Lab 2: Kemisk mönsterbildning

Många kemiska system uppvisar komplicerade mönster om de sker under förhållanden där kemikalierna inte blandas utan bara transporteras med hjälp av diffusion. Det första sådana system som upptäcktes av Belousov-Zhabotinsky reaktionen som ser ut så här.

Moment 1: Den så kallade Gray-Scott modellen beskriver ett system av två kemikalier som reagerar med varandra och diffunderar i ett reaktionskärl. Det beskrivs av följande uppsättning ekvationer:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D_u \nabla^2 u - uv^2 + F(1-u) \tag{1}$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = D_v \nabla^2 v + uv^2 - (F+k)v \tag{2}$$

där $D_u = 2 \times 10^{-5}$, $D_v = 10^{-5}$ är diffusionskonstanter och $F = 0.04$ och $k = 0.065$ är kontrollparametrar som beskriver flödeshastigheten i reaktorn och sönderfallet av v.

Ni ska studera systemet i ett reaktionskärl av storleksordningen 1 meter med von Neumann randvillkor ($\nabla u \cdot n = 0$) och undersöka hur en lokal störning i koncentrationen av v runt det stabila homogena jämviktsläget $(u_0, v_0) = (1, 0)$ utvecklas över tiden. En typisk störning skulle kunna vara av formen:

$$v = v_0 + \exp(-(x^2 + y^2)/\varepsilon) \tag{3}$$

med $\varepsilon \approx 10^{-4}$. Hur sprider sig störningen i rekationskärlet? Hur beror förloppet på parametern k?

Moment 2: Reaktions-diffusionssystem har också använts för att förklara mönsterbildning på djurpälsar. Ett system som har studerats i detta syfte är Schnakenberg modellen:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nabla^2 u + \gamma(a - u + u^2 v) \tag{4}$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = D\nabla^2 v + \gamma(b - u^2 v) \tag{5}$$

med de typiska parametervärdena $D = 100$, $a = 0.2$, $b = 2$ och $\gamma = 10^3$.

Visa först att det finns en stationär rumsoberoende lösning (u_0, v_0), och undersök sedan stabiliteten hos denna lösningen genom att lägga på små slumpmässiga störningar. Som ovan skall ni göra det i en domän av storleksordningen 1 meter och med von Neumann randvillkor ($\nabla u \cdot n = 0$). Hur beror lösningen på geometrin och på diffusionskonstanten D och γ? Ni kan tex. använda geometrier som den här.