^{\frac{4}{2}}\right).
 \end{aligned}$$

Nach Einführung der Abkürzungen $G = ag$, $H = hb$ ergeben sich die gekoppelten, erhaltenen Transportgleichungen auf Ebene der GTOPS gemäß

$$\begin{aligned}
 \partial_t \rho &= D_\rho \nabla^2 \rho - s_c \kappa_c \rho_0 \Delta \left[\rho - G \rho^2 + G^2 \rho^3 + D_c \Delta \rho \right] - s_c \kappa_c \nabla \left[\rho \nabla \left(\rho - G \rho^2 \right) \right] \\
 &\quad - s_d \kappa_d \rho_0 \Delta \left[\psi - H \psi^2 + H^2 \psi^3 + D_d \Delta \psi \right] - s_d \kappa_d \nabla \left[\rho \nabla \left(\psi - H \psi^2 \right) \right], \quad (12.9a)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \partial_t \psi &= D_\psi \nabla^2 \psi - \kappa_d k_d \psi_0 \Delta \left[\psi - H \psi^2 + H^2 \psi^3 + D_d \Delta \psi \right] - k_d \kappa_d \nabla \left[\psi \nabla \left(\psi - H \psi^2 \right) \right] \\
 &\quad - k_c \kappa_c \psi_0 \Delta \left[\rho - G \rho^2 + G^2 \rho^3 + D_c \Delta \rho \right] - k_c \kappa_c \nabla \left[\psi \nabla \left(\rho - G \rho^2 \right) \right]. \quad (12.9b)
 \end{aligned}$$

Die Vorfaktoren der verschiedenen Terme in Gleichungen (12.9) lassen sich noch wie folgt zusammenfassen:

$$\begin{aligned}
 \alpha_1 &= s_c \kappa_c \rho_0 - D_\rho, & \beta_1 &= k_d \kappa_d \psi_0 - D_\psi, \\
 \alpha_2 &= s_c \kappa_c \rho_0 D_c / \gamma_c, & \beta_2 &= k_d \kappa_d \psi_0 D_d / \gamma_d, \\
 \alpha_3 &= s_c \kappa_c \left(\frac{1}{2} - \rho_0 a g \right), & \beta_3 &= k_d \kappa_d \left(\frac{1}{2} - \psi_0 b h \right) \\
 \alpha_4 &= s_c \kappa_c a g \left(\frac{2}{3} - \rho_0 a g \right), & \beta_4 &= k_d \kappa_d b h \left(\frac{2}{3} - \psi_0 b h \right), \\
 K_1 &= s_d \kappa_d \rho_0, & L_1 &= k_c \kappa_c \psi_0, \\
 K_2 &= s_d \kappa_d \rho_0 D_d / \gamma_d, & L_2 &= k_c \kappa_c \psi_0 D_c / \gamma_c, \\
 K_3 &= -s_d \kappa_d \rho_0 b h, & L_3 &= -k_c \kappa_c \psi_0 a g, \\
 K_4 &= -s_d \kappa_d \rho_0 b^2 h^2, & L_4 &= -k_c \kappa_c \psi_0 a^2 g^2, \\
 K_5 &= s_d \kappa_d b h, & L_5 &= k_c \kappa_c a g, \\
 K_6 &= s_d \kappa_d, & L_6 &= k_c \kappa_c.
 \end{aligned} \tag{12.10}$$

Somit erhält man durch Gleichungen (12.10) die Zuordnung der Parameter des chemotaktischen Modells aus Gleichungen (12.1) zu den Parametern der adiabatischen Gleichungen (12.9) in der Form

$$\begin{aligned} \partial_t \rho = & -\nabla^2 [\alpha_1 \rho + \alpha_2 \nabla^2 \rho + \alpha_3 \rho^2 - \alpha_4 \rho^3] \\ & - \nabla^2 [K_1 \psi + K_2 \nabla^2 \psi + K_3 \psi^2 - K_4 \psi^3] \\ & - \nabla [\rho \nabla (K_6 \psi - K_5 \psi^2)] , \end{aligned} \quad (12.11a)$$

$$\begin{aligned} \partial_t \psi = & -\nabla^2 [\beta_1 \psi + \beta_2 \nabla^2 \psi + \beta_3 \psi^2 - \beta_4 \psi^3] \\ & - \nabla^2 [L_1 \rho + L_2 \nabla^2 \rho + L_3 \rho^2 - L_4 \rho^3] \\ & - \nabla [\psi \nabla (L_6 \rho - L_5 \rho^2)] . \end{aligned} \quad (12.11b)$$

Für die Verknüpfung von Gleichungen (12.11) zur Ordnungsparametergleichung Gl. (10.23) benötigt man noch die Zuordnung des Kontrollparameters ε zu den Systemparametern. Durch die Wahl des Kontrollparameters in Abschnitt 12.3 und der Definition von β_1 in Gleichungen (12.10) ergibt sich somit

$$s_{c,c} = \frac{-k_d \psi_0 \kappa_d + D_\psi + D_\rho}{\rho_0 \kappa_c} = \frac{-\beta_1 + D_\rho}{\rho_0 \kappa_c} .$$

In Gl. (12.10) sieht man, dass alle Parameter α_i von s_c und somit abhängig vom Kontrollparameter ε sind. Für α_i mit $i > 1$ sind die Beiträge $\varepsilon \neq 0$ zum Gesamtsystem von der Ordnung $O(O)(\varepsilon^{6/2})$ oder höher und können somit aufgrund der Überlegungen in Abschnitt 10.5 vernachlässigt werden. Die einzige verbleibende, nicht verschwindende Abhängigkeit ist in α_1 enthalten. Für α_1 gilt die Beziehung

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= -\beta_1 + \varepsilon(-\beta_1 + D_\rho) + O(\varepsilon^{4/2}), \\ \Rightarrow \quad \alpha_{1,0} &= -\beta_1, \quad \alpha_{1,2} = -\beta_1 + D_\rho. \end{aligned}$$

Die Parameter β_i , L_i und K_i sind unabhängig von s_c und somit auch unabhängig vom Kontrollparameter ε , d.h. $\beta_{1,0} = \beta_1$, $\beta_{1,2} = 0$.

Mit diesen Überlegungen kann man die Übersetzung der Systemparameter in Gleichungen (12.1) über die Vorfaktoren α_i , β_i , K_i , L_i von Gleichungen (9.4) auf die OPG Gl. (10.23)

$$\begin{aligned} \partial_t A = & -\Delta (\xi_1 A + \xi_2 \Delta A + \xi_3 A^2 - \xi_4 A^3) - \nabla [\xi_5 A \nabla (A^*) + \xi_6 A^* \nabla (A)] \\ & + \nabla [\xi_7 A^2 \nabla (A^*) + \xi_8 A^* \nabla (A^2)] + \nabla [\xi_9 A \nabla (A^{*2}) + \xi_{10} A^{*2} \nabla (A)] \end{aligned}$$

übertragen, wobei die Vorfaktoren ξ_i der Ordnungsparametergleichung mithilfe der Defini-

tion in Gleichungen (10.24) erfolgt und hier nicht explizit ausgeschrieben werden.

Diese Verknüpfung zeigt eine der Stärken der verschiedenen Reduktionsebenen. Diese erlauben es, den Einfluss der verschiedenen Systemparameter einfacher zu interpretieren. Man erkennt zum Beispiel die Bedeutung der die Produktion der Botenstoffe begrenzenden Faktoren a und b und man kann ableiten, warum diese zur Vermeidung von numerischen Instabilitäten beitragen. Wählt man bspw. $a = b = 0$, so verschwinden die Beiträge von $\alpha_4, K_3, K_4, K_5, \beta_4, L_3, L_4, L_5$. Somit verschwinden die kubisch begrenzenden, nichtlinearen Terme in den Gleichungen auf Ebene der GTOPS Gl. (12.11) und die Dynamik besitzt somit keine Amplitudenbegrenzung. Dies ist auch auf Ebene der Ordnungsparametergleichung (10.23) zu erkennen. Dort fallen durch Verschwinden der Begrenzungen a und b die Terme $\propto \xi_{4,7,8,9,10}$ weg (siehe Gleichungen (10.24) in Verbindung mit Gl. (12.10)) und somit ist das System nicht mehr durch kubische Nichtlinearitäten begrenzt.

Bei der Zuordnung der Systemparameter Gl. (12.10) wird ersichtlich, warum eine nicht-lineare Kopplung zwischen den Felder auf Ebene der GTOPS wichtig ist. Ohne deren Berücksichtigung würde man Beiträge der Terme $\propto K_3, K_4, K_5, K_6, L_3, L_4, L_5, L_6$ nicht abdecken und eventuell wichtige Systemdynamiken wären nicht richtig abgebildet. Selbst im Fall $a = b = 0$ wären nichtlineare Kopplungen der Terme $\propto K_6, L_6$ vorhanden und tauchen auf der GTOPS Ebene auf.

Durch die Verknüpfung der verschiedenen Ebenen der Reduktion können numerische Ergebnisse des vollen Systems (Gleichungen (12.1)) mit denen der GTOPS Gleichungen (9.4) und der Ordnungsparametergleichung (Gleichungen (10.23)) für Π_o Phasenübergänge verglichen werden. Hierfür werden die Parameter aus dem Ausgangssystem (Gleichungen (12.1)) über die Beziehungen aus Gleichungen (12.10) in die Parameter $\alpha_i, \beta_i, K_i, L_i$ umgerechnet. Diese können anschließend in Gleichungen (10.24) eingesetzt werden, um die Werte der ξ_i Faktoren zu erhalten.

Als Parametersatz werden die Faktoren äquivalent zu Abb. 12.2 mit einer Systemlänge von $L = 180$ gewählt und anschließend die Veränderung bei Variation von ε getestet. Da die Ordnungsparametergleichung eine Entwicklung um den Kleinheitsparameter ε darstellt, kann somit der Gültigkeitsbereich der Ordnungsparametergleichung getestet werden. Zur Einordnung in das Phasendiagramm ist in Abb. 12.1 der Parametersatz mit $\varepsilon = 0.025$ durch ein Kreuz (schwarzes x-Symbol) gekennzeichnet. Die gewählten Parameter liegen im oszillatorischen Bereich, knapp oberhalb der Grenze, die den Übergang vom homogenen stabilen Zustand (weißer Hintergrund) zur homogenen Instabilität (grauer Hintergrund) anzeigt.

In Abb. 12.3 sind die Profile von ρ (gestrichelte Linie) und ψ (gepunktete Linie) gezeigt.

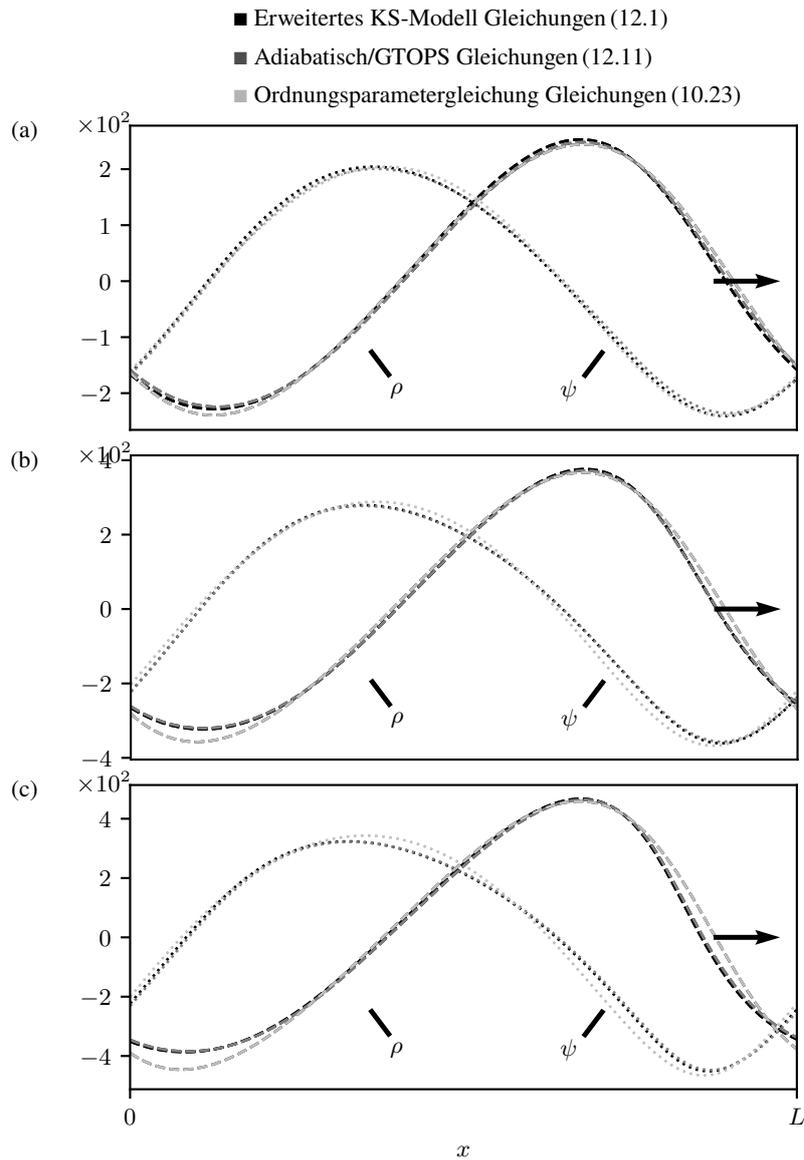


Abb. 12.3.: Vergleich der Feld-Amplituden ρ (gestrichelte Linien) und ψ (gepunktete Linien) nach dem Einschwingvorgang zwischen dem erweiterten KS-Modell Gleichungen (12.1) (schwarz), dem adiabatisch reduzierten Gleichungssystem Gleichungen (12.11) (grau) und der Ordnungsgleichung (OPE, hellgrau) für (a) $\varepsilon = 0.03$, (b) $\varepsilon = 0.06$ und (c) $\varepsilon = 0.09$. Man erkennt eine gute Übereinstimmung aller Simulationen.

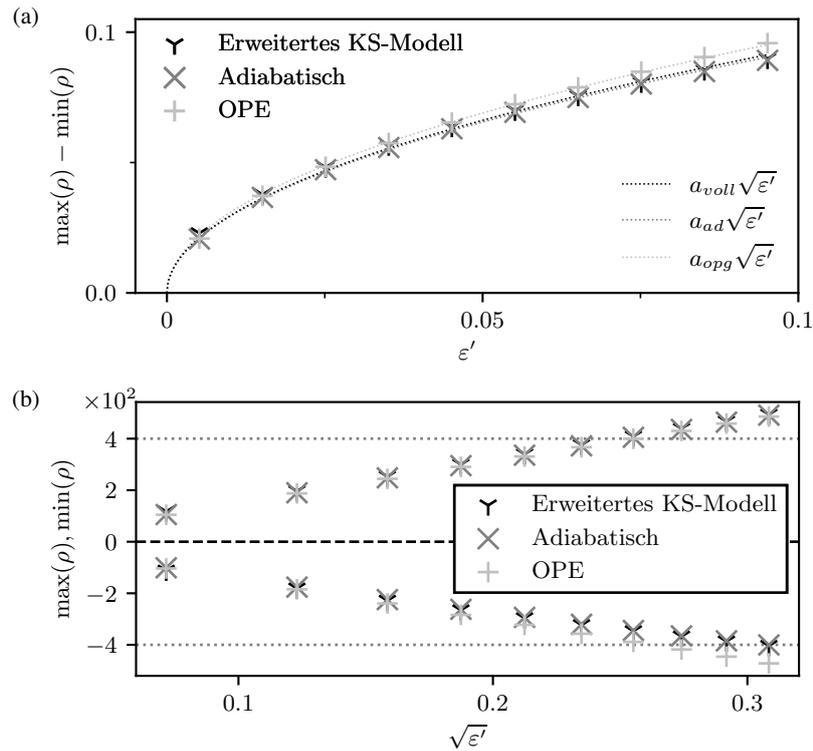


Abb. 12.4.: Vergleich der Bifurkationsbilder der Inhomogenität des Felder ρ für das erweiterte KS-Modell Gleichungen (12.1) (schwarz,y-Symbol), das adiabatisch reduzierte Gleichungssystem Gleichungen (12.11) (grau,x-Symbol) und die Ordnungsparametergleichung (OPE, hellgrau,+Symbol) als Funktion des Kontrollparameters ε' für die Mode $l = 1$. In (a) ist die Plateaudifferenz dargestellt, welche superkritisch $\propto \sqrt{\varepsilon'}$ skaliert. Die gepunkteten Linien zeigen an die Simulation gefittete Kurven $\propto \sqrt{\varepsilon'}$. In (b) sind die globalen Extrema $\max(\rho) > 0$ bzw. $\min(\rho) < 0$ gezeigt, welche linear zu $\sqrt{\varepsilon'}$ verlaufen. Aufgrund der Beiträge von quadratischen Termen verhalten sich die Extrema nicht symmetrisch zur Ursprungsgeraden. In allen Fällen erkennt man eine sehr gute Übereinstimmung der verschiedenen Modelle.

Die Daten wurden dabei mit den verschiedenen Modellen erzeugt, wobei die Ergebnisse des vollen Modells (Gleichungen (12.1)) in schwarz, des adiabatische Modell auf Level der GTOPS aus Gleichungen (12.11) in grau und die der Ordnungsparametergleichung Gl. (10.23) in hellgrau dargestellt sind. Für die Anfangsbedingung wurde eine Simulation mit Rauschen als Startbedingung bei $\varepsilon = 0.01$ gestartet. Die Ergebnisse der gesättigten Simulation wurden dann als Startbedingung für die darauffolgende Simulation verwendet, bei welcher ε jeweils um 0.01 erhöht wurde, womit der Einschwingvorgang beschleunigt werden kann. In Abb. 12.3 (a) ist $\varepsilon = 0.03$ gezeigt. Es stellt sich, ähnlich wie bereits im MiMo in Abschnitt 9.3, eine laufende Struktur mit maximal vergrößerter Grundstruktur der Mode $l_p = 1$ ein. Die Profile von ρ und ψ sind dabei phasenverschoben und folgen einander, wobei der Parameter mit Kreuzkopplung positiv ($k_c > 0$) derjenigen mit negativer

Kreuzkopplung ($s_d < 0$) hinterher eilt. Dieses Szenario entspricht einem Räuber-Beute Szenario und stimmt mit bekannten Szenarien überein [200–202, 206, 207, 241]. Einer der Kernpunkte in Abb. 12.3 (a) ist der Vergleich der Methoden der verschiedenen Darstellungslevel: Die Ergebnisse des vollen Modells, der adiabatisch eliminierten Ebene und der Ordnungsparametergleichung zeigen eine sehr gute Übereinstimmung. Mit zunehmendem Abstand zum Einsatzpunkt der Instabilität des homogenen Grundzustandes erkennt man einen zunehmenden Unterschied zwischen Ordnungsparametergleichung und dem vollen bzw. adiabatischen Modell (siehe Abb. 12.3 (b) mit $\varepsilon = 0.06$ und (c) mit $\varepsilon = 0.09$), da die Ordnungsparametergleichung per Konstruktion einen Gültigkeitsbereich für kleine Kontrollparameter aufweist. Die allgemeine, strukturelle Übereinstimmung bleibt dennoch erhalten.

In Abb. 12.4 sind die Ergebnisse der Simulationen für den gesamten Bereich $\varepsilon = 0.01, \dots, 0.1$ mit $\Delta \varepsilon = 0.01$ dargestellt. Für ein System endlicher Länge L ist der Einsatz der Strukturbildung effektiv um den Wert $\varepsilon_0 := \varepsilon|_{\sigma(q_p)=0}$ verschoben, mit der Wellenlänge q_p der dominierenden Mode mit Modenzahl $l_p = q_p \frac{L}{2\pi}$. Der bereinigte Kontrollparameter $\varepsilon' = \varepsilon - \varepsilon_0$ gibt somit den berichtigten Abstand für Muster endlicher Wellenlängen zum Übergang der Instabilität an und wurde in Abb. 12.4 für die Abszisse gewählt. In Abb. 12.4 (a) ist die Plateau-Differenz $\max(\rho) - \min(\rho)$ gezeigt. Die verschiedenen Marker entsprechen dabei dem Ausgangsmodell mit den Gleichungen (12.1) (schwarze Y-Symbole), dem adiabatischen Modell (Gleichungen (12.11)) (graue X-Symbole) sowie den Ergebnissen der Ordnungsparametergleichung Gl. (10.23) (hellgraue +-Symbole). Die Plateaudifferenz zeigt einen superkritischen Verlauf $\propto \sqrt{\varepsilon'}$ und bestätigt daher die getroffenen Annahmen in Abschnitt 12.4. Zudem zeigt sie die erfolgreiche Anwendung des in Abschnitt 10 dargestellten Reduktionsschemas für ein explizites System. Auch in der Darstellung der Bifurkation erkennt man, dass die Ordnungsparametergleichung eine bessere Übereinstimmung zu den anderen Modellen für kleine ε liefert.

In Abb. 12.4 (b) sind explizit die Extrema $\max(\rho) > 0$ bzw. $\min(\rho) < 0$ als Funktion von $\sqrt{\varepsilon'}$ dargestellt. Die lineare Abhängigkeit von $\sqrt{\varepsilon'}$ zeigt erneut die Eigenschaft des superkritischen Übergangs. In dieser Darstellung fällt auf, dass die Minima und Maxima von ρ nicht \pm -symmetrisch zur Ursprungsgeraden verlaufen (siehe hierfür auch die eingezeichnete Hilfslinie bei $\max(\rho), \min(\rho) = \pm 4$). Diese Asymmetrie wird durch die quadratischen Terme hervorgerufen, welche die \pm -Symmetrie des Systems brechen. Diese Eigenschaft ist für alle Modelle zu beobachten, wobei sie bei der Ordnungsparametergleichung etwas schwächer ausgeprägt ist.

12.5. Fazit

In diesem Abschnitt wurden zwei chemotaktisch interagierende Spezies an Bakterien untersucht. Dieses System wird mit den erhaltenen Dichten der Teilchen ρ und ψ , sowie den entsprechenden Chemikalien c und d modelliert. Somit besteht es aus vier Gleichungen, von denen zwei erhalten und zwei nicht erhalten sind. Im Vergleich zu anderen Modellen wie in [206, 207, 241] wird hier der Effekt der Sättigung in der Produktion der Chemikalien der beiden Spezies berücksichtigt, welche die Kontinuums-Simulationen stabilisiert und blow-ups verhindern kann. Dieser Effekt kann zum Beispiel durch sogenannte Quorum sensing Effekte bedingt auftreten, bei denen Bakterien auf konzentrationsabhängige Wechselwirkungen mit anderen Bakterien reagieren und häufig in der Natur vorkommt [289, 290].

Eine lineare Stabilitätsanalyse dieses Systems erlaubt es zum einen, das Phasendiagramm der gekoppelten Gleichungen für den Fall nicht reziproker Wechselwirkung aufzustellen. Darin erkennt man Gebiete der stationären, als auch oszillatorischen Phasenseparation, welche bekannt sind für gekoppelte, erhaltene Felder verschiedener Systeme [198, 201]. Für den Grenzfall $\rho \ll \psi$ bzw. $\psi \ll \rho$ erhält man den aus entkoppelten Systemen bekannten Fall der stationären Phasenseparationsdynamik. Die Dispersion zeigt zudem, dass für dieses System zwei Eigenwerte vorliegen, die stark gedämpft sind. Dies motiviert eine adiabatische Näherung der dynamischen Gleichungen der Chemikalien analog zu [195, 196]. Dadurch kann das System auf zwei gekoppelte, erhaltene Transportgleichungen auf der Ebene der GTOPS reduziert werden. Durch das Reduktionsschema, welches in Abschnitt 10 beschrieben wird, können die adiabatisch eliminierten Gleichungen letztendlich mit der allgemeinen OPG für Typ II_o^c Systeme verknüpft werden.

Anhand der adiabatisch eliminierten Gleichungshierarchie wurde die Bedeutung der nicht-linearen Kopplung auf Ebene der GTOPS deutlich. Für dieses angewandte System erhält man unter anderem Beiträge der Terme $K_3, K_4, K_5, K_6, L_3, L_4, L_5, L_6$, welche alle durch nicht-lineare Kopplung entstehen. Somit würde das hier diskutierte System durch linear gekoppelte CH Gleichungen wie in [200–202] nicht vollständig beschrieben. Auch der Einfluss der Quorum sensing Terme a und b wurde ersichtlich. Diese erzeugen nichtlineare Dämpfungen auf Ebene der Transportgleichung. Für Systeme ohne diese Terme mit $a = b = 0$ fallen einige dieser Beiträge weg, was zu einer Destabilisierung der Dynamik und somit auch in der numerischen Beschreibung zur Folge haben kann.

Diese systematische Verknüpfung der verschiedenen Reduktionsebenen erlaubt einen Vergleich des vollen Ausgangssystems der vier chemotaktisch gekoppelten Gleichungen, als auch der zugehörigen erhaltenen Transportgleichungen und letztendlich der OPG. Für diesen

Vergleich wird das oszillatorische Gebiet im zuvor bestimmten Phasendiagramm gewählt. Für diesen Bereich fanden sich anharmonische, laufende Wellen als Lösungen für den Fall einer nicht reziproken Kopplung. Hierbei eilt die Dichte ρ , mit negativer Kreuzkopplung an ψ voraus, während die Dichte ψ mit positiver Kopplung an ρ der anderen Dichte hinterher eilt, was sich mit den Erkenntnissen aus anderen Arbeiten deckt [200, 201, 206]. Die Ergebnisse aller getesteten Reduktionsebenen zeigten dabei eine sehr gute Übereinstimmung. Auch bei der Betrachtung des Bifurkationsverhaltens erkennt man, dass die Amplituden der Lösungen superkritisch aus dem homogenen Grundzustand abzweigen und somit die in den vorherigen Kapiteln getätigten Annahmen in diesem Fall korrekt sind. Auch in diesem Vergleich wurde eine sehr gute Übereinstimmung aller Ebenen gefunden. Dies zeigt die Bedeutung der entwickelten Techniken, welche eine Reduktion der dargestellten Systeme auf das generische Verhalten am kritischen Punkt durch eine universelle Ordnungsparametergleichung ermöglicht und die Verknüpfung der verschiedenen Ebenen erlaubt. Somit kann die vorher bestimmte OPG verwendet werden, um das generische Verhalten des vorliegenden Systems gekoppelter, erhaltener Teilchen zu untersuchen und im Kontext der generischen Beschreibung zu kategorisieren.

Literaturverzeichnis

- [1] E. Evans und Y.-C. Fung, *Improved measurements of the erythrocyte geometry*, *Microvascular Research* **4**, 335 (1972).
- [2] G. D. Boon, *An Overview of Hemostasis*, *Toxicologic Pathology* **21**, 170 (1993).
- [3] J. Elgeti, R. G. Winkler und G. Gompper, *Physics of microswimmers—single particle motion and collective behavior: a review*, *Reports on Progress in Physics* **78**, 056601 (2015).
- [4] L. Naselli-Flores und R. Barone, *Invited Review - Fight on Plankton! or, Phytoplankton Shape and Size as Adaptive Tools to Get Ahead in the Struggle for Life*, *Cryptogamie, Algologie* **32**, 157 (2011).
- [5] C. Singer, *Notes on the Early History of Microscopy*, *Proceedings of the Royal Society of Medicine* **7**, 247 (1914).
- [6] B. R. Masters, *History of the Optical Microscope in Cell Biology and Medicine*, in *eLS* (John Wiley & Sons, Ltd, Chichester, 2008).
- [7] S. Rebohm, *Frühe Mikroskopie : Beobachtung als Forschungspraxis*, Doctoral Thesis (Technische Universität Berlin, Berlin, 2015).
- [8] M. A. Riva, L. Borghi und F. Pagni, *The first recorded use of microscopy in medicine: Pope Innocent XII's autopsy report*, *The Lancet* **388**, 559 (2016).
- [9] J. Siepmann, R. A. Siegel und M. J. Rathbone, *Fundamentals and Applications of Controlled Release Drug Delivery* (Springer, Heidelberg, 2011).
- [10] K. Namdee, A. J. Thompson, P. Charoenphol und O. Eniola-Adefeso, *Margination Propensity of Vascular-Targeted Spheres from Blood Flow in a Microfluidic Model of Human Microvessels*, *Langmuir* **29**, 2530 (2013).
- [11] S. De Koker, R. Hoogenboom und B. G. De Geest, *Polymeric multilayer capsules for drug delivery*, *Chem. Soc. Rev.* **41**, 2867 (2012).
- [12] M. A. Scranton, J. T. Ostrand, F. J. Fields und S. P. Mayfield, *Chlamydomonas as a model for biofuels and bio-products production*, *The Plant Journal* **82**, 523 (2015).

- [13] M. A. Bees und O. A. Croze, *Mathematics for streamlined biofuel production from unicellular algae*, *Biofuels* **5**, 53 (2014).
- [14] N. P. Ivleva, A. C. Wiesheu und R. Niessner, *Microplastic in Aquatic Ecosystems*, *Angewandte Chemie International Edition* **56**, 1720 (2017).
- [15] W. J. Shim, S. H. Hong und S. E. Eo, *Identification methods in microplastic analysis: a review*, *Anal. Methods* **9**, 1384 (2017).
- [16] E.-L. Ng, E. Huerta Lwanga, S. M. Eldridge, P. Johnston, H.-W. Hu, V. Geissen und D. Chen, *An overview of microplastic and nanoplastic pollution in agroecosystems*, *Science of The Total Environment* **627**, 1377 (2018).
- [17] A. Ashkin, *Acceleration and Trapping of Particles by Radiation Pressure*, *Phys. Rev. Lett.* **24**, 156 (1970).
- [18] A. Ashkin, *Optical trapping and manipulation of neutral particles using lasers*, *Proceedings of the National Academy of Sciences* **94**, 4853 (1997).
- [19] I. A. Favre-Bulle, A. B. Stilgoe, E. K. Scott und H. Rubinsztein-Dunlop, *Optical trapping in vivo: theory, practice, and applications*, *Nanophotonics* **8**, 1023 (2019).
- [20] K. O. Greulich, *Manipulation of cells with laser microbeam scissors and optical tweezers: a review*, *Reports on Progress in Physics* **80**, 026601 (2016).
- [21] B.-Jo, L. M. Van Lerberghe, K. M. Motsegood und D. J. Beebe, *Three-dimensional micro-channel fabrication in polydimethylsiloxane (PDMS) elastomer*, *Journal of Microelectromechanical Systems* **9**, 76 (2000).
- [22] H. Stone, A. Stroock und A. Ajdari, *Engineering Flows in Small Devices: Microfluidics Toward a Lab-on-a-Chip*, *Annual Review of Fluid Mechanics* **36**, 381 (2004).
- [23] P. S. Dittrich und A. Manz, *Lab-on-a-chip: microfluidics in drug discovery*, *Nature Reviews Drug Discovery* **5**, 210 (2006).
- [24] A. Ghasemi, H. Amiri, H. Zare, M. Masroor, A. Hasanzadeh, A. Beyzavi, A. R. Aref, M. Karimi und M. R. Hamblin, *Carbon nanotubes in microfluidic lab-on-a-chip technology: current trends and future perspectives*, *Microfluidics and Nanofluidics* **21**, 151 (2017).
- [25] Y. C. Lim, A. Z. Kouzani und W. Duan, *Lab-on-a-chip: a component view*, *Microsystem Technologies* **16**, 1995 (2010).
- [26] A. Y. Fu, H.-P. Chou, C. Spence, F. H. Arnold und S. R. Quake, *An Integrated Microfabricated Cell Sorter*, *Analytical Chemistry* **74**, 2451 (2002).

- [27] S. B. Im, M. J. Uddin, G. J. Jin und J. S. Shim, *A disposable on-chip microvalve and pump for programmable microfluidics*, Lab Chip **18**, 1310 (2018).
- [28] C. Bechinger, R. Di Leonardo, H. Löwen, C. Reichhardt, G. Volpe und G. Volpe, *Active particles in complex and crowded environments*, Rev. Mod. Phys. **88**, 045006 (2016).
- [29] G. Gompper, C. Bechinger, S. Herminghaus, R. Isele-Holder, U. B. Kaupp, H. Löwen, H. Stark und R. G. Winkler, *Microswimmers – From Single Particle Motion to Collective Behavior*, The European Physical Journal Special Topics **225**, 2061 (2016).
- [30] D. L. Ringo, *Flagellar motion and fine structure of the flagellar apparatus in Chlamydomonas*, Journal of Cell Biology **33**, 543 (1967).
- [31] K. Drescher, R. E. Goldstein, N. Michel, M. Polin und I. Tuval, *Direct Measurement of the Flow Field around Swimming Microorganisms*, Phys. Rev. Lett. **105**, 168101 (2010).
- [32] S. Rafai, L. Jibuti und P. Peyla, *Effective Viscosity of Microswimmer Suspensions*, Phys. Rev. Lett. **104**, 098102 (2010).
- [33] M. Garcia, S. Berti, P. Peyla und S. Rafai, *Random walk of a swimmer in a low-Reynolds-number medium*, Phys. Rev. E **83**, 035301 (2011).
- [34] R. Jeanneret, M. Contino und M. Polin, *A brief introduction to the model microswimmer Chlamydomonas reinhardtii*, The European Physical Journal Special Topics **225**, 2141 (2016).
- [35] G. I. Taylor, *Analysis of the swimming of microscopic organisms*, Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences **209**, 447 (1951).
- [36] E. Gaffney, H. Gadêlha, D. Smith, J. Blake und J. Kirkman-Brown, *Mammalian Sperm Motility: Observation and Theory*, Annual Review of Fluid Mechanics **43**, 501 (2011).
- [37] H. C. Berg und D. A. Brown, *Chemotaxis in Escherichia coli analysed by Three-dimensional Tracking*, Nature **239**, 500 (1972).
- [38] N. C. Darnton, L. Turner, S. Rojevsky und H. C. Berg, *On Torque and Tumbling in Swimming Escherichia coli*, Journal of Bacteriology **189**, 1756 (2007).
- [39] H. Wu, A. Farutin, W.-F. Hu, M. Thiébaud, S. Rafai, P. Peyla, M.-C. Lai und C. Misbah, *Amoeboid swimming in a channel*, Soft Matter **12**, 7470 (2016).

- [40] S. Dalal, A. Farutin und C. Misbah, *Amoeboid swimming in a compliant channel*, *Soft Matter* **16**, 1599 (2020).
- [41] A. Ghosh und P. Fischer, *Controlled Propulsion of Artificial Magnetic Nanostructured Propellers*, *Nano Letters* **9**, 2243 (2009).
- [42] L. Zhang, J. J. Abbott, L. Dong, K. E. Peyer, B. E. Kratochvil, H. Zhang, C. Bergeles und B. J. Nelson, *Characterizing the Swimming Properties of Artificial Bacterial Flagella*, *Nano Letters* **9**, 3663 (2009).
- [43] V. Garcia-Gradilla, J. Orozco, S. Sattayasamitsathit, F. Soto, F. Kuralay, A. Pourazary, A. Katzenberg, W. Gao, Y. Shen und J. Wang, *Functionalized Ultrasound-Propelled Magnetically Guided Nanomotors: Toward Practical Biomedical Applications*, *ACS Nano* **7**, 9232 (2013).
- [44] J. Bao, Z. Yang, M. Nakajima, Y. Shen, M. Takeuchi, Q. Huang und T. Fukuda, *Self-Actuating Asymmetric Platinum Catalytic Mobile Nanorobot*, *IEEE Transactions on Robotics* **30**, 33 (2014).
- [45] S. Ebbens, R. A. L. Jones, A. J. Ryan, R. Golestanian und J. R. Howse, *Self-assembled autonomous runners and tumblers*, *Phys. Rev. E* **82**, 015304 (2010).
- [46] Z. Wu, Y. Chen, D. Mukasa, O. S. Pak und W. Gao, *Medical micro/nanorobots in complex media*, *Chemical Society Reviews* **49**, 8088 (2020).
- [47] A. C. H. Tsang, E. Demir, Y. Ding und O. S. Pak, *Roads to Smart Artificial Microswimmers*, *Advanced Intelligent Systems* **2**, 1900137 (2020).
- [48] J. Toner, Y. Tu und S. Ramaswamy, *Hydrodynamics and phases of flocks*, *Annals of Physics* **318**, 170 (2005).
- [49] S. Ramaswamy, *The Mechanics and Statistics of Active Matter*, *Annual Review of Condensed Matter Physics* **1**, 323 (2010).
- [50] M. C. Marchetti, J. F. Joanny, S. Ramaswamy, T. B. Liverpool, J. Prost, M. Rao und R. A. Simha, *Hydrodynamics of soft active matter*, *Rev. Mod. Phys.* **85**, 1143 (2013).
- [51] A. Be'er, B. Ilkanaiv, R. Gross, D. B. Kearns, S. Heidenreich, M. Bär und G. Ariel, *A phase diagram for bacterial swarming*, *Communications Physics* **3**, 66 (2020).
- [52] M. Bär, R. Großmann, S. Heidenreich und F. Peruani, *Self-Propelled Rods: Insights and Perspectives for Active Matter*, *Annual Review of Condensed Matter Physics* **11**, 441 (2020).
- [53] H.-S. Niwa, *Self-organizing Dynamic Model of Fish Schooling*, *Journal of Theoretical Biology* **171**, 123 (1994).

- [54] E. Crosato, L. Jiang, V. Lecheval, J. T. Lizier, X. R. Wang, P. Tichit, G. Theraulaz und M. Prokopenko, *Informative and misinformative interactions in a school of fish*, *Swarm Intelligence* **12**, 283 (2018).
- [55] P. Romanczuk, M. Bär, W. Ebeling, B. Lindner und L. Schimansky-Geier, *Active Brownian particles*, *The European Physical Journal Special Topics* **202**, 1 (2012).
- [56] J. Stenhammar, A. Tiribocchi, R. J. Allen, D. Marenduzzo und M. E. Cates, *Continuum Theory of Phase Separation Kinetics for Active Brownian Particles*, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 145702 (2013).
- [57] N. Kyriakopoulos, F. Ginelli und J. Toner, *Leading birds by their beaks: the response of flocks to external perturbations*, *New Journal of Physics* **18**, 073039 (2016).
- [58] A. Doostmohammadi, T. N. Shendruk, K. Thijssen und J. M. Yeomans, *Onset of meso-scale turbulence in active nematics*, *Nature Communications* **8**, 15326 (2017).
- [59] M. Linkmann, G. Boffetta, M. C. Marchetti und B. Eckhardt, *Phase Transition to Large Scale Coherent Structures in Two-Dimensional Active Matter Turbulence*, *Phys. Rev. Lett.* **122**, 214503 (2019).
- [60] J. Yan, M. Han, J. Zhang, C. Xu, E. Luijten und S. Granick, *Reconfiguring active particles by electrostatic imbalance*, *Nature Materials* **15**, 1095 (2016).
- [61] T. Speck, J. Bialké, A. M. Menzel und H. Löwen, *Effective Cahn-Hilliard Equation for the Phase Separation of Active Brownian Particles*, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 218304 (2014).
- [62] R. Wittkowski, A. Tiribocchi, J. Stenhammar, R. J. Allen, D. Marenduzzo und M. E. Cates, *Scalar ϕ^4 field theory for active-particle phase separation*, *Nature Communications* **5**, 4351 (2014).
- [63] P. Digregorio, D. Levis, A. Suma, L. F. Cugliandolo, G. Gonnella und I. Pagonabarraga, *Full Phase Diagram of Active Brownian Disks: From Melting to Motility-Induced Phase Separation*, *Phys. Rev. Lett.* **121**, 098003 (2018).
- [64] F. Bergmann, L. Rapp und W. Zimmermann, *Active phase separation: A universal approach*, *Phys. Rev. E* **98**, 020603 (2018).
- [65] M. C. Cross und P. C. Hohenberg, *Pattern formation outside of equilibrium*, *Rev. Mod. Phys.* **65**, 851 (1993).
- [66] E. M. Purcell, *Life at low Reynolds number*, *American Journal of Physics* **45**, 3 (1977).
- [67] E. Lauga und T. R. Powers, *The hydrodynamics of swimming microorganisms*, *Reports on Progress in Physics* **72**, 096601 (2009).

- [68] J. M. Yeomans, D. O. Pushkin und H. Shum, *An introduction to the hydrodynamics of swimming microorganisms*, The European Physical Journal Special Topics **223**, 1771 (2014).
- [69] S. E. Spagnolie und E. Lauga, *Hydrodynamics of self-propulsion near a boundary: predictions and accuracy of far-field approximations*, Journal of Fluid Mechanics **700**, 105 (2012).
- [70] B. Liebchen und A. K. Mukhopadhyay, *Interactions in active colloids*, Journal of Physics: Condensed Matter **34**, 083002 (2021).
- [71] R. Alonso-Matilla, B. Chakrabarti und D. Saintillan, *Transport and dispersion of active particles in periodic porous media*, Phys. Rev. Fluids **4**, 043101 (2019).
- [72] L. Angelani, R. Di Leonardo und G. Ruocco, *Self-Starting Micromotors in a Bacterial Bath*, Phys. Rev. Lett. **102**, 048104 (2009).
- [73] A. T. Brown, I. D. Vladescu, A. Dawson, T. Vissers, J. Schwarz-Linek, J. S. Lintuvuori und W. C. K. Poon, *Swimming in a crystal*, Soft Matter **12**, 131 (2016).
- [74] J. Elgeti und G. Gompper, *Self-propelled rods near surfaces*, EPL (Europhysics Letters) **85**, 38002 (2009).
- [75] S. Jung, *Caenorhabditis elegans swimming in a saturated particulate system*, Physics of Fluids **22**, 031903 (2010).
- [76] J. Karbowski, C. J. Cronin, A. Seah, J. E. Mendel, D. Cleary und P. W. Sternberg, *Conservation rules, their breakdown, and optimality in Caenorhabditis sinusoidal locomotion*, Journal of Theoretical Biology **242**, 652 (2006).
- [77] L. D. Landau und E. M. Lifschitz, *VI - Hydrodynamik*, 5. Aufl. (Akad.-Verlag, Berlin, 1991).
- [78] H. Herwig, *Strömungsmechanik - Eine Einführung in die Physik und die mathematische Modellierung von Strömungen* (Springer, Berlin, 2006).
- [79] J. K. Dhont, *An introduction to dynamics of colloids* (Elsevier, Amsterdam, 1996).
- [80] B. Eckhardt, *Introduction. Turbulence transition in pipe flow: 125th anniversary of the publication of Reynolds' paper*, Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences **367**, 449 (2009).
- [81] O. Reynolds, *XXIX. An experimental investigation of the circumstances which determine whether the motion of water shall be direct or sinuous, and of the law of resistance in parallel channels*, Philosophical Transactions of the Royal Society of London **174**, 935 (1883).

- [82] T. Krüger, H. Kusumaatmaja, A. Kuzmin, O. Shardt, G. Silva und E. M. Viggien, *The Lattice Boltzmann Method, Principles and Practice* (Springer, Cham, 2017).
- [83] L. M. Cathles, *Viscosity of the Earth's Mantle*, Bd. 1362 (Princeton University Press, Princeton, 2015).
- [84] G. G. Stokes, *On the Effect of the Internal Friction of Fluids on the Motion of Pendulums*, Transactions of the Cambridge Philosophical Society **9**, 8 (1851).
- [85] M. Doi, S. F. Edwards und S. F. Edwards, *The theory of polymer dynamics*, Bd. 73 (Clarendon Press, Oxford, 1988).
- [86] C. Cercignani, R. Illner und M. Pulvirenti, *The Mathematical Theory of Dilute Gases* (Springer, New York, 1994).
- [87] M. V. Sadvskii, *Statistical Physics -* (De Gruyter, Berlin, 2012).
- [88] M. Colangeli, *From Kinetic Models to Hydrodynamics - Some Novel Results* (Springer, New York, 2013).
- [89] P. L. Bhatnagar, E. P. Gross und M. Krook, *A Model for Collision Processes in Gases. I. Small Amplitude Processes in Charged and Neutral One-Component Systems*, Phys. Rev. **94**, 511 (1954).
- [90] N. G. Hadjiconstantinou, *The limits of Navier-Stokes theory and kinetic extensions for describing small-scale gaseous hydrodynamics*, Physics of Fluids **18**, 111301 (2006).
- [91] E. Lauga und D. Bartolo, *No many-scallop theorem: Collective locomotion of reciprocal swimmers*, Phys. Rev. E **78**, 030901 (2008).
- [92] H. C. Berg und R. A. Anderson, *Bacteria Swim by Rotating their Flagellar Filaments*, Nature **245**, 380 (1973).
- [93] H. C. Berg, *The Rotary Motor of Bacterial Flagella*, Annual Review of Biochemistry **72**, 19 (2003).
- [94] J. Schwarz-Linek, J. Arlt, A. Jepsen, A. Dawson, T. Vissers, D. Miroli, T. Pilizota, V. A. Martinez und W. C. Poon, *Escherichia coli as a model active colloid: A practical introduction*, Colloids and Surfaces B: Biointerfaces **137**, 2 (2016).
- [95] Q. Liao, G. Subramanian, M. P. DeLisa, D. L. Koch und M. Wu, *Pair velocity correlations among swimming Escherichia coli bacteria are determined by force-quadrupole hydrodynamic interactions*, Physics of Fluids **19**, 061701 (2007).
- [96] J. Gray und G. J. Hancock, *The Propulsion of Sea-Urchin Spermatozoa*, Journal of Experimental Biology **32**, 802 (1955).

- [97] Q. Wang und H. G. Othmer, *Computational analysis of amoeboid swimming at low Reynolds number*, Journal of Mathematical Biology **72**, 1893 (2016).
- [98] E. J. Campbell und P. Bagchi, *A computational model of amoeboid cell swimming*, Physics of Fluids **29**, 101902 (2017).
- [99] E. Lauga und R. E. Goldstein, *Dance of the microswimmers*, Physics Today **65**, 30 (2012).
- [100] A. Najafi und R. Golestanian, *Simple swimmer at low Reynolds number: Three linked spheres*, Phys. Rev. E **69**, 062901 (2004).
- [101] M. S. Kumar und P. Philominathan, *Purcell's swimmer revisited*, International Journal of Automation and Computing **9**, 325 (2012).
- [102] K. Schaar, A. Zöttl und H. Stark, *Detention Times of Microswimmers Close to Surfaces: Influence of Hydrodynamic Interactions and Noise*, Phys. Rev. Lett. **115**, 038101 (2015).
- [103] O. Sipos, K. Nagy, R. Di Leonardo und P. Galajda, *Hydrodynamic Trapping of Swimming Bacteria by Convex Walls*, Phys. Rev. Lett. **114**, 258104 (2015).
- [104] D. Takagi, J. Palacci, A. B. Braunschweig, M. J. Shelley und J. Zhang, *Hydrodynamic capture of microswimmers into sphere-bound orbits*, Soft Matter **10**, 1784 (2014).
- [105] S. E. Spagnolie, G. R. Moreno-Flores, D. Bartolo und E. Lauga, *Geometric capture and escape of a microswimmer colliding with an obstacle*, Soft Matter **11**, 3396 (2015).
- [106] V. Kantsler, J. Dunkel, M. Polin und R. E. Goldstein, *Ciliary contact interactions dominate surface scattering of swimming eukaryotes*, Proceedings of the National Academy of Sciences **110**, 1187 (2013).
- [107] K. Drescher, J. Dunkel, L. H. Cisneros, S. Ganguly und R. E. Goldstein, *Fluid dynamics and noise in bacterial cell-cell and cell-surface scattering*, Proceedings of the National Academy of Sciences **108**, 10940 (2011).
- [108] E. Lushi, V. Kantsler und R. E. Goldstein, *Scattering of biflagellate microswimmers from surfaces*, Phys. Rev. E **96**, 023102 (2017).
- [109] R. Di Leonardo, L. Angelani, D. Dell'Arciprete, G. Ruocco, V. Iebba, S. Schippa, M. P. Conte, F. Mecarini, F. De Angelis und E. Di Fabrizio, *Bacterial ratchet motors*, Proceedings of the National Academy of Sciences **107**, 9541 (2010).
- [110] S. K. Lamoreaux, *Demonstration of the Casimir Force in the 0.6 to 6 μ m Range*, Phys. Rev. Lett. **78**, 5 (1997).

- [111] D. Ray, C. Reichhardt und C. J. O. Reichhardt, *Casimir effect in active matter systems*, Phys. Rev. E **90**, 013019 (2014).
- [112] J. Harder, S. A. Mallory, C. Tung, C. Valeriani und A. Cacciuto, *The role of particle shape in active depletion*, The Journal of Chemical Physics **141**, 194901 (2014).
- [113] S. K. Das, S. A. Egorov, B. Trefz, P. Virnau und K. Binder, *Phase Behavior of Active Swimmers in Depletants: Molecular Dynamics and Integral Equation Theory*, Phys. Rev. Lett. **112**, 198301 (2014).
- [114] M. Contino, E. Lushi, I. Tuval, V. Kantsler und M. Polin, *Microalgae Scatter off Solid Surfaces by Hydrodynamic and Contact Forces*, Phys. Rev. Lett. **115**, 258102 (2015).
- [115] B. Ezhilan, R. Alonso-Matilla und D. Saintillan, *On the distribution and swim pressure of run-and-tumble particles in confinement*, Journal of Fluid Mechanics **781**, R4 (2015).
- [116] M. Brun-Cosme-Bruny, A. Förtsch, W. Zimmermann, E. Bertin, P. Peyla und S. Rafai, *Deflection of phototactic microswimmers through obstacle arrays*, Phys. Rev. Fluids **5**, 093302 (2020).
- [117] M. Laumann, A. Förtsch, E. Kanso und W. Zimmermann, *Engineering passive swimmers by shaking liquids*, New Journal of Physics **21**, 073012 (2019).
- [118] W. Schmidt, A. Förtsch, M. Laumann und W. Zimmermann, *Oscillating non-progressing flows induce directed cell motion*, Phys. Rev. Fluids **7**, L032201 (2022).
- [119] S. Chen und G. D. Doolen, *Lattice Boltzmann method for fluid flows*, Annual Review of Fluid Mechanics **30**, 329 (1998).
- [120] J. Hardy, Y. Pomeau und O. de Pazzis, *Time evolution of a two-dimensional model system. I. Invariant states and time correlation functions*, Journal of Mathematical Physics **14**, 1746 (1973).
- [121] J. Hardy, O. de Pazzis und Y. Pomeau, *Molecular dynamics of a classical lattice gas: Transport properties and time correlation functions*, Phys. Rev. A **13**, 1949 (1976).
- [122] G. R. McNamara und G. Zanetti, *Use of the Boltzmann Equation to Simulate Lattice-Gas Automata*, Phys. Rev. Lett. **61**, 2332 (1988).
- [123] C. K. Aidun und J. R. Clausen, *Lattice-Boltzmann Method for Complex Flows*, Annual Review of Fluid Mechanics **42**, 439 (2010).

- [124] M. E. Cates, K. Stratford, R. Adhikari, P. Stansell, J.-C. Desplat, I. Pagonabarraga und A. J. Wagner, *Simulating colloid hydrodynamics with lattice Boltzmann methods*, Journal of Physics: Condensed Matter **16**, S3903 (2004).
- [125] A. J. C. Ladd, *Numerical simulations of particulate suspensions via a discretized Boltzmann equation. Part 1. Theoretical foundation*, Journal of Fluid Mechanics **271**, 285 (1994).
- [126] P. V. Coveney, S. Succi, D. d’Humières, I. Ginzburg, M. Krafczyk, P. Lallemand und L.-S. Luo, *Multiple-relaxation-time lattice Boltzmann models in three dimensions*, Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences **360**, 437 (2002).
- [127] P. V. Coveney, S. Succi, D. d’Humières, I. Ginzburg, M. Krafczyk, P. Lallemand und L.-S. Luo, *Multiple-relaxation-time lattice Boltzmann models in three dimensions*, Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences **360**, 437 (2002).
- [128] C. K. Aidun, Y. Lu und E.-J. Ding, *Direct analysis of particulate suspensions with inertia using the discrete Boltzmann equation*, Journal of Fluid Mechanics **373**, 287 (1998).
- [129] N.-Q. Nguyen und A. J. C. Ladd, *Lubrication corrections for lattice-Boltzmann simulations of particle suspensions*, Phys. Rev. E **66**, 046708 (2002).
- [130] Z. Guo, C. Zheng und B. Shi, *Discrete lattice effects on the forcing term in the lattice Boltzmann method*, Phys. Rev. E **65**, 046308 (2002).
- [131] X. He, X. Shan und G. D. Doolen, *Discrete Boltzmann equation model for nonideal gases*, Phys. Rev. E **57**, R13 (1998).
- [132] Q. Li, K. Luo, Q. Kang, Y. He, Q. Chen und Q. Liu, *Lattice Boltzmann methods for multiphase flow and phase-change heat transfer*, Progress in Energy and Combustion Science **52**, 62 (2016).
- [133] C. S. Peskin, *Numerical analysis of blood flow in the heart*, Journal of Computational Physics **25**, 220 (1977).
- [134] C. S. Peskin, *The immersed boundary method*, Acta Numerica **11**, 479 (2002).
- [135] J.-D. Rochaix, *Chlamydomonas reinhardtii as the photosynthetic yeast*, Annual Review of Genetics **29**, 209 (1995).
- [136] D. Cortese und K. Y. Wan, *Control of Helical Navigation by Three-Dimensional Flagellar Beating*, Phys. Rev. Lett. **126**, 088003 (2021).

- [137] R. R. Bennett und R. Golestanian, *Emergent Run-and-Tumble Behavior in a Simple Model of Chlamydomonas with Intrinsic Noise*, Phys. Rev. Lett. **110**, 148102 (2013).
- [138] U. Ruffer und W. Nultsch, *High-speed cinematographic analysis of the movement of Chlamydomonas*, Cell Motility **5**, 251 (1985).
- [139] K. W. Foster und R. D. Smyth, *Light Antennas in phototactic algae*, Microbiological reviews **44**, 572 (1980).
- [140] M. Martin, A. Barzyk, E. Bertin, P. Peyla und S. Rafai, *Photofocusing: Light and flow of phototactic microswimmer suspension*, Phys. Rev. E **93**, 051101 (2016).
- [141] G. B. Witman, *Chlamydomonas phototaxis*, Trends in Cell Biology **3**, 403 (1993).
- [142] R. L. Stavis und R. Hirschberg, *Phototaxis in Chlamydomonas reinhardtii*, Journal of Cell Biology **59**, 367 (1973).
- [143] T. J. Bøddeker, S. Karpitschka, C. T. Kreis, Q. Magdelaine und O. Bäumchen, *Dynamic force measurements on swimming Chlamydomonas cells using micropipette force sensors*, Journal of The Royal Society Interface **17**, 20190580 (2020).
- [144] K. Batyrova und P. C. Hallenbeck, *Hydrogen Production by a Chlamydomonas reinhardtii Strain with Inducible Expression of Photosystem II*, International Journal of Molecular Sciences **18**, 647 (2017).
- [145] A. A. Tsygankov, S. N. Kosourov, I. V. Tolstygina, M. L. Ghirardi und M. Seibert, *Hydrogen production by sulfur-deprived Chlamydomonas reinhardtii under photoautotrophic conditions*, International Journal of Hydrogen Energy **31**, 1574 (2006).
- [146] M. Mirzakanloo, S. Esmailzadeh und M.-R. Alam, *Active cloaking in Stokes flows via reinforcement learning*, Journal of Fluid Mechanics **903**, A34 (2020).
- [147] N. Isogai, R. Kamiya und K. Yoshimura, *Dominance between the Two Flagella during Phototactic Turning in Chlamydomonas*, Zoological Science **17**, 1261 (2000).
- [148] H. Crenshaw, C. Ciampaglio und M. McHenry, *Analysis of the three-dimensional trajectories of organisms: estimates of velocity, curvature and torsion from positional information*, Journal of Experimental Biology **203**, 961 (2000).
- [149] J. S. Guasto, K. A. Johnson und J. P. Gollub, *Oscillatory Flows Induced by Microorganisms Swimming in Two Dimensions*, Phys. Rev. Lett. **105**, 168102 (2010).
- [150] K. Schaller, R. David und R. Uhl, *How Chlamydomonas keeps track of the light once it has reached the right phototactic orientation*, Biophysical Journal **73**, 1562 (1997).

- [151] H. Crenshaw, *Kinematics of helical motion of microorganisms capable of motion with four degrees of freedom*, Biophysical Journal **56**, 1029 (1989).
- [152] M. Polin, I. Tuval, K. Drescher, J. P. Gollub und R. E. Goldstein, *Chlamydomonas Swims with Two Gears in a Eukaryotic Version of Run-and-Tumble Locomotion*, Science **325**, 487 (2009).
- [153] U. Ruffer und W. Nultsch, *Flagellar photoresponses of Chlamydomonas cells held on micropipettes: I. Change in flagellar beat frequency*, Cell Motility **15**, 162 (1990).
- [154] N. Ueki, T. Ide, S. Mochiji, Y. Kobayashi, R. Tokutsu, N. Ohnishi, K. Yamaguchi, S. Shigenobu, K. Tanaka, J. Minagawa, T. Hisabori, M. Hirono und K.-i. Wakabayashi, *Eyespot-dependent determination of the phototactic sign in Chlamydomonas reinhardtii*, Proceedings of the National Academy of Sciences **113**, 5299 (2016).
- [155] T. Ide, S. Mochiji, N. Ueki, K. Yamaguchi, S. Shigenobu, M. Hirono und K.-i. Wakabayashi, *Identification of the aggl mutation responsible for negative phototaxis in a "wild-type" strain of Chlamydomonas reinhardtii*, Biochemistry and Biophysics Reports **7**, 379 (2016).
- [156] D. Qin, Y. Xia und G. M. Whitesides, *Soft lithography for micro- and nanoscale patterning*, Nature Protocols **5**, 491 (2010).
- [157] F. J. Schwarzendahl und M. G. Mazza, *Maximum in density heterogeneities of active swimmers*, Soft Matter **14**, 4666 (2018).
- [158] J. D. Weeks, D. Chandler und H. C. Andersen, *Role of Repulsive Forces in Determining the Equilibrium Structure of Simple Liquids*, The Journal of Chemical Physics **54**, 5237 (1971).
- [159] J. Hassink, L. Bouwman, K. Zwart und L. Brussaard, *Relationships between habitable pore space, soil biota and mineralization rates in grassland soils*, Soil Biology and Biochemistry **25**, 47 (1993).
- [160] M. Vos, A. B. Wolf, S. J. Jennings und G. A. Kowalchuk, *Micro-scale determinants of bacterial diversity in soil*, FEMS Microbiology Reviews **37**, 936 (2013).
- [161] J. K. Carson, V. Gonzalez-Quiñones, D. V. Murphy, C. Hinz, J. A. Shaw und D. B. Gleeson, *Low Pore Connectivity Increases Bacterial Diversity in Soil*, Applied and Environmental Microbiology **76**, 3936 (2010).
- [162] N. A. Licata, B. Mohari, C. Fuqua und S. Setayeshgar, *Diffusion of Bacterial Cells in Porous Media*, Biophysical Journal **110**, 247 (2016).
- [163] O. Chepizhko und F. Peruani, *Diffusion, Subdiffusion, and Trapping of Active Particles in Heterogeneous Media*, Phys. Rev. Lett. **111**, 160604 (2013).

- [164] M. Brun-Cosme-Bruny, E. Bertin, B. Coasne, P. Peyla und S. Rafai, *Effective diffusivity of microswimmers in a crowded environment*, The Journal of Chemical Physics **150**, 104901 (2019).
- [165] O. Chepizhko, E. G. Altmann und F. Peruani, *Optimal Noise Maximizes Collective Motion in Heterogeneous Media*, Phys. Rev. Lett. **110**, 238101 (2013).
- [166] C. Reichhardt und C. J. O. Reichhardt, *Aspects of jamming in two-dimensional athermal frictionless systems*, Soft Matter **10**, 2932 (2014).
- [167] A. Creppy, E. Clément, C. Douarche, M. V. D'Angelo und H. Auradou, *Effect of motility on the transport of bacteria populations through a porous medium*, Phys. Rev. Fluids **4**, 013102 (2019).
- [168] M. P. MacDonald, G. C. Spalding und K. Dholakia, *Microfluidic sorting in an optical lattice*, Nature **426**, 421 (2003).
- [169] L. R. Huang, E. C. Cox, R. H. Austin und J. C. Sturm, *Continuous Particle Separation Through Deterministic Lateral Displacement*, Science **304**, 987 (2004).
- [170] A. M. Lacasta, J. M. Sancho, A. H. Romero und K. Lindenberg, *Sorting on Periodic Surfaces*, Phys. Rev. Lett. **94**, 160601 (2005).
- [171] C. Reichhardt und C. J. O. Reichhardt, *Collective effects and pattern formation for directional locking of disks moving through obstacle arrays*, Phys. Rev. E **102**, 022608 (2020).
- [172] C. Reichhardt und C. J. O. Reichhardt, *Directional locking effects for active matter particles coupled to a periodic substrate*, Phys. Rev. E **102**, 042616 (2020).
- [173] G. Volpe, I. Buttinoni, D. Vogt, H.-J. Kümmerer und C. Bechinger, *Microswimmers in patterned environments*, Soft Matter **7**, 8810 (2011).
- [174] O. Felfoul, M. Mohammadi, S. Taherkhani, D. de Lanauze, Y. Zhong Xu, D. Loghin, S. Essa, S. Jancik, D. Houle, M. Lafleur, L. Gaboury, M. Tabrizian, N. Kaou, M. Atkin, T. Vuong, G. Batist, N. Beauchemin, D. Radzioch und S. Martel, *Magneto-aerotactic bacteria deliver drug-containing nanoliposomes to tumour hypoxic regions*, Nature Nanotechnology **11**, 941 (2016).
- [175] C. Nikolova und T. Gutierrez, *Use of Microorganisms in the Recovery of Oil From Recalcitrant Oil Reservoirs: Current State of Knowledge, Technological Advances and Future Perspectives*, Frontiers in Microbiology **10**, 2996 (2020).
- [176] J. D. V. Hamme, A. Singh und O. P. Ward, *Recent Advances in Petroleum Microbiology*, Microbiology and Molecular Biology Reviews **67**, 503 (2003).

- [177] H. Ping Chu und X.-y. Li, *Membrane fouling in a membrane bioreactor (MBR): Sludge cake formation and fouling characteristics*, *Biotechnology and Bioengineering* **90**, 323 (2005).
- [178] A. Marty, C. Roques, C. Causserand und P. Bacchin, *Formation of bacterial streamers during filtration in microfluidic systems*, *Biofouling* **28**, 551 (2012).
- [179] C. W. Reynolds, *Flocks, Herds and Schools: A Distributed Behavioral Model*, *SIGGRAPH Computer Graphics* **21**, 25 (1987).
- [180] A. Cavagna und I. Giardina, *Bird Flocks as Condensed Matter*, *Annual Review of Condensed Matter Physics* **5**, 183 (2014).
- [181] S. Bazazi, P. Romanczuk, S. Thomas, L. Schimansky-Geier, J. J. Hale, G. A. Miller, G. A. Sword, S. J. Simpson und I. D. Couzin, *Nutritional state and collective motion: from individuals to mass migration*, *Proceedings of the Royal Society B: Biological Sciences* **278**, 356 (2011).
- [182] A. Garcimartín, D. Maza, J. M. Pastor, D. R. Parisi, C. Martín-Gómez und I. Zuriguel, *Redefining the role of obstacles in pedestrian evacuation*, *New Journal of Physics* **20**, 123025 (2018).
- [183] W. F. Paxton, K. C. Kistler, C. C. Olmeda, A. Sen, S. K. St. Angelo, Y. Cao, T. E. Mallouk, P. E. Lammert und V. H. Crespi, *Catalytic Nanomotors: Autonomous Movement of Striped Nanorods*, *Journal of the American Chemical Society* **126**, 13424 (2004).
- [184] W. Wang, W. Duan, A. Sen und T. E. Mallouk, *Catalytically powered dynamic assembly of rod-shaped nanomotors and passive tracer particles*, *Proceedings of the National Academy of Sciences* **110**, 17744 (2013).
- [185] B. Mahault, X.-c. Jiang, E. Bertin, Y.-q. Ma, A. Patelli, X.-q. Shi und H. Chaté, *Self-Propelled Particles with Velocity Reversals and Ferromagnetic Alignment: Active Matter Class with Second-Order Transition to Quasi-Long-Range Polar Order*, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 258002 (2018).
- [186] O. Chepizhko, M. C. Lionetti, C. Malinverno, C. Giampietro, G. Scita, S. Zapperi und C. A. M. La Porta, *From jamming to collective cell migration through a boundary induced transition*, *Soft Matter* **14**, 3774 (2018).
- [187] A. Mauleon-Amieva, M. Mosayebi, J. E. Hallett, F. Turci, T. B. Liverpool, J. S. van Duijneveldt und C. P. Royall, *Competing active and passive interactions drive amoebalike crystallites and ordered bands in active colloids*, *Phys. Rev. E* **102**, 032609 (2020).

- [188] A. Doostmohammadi, M. F. Adamer, S. P. Thampi und J. M. Yeomans, *Stabilization of active matter by flow-vortex lattices and defect ordering*, Nature Communications **7**, 10557 (2016).
- [189] H. Reinken, D. Nishiguchi, S. Heidenreich, A. Sokolov, M. Bär, S. H. L. Klapp und I. S. Aranson, *Organizing bacterial vortex lattices by periodic obstacle arrays*, Communications Physics **3**, 76 (2020).
- [190] G. Foffano, J. S. Lintuvuori, K. Stratford, M. E. Cates und D. Marenduzzo, *Colloids in Active Fluids: Anomalous Microrheology and Negative Drag*, Phys. Rev. Lett. **109**, 028103 (2012).
- [191] F. Kobayashi, Y. Sasaki, S. Fujii, H. Orihara und T. Nagaya, *Negative viscosity of liquid crystals in the presence of turbulence: Conductivity dependence, phase diagram, and self-oscillation*, Phys. Rev. E **101**, 022702 (2020).
- [192] T. Vicsek, A. Czirók, E. Ben-Jacob, I. Cohen und O. Shochet, *Novel Type of Phase Transition in a System of Self-Driven Particles*, Phys. Rev. Lett. **75**, 1226 (1995).
- [193] F. Jülicher, K. Kruse, J. Prost und J.-F. Joanny, *Active behavior of the Cytoskeleton*, Physics Reports **449**, 3 (2007).
- [194] T. Vicsek und A. Zafeiris, *Collective motion*, Physics Reports **517**, 71 (2012).
- [195] L. Rapp, F. Bergmann und W. Zimmermann, *Systematic extension of the Cahn-Hilliard model for motility-induced phase separation*, The European Physical Journal E **42**, 57 (2019).
- [196] L. Rapp und W. Zimmermann, *Universal aspects of collective behavior in chemotactic systems*, Phys. Rev. E **100**, 032609 (2019).
- [197] P. Fromherz, *Spatio-temporal patterns in the fluid-mosaic model of membranes*, Biochimica et Biophysica Acta (BBA) - Biomembranes **944**, 108 (1988).
- [198] P. Fromherz, *Dissipative spinodal condensation of membrane proteins*, Chemical Physics Letters **154**, 147 (1989).
- [199] T. Frohoff-Hülsmann und U. Thiele, *Localized states in coupled Cahn-Hilliard equations*, IMA Journal of Applied Mathematics **86**, 924 (2021).
- [200] T. Frohoff-Hülsmann, J. Wrembel und U. Thiele, *Suppression of coarsening and emergence of oscillatory behavior in a Cahn-Hilliard model with nonvariational coupling*, Phys. Rev. E **103**, 042602 (2021).
- [201] S. Saha, J. Agudo-Canalejo und R. Golestanian, *Scalar Active Mixtures: The Non-reciprocal Cahn-Hilliard Model*, Phys. Rev. X **10**, 041009 (2020).

- [202] Z. You, A. Baskaran und M. C. Marchetti, *Nonreciprocity as a generic route to traveling states*, Proceedings of the National Academy of Sciences **117**, 19767 (2020).
- [203] S. A. M. Loos und S. H. L. Klapp, *Irreversibility, heat and information flows induced by non-reciprocal interactions*, New Journal of Physics **22**, 123051 (2020).
- [204] A. V. Ivlev, J. Bartnick, M. Heinen, C.-R. Du, V. Nosenko und H. Löwen, *Statistical Mechanics where Newton's Third Law is Broken*, Phys. Rev. X **5**, 011035 (2015).
- [205] L. Schimansky-Geier, B. Lindner, S. Milster und A. B. Neiman, *Demixing of two species via reciprocally concentration-dependent diffusivity*, Phys. Rev. E **103**, 022113 (2021).
- [206] J. Grauer, H. Löwen, A. Be'er und B. Liebchen, *Swarm Hunting and Cluster Ejections in Chemically Communicating Active Mixtures*, Scientific Reports **10**, 5594 (2020).
- [207] V. Ouazan-Reboul, J. Agudo-Canalejo und R. Golestanian, *Non-equilibrium phase separation in mixtures of catalytically active particles: size dispersity and screening effects*, The European Physical Journal E **44**, 113 (2021).
- [208] J. Guckenheimer und P. Holmes, *Nonlinear oscillations, dynamical systems, and bifurcations of vector fields*, Bd. 42 (Springer, New York, 1983).
- [209] A. C. Newell und J. A. Whitehead, *Finite bandwidth, finite amplitude convection*, Journal of Fluid Mechanics **38**, 279 (1969).
- [210] J. W. Cahn und J. E. Hilliard, *Free Energy of a Nonuniform System. I. Interfacial Free Energy*, The Journal of Chemical Physics **28**, 258 (1958).
- [211] J. W. Cahn, *On spinodal decomposition*, Acta Metallurgica **9**, 795 (1961).
- [212] J. Lee, *Spinodal decomposition in quenched correlated fields*, Physica A: Statistical Mechanics and its Applications **210**, 127 (1994).
- [213] A. Bray, *Theory of phase-ordering kinetics*, Advances in Physics **43**, 357 (1994).
- [214] M. Cross und H. Greenside, *Pattern Formation and Dynamics in Nonequilibrium Systems* (Cambridge University Press, Cambridge, 2009).
- [215] Y. Kuramoto, *Chemical Oscillations, Waves, and Turbulence* (Springer, Berlin, 1984).
- [216] F. Schwabl, *Statistische Mechanik* (Springer, Berlin, Heidelberg, 2013).
- [217] H. Löwen, *Inertial effects of self-propelled particles: From active Brownian to active Langevin motion*, The Journal of Chemical Physics **152**, 040901 (2020).

- [218] Y. Fily und M. C. Marchetti, *Athermal Phase Separation of Self-Propelled Particles with No Alignment*, Phys. Rev. Lett. **108**, 235702 (2012).
- [219] J. Bialké, H. Löwen und T. Speck, *Microscopic theory for the phase separation of self-propelled repulsive disks*, **103**, 30008 (2013).
- [220] F. Schweitzer und L. Schimansky-Geier, *Clustering of “active” walkers in a two-component system*, Physica A: Statistical Mechanics and its Applications **206**, 359 (1994).
- [221] G. E. Uhlenbeck und L. S. Ornstein, *On the Theory of the Brownian Motion*, Phys. Rev. **36**, 823 (1930).
- [222] T. Speck, *Collective behavior of active Brownian particles: From microscopic clustering to macroscopic phase separation*, The European Physical Journal Special Topics **225**, 2287 (2016).
- [223] J. Adler, *Effect of Amino Acids and Oxygen on Chemotaxis in Escherichia coli*, Journal of Bacteriology **92**, 121 (1966).
- [224] J. Adler, *Chemotaxis in Bacteria*, Science **153**, 708 (1966).
- [225] E. F. Keller und L. A. Segel, *Initiation of slime mold aggregation viewed as an instability*, Journal of Theoretical Biology **26**, 399 (1970).
- [226] P. Romanczuk, U. Erdmann, H. Engel und L. Schimansky-Geier, *Beyond the Keller-Segel model*, The European Physical Journal Special Topics **157**, 61 (2008).
- [227] E. F. Keller und L. A. Segel, *Model for chemotaxis*, Journal of Theoretical Biology **30**, 225 (1971).
- [228] T. Hillen und K. J. Painter, *A user’s guide to PDE models for chemotaxis*, Journal of Mathematical Biology **58**, 183 (2008).
- [229] K. Painter und T. Hillen, *Volume-filling and quorum-sensing in models for chemosensitive movement*, Canadian Applied Mathematics Quarterly **10**, 501 (2002).
- [230] D. Gottlieb und S. A. Orszag, *Numerical Analysis of Spectral Methods - Theory and Applications* (SIAM, Philadelphia, 1977).
- [231] L. Chen und J. Shen, *Applications of semi-implicit Fourier-spectral method to phase field equations*, Computer Physics Communications **108**, 147 (1998).
- [232] M. Frigo und S. Johnson, *The Design and Implementation of FFTW3*, Proceedings of the IEEE **93**, 216 (2005).
- [233] V. N. Malozemov und S. M. Masharsky, *Foundations of Discrete Harmonic Analysis* (Birkhäuser, Cham, 2020).

- [234] M. Cheng und J. A. Warren, *An efficient algorithm for solving the phase field crystal model*, Journal of Computational Physics **227**, 6241 (2008).
- [235] R. Toral, A. Chakrabarti und J. D. Gunton, *Large scale simulations of the two-dimensional Cahn-Hilliard model*, Physica A: Statistical Mechanics and its Applications **213**, 41 (1995).
- [236] J. Zhu, L.-Q. Chen, J. Shen und V. Tikare, *Coarsening kinetics from a variable-mobility Cahn-Hilliard equation: Application of a semi-implicit Fourier spectral method*, Phys. Rev. E **60**, 3564 (1999).
- [237] E. Anderson, Z. Bai, C. Bischof, S. Blackford, J. Demmel, J. Dongarra, J. Du Croz, A. Greenbaum, S. Hammarling, A. McKenney und D. Sorensen, *LAPACK Users' Guide*, Third (Society for Industrial und Applied Mathematics, Philadelphia, 1999).
- [238] R. Toral, A. Chakrabarti und J. D. Gunton, *Numerical Study of the Cahn-Hilliard Equation in Three Dimensions*, Phys. Rev. Lett. **60**, 2311 (1988).
- [239] D. Horstmann, *Generalizing the Keller–Segel Model: Lyapunov Functionals, Steady State Analysis, and Blow-Up Results for Multi-species Chemotaxis Models in the Presence of Attraction and Repulsion Between Competitive Interacting Species*, Journal of Nonlinear Science **21**, 231 (2011).
- [240] H. Knútsdóttir, E. Pálsson und L. Edelstein-Keshet, *Mathematical model of macrophage-facilitated breast cancer cells invasion*, Journal of Theoretical Biology **357**, 184 (2014).
- [241] J. Agudo-Canalejo und R. Golestanian, *Active Phase Separation in Mixtures of Chemically Interacting Particles*, Phys. Rev. Lett. **123**, 018101 (2019).
- [242] D. Schüler, S. Alonso, A. Torcini und M. Bär, *Spatio-temporal dynamics induced by competing instabilities in two asymmetrically coupled nonlinear evolution equations*, Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science **24**, 043142 (2014).
- [243] S. R. d. Groot und P. Mazur, *Non-equilibrium Thermodynamics* (Dover Publications Inc., New York, 1984).
- [244] R. Livi und P. Politi, *Nonequilibrium Statistical Physics - A Modern Perspective* (Cambridge University Press, Cambridge, 2017).
- [245] A. M. Zhabotinsky, M. Dolnik und I. R. Epstein, *Pattern formation arising from wave instability in a simple reaction-diffusion system*, The Journal of Chemical Physics **103**, 10306 (1995).

- [246] D. Walgraef, *Spatio-Temporal Pattern Formation - With Examples from Physics, Chemistry, and Materials Science* (Springer, New York, Heidelberg, 1997).
- [247] H. R. Brand, P. C. Hohenberg und V. Steinberg, *Codimension-2 bifurcations for convection in binary fluid mixtures*, Phys. Rev. A **30**, 2548 (1984).
- [248] M. C. Cross und K. Kim, *Linear instability and the codimension-2 region in binary fluid convection between rigid impermeable boundaries*, Phys. Rev. A **37**, 3909 (1988).
- [249] L. Kramer, E. Bodenschatz, W. Pesch, W. Thom und W. Zimmermann, *Invited Lecture. New results on the electrohydrodynamic instability in nematics*, Liquid Crystals **5**, 699 (1989).
- [250] W. Zimmermann, A. Ogawa, S. Kai, K. Kawasaki und T. Kawakatsu, *Wavelength Competition in Convective Systems*, **24**, 217 (1993).
- [251] B. Liebchen, D. Marenduzzo, I. Pagonabarraga und M. E. Cates, *Clustering and Pattern Formation in Chemorepulsive Active Colloids*, Phys. Rev. Lett. **115**, 258301 (2015).
- [252] P. C. Matthews und S. M. Cox, *Pattern formation with a conservation law*, Nonlinearity **13**, 1293 (2000).
- [253] R. C. Desai und R. Kapral, *Dynamics of Self-Organized and Self-Assembled Structures* (Cambridge University Press, Cambridge, 2009).
- [254] F. H. Busse, *Non-linear properties of thermal convection*, Reports on Progress in Physics **41**, 1929 (1978).
- [255] M. Ruppert und W. Zimmermann, *On the bandwidth of stable nonlinear stripe patterns in finite size systems*, Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science **31**, 113136 (2021).
- [256] K. R. Elder, J. Viñals und M. Grant, *Ordering Dynamics in the Two-Dimensional Stochastic Swift-Hohenberg Equation*, Phys. Rev. Lett. **68**, 3024 (1992).
- [257] M. C. Cross und D. I. Meiron, *Domain Coarsening in Systems Far from Equilibrium*, Phys. Rev. Lett. **75**, 2152 (1995).
- [258] T. M. Rogers und R. C. Desai, *Numerical study of late-stage coarsening for off-critical quenches in the Cahn-Hilliard equation of phase separation*, Phys. Rev. B **39**, 11956 (1989).
- [259] M. C. Cross, *Traveling and Standing Waves in Binary-Fluid Convection in Finite Geometries*, Phys. Rev. Lett. **57**, 2935 (1986).

- [260] M. C. Cross, *Structure of nonlinear traveling-wave states in finite geometries*, Phys. Rev. A **38**, 3593 (1988).
- [261] E. Moses, J. Fineberg und V. Steinberg, *Multistability and confined traveling-wave patterns in a convecting binary mixture*, Phys. Rev. A **35**, 2757 (1987).
- [262] R. Heinrichs, G. Ahlers und D. S. Cannell, *Traveling waves and spatial variation in the convection of a binary mixture*, Phys. Rev. A **35**, 2761 (1987).
- [263] N. Garnier, A. Chiffaudel und F. Daviaud, *Nonlinear dynamics of waves and modulated waves in 1D thermocapillary flows. II. Convective/absolute transitions*, Physica D: Nonlinear Phenomena **174**, 30 (2003).
- [264] F. Bergmann, L. Rapp und W. Zimmermann, *Size matters for nonlinear (protein) wave patterns*, New Journal of Physics **20**, 072001 (2018).
- [265] R. Peter, M. Hilt, F. Ziebert, J. Bammert, C. Erlenkämper, N. Lorscheid, C. Weitenberg, A. Winter, M. Hammele und W. Zimmermann, *Stripe-hexagon competition in forced pattern-forming systems with broken up-down symmetry*, Phys. Rev. E **71**, 046212 (2005).
- [266] S. Kondo und T. Miura, *Reaction-Diffusion Model as a Framework for Understanding Biological Pattern Formation*, Science **329**, 1616 (2010).
- [267] D. Etling und R. A. Brown, *Roll vortices in the planetary boundary layer: A review*, Boundary-Layer Meteorology **65**, 215 (1993).
- [268] A. C. Newell, T. Passot und J. Lega, *Order Parameter Equations for Patterns*, Annual Review of Fluid Mechanics **25**, 399 (1993).
- [269] I. S. Aranson und L. Kramer, *The world of the complex Ginzburg-Landau equation*, Rev. Mod. Phys. **74**, 99 (2002).
- [270] F. Bergmann und W. Zimmermann, *On system-spanning demixing properties of cell polarization*, PLoS ONE **14**, e0218328 (2019).
- [271] W. Zimmermann, *Stability of traveling waves for a conserved field*, Physica A: Statistical Mechanics and its Applications **237**, 405 (1997).
- [272] M. Hilt, W. Pesch und W. Zimmermann, *Two Paradigms of Spatiotemporal Chaos : Spirals in Convection and Waves on Biomembranes*, in NIC Symposium 2004, Proceedings, Bd. 20, NIC series (2004), 453.
- [273] B. Shraiman, A. Pumir, W. van Saarloos, P. Hohenberg, H. Chaté und M. Holen, *Spatiotemporal chaos in the one-dimensional complex Ginzburg-Landau equation*, Physica D: Nonlinear Phenomena **57**, 241 (1992).

- [274] H. Chate, *Spatiotemporal intermittency regimes of the one-dimensional complex Ginzburg-Landau equation*, *Nonlinearity* **7**, 185 (1994).
- [275] R. P. Johnson, *Scent marking in mammals*, *Animal Behaviour* **21**, 521 (1973).
- [276] D. Otte, *Effects and Functions in the Evolution of Signaling Systems*, *Annual Review of Ecology and Systematics* **5**, 385 (1974).
- [277] J. Mallet und M. Joron, *Evolution of Diversity in Warning Color and Mimicry: Polymorphisms, Shifting Balance, and Speciation*, *Annual Review of Ecology and Systematics* **30**, 201 (1999).
- [278] C. Brönmark und L.-A. Hansson, *Chemical Communication in Aquatic Systems: An Introduction*, *Oikos* **88**, 103 (2000).
- [279] M. Ayasse, R. J. Paxton und J. Tengö, *Mating behavior and chemical communication in the order Hymenoptera*, *Annual Review of Entomology* **46**, 31 (2001).
- [280] R. B. Cocroft und R. L. Rodríguez, *The Behavioral Ecology of Insect Vibrational Communication*, *BioScience* **55**, 323 (2005).
- [281] M. Stevens und G. D. Ruxton, *Linking the evolution and form of warning coloration in nature*, *Proceedings of the Royal Society B: Biological Sciences* **279**, 417 (2012).
- [282] R. A. Raguso, *Wake Up and Smell the Roses: The Ecology and Evolution of Floral Scent*, *Annual Review of Ecology, Evolution, and Systematics* **39**, 549 (2008).
- [283] F. P. Schiestl, *The evolution of floral scent and insect chemical communication*, *Ecology Letters* **13**, 643 (2010).
- [284] J. F. Eisenberg und D. G. Kleiman, *Olfactory Communication in Mammals*, *Annual Review of Ecology and Systematics* **3**, 1 (1972).
- [285] P. K. Maini, M. R. Myerscough, K. H. Winter und J. D. Murray, *Bifurcating spatially heterogeneous solutions in a chemotaxis model for biological pattern generation*, *Bulletin of Mathematical Biology* **53**, 701 (1991).
- [286] M. Myerscough, P. Maini und K. Painter, *Pattern Formation in a Generalized Chemotactic Model*, *Bulletin of Mathematical Biology* **60**, 1 (1998).
- [287] M. Meyer, L. Schimansky-Geier und P. Romanczuk, *Active Brownian agents with concentration-dependent chemotactic sensitivity*, *Phys. Rev. E* **89**, 022711 (2014).
- [288] M. J. Tindall, P. K. Maini, S. L. Porter und J. P. Armitage, *Overview of Mathematical Approaches Used to Model Bacterial Chemotaxis II: Bacterial Populations*, *Bulletin of Mathematical Biology* **70**, 1570 (2008).

- [289] M. B. Miller und B. L. Bassler, *Quorum Sensing in Bacteria*, Annual Review of Microbiology **55**, 165 (2001).
- [290] R. T. Pena, L. Blasco, A. Ambroa, B. González-Pedrajo, L. Fernández-García, M. López, I. Bleriot, G. Bou, R. García-Contreras, T. K. Wood und M. Tomás, *Relationship Between Quorum Sensing and Secretion Systems*, Frontiers in Microbiology **10**, 1100 (2019).
- [291] Maplesoft, a division of Waterloo Maple Inc., *Maple*, Version 2019, Waterloo, Ontario, 2019.
- [292] W. R. Inc., *Mathematica*, Version 13.0.0.

Akronyme

BFR Benjamin-Feir Resonanz. 150, 152, 160

BGK Bhatnagar-Gross-Krook. 15, 22

CH Cahn-Hilliard. 64–66, 69–71, 73, 84–87, 89–92, 94, 97, 98, 101, 105, 106, 109, 111, 113, 115–118, 122, 129, 130, 146, 155–157, 161, 165, 181, VI

CR Chlamydomonas reinhardtii. 2, 3, 8, 17, 20, 21, 30–35, 37–39, 41–45, 47, 48, 52, 56, 57

CTP Co-Dimension Two Point. 66, 98, 101, 117, 137

DKM Dissipatives-Kollosions-Modell. 36, 38, 47, 49, 54–59

GTOPS gekoppelten Transportgleichungen für oszillatorische Phasen-Separation. 65, 66, 90, 92, 94, 96, 97, 117, 122, 123, 126, 128–131, 135–137, 144, 148, 158, 160, 161, 163, 165, 167, 170, 175, 177–179, 181, VII

HI hydrodynamic interaction. 47, 54, 56, 57

Kn Knudsen-Zahl. 11, 15

KS Keller-Segel. 168, 169, 178, 179

LBM Lattice Boltzmann Methode. 8, 21–24, 27, 28, 34–36, 38, 39, 47, 54–59, 209

LQ laufende Quadrate. 139, 141, 142

LW laufende Wellen. 105–108, 115, 116, 118, 138–146, 148–150, 152–154, 159

Ma Mach-Zahl. 28

MiMo Minimal Modell. 66, 90, 92, 97–99, 101–115, 117, 118, 137, 154, 179, VI

MIPS motility induced phase separation. 64

NSG Navier-Stokes Gleichung. 8, 12, 15, 21

OPG Ordnungsparametergleichung. 65, 66, 89, 90, 107, 122, 126, 146, 158–161, 176, 181, 182

OSQ oszillierende stehende Quadrate. 107, 115, 116, 118, 139, 142–144, 149–152, 159, 160

PSM Pseudo-Spektral Methode. 79, 80, 82, 83

Re Reynolds-Zahl. 7, 8, 12, 13, 16, 17, 27, 30, V

RZC Raum-Zeit Chaos. 151, 152, 160

SW stehende Welle. 107, 114–116, 118, 139–141, 143, 144, 148–150, 154, 155, 159

Teil III.

Appendix

A. Simulation der Mikroschwimmer

Bei der Verwendung von Simulationsmethoden wie der LBM zur Beschreibung von Systemen sehr kleiner Reynoldszahlen kommt es häufig zu dem Problem, dass es nicht möglich ist, diese exakt nachzubilden, da dies Simulationen mit einer nicht realisierbaren Anzahl an Zeitschritten bedeuten würde [124]. Wie in [124] allerdings erklärt wird, ist dies häufig nicht nötig, denn im Stokes-Limes sind die Strömungsprofile unterhalb einer Grenze quasi-statisch und andere Fehlerquellen wie Diskretisierung haben mehr Einfluss als die Reynoldszahl-Änderung unter diesem Grenzwert. Somit genügt es eine Simulation mit einer genügend kleinen Reynoldszahl durchzuführen, bei der das Strömungsprofil einen hinreichend kleinen Fehler aufweist, welche systemspezifisch ist.

Um diese Grenze der Reynoldszahl zu bestimmen, wird in [124] eine hochaufgelöste Vergleichssimulation eines Beispielproblems bei sehr kleinen Reynoldszahlen Re_c durchgeführt. Anschließend werden Testsimulationen bei höheren Reynoldszahlen mit der hochaufgelösten Simulation verglichen und getestet, wie groß der relative Fehler der jeweiligen Simulation ist. Somit kann bestimmt werden, welche Reynoldszahl hinreichend klein ist, um einen annehmbar kleinen Fehler im Strömungsprofil bei möglichst geringer Simulationszeit zu erzielen.

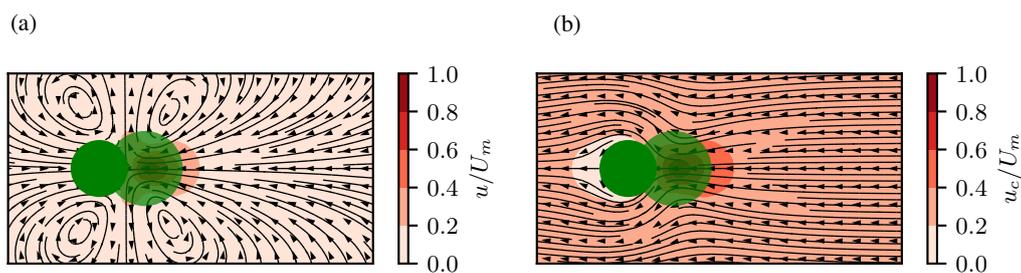


Abb. A.1.: Strömungsprofil der Vergleichssimulation in der xy -Ebene mit $Re \approx 4.2 \cdot 10^{-4}$. Die Strömungsamplituden sind normiert auf die jeweilige maximale Strömungsgeschwindigkeit U_m . In Bild (a) ist das Strömungsprofil $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ im ruhenden System gezeigt, während (b) die relative Strömungsgeschwindigkeit $\mathbf{u}_c(\mathbf{r}) = \mathbf{u}(\mathbf{r}) - V_0 \hat{\mathbf{e}}_x$ im mitbewegten System des Schwimmers mit Schwimmgeschwindigkeit V_0 zeigt. Die jeweiligen Stromamplituden sind normiert mit der maximalen Strömungsamplitude U_m .

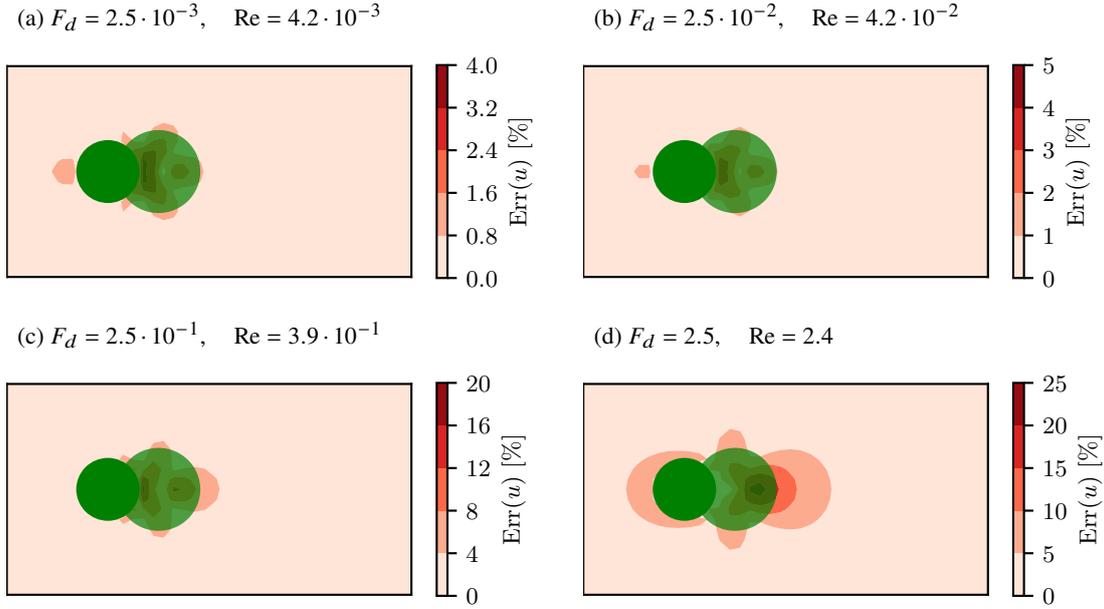


Abb. A.2.: Relativer Fehler aus Gl. (A.1) zwischen dem Strömungsprofil der Vergleichssimulation (siehe Abb. A.1) und der jeweiligen Reynoldszahl (bzw. Dipolkraft F_d). Man erkennt, dass für $F_d = 0.25$ (bzw. $Re \approx 0.4$) der relative Fehler außerhalb des Schwimmers maximal acht Prozent beträgt und in kleiner Entfernung zum Schwimmer bereits auf weniger als vier Prozent abfällt. Für höhere Dipolkräfte steigt der Fehler stark an und man erhält Fehler größer als zehn Prozent bei $F_d = 2.5$.

Diese in [124] vorgestellte Technik wird auch in der vorliegenden Arbeit verwendet. Hierfür wird eine Vergleichssimulation mit periodischen Rändern der Länge $L_x = 2L_{y,z} = \frac{64}{3}a$ und einer Reynoldszahl von $Re_c \approx 4.2 \cdot 10^{-4}$ durchgeführt, in welchem ein einzelner Schwimmer in x -Richtung schwimmt. Das entstehende Strömungsprofil, reskaliert mit der maximalen Strömungsamplitude U_m , ist in Abb. A.1 gezeigt wobei links das Strömungsprofil $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ im ruhenden System und rechts das Strömungsprofil $\mathbf{u}_c(\mathbf{r}) = \mathbf{u}(\mathbf{r}) - V_0 \hat{\mathbf{e}}_x$ im mitbewegten System des Schwimmers mit Geschwindigkeit V_0 dargestellt ist. Anschließend werden durch Variation der Dipolstärke F_d Simulationen mit verschiedenen Reynoldszahlen berechnet und jeweils der Betrag $|\cdot|$ der relativen Fehler

$$\text{Err}(Re) = \left| \left(\frac{\mathbf{u}(\mathbf{r})}{U_m} \right) \Big|_{Re} - \left(\frac{\mathbf{u}(\mathbf{r})}{U_m} \right) \Big|_{Re_c} \right| \quad (\text{A.1})$$

bestimmt. Das Ergebnis ist in Abb. A.2 zu sehen. Für $Re = 0.39$ (bzw. $F_d = 0.25$) ist der relative Fehler des Strömungsprofils außerhalb des Schwimmers maximal acht Prozent und in kleinem Abstand zum Schwimmer bereits auf weniger als vier Prozent abgefallen (siehe Abb. A.2(c)). Dies stimmt auch mit den Erkenntnissen aus [124] überein, worin beschrieben wird, dass für $Re = 0.8$ Fehler im Bereich von fünf Prozent gefunden wurde. Die sich daraus

einstellende Schwimmergeschwindigkeit, welche für die Simulationen verwendet wird, ist $V_0 = 5.4 \cdot 10^{-3}$. Für höhere Werte von Re steigt der relative Fehler stark an und das Strömungsprofil wird folglich nicht gut wiedergegeben (siehe Abb. A.2(d)). Bei der Wahl der Zeitkonstante $\Delta t = 1$ wird somit die Bewegung über die Länge eines Schwimmers $L = a + b + f = 4a$ mit $2.2 \cdot 10^3$ Schritten aufgelöst und liefert somit eine hinreichend gute Genauigkeit für die gewählte Konstante.

Zusätzlich kann noch die Stokes-Zahl St als dimensionslose Größe betrachtet werden, die aus dem Verhältnis der Relaxationszeit der Trägheit τ_r und der typischen Zeitkonstante τ_f einer Kollision beschrieben wird und angibt, ob ein Teilchen den Stromlinien eines Flusses folgt ($St \ll 1$) oder Trägheit dominiert ($St \gg 1$). Für das vorliegende System liefert ein Fit der Einschwingzeit des Schwimmers einen Wert von $\tau_r = 16.9 \approx 17$. Die Kollisionskonstante τ_f wird als Zeit eines Streuvorgangs genommen und berechnet als L_f/V_0 , wobei L_f die Größe des Hindernisses ist. Hierbei kann man verschiedene Abschätzungen treffen und entweder die volle Teilchengröße $L = a + b + f = 4a$, die Zylindergröße der Hindernisse $D = 40a$ oder die Systemgröße $L = 46a$ als Einheitszelle eines Streuvorgangs heranziehen (siehe hierfür Abschnitt 5.2). Mit diesen Werten erhält man eine Stokes-Zahl von $St = 7.7 \cdot 10^{-3} - 6.7 \cdot 10^{-4}$ und befindet sich somit im Limes kleiner Stokeszahlen.

Der Wert $F_d = 0.25$ für die Dipolkraft liefert somit hinreichend gute Ergebnisse bei einer möglichst kurzen Simulationszeit und wird deshalb für die Untersuchungen in dieser Arbeit verwendet.

Eigene Publikationen

Wissenschaftliche Veröffentlichungen

Veröffentlicht

- M. Laumann, A. Förtsch, E. Kanso and W. Zimmermann
Engineering passive swimmers by shaking liquids
New Journal of Physics **21**(7), 073012 (2019) DOI: 10.1088/1367-2630/ab240c
- M. Brun-Cosme-Bruny*, A. Förtsch*, W. Zimmermann, E. Bertin, P. Peyla, and S. Rafai (* These authors contributed equally to this work.)
Deflection of phototactic microswimmers through obstacle arrays
Phys. Rev. Fluids **5**, 093302 – Published 18. September 2020
Editors suggestion & DOI: 10.1103/PhysRevFluids.5.093302
- W. Schmidt, A. Förtsch, M. Laumann and W. Zimmermann
Oscillating non-progressing flows induce directed cell motion
2022 Phys. Rev. Fluids **7** L032201 DOI: 10.1103/PhysRevFluids.7.L032201

In Vorbereitung

- A. Förtsch and W. Zimmermann
Oscillatory demixing in driven and active matter systems: A Universal equation

Diese Arbeit enthält einen Überblick über die Methoden und Ergebnisse aus Teil II.

- A. Förtsch, S. Grimm, M. Ruppert and W. Zimmermann
A mass-conserving Turing model and the predictive power of a perturbation method

In dieser Arbeit wird die in Abschnitt 10.6 gezeigte Störungsentwicklung auf ein dreikomponentiges Reaktions-Diffusions Modell mit Erhaltung in der Nähe des Lifshitz-Punktes angewandt.

Präsentationen

Der Autor dieser Arbeit hat bei den folgenden Konferenzen, Sommer-Schulen und Workshops beigetragen:

- Summer School Cargèse, „Active Complex Matter Cargèse“, **Poster**
12 Juli - 23 Juli 2016, (Cargèse, Frankreich)
- WEH Seminar, „Patterns in Nature - Functions, Variations and Control“, **Poster**
9 Oktober - 12 Oktober, 2016, (Bayreuth, Deutschland)
- DPG Spring Meeting, **Vortrag**
19 März - 24 März 2017, (Dresden, Deutschland)
- COST, „Dynamics of Interfaces in Complex Fluids and Complex Flows“, **Poster**
28 Februar- 3 März 2017, (Erlangen, Deutschland)
- „Blood Flow: Current State and Future Prospects“, **Poster**
9 Oktober - 11 Oktober 2017, (Paris, Frankreich)
- DFH, „Living Fluids“, **Poster**
12 Oktober -13 Oktober 2017, (Paris, Frankreich)
- DPG Spring Meeting, **Poster**
11 März - 16 März 2018, (Berlin, Deutschland)
- „Journées de la Matière Condensée“, **Poster**
27 August - 31 August 2018, (Grenoble, Frankreich)
- Advanced School, „From Complex Fluids to Living Matter“, **Poster**
24 September - 28 September 2018, (Münster, Deutschland)
- DPG Spring Meeting, **Poster**
31 März -05 April 2019, (Regensburg, Deutschland)
- DFH, „Living Fluids“, **Vortrag + Poster**
30 September - 1 Oktober 2019, (Bayreuth, Deutschland)
- DFH, „Living Fluids“, **Poster**
6 Oktober 2020, Online

Danksagung

Zuallererst möchte ich Prof. Dr. Walter Zimmermann danken, für die Betreuung während der Promotion, die Möglichkeiten, mich in einer offenen und aufgeschlossenen Atmosphäre weiterzuentwickeln, an verschiedenen Konferenzen meine Arbeit vorzustellen und für die vielen hilfreichen Diskussionen, über wissenschaftliche Themen und darüber hinaus.

Ich möchte mich auch bei der Gruppe in Grenoble bedanken, insbesondere bei Prof. Dr. Philippe Peyla, für die Kooperation, den fachlichen Austausch sowie der Möglichkeit des Aufenthalts in Frankreich.

Ein Dank auch an alle Kolleginnen und Kollegen während meiner Promotion, insbesondere meinen Zimmerkollegen, für die gute Zusammenarbeit, die erheiternden Kaffeepausen und die zusammen erlebte Zeit am Campus, auf verschiedenen Konferenzen und auch privat. Vielen Dank auch an Markus Hilt für den technischen Support und an Frau Brandt für die organisatorische Unterstützung.

Vielen Dank an meine Bayreuther Freunde, die die Zeit in Bayreuth mit vielen tollen Erinnerungen gefüllt haben.

Ein großer Dank geht an meine Familie, die mir mit Rat und Tat beiseite stehen und mich immer unterstützen.

Mein unendlicher Dank gebührt meiner Frau Anne, ohne die diese Arbeit nicht möglich gewesen wäre und für die ich meine Dankbarkeit nicht annähernd in Worte fassen kann.

Eidesstattliche Versicherung

Hiermit versichere ich an Eides statt, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die von mir angegebenen Quellen und Hilfsmittel verwendet habe.

Weiterhin erkläre ich, dass ich die Hilfe von gewerblichen Promotionsberatern bzw. -vermittlern oder ähnlichen Dienstleistern weder bisher in Anspruch genommen habe, noch künftig in Anspruch nehmen werde.

Zusätzlich erkläre ich hiermit, dass ich keinerlei frühere Promotionsversuche unternommen habe.

Bayreuth, den

Unterschrift