

# Stofftransport & Reaktionsgleichungen

Projekt zur Vorlesung Numerische Simulation  
WS16/17

P. Buchfink   E. Ott   M. Schleicher

February 8, 2017

# Wiederholung: Diffusions-Advektionsgleichung

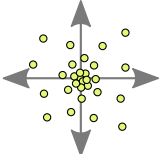
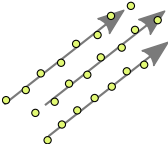
Stofftransport &  
Reaktionsgleichungen

P. Buchfink,  
E. Ott,  
M. Schleicher

RAD-Gleichungen

Lotka-Volterra

Gray-Scott

Diffusion	Advektion
$\frac{\partial s(t, \vec{x})}{\partial t} = \nabla \cdot (D \nabla s(t, \vec{x}))$	$\frac{\partial s(t, \vec{x})}{\partial t} = -\nabla \cdot (\vec{v} s)$
	

(*Stochastic Problems in Physics and Astronomy*, Page 41, S. Chandrasekhar, 1943,  
Reviews of Modern Physics, American Physical Society)

# Zeitschrittbeschränkung

Stofftransport &  
Reaktionsgleichungen

P. Buchfink,  
E. Ott,  
M. Schleicher

RAD-Gleichungen

Lotka-Volterra

Gray-Scott

Für Diffusion:

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x^2 \Delta y^2}{2D(\Delta x^2 + \Delta y^2)}$$

([pauli.uni-muenster.de/tp/fileadmin/lehre/NumMethoden/WS0910/ScriptPDE/Heat.pdf](http://pauli.uni-muenster.de/tp/fileadmin/lehre/NumMethoden/WS0910/ScriptPDE/Heat.pdf),  
Page 12)

Für Advektion: "Vererbt" von Beschränkung für  
Strömungslöser

# Gesamtgleichung

Stofftransport &  
Reaktionsgleichungen

P. Buchfink,  
E. Ott,  
M. Schleicher

RAD-Gleichungen

Lotka-Volterra

Gray-Scott

$$\frac{\partial s(\vec{x}, s, t)}{\partial t} = \nabla \cdot (D \nabla s(t, \vec{x})) - \nabla \cdot (\vec{v} s) + R(\vec{x}, s, t)$$

Erweitert um allgemeinen Reaktionsterm  $R$

# Lotka-Volterra-Modell

Stofftransport &  
Reaktionsgleichungen

P. Buchfink,  
E. Ott,  
M. Schleicher

RAD-Gleichungen

Lotka-Volterra

Gray-Scott

## Reaktionsterm im Lotka-Volterra-Modell

$$R(s, t) = \alpha_i s_i + s_i \sum_{j=1}^n \beta_{ij} s_j$$

Zudem:  $\beta_{ii} = -\frac{\alpha_i}{L_i}$  mit  $L_i$  als Gleichgewichtspunkt

(*Principes de biologie mathématique*, V. Volterra, Acta Biotheoretica, 1937,  
Volume 3, Issue 1, Pages 1–36)

# Lotka-Volterra-Modell

Stofftransport &  
Reaktionsgleichungen

P. Buchfink,  
E. Ott,  
M. Schleicher

RAD-Gleichungen

Lotka-Volterra

Gray-Scott

- Zwei Substanzen A: Beute, B: Jäger



$$\begin{aligned} R_A(s_A, s_B) &= \alpha_A s_A (L_A - s_A) - \gamma_A s_A s_B \\ R_B(s_A, s_B) &= +\gamma_B s_B s_A - \alpha_B s_B (L_B - s_B) \end{aligned}$$

- $\alpha_A$  Reproduktionsrate der Beute
- $\gamma_A$  Fressrate der Räuber pro Beutelebewesen
- $\gamma_B$  Reproduktionsrate der Räuber pro Beutelebewesen
- $\alpha_B$  Sterberate der Räuber

# Verhalten & Stabilität

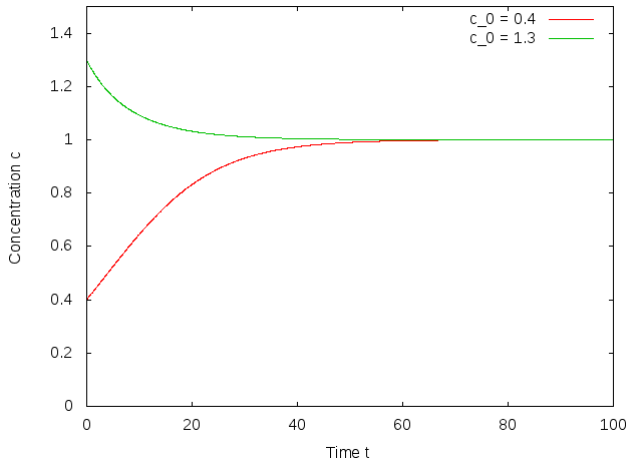
Stofftransport &  
Reaktionsgleichungen

P. Buchfink,  
E. Ott,  
M. Schleicher

RAD-Gleichungen

Lotka-Volterra

Gray-Scott



# Verhalten & Stabilität

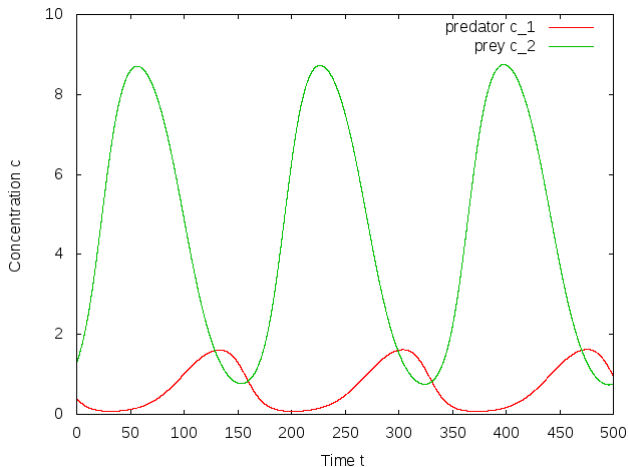
Stofftransport &  
Reaktionsgleichungen

P. Buchfink,  
E. Ott,  
M. Schleicher

RAD-Gleichungen

Lotka-Volterra

Gray-Scott





# Verhalten & Stabilität

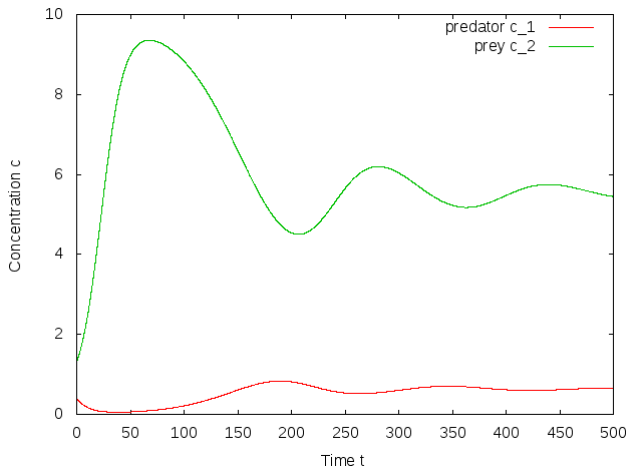
Stofftransport &  
Reaktionsgleichungen

P. Buchfink,  
E. Ott,  
M. Schleicher

RAD-Gleichungen

Lotka-Volterra

Gray-Scott



# Verhalten & Stabilität

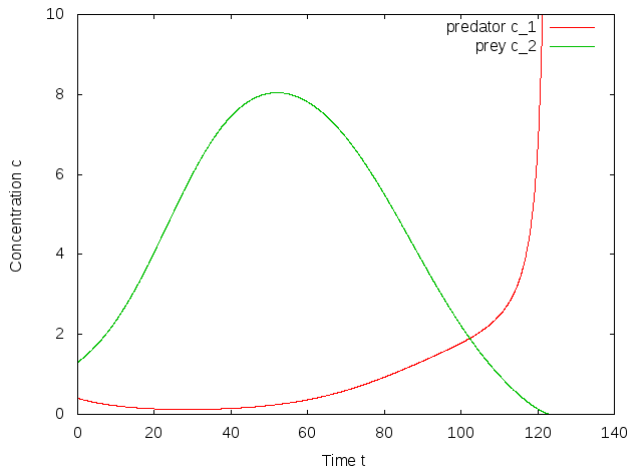
Stofftransport &  
Reaktionsgleichungen

P. Buchfink,  
E. Ott,  
M. Schleicher

RAD-Gleichungen

Lotka-Volterra

Gray-Scott



# Verhalten & Stabilität

Stofftransport &  
Reaktionsgleichungen

P. Buchfink,  
E. Ott,  
M. Schleicher

RAD-Gleichungen

Lotka-Volterra

Gray-Scott

- Instabilität durch Parameter und Löser überlagert
- Löser lässt sich durch symplektische Verfahren ersetzen
- Parameterwahl nicht trivial, aber auch nicht willkürlich

# Inspiration

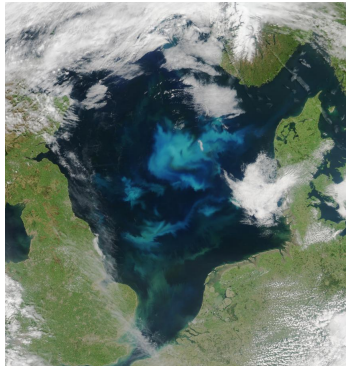
Stofftransport &  
Reaktionsgleichungen

P. Buchfink,  
E. Ott,  
M. Schleicher

RAD-Gleichungen

Lotka-Volterra

Gray-Scott



Quelle: <http://www.spiegel.de/wissenschaft/natur/bild-1042982-869697.html>

# Idee des Gray-Scott Modells

Stofftransport &  
Reaktionsgleichungen

P. Buchfink,  
E. Ott,  
M. Schleicher

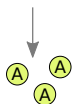
RAD-Gleichungen

Lotka-Volterra

Gray-Scott

- Zwei Substanzen A: Futter, B: Räuber

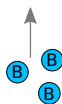
Feed



Reaktion



Kill



$$R_A(s_A, s_B) = f(1 - s_A)$$

$$R_B(s_A, s_B) = -s_A s_B^2$$

$$+ s_A s_B^2$$

$$-(k + f)s_B$$

- Kill-Rate  $k$

- Feed-Rate  $f$

- Diffusions-Konstanten  $d_A, d_B$

(*Autocatalytic Reactions in the Isothermal Continuous Stirred Tank Reactor*, P. Gray and S. K. Scott, 1984, Chemical Engineering Science)

# Gray-Scott Modell ohne Advektion

Stofftransport &  
Reaktionsgleichungen

P. Buchfink,  
E. Ott,  
M. Schleicher

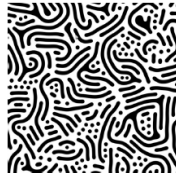
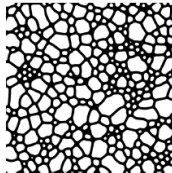
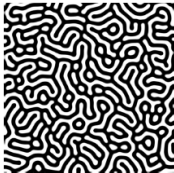
RAD-Gleichungen

Lotka-Volterra

Gray-Scott

## ■ Muster bekannt von

- Blättern
- Tierfellen (Rehe, Giraffen, Schmetterlinge, ...)
- Mitose



(<http://www.karlsims.com/rd.html>)