

**UNIVERSITÄT  
BAYREUTH**

**Fakultät für Mathematik, Physik und Informatik  
Mathematisches Institut  
Lehrstuhl für Angewandte Mathematik**

---

# **Oszillierende Chemische Reaktionen - Mathematische Analyse der Belousov-Zhabotinskii Reaktion**

---

**Bachelorarbeit  
von  
Barbara Doleschal**

**Abgabedatum: 30.09.2013  
Betreuer: Prof. Dr. Lars Grüne**







# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Grundlagen</b>	<b>3</b>
2.1	Der Oregonator . . . . .	3
2.2	Mathematische Grundlagen . . . . .	5
2.2.1	Lineare Stabilitätsanalyse . . . . .	5
2.2.2	Periodische Lösungen . . . . .	5
2.3	Fixpunktsatz von Brouwer . . . . .	6
2.4	Hilfsmittel . . . . .	6
2.4.1	Vorzeichenregel von Descartes . . . . .	6
2.4.2	Routh-Hurwitz Kriterium . . . . .	7
2.4.3	Wurzelsatz von Vieta . . . . .	8
<b>3</b>	<b>Lineare Stabilitätsanalyse des FKN Modells</b>	<b>9</b>
3.1	Bestimmung der Gleichgewichte . . . . .	9
3.2	Untersuchung der Gleichgewichte auf Stabilität . . . . .	10
3.2.1	Das Gleichgewicht $(0,0,0)$ . . . . .	11
3.2.2	Das Gleichgewicht $(x_1^*, y_1^*, z_1^*)$ . . . . .	12
3.3	Ein Beispiel . . . . .	15
<b>4</b>	<b>Die „Box-Methode“</b>	<b>17</b>
4.1	Warum diese Methode? . . . . .	17
4.2	Bestimmung der Box $S$ . . . . .	18
4.3	Verhalten der Lösungen in $S$ . . . . .	20
4.4	Beweis der Existenz einer periodischen Lösung in $S$ . . . . .	26
<b>5</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>31</b>
<b>A</b>	<b>Anhang</b>	<b>35</b>



# Kapitel 1

## Einleitung

Boris P. Belousov entdeckte 1951 eher zufällig eine periodische Farbänderung bei der von Cerionen katalysierten Oxidation von Zitronensäure durch Bromationen in schwefelsaurer Lösung. Diese Farbänderung ist auf eine zeitliche Oszillation im Verhältnis der  $\text{Ce}^{3+}$ - zu den  $\text{Ce}^{4+}$ -Ionen zurückzuführen<sup>1</sup>. Doch zu dieser Zeit galt die allgemeine, wie sich später herausstellte nicht korrekte Ansicht, dass zeitliche Oszillationen von Zwischenprodukten in homogenen chemischen Systemen nicht möglich sind, da sie dem 2. Hauptsatz der Thermodynamik widersprechen. Dies war vermutlich einer der Gründe, warum Belousov seine Ergebnisse erst 1958 veröffentlichen konnte. Eine englische Übersetzung seiner unveröffentlichten Arbeit von 1951 findet sich im Anhang eines Buches, welches von Field und Burger [3] 1985 herausgegeben wurde.

Belousovs Arbeit wurde von Zhabotinskii fortgesetzt und ist daher heute als Belousov-Zhabotinskii Reaktion oder kurz BZ-Reaktion bekannt. Dieser wurde, wie er in [18] berichtet, 1961, also zehn Jahre nach Belousovs Entdeckung, von seinem Biochemieprofessor an der Moscow State University, S. E. Schnoll, auf die ihm bis dahin unbekannte Arbeit Belousovs aufmerksam gemacht. In den folgenden Jahren fand er eine Vielzahl weiterer oszillierender Systeme, und er begann, den Reaktionsmechanismus zu entschlüsseln. Darüber hinaus begann er, zusammen mit einigen Mathematikern, ein mathematisches Modell zu entwickeln, welches alle wesentlichen Merkmale der oszillierenden Reaktion beschreiben, und eine gewisse Aussagekraft haben sollte [vergleiche 18, S.5]. Dieses Modell, sowie eine Beschreibung seiner Arbeit in den Jahren 1961-1970 findet sich in [18].

Als die Reaktion um 1970 im Westen bekannt wurde, erregte sie großes Aufsehen. Innerhalb weniger Jahre begannen sowohl Chemiker als auch Mathematiker, Physiker und Biologen, sich mit diesem hochinteressanten, neuen Thema zu beschäftigen<sup>2</sup>.

Doch woran lag dieses große Interesse? Anfangs sicherlich zum einen an der spektakulären Farbänderung von Rot nach Blau, welche bei Zugabe eines Indikators, wie zum Beispiel Ferroin, auftritt, zum anderen an den bereits von Belousov beschriebenen räumlichen Oszillationen. Field und Schneider nennen in [4, S. 17] einige weitere Gründe.

---

<sup>1</sup> In wässriger Lösung sind  $\text{Ce}^{3+}$ -Ionen farblos,  $\text{Ce}^{4+}$ -Ionen hingegen gelb.

<sup>2</sup> Einen großen Überblick über all diese Arbeiten findet man in dem bereits erwähnten Buch von Field und Burger [3].

So schreiben sie, dass neben dem „spezifischen Interesse an der Chemie (Verhalten und Mechanismus) oszillierender chemischer Reaktionen“ [4] die „Verknüpfung von diesen Oszillatoren mit den Eigenschaften nichtlinearer Differentialgleichungen und der Theorie von Prozessen fern vom chemischen Gleichgewicht, wie sie z.B. zum Verständnis lebender Systeme - u.a. charakterisiert durch Selbstorganisation, Musterbildung, Wachstum - entscheidend sind“ [4] Gründe für die zunehmende Forschung auf diesem Gebiet sind. Des weiteren sagen sie, dass die BZ-Reaktion dabei als „experimentelles Modellsystem“ [4] dient.

Richard J. Field ist einer dieser Wissenschaftler, die um 1970 mit der Erforschung der BZ-Reaktion begannen. Zusammen mit Kőrös und Noyes stellte er 1972 einen Mechanismus für die zeitlichen Oszillationen vor, der in den nächsten Jahren weiter verfeinert wurde<sup>3</sup>. Dieser, nach seinen Entdeckern benannte FKN-Mechanismus, ist heute allgemein anerkannt, und diente Field und Noyes als Grundlage für die Entwicklung des Oregonator-Modells<sup>4</sup>.

Ziel dieser Arbeit soll es sein, eine mathematische Analyse der Belousov-Zhabotinskii Reaktion durchzuführen. Diese baut auf den Differentialgleichungen, die das dynamische Verhalten des Oregonator-Modells beschreiben auf.

In Kapitel 2 werden daher zunächst dieses Modell und die daraus resultierenden Differentialgleichungen vorgestellt. Anschließend werden einige Grundlagen aus dem Bereich der Gewöhnlichen Differentialgleichungen wiederholt, und Hilfsmittel vorgestellt, mit denen Aussagen über Nullstellen von Polynomen höherer Ordnung getroffen werden können. Außerdem wird der Fixpunktsatz von Brouwer angegeben, der in dem Beweis, dass mindestens eine periodische Lösung existiert, verwendet werden wird (siehe Kapitel 4.4).

Angelehnt an die Arbeit von Murray [10] und [9] wird in Kapitel 3 mithilfe der Linearen Stabilitätsanalyse untersucht, unter welchen Bedingungen das FKN-Modell ein instabiles Gleichgewicht besitzt. Diese Arbeiten, sowie die Arbeit von Hastings und Murray [6] dienen als Grundlage für Kapitel 4. Dort wird die sogenannte „Box-Methode“ verwendet, um zu zeigen, dass die Lösungen des Oregonators oszillieren, dass sie eine begrenzte Amplitude besitzen, und dass mindestens eine periodische Lösung existiert. Schließlich wird es in einem kurzen Ausblick um den Zusammenhang der BZ-Reaktion mit der Verzweigungstheorie gehen.

<sup>3</sup> Dieser Mechanismus findet sich zum Beispiel in [15].

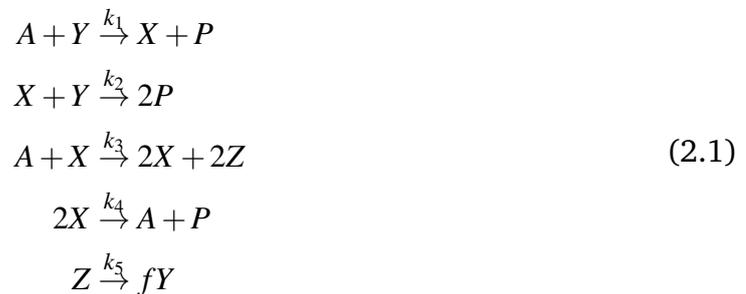
<sup>4</sup> Benannt nach dem US-Staat Oregon, wo es entwickelt wurde

# Kapitel 2

## Grundlagen

### 2.1 Der Oregonator<sup>1</sup>

Der Oregonator, häufig auch FKN-Modell genannt, wurde von Field und Noyes aus dem FKN-Mechanismus entwickelt. Obwohl der Mechanismus aus mehr als zehn Reaktionen besteht, konnten fünf Reaktionen festgelegt werden, die Murray als „Schlüsselreaktionen“ [10] bezeichnet. Diese sind



mit



und bekannten Geschwindigkeitskonstanten  $k_1, \dots, k_5$ . Der stöchiometrische Faktor  $f$  kann im Experiment bestimmt werden und ist ungefähr 0.5.

Da die Konzentration des Bromations  $[A]$  als konstant angesehen werden kann und die Konzentration von  $[P]$  uninteressant ist, kann für die Konzentrationen folgendes Differentialgleichungssystem dritter Ordnung aufgestellt werden:

$$\begin{aligned}\frac{dX}{dT} &= k_1AY - k_2XY + k_3AX - k_4X^2 \\ \frac{dY}{dT} &= -k_1AY - k_2XY + fk_5Z \\ \frac{dZ}{dT} &= 2k_3AX - k_5Z.\end{aligned}\tag{2.3}$$

---

<sup>1</sup> siehe [10]

Das System (2.3) wird als Oregonator bezeichnet.

Um mit dem Oregonator arbeiten zu können, muss er jedoch in eine dimensionslose Form gebracht werden. Dies kann auf unterschiedliche Weise geschehen. In [15] geht Tyson insbesondere auf den Unterschied zwischen der Field-Noyes Version und der Tyson Version ein. Im Folgenden wird jedoch mit der Version von Murray [10] gearbeitet werden, die beinahe identisch zur Tyson Version ist. An dieser Stelle sei darauf hingewiesen, dass Murray [9] und Hastings und Murray [6] mit der Field-Noyes Version arbeiten. Zwar wird dadurch mit anderen Differentialgleichungen gearbeitet, die Ergebnisse sind jedoch dieselben.

Es wird nun Folgendes festgelegt:

$$\begin{aligned} x &= \frac{dX}{dX_0}, & X_0 &= \frac{k_3 A}{k_4} \approx 1.2 \times 10^{-7} M, \\ y &= \frac{dY}{dY_0}, & Y_0 &= \frac{k_3 A}{k_2} \approx 6 \times 10^{-7} M, \\ z &= \frac{dZ}{dZ_0}, & Z_0 &= \frac{2(k_3 A)^2}{k_4 k_5} \approx 5 \times 10^{-3} M, \\ t &= \frac{dT}{dT_0}, & T_0 &= \frac{1}{k_5} \approx 50 s, \end{aligned}$$

und außerdem

$$\begin{aligned} \varepsilon &= \frac{k_5}{k_3 A} \approx 5 \times 10^{-5}, & \delta &= \frac{k_4 k_5}{k_2 k_3 A} \approx 2 \times 10^{-4}, \\ q &= \frac{k_1 k_4}{k_2 k_3} \approx 8 \times 10^{-4}, & (f &\approx 0.5) \end{aligned} \quad (2.4)$$

Setzt man dies in (2.3) ein, erhält man nach Umformen folgendes dimensionsloses System:

$$\begin{aligned} \varepsilon \frac{dx}{dt} &= qy - xy + x - x^2 \\ \delta \frac{dy}{dt} &= -qy - xy + 2fz \\ \frac{dz}{dt} &= x - z \end{aligned} \quad (2.5)$$

Die BZ-Reaktion kann damit durch folgende nichtlineare autonome Differentialgleichung dargestellt werden, wobei  $r = (x, y, z)^T$

$$\frac{dr}{dt} = F(r; \varepsilon, \delta, q, f) = \begin{pmatrix} \frac{qy - xy + x - x^2}{\varepsilon} \\ -qy - xy + 2fz \\ \delta \\ x - z \end{pmatrix}. \quad (2.6)$$

## 2.2 Mathematische Grundlagen

### 2.2.1 Lineare Stabilitätsanalyse

Die Lineare Stabilitätsanalyse besteht aus zwei Schritten:

1. Bestimmung der Gleichgewichte
2. Untersuchung der Gleichgewichte auf Stabilität.

Ein Gleichgewicht wird wie folgt definiert (siehe [5, S. 52]):

#### Definition 1 (Gleichgewicht)

Ein Punkt  $x^* \in \mathbb{R}^n$  heißt Gleichgewicht (auch Ruhelösung, Ruhelage oder Equilibrium) der gewöhnlichen Differentialgleichung  $\dot{x} = f(t, x)$ , falls für die zugehörige Lösung

$$x(t; t_0, x^*) = x^* \quad \forall t, t_0 \in \mathbb{R}$$

gilt.

Es ist leicht zu sehen, dass gilt:

$$x^* \text{ ist ein Gleichgewicht} \Leftrightarrow f(t, x^*) = 0 \quad \forall t \in \mathbb{R}, \quad (2.7)$$

womit sich die Gleichgewichte leicht berechnen lassen.

Um die Gleichgewichte auf Stabilität zu untersuchen, muss zunächst die Linearisierung im Gleichgewicht berechnet werden.

Falls  $x_0 = x^*$  und  $f$  autonom, ist die Linearisierung durch folgende Matrix gegeben:

$$A = \frac{df}{dx}(x^*). \quad (2.8)$$

Damit gilt für ein Gleichgewicht  $x^*$  einer nichtlinearen autonomen Differentialgleichung

$$\begin{aligned} &x^* \text{ ist lokal exponentiell stabil} \\ \Leftrightarrow &\text{ für alle Eigenwerte } \lambda \text{ der Linearisierungsmatrix } A \text{ gilt } \operatorname{Re} \lambda < 0. \end{aligned}$$

Existiert ein Eigenwert mit  $\operatorname{Re} \lambda > 0$  so ist das Gleichgewicht  $x^*$  instabil.

### 2.2.2 Periodische Lösungen

In Kapitel 4 soll unter anderen gezeigt werden, dass mindestens eine periodische Lösung existiert. Dafür wird folgende Definition benötigt:

#### Definition 2 (Periodische Lösung)

Das autonome Anfangswertproblem  $\dot{x} = f(t, x)$ ,  $x(0) = x_0$  besitzt eine periodische Lösung, falls ein  $T > 0$  existiert, so dass gilt:

$$x(T; x_0) = (0; x_0). \quad (2.9)$$

## 2.3 Fixpunktsatz von Brouwer

Für den Beweis, dass mindestens eine periodische Lösung existiert, wird der Brouwersche Fixpunktsatz benötigt. Dieser lautet wie folgt (vergleiche [7, S. 593]):

### Satz 1 (Brouwerscher Fixpunktsatz)

Jede stetige Selbstabbildung  $f$  der abgeschlossenen Einheitskugel des euklidisch normierten  $\mathbb{R}^p$  besitzt mindestens einen Fixpunkt.

Dieser kann für konvexe, kompakte Mengen im  $\mathbb{R}^p$  wie folgt verallgemeinert werden (siehe [7, S. 603]):

### Satz 2 (Fixpunktsatz)

Jede stetige Selbstabbildung  $f$  einer konvexen, kompakten und nichtleeren Teilmenge  $C$  des  $\mathbb{R}^p$  (versehen mit irgendeiner Norm) besitzt mindestens einen Fixpunkt.

## 2.4 Hilfsmittel

Bei der Linearen Stabilitätsanalyse kann es vorkommen, dass das charakteristische Polynom vom Grad  $\geq 3$  ist. Für diese Polynome ist es unter Umständen schwierig, die Nullstellen zu berechnen. Um dennoch eine Aussage über die Eigenwerte treffen zu können, werden im folgenden einige Hilfsmittel vorgestellt und an einem kurzen Beispiel erklärt.

### 2.4.1 Vorzeichenregel von Descartes <sup>2</sup>

#### Satz 3 (Vorzeichenregel von Descartes)

Die Anzahl aller positiven, reellen Nullstellen eines reellen Polynoms ist gleich der Anzahl der Vorzeichenwechsel seiner Koeffizientenfolge oder um eine gerade natürliche Zahl kleiner als diese. Dabei werden die Nullstellen entsprechend ihrer Vielfachheiten gezählt.

Als Beispiel soll das folgende reelle Polynom betrachtet werden:

$$f(x) = x^3 - 2x^2 - x + 2.$$

Die Anzahl der positiven, reellen Nullstellen lässt sich leicht bestimmen:

Das Polynom hat zwei Vorzeichenwechsel und daher zwei oder null positive, reelle Nullstellen.

Um die Anzahl der negativen, reellen Nullstellen zu bestimmen, setzt man  $x = -u$ . Man erhält damit folgendes Polynom:

$$g(u) = u^3 + 2u^2 - u - 2.$$

<sup>2</sup> siehe [10] und [16]

Dieses Polynom hat einen Vorzeichenwechsel und damit genau eine positive, reelle Nullstelle. Das Polynom  $f(x)$  hat also genau eine negative, reelle Nullstelle. Tatsächlich hat  $f(x)$  die Nullstellen  $-1$ ,  $1$  und  $2$ .

## 2.4.2 Routh-Hurwitz Kriterium<sup>3</sup>

Betrachte ein normiertes, reelles Polynom

$$f(x) = x^n + a_1x^{n-1} + \dots + a_n = 0, \quad a_i, i = 0, 1, \dots, n \in \mathbb{R}.$$

Die Hurwitz-Determinante wird wie folgt definiert:

$$H_n = \begin{vmatrix} a_1 & a_3 & a_5 & \dots & \dots & \dots \\ 1 & a_2 & a_4 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & a_1 & a_3 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 1 & a_2 & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & a_n \end{vmatrix}.$$

### Satz 4 (Routh-Hurwitz Kriterium)

Für alle Nullstellen von  $f(x)$  gilt  $\operatorname{Re} x < 0 \iff a_n > 0$  und alle Hauptminoren der Hurwitz-Determinante sind positiv.

Für ein Polynom  $f(x) = x^3 + a_1x^2 + a_2x + a_3 = 0$  vom Grad 3 bedeutet das, dass  $\operatorname{Re} x < 0$  genau dann wenn

$$\begin{aligned} a_3 &> 0 \\ H_1 &= |a_1| = a_1 > 0 \\ H_2 &= \begin{vmatrix} a_1 & a_3 \\ 1 & a_2 \end{vmatrix} = a_1a_2 - a_3 > 0 \\ H_3 &= \begin{vmatrix} a_1 & a_3 & a_5 \\ 1 & a_2 & a_4 \\ 0 & a_1 & a_3 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} a_1 & a_3 & 0 \\ 1 & a_2 & 0 \\ 0 & a_1 & a_3 \end{vmatrix} = a_2H_2 - a_1(a_1 \cdot 0 - 1 \cdot 0) = a_2H_2 > 0. \end{aligned}$$

Man sieht, dass  $H_3$  ein Vielfaches von  $H_2$  ist. Für ein Polynom vom Grad 3 reicht es also, die Bedingungen  $a_1 > 0$ ,  $a_3 > 0$  und  $a_1a_2 - a_3 > 0$  zu überprüfen.

<sup>3</sup> siehe [10] und [8]

### 2.4.3 Wurzelsatz von Vieta <sup>4</sup>

#### Satz 5 (Wurzelsatz von Vieta)

Sind  $x_1, \dots, x_n$  die komplexen Nullstellen des normierten Polynoms

$p(x) = x^n + a_{n-1}x^{n-1} + \dots + a_1x + a_0$  mit komplexen Koeffizienten, dann gilt:

$$\begin{aligned}
 a_{n-1} &= (-1)^1 (x_1 + x_2 + \dots + x_n), \\
 a_{n-2} &= (-1)^2 \sum_{j < k} x_j x_k = x_1 x_2 + x_1 x_3 + \dots + x_1 x_n + x_2 x_3 + \dots + x_{n-1} x_n, \\
 a_{n-3} &= (-1)^3 \sum_{j < k < m} x_j x_k x_m = -(x_1 x_2 x_3 + \dots + x_{n-2} x_{n-1} x_n), \\
 &\dots \\
 a_0 &= (-1)^n x_1 x_2 \cdot \dots \cdot x_n.
 \end{aligned} \tag{2.10}$$

Betrachte als Beispiel ein Polynom vom Grad 3:

$$p(x) = x^3 + a_2 x^2 + a_1 x + a_0$$

mit Nullstellen  $x_1, x_2, x_3$ .

Es gilt:

$$\begin{aligned}
 a_2 &= -(x_1 + x_2 + x_3), \\
 a_1 &= x_1 x_2 + x_1 x_3 + x_2 x_3, \\
 a_0 &= -(x_1 x_2 x_3).
 \end{aligned} \tag{2.11}$$

---

<sup>4</sup> siehe [17]

# Kapitel 3

## Lineare Stabilitätsanalyse des FKN Modells

### 3.1 Bestimmung der Gleichgewichte

Als erstes sollen die nicht negativen Gleichgewichte der Differentialgleichung (2.6) bestimmt und auf Stabilität untersucht werden.

Die Gleichgewichte können mit (2.7) berechnet werden:

$$\frac{dr}{dt} = \begin{pmatrix} \frac{qy - xy + x - x^2}{\varepsilon} \\ \frac{-qy - xy + 2fz}{\delta} \\ x - z \end{pmatrix} \stackrel{!}{=} 0. \quad (3.1)$$

Dies lässt sich auch als Gleichungssystem mit drei Gleichungen und drei Unbekannten schreiben:

$$qy - xy + x(1 - x) = 0 \quad (3.2)$$

$$-qy - xy + 2fz = 0 \quad (3.3)$$

$$x - z = 0. \quad (3.4)$$

Aus (3.4) folgt:

$$x = z.$$

Damit ergibt sich für (3.3):

$$\begin{aligned} -qy - xy + 2fx &= 0 \\ \Rightarrow y &= \frac{2fx}{q+x}. \end{aligned}$$

In (3.2) eingesetzt erhält man somit

$$\begin{aligned} q \frac{2fx}{q+x} - x \frac{2fx}{q+x} + x - x^2 &= 0 \\ \Rightarrow 2qfx - 2fx^2 + (x - x^2)(q+x) &= 0 \\ \Rightarrow x^3 + x^2(q-1+2f) + x(-q-2qf) &= 0 \\ \Rightarrow x(x^2 + x(q-1+2f) + (-q-2qf)) &= 0. \end{aligned}$$

Man erhält damit direkt folgendes Gleichgewicht:

$$(x_0^*, y_0^*, z_0^*) = (0, 0, 0). \quad (3.5)$$

Durch Lösen der Gleichung  $x^2 + x(q-1+2f) + (-q-2qf) = 0$  erhält man:

$$\begin{aligned} x_{1/2}^* = z_{1/2}^* &= \frac{-(q-1+2f) \pm \sqrt{(q-1+2f)^2 + 4q + 8qf}}{2} \\ y_{1/2}^* &= \frac{2f \left[ -(q-1+2f) \pm \sqrt{(q-1+2f)^2 + 4q + 8qf} \right]}{2q + \left[ -(q-1+2f) \pm \sqrt{(q-1+2f)^2 + 4q + 8qf} \right]}. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Da  $(q-1+2f) < \sqrt{(q-1+2f)^2 + 4q + 8qf}$  folgt, dass  $x_2^* = z_2^* < 0$ . Damit erhält man  $(x_1^*, y_1^*, z_1^*)$  als zweites nicht negatives Gleichgewicht. Das negative Gleichgewicht kann ignoriert werden, da in einem chemischen System keine negativen Konzentrationen möglich sind.

## 3.2 Untersuchung der Gleichgewichte auf Stabilität

Um die Gleichgewichte auf Stabilität untersuchen zu können, wird die Linearisierungsmatrix  $A$  benötigt.

Diese kann mit (2.8) berechnet werden:

$$A = \frac{dF}{dr}(r) = \begin{pmatrix} \frac{(1-2x-y)}{\varepsilon} & \frac{(q-x)}{\varepsilon} & 0 \\ \frac{(-y)}{\delta} & \frac{(-q-x)}{\delta} & \frac{2f}{\delta} \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3.7)$$

Im folgenden werden außerdem einige Hilfsgleichungen benötigt, die man aus (3.2), (3.3) und (3.4) erhält. Da aus Gleichung (3.4)  $x = z$  folgt erhält man folgendes Gleichungssystem:

$$qy - xy + x(1-x) = 0 \quad (3.8)$$

$$-qy - xy + 2fx = 0. \quad (3.9)$$

Wie bereits bei der Berechnung der Gleichgewichte gesehen, folgt aus (3.9), dass

$$y = \frac{2fx}{q+x}. \quad (3.10)$$

Durch Addition der Gleichungen (3.8) und (3.9) erhält man außerdem:

$$\begin{aligned} -2xy + x + x^2 + 2fx &= 0 \\ \Rightarrow y &= \frac{1-x+2f}{2}. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Da  $\frac{2fx}{q+x} = y = \frac{1-x+2f}{2}$  folgt:

$$2fx = 2fq + q + x - qx - x^2 \quad \text{und} \quad (3.12)$$

$$x^2 = 2fq + q + x - qx - 2fx. \quad (3.13)$$

### 3.2.1 Das Gleichgewicht $(0,0,0)$

Als Linearisierung im Punkt  $(0,0,0)$  ergibt sich:

$$A_0 = \begin{pmatrix} \frac{1}{\varepsilon} & \frac{q}{\varepsilon} & 0 \\ 0 & \frac{-q}{\delta} & \frac{2f}{\delta} \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Um die Stabilität im Gleichgewicht  $(x_0^*, y_0^*, z_0^*)$  angeben zu können, muss nun noch das charakteristische Polynom berechnet werden:

$$\begin{aligned} |A_0 - \lambda I| &= \begin{vmatrix} \frac{1}{\varepsilon} - \lambda & \frac{q}{\varepsilon} & 0 \\ 0 & \frac{-q}{\delta} - \lambda & \frac{2f}{\delta} \\ 1 & 0 & -1 - \lambda \end{vmatrix} = 0 \\ \Rightarrow & \left( \frac{1}{\varepsilon} - \lambda \right) \left( \frac{-q}{\delta} - \lambda \right) (-1 - \lambda) + \frac{q}{\varepsilon} \cdot \frac{2f}{\delta} \cdot 1 = 0 \\ \Rightarrow & \frac{q}{\varepsilon\delta} + \frac{1}{\varepsilon}\lambda - \frac{q}{\delta}\lambda - \lambda^2 + \frac{q}{\varepsilon\delta}\lambda + \frac{1}{\varepsilon}\lambda^2 - \frac{q}{\delta}\lambda^2 - \lambda^3 + \frac{2fq}{\varepsilon\delta} = 0 \\ \Rightarrow & \lambda^3 - \left( \frac{1}{\varepsilon} - \frac{q}{\delta} - 1 \right) \lambda^2 - \left[ \frac{1}{\varepsilon} \left( 1 + \frac{q}{\delta} \right) - \frac{q}{\delta} \right] \lambda - \frac{q(1+2f)}{\varepsilon\delta} = 0. \end{aligned}$$

Mit  $\varepsilon$ ,  $q$  und  $\delta$  aus (2.4) folgt, dass

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{\varepsilon} - \frac{q}{\delta} - 1\right) &> 0, \\ \left[\frac{1}{\varepsilon} \left(1 + \frac{q}{\delta}\right) - \frac{q}{\delta}\right] &> 0 \quad \text{und} \\ \frac{q(1+2f)}{\varepsilon\delta} &> 0. \end{aligned}$$

Das charakteristische Polynom hat also einen Vorzeichenwechsel und damit nach der Vorzeichenregel von Descartes eine positive, reelle Nullstelle.

Für das Gleichgewicht  $(0,0,0)$  folgt damit, dass es instabil ist. Dies ist eine wichtige Voraussetzung dafür, dass Oszillationen auftreten können. Bei asymptotischer Stabilität wäre dies nicht der Fall.

### 3.2.2 Das Gleichgewicht $(x_1^*, y_1^*, z_1^*)$

Im Punkt  $(x_1^*, y_1^*, z_1^*)$  ergibt sich als Linearisierung:

$$A_1 = \begin{pmatrix} \frac{1-2x_1^*-y_1^*}{\varepsilon} & \frac{q-x_1^*}{\varepsilon} & 0 \\ \frac{-y_1^*}{\delta} & \frac{-q-x_1^*}{\delta} & \frac{2f}{\delta} \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3.14)$$

Die Berechnung des charakteristischen Polynoms ist Standard und man erhält:

$$\begin{aligned} |A_1 - \lambda I| &= \begin{vmatrix} \frac{1-2x_1^*-y_1^*}{\varepsilon} - \lambda & \frac{q-x_1^*}{\varepsilon} & 0 \\ \frac{-y_1^*}{\delta} & \frac{-x_1^*-q}{\delta} - \lambda & \frac{2f}{\delta} \\ 1 & 0 & -1-\lambda \end{vmatrix} = 0 \\ \Rightarrow \lambda^3 + A\lambda^2 + B\lambda + C &= 0. \end{aligned}$$

Dabei sind  $A$ ,  $B$  und  $C$  folgende Terme:

$$\begin{aligned} A &= 1 + \frac{q+x_1^*}{\delta} + \frac{2x_1^*+y_1^*-1}{\varepsilon} \\ B &= \frac{q+x_1^*}{\delta} + \frac{2x_1^*+y_1^*-1}{\varepsilon} + \frac{(q+x_1^*)(2x_1^*+y_1^*-1) + y_1^*(q-x_1^*)}{\varepsilon\delta} \\ C &= \frac{(q+x_1^*)(2x_1^*+y_1^*-1) - 2f(q-x_1^*) + y_1^*(q-x_1^*)}{\varepsilon\delta}. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Da es sich bei dem charakteristischen Polynom um ein allgemeines Polynom vom Grad 3 handelt, können die Eigenwerte nicht so leicht bestimmt werden. Man muss daher auf die in Kapitel 2.4 vorgestellten Methoden zurückgreifen. Doch um das Routh-Hurwitz Kriterium oder die Vorzeichenregel von Descartes anwenden zu können, muss bekannt sein, ob  $A$ ,  $B$  und  $C$  größer oder kleiner Null sind.

Um dies zu untersuchen, wird  $E := 2x_1^* + y_1^* - 1$  definiert. Mit (3.10) und (3.12) folgt, dass

$$E = \frac{qx_1^* + x_1^{*2} + 2fq}{q + x_1^*} > 0. \quad (3.16)$$

Damit folgt

$$A = 1 + \frac{q + x_1^*}{\delta} + \frac{E}{\varepsilon} > 0$$

und mit (3.11) und (3.12)

$$C = \frac{2fq + q + x_1^{*2}}{\varepsilon\delta} > 0.$$

$B$  kann allerdings sowohl größer, als auch kleiner Null sein.

Mit der Vorzeichenregel von Descartes kann man nun in Abhängigkeit von  $B$  einige Aussagen treffen.

Für  $B < 0$  gilt:

$\lambda^3 + A\lambda^2 + B\lambda + C = 0$  hat zwei Vorzeichenwechsel und damit zwei oder keine positive, reelle Nullstelle und mit  $\lambda = -u$  einen Vorzeichenwechsel, also eine negative, reelle Nullstelle.

Für  $B > 0$  gilt dagegen:

$\lambda^3 + A\lambda^2 + B\lambda + C = 0$  hat keinen Vorzeichenwechsel und damit keine positive, reelle Nullstelle und mit  $\lambda = -u$  drei Vorzeichenwechsel und damit drei oder eine negative, reelle Nullstelle.

Dies liefert jedoch kein wirkliches Ergebnis.

Mit dem Routh-Hurwitz Kriterium kann man dagegen ein Stabilitätskriterium für das positive Gleichgewicht aus (3.6) erhalten.

Es gilt:

Das Gleichgewicht  $(x_1^*, y_1^*, z_1^*)$  ist stabil  $\Leftrightarrow A > 0$ ,  $C > 0$  und  $AB - C > 0$ .

Mit  $A$ ,  $B$  und  $C$  aus (3.15),  $E$  aus (3.16) und den Hilfsgleichungen (3.10), (3.11), (3.12) und (3.13) lässt sich  $AB - C$  berechnen:

$$\begin{aligned} \phi(\delta, f, \varepsilon) &:= AB - C \\ &= \left(1 + \frac{q + x_1^*}{\delta} + \frac{E}{\varepsilon}\right) \left(\frac{q + x_1^*}{\delta} + \frac{E}{\varepsilon} + \frac{(q + x_1^*)E + y_1^*(q - x_1^*)}{\varepsilon\delta}\right) - \frac{2fq + q + x_1^{*2}}{\varepsilon\delta} \\ &= \frac{(\delta(\varepsilon + E) + \varepsilon(q + x_1^*)) (E\delta + (q + x_1^*)(\varepsilon + E) + x_1^{*2} - x_1^*) - (x_1^{*2} + 2qf + q)\varepsilon\delta}{(\varepsilon\delta)^2} \quad (3.17) \\ &= \dots = \frac{N\delta^2 + M\delta + L}{\delta^2}, \end{aligned}$$

wobei  $N$ ,  $M$  und  $L$  wie folgt definiert sind:

$$\begin{aligned}
 N &:= \frac{E(\varepsilon + E)}{\varepsilon^2} = \frac{E}{\varepsilon} \left(1 + \frac{E}{\varepsilon}\right) = \frac{qx_1^* + x_1^{*2} + 2fq}{\varepsilon(q + x_1^*)} \left(1 + \frac{qx_1^* + x_1^{*2} + 2fq}{\varepsilon(q + x_1^*)}\right), \\
 M &:= \frac{(q + x_1^*)(\varepsilon + E)^2}{\varepsilon^2} + \frac{x_1^{*2}(\varepsilon + E)}{\varepsilon^2} - \frac{x_1^*(\varepsilon + E)}{\varepsilon^2} + \frac{\varepsilon E(q + x_1^*)}{\varepsilon^2} - \frac{x_1^{*2}\varepsilon}{\varepsilon^2} - \frac{2qf\varepsilon}{\varepsilon^2} - \frac{q\varepsilon}{\varepsilon^2}, \\
 L &:= \frac{\varepsilon(q + x_1^*)^2(\varepsilon + E)}{\varepsilon^2} + \frac{\varepsilon(q + x_1^*)x_1^{*2}}{\varepsilon^2} - \frac{\varepsilon(q + x_1^*)x_1^*}{\varepsilon^2} \\
 &= (q + x_1^*) \left[ (q + x_1^*) \left(1 + \frac{E}{\varepsilon}\right) + \frac{x_1^{*2}}{\varepsilon} - \frac{x_1^*}{\varepsilon} \right] \\
 &= \dots = (q + x_1^*) \left[ (q + x_1^*) + \frac{x_1^*(1 - q - 4f) + 2q(1 + 3f)}{\varepsilon} \right].
 \end{aligned}$$

Da alle Konstanten positiv sind (vergleiche (2.4)) ist leicht zu sehen, dass  $N > 0$  gilt. Der Ausdruck  $M$  wurde nicht weiter vereinfacht, da es im folgenden nicht weiter benötigt wird.

Doch damit lässt sich nicht nur sagen, wann das Gleichgewicht stabil ist, sondern auch unter welchen Bedingungen es instabil ist, was Voraussetzung für Oszillationen ist. Genauer gesagt bedeutet das, dass  $(x_1^*, y_1^*, z_1^*)$  instabil ist, falls eine der Bedingungen des Routh-Hurwitz Kriteriums nicht erfüllt ist. Da  $A > 0$  und  $C > 0$  für positive Konstanten immer erfüllt ist, stellt sich die Frage, wann  $\phi(\delta, f, \varepsilon) > 0$  nicht erfüllt ist. Das heißt das Gleichgewicht ist instabil, falls  $\phi(\delta, f, \varepsilon) < 0$ , wobei  $\phi(\delta, f, \varepsilon) = 0$  die Grenze zwischen stabilem und instabilen Gleichgewicht darstellt.

Es stellt sich also die Frage, für welche  $\delta$  die Ungleichung  $\phi(\delta, f, \varepsilon) < 0$  gilt. Betrachte dazu  $\phi(\delta, f, \varepsilon) = 0$ . Es gilt:

$$\begin{aligned}
 \phi(\delta, f, \varepsilon) &= 0 \\
 \Leftrightarrow N\delta^2 + M\delta + L &= 0 \\
 \Leftrightarrow \delta_{1/2} &= \frac{-M \pm \sqrt{M^2 - 4LN}}{2N}.
 \end{aligned}$$

Damit erhält man als nichtnegativen Bereich, in dem  $\phi(\delta, f, \varepsilon) < 0$  gilt:

$$0 < \delta < \frac{-M + \sqrt{M^2 - 4LN}}{2N}, \quad \text{falls} \quad (3.18)$$

$$L = (q + x_1^*) \left[ (q + x_1^*) + \frac{x_1^*(1 - q - 4f) + 2q(1 + 3f)}{\varepsilon} \right] < 0 \quad (3.19)$$

gilt (da  $N > 0$ ).

Mit  $x_1^*$  aus (3.6) und  $q, \varepsilon$  aus (2.4) erhält man eine Funktion von  $f$ . Da  $q + x_1^* > 0$  ist  $L < 0$  erfüllt, falls

$$\begin{aligned}
 \frac{x_1^*(1 - q - 4f) + 2q(1 + 3f)}{\varepsilon} &< -(q + x_1^*) \\
 \Leftrightarrow x_1^*(1 - q - 4f) + 2q(1 + 3f) + (q + x_1^*)\varepsilon &< 0.
 \end{aligned} \quad (3.20)$$

Setzt man in (3.20) für  $<$  ein Gleichheitszeichen ein, und für  $q$  und  $\varepsilon$  die Werte aus (2.4) kann man sich zum Beispiel von WolframAlpha<sup>1</sup> die kritischen  $f$  berechnen lassen<sup>2</sup>

$$\begin{aligned}f_{c_1} &= 0.251218 \\f_{c_2} &= 1.20308\end{aligned}$$

$f$  muss zwischen diesen beiden Werten liegen und man erhält so den Bereich von  $f$ , für den das Gleichgewicht  $(x_1^*, y_1^*, z_1^*)$  instabil ist:

$$0.251218 = f_{c_1} < f < f_{c_2} = 1.20308, \quad (3.21)$$

und die Stabilitätskurve von  $\delta$  in Abhängigkeit von  $f$ :

$$\delta = \frac{-M + \sqrt{M^2 - 4LN}}{2N}. \quad (3.22)$$

### 3.3 Ein Beispiel

In (2.4) wurden ungefähre Werte von  $\varepsilon$ ,  $\delta$ ,  $q$  und  $f$  für das Differentialgleichungssystem (2.6) angegeben. Doch insbesondere  $f \approx 0.5$  wurde experimentell bestimmt.

Aufgrund der vorangegangenen Überlegungen, müsste das Gleichgewicht  $(x_1^*, y_1^*, z_1^*)$  instabil sein. Im Folgenden soll dies nun nachgerechnet werden.

Zur Erinnerung:

$$\varepsilon \approx 5 \times 10^{-5}, \quad \delta \approx 2 \times 10^{-4}, \quad q \approx 8 \times 10^{-4}.$$

Setzt man diese Werte in (3.6) ein, erhält man als nicht negatives Gleichgewicht:

$$(x_1^*, y_1^*, z_1^*) \approx (0.039602, 0.980199, 0.039602). \quad (3.23)$$

Als Linearisierung im Gleichgewicht erhält man damit

$$A_1 = \begin{pmatrix} -1188.06 & -776.04 & 0 \\ -4900.995 & -202.01 & 5000 \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

und die Berechnung des charakteristischen Polynoms ergibt

$$|A_1 - \lambda I| \approx -\lambda^3 - 1391.07\lambda^2 + 3.56198 \times 10^6\lambda - 316832.$$

Die Berechnung der Eigenwerte gestaltet sich auch hier schwierig. Deshalb wird diese wieder bei WolframAlphadurchgeführt und man erhält die Eigenwerte<sup>3</sup>

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= -2706.97 \\ \lambda_2 &= 0.0889514 \\ \lambda_3 &= 1315.81.\end{aligned}$$

Da ein Eigenwert mit  $\operatorname{Re} \lambda > 0$  existiert, folgt, dass das Gleichgewicht instabil ist.

<sup>1</sup> <http://www.wolframalpha.com/>

<sup>2</sup> zum Vergleich siehe Abbildung A.1 im Anhang

<sup>3</sup> zum Vergleich siehe Abbildung A.2 im Anhang



# Kapitel 4

## Die „Box-Methode“

### 4.1 Warum diese Methode?

Im letzten Kapitel haben wir einen Bereich für  $f$  bestimmt, so dass das Differentialgleichungssystem (2.6) ein instabiles Gleichgewicht im positiven Oktanten besitzt. Dies gibt einen Hinweis darauf, dass Oszillationen auftreten können. Ob es jedoch wirklich zu Oszillationen kommt, oder ob ein anderes Verhalten zu beobachten ist, muss anders untersucht werden.

Eine Bedingung für Oszillationen ist die Existenz eines periodischen Orbits. Da es sich bei (2.6) um ein System dritter Ordnung handelt, kann jedoch der Satz von Poincaré-Bendixson<sup>1</sup> nicht angewendet werden, um die Existenz eines periodischen Orbits zu beweisen. Murray [9] und Hastings und Murray [6] wenden daher eine Methode an, die Troy [13] als „Box-Methode“ bezeichnet.

Diese Methode besteht aus drei Schritten:

1. Bestimmung einer Menge  $S$ , so dass jede Lösung die zur Zeit  $t_0$  in  $S$  liegt für alle  $t > t_0$  in  $S$  bleibt
2. Diskussion des Verhaltens der Lösungen in  $S$
3. Beweis, dass mindestens ein periodischer Orbit in  $S$  existiert

welche im folgenden besprochen werden sollen.

Dabei ist zu beachten, dass Murray [9] und Hastings und Murray [6] ein von (2.6) verschiedenes Differentialgleichungssystem verwenden. Da Murray in [10]  $S$  allerdings auch für das Differentialgleichungssystem (2.6) bestimmt, wird sich der erste Punkt an dieser Arbeit orientieren. Die Punkte zwei und drei orientieren sich dagegen an dem Artikel von Hastings und Murray [6], wobei ihr Vorgehen auf das Differentialgleichungssystem (2.6) übertragen wird.

---

<sup>1</sup> siehe zum Beispiel [5]

## 4.2 Bestimmung der Box $S$

Gesucht ist eine beschränkte, abgeschlossene Menge  $S$ , die das Gleichgewicht  $(x_1^*, y_1^*, z_1^*)$  einschließt und für die gilt, dass jede Lösung die zur Zeit  $t_0$  in  $S$  liegt für alle  $t > t_0$  in  $S$  bleibt. Außerdem gilt für eine solche Menge  $S$ , dass jede Lösung im positiven Oktanten  $x, y, z > 0$ , die außerhalb von  $S$  liegt, irgendwann nach  $S$  hinein läuft.

Um diese Menge zu finden, wird die nach außen zeigende Normale  $n$  auf  $S$  eingeführt. Diese kann man sich wie in Abbildung 4.1 vorstellen.

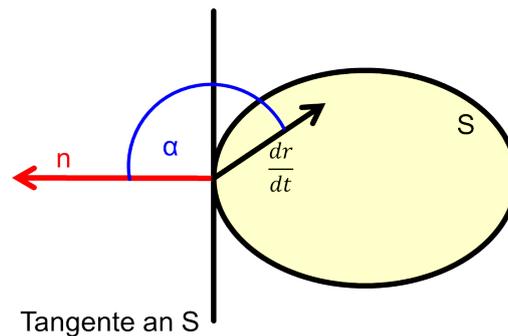


Abbildung 4.1: Nach außen zeigende Normale auf  $S$

Das heißt, dass  $\frac{dr}{dt}$  für jeden Punkt auf dem Rand von  $S$  nach  $S$  hinein zeigen muss, damit obige Bedingungen erfüllt sind.

Es ist also zu zeigen, dass für alle  $r \in S$  gilt:

$$n \cdot \frac{dr}{dt} < 0 \quad (4.1)$$

mit  $\frac{dr}{dt}$  aus (2.6).

Die einfachste Menge  $S$  ist eine rechtwinklige Box, die durch die Flächen

$$x = x_1, x = x_2; \quad y = y_1, y = y_2; \quad z = z_1, z = z_2$$

definiert wird und das Gleichgewicht  $(x_1^*, y_1^*, z_1^*)$  einschließt.

Dabei seien  $i, j$  und  $k$  die Einheitsnormalen in positive  $x, y$  und  $z$  Richtung.

Betrachte als erstes  $x = x_1$  und  $x = x_2$  mit  $0 < x_1 < x_1^* < x_2$ .

Für  $x = x_1$ ,  $n = -i$  und (4.1) muss gelten

$$-i \cdot \frac{dr}{dt} \Big|_{x=x_1} = - \frac{dx}{dt} \Big|_{x=x_1} < 0.$$

Da  $\varepsilon > 0$  folgt mit (2.6)

$$qy - x_1 y + x_1 - x_1^2 > 0.$$

Aus (2.4) ist bekannt, dass  $0 < q \ll 1$ . Wählt man  $x_1 = q$ , so kann obiger Ausdruck wie folgt abgeschätzt werden:

$$y(q - x_1) + x_1 - x_1^2 \approx y(q - x_1) + x_1 > 0 \quad \forall y_1 < y < y_2.$$

Damit ergibt sich für  $x < x_1^*$  die natürliche Grenze  $x_1 = q$  und für  $x = x_1 = q$  ist (4.1) erfüllt:

$$-i \cdot \left. \frac{dr}{dt} \right|_{x=x_1=q} = -\frac{qy - qy + q - q^2}{\varepsilon} = -\frac{q(1-q)}{\varepsilon} < 0 \quad \text{für } q < 1.$$

Für  $x = x_2$ ,  $n = i$  und (4.1) folgt analog:

$$i \cdot \left. \frac{dr}{dt} \right|_{x=x_2} = \left. \frac{dx}{dt} \right|_{x=x_2} < 0 \quad \Rightarrow \quad y(q - x_2) + x_2 - x_2^2 < 0, \quad \text{da } \varepsilon > 0$$

Wählt man  $x_2 = 1$  folgt:

$$i \cdot \left. \frac{dr}{dt} \right|_{x=x_2=1} = \frac{y(q-1)}{\varepsilon} < 0 \quad \text{für } q < 1, \forall y > 0.$$

Es lässt sich leicht zeigen, dass  $q = x_1 < x_1^* < x_2 = 1$  für  $q < 1$  und  $x_1^*$ .

Betrachte nun  $z = z_1$  und  $z = z_2$  mit  $0 < z_1 < z_1^* < z_2$ .

Für  $z = z_1$ ,  $n = -k$  und (4.1) folgt

$$-k \cdot \left. \frac{dr}{dt} \right|_{z=z_1} = -\left. \frac{dz}{dt} \right|_{z=z_1} = -(x - z_1) < 0.$$

Damit folgt, dass  $z_1 < x$  und da in  $S$   $x \geq x_1$  kann  $z = z_1 = q$  als untere Schranke gesetzt werden.

Entsprechend gilt für  $z = z_2$  und  $n = k$

$$k \cdot \left. \frac{dr}{dt} \right|_{z=z_2} = \left. \frac{dz}{dt} \right|_{z=z_2} = (x - z_2) < 0 \quad \Rightarrow \quad x < z_2$$

und  $z = z_2 = 1$  kann als obere Schranke gesetzt werden, da  $x \leq 1$  in  $S$ .

Da  $z_1^* = x_1^*$  ist die Bedingung  $q = z_1 < z_1^* < z_2 = 1$  ebenfalls erfüllt.

Als letztes muss nun noch  $y = y_1$  und  $y = y_2$  mit  $y_1 < y_1^* < y_2$  betrachtet werden.

Für  $y = y_1$ ,  $n = -j$  und (4.1) folgt

$$-j \cdot \left. \frac{dr}{dt} \right|_{y=y_1} = -\left. \frac{dy}{dt} \right|_{y=y_1} < 0.$$

Da  $\delta > 0$  folgt mit (2.6)

$$y_1(q + x) - 2fz < 0.$$

Für alle  $q \leq x \leq 1$  und alle  $q \leq z \leq 1$  muss also gelten:

$$y_1 < \frac{2fz}{q+x}.$$

Eine untere Schranke für  $y$  erhält man nun, wenn man  $z = z_{\min} = q$  und  $x = x_{\max} = 1$  setzt:

$$y_1 = \frac{2fq}{q+1}.$$

Analog folgt für  $y = y_2$ ,  $n = j$  und (4.1)

$$j \cdot \frac{dr}{dt} \Big|_{y=y_2} = \frac{dy}{dt} \Big|_{y=y_2} < 0 \quad \Rightarrow \quad 2fz - y_2(q+x) < 0, \quad \text{da } \delta > 0$$

und dass für alle  $q \leq x \leq 1$  und alle  $q \leq z \leq 1$

$$y_2 > \frac{2fz}{q+x}$$

gelten muss.

Setzt man  $z = z_{\max} = 1$  und  $x = x_{\min} = q$  erhält man als obere Schranke für  $y$

$$y_2 = \frac{f}{q}.$$

Die Bedingung  $y_1 < y_1^* < y_2$  ist ebenfalls erfüllt, wenn man  $q$  und  $f$  wie in (2.4) wählt.

Es kann also ein Quader  $S$  gefunden werden, der (4.1)  $\forall r \in S$  erfüllt. Dieser wird durch

$$x = q, x = 1; \quad y = \frac{2fq}{q+1}, y = \frac{f}{q}; \quad z = q, z = 1 \quad (4.2)$$

begrenzt und schließt das Gleichgewicht  $(x_1^*, y_1^*, z_1^*)$  ein. Dabei werden  $f$  und  $q$  wie in (2.4) gewählt.

Wie bereits erwähnt, waren die Bedingungen für  $S$ , dass jede Lösung, die zur Zeit  $t_0$  in  $S$  liegt für alle  $t > t_0$  in  $S$  bleibt, und dass jede Lösung im positiven Oktanten  $x, y, z > 0$ , die außerhalb von  $S$  liegt, irgendwann nach  $S$  hinein läuft. Da (4.1) erfüllt ist, sind diese Bedingungen erfüllt. Hastings und Murray sagen in [6], dass die Existenz einer solchen Menge  $S$  eine nützliche Voraussetzung ist, um die Existenz periodischer Lösungen mit begrenzter Amplitude zu beweisen. Dies wird im nächsten Kapitel gezeigt werden.

### 4.3 Verhalten der Lösungen in $S$

Nachdem im vorherigen Abschnitt  $S$  bestimmt wurde, stellt sich die Frage, ob über das Verhalten der Lösungen in  $S$  eine Aussage gemacht werden kann. Dafür wird  $S$  zunächst derart in acht Unterquader  $S_1, S_2, \dots, S_8$  unterteilt, dass diese das Gleichgewicht  $(x_1^*, y_1^*, z_1^*) = r_1^*$  als gemeinsamen Eckpunkt besitzen.

Die Unterquader werden wie folgt definiert:

$$\begin{aligned}
 S_1 : & \quad q \leq x \leq x_1^*, \quad y_1 \leq y \leq y_1^*, \quad q \leq z \leq z_1^*; \\
 S_2 : & \quad x_1^* \leq x \leq 1, \quad y_1 \leq y \leq y_1^*, \quad q \leq z \leq z_1^*; \\
 S_3 : & \quad q \leq x \leq x_1^*, \quad y_1^* \leq y \leq y_2, \quad q \leq z \leq z_1^*; \\
 S_4 : & \quad x_1^* \leq x \leq 1, \quad y_1^* \leq y \leq y_2, \quad q \leq z \leq z_1^*; \\
 S_5 : & \quad q \leq x \leq x_1^*, \quad y_1 \leq y \leq y_1^*, \quad z_1^* \leq z \leq 1; \\
 S_6 : & \quad x_1^* \leq x \leq 1, \quad y_1 \leq y \leq y_1^*, \quad z_1^* \leq z \leq 1; \\
 S_7 : & \quad q \leq x \leq x_1^*, \quad y_1^* \leq y \leq y_2, \quad z_1^* \leq z \leq 1; \\
 S_8 : & \quad x_1^* \leq x \leq 1, \quad y_1^* \leq y \leq y_2, \quad z_1^* \leq z \leq 1.
 \end{aligned}$$

Zur Veranschaulichung dient Abbildung 4.2<sup>2</sup>.

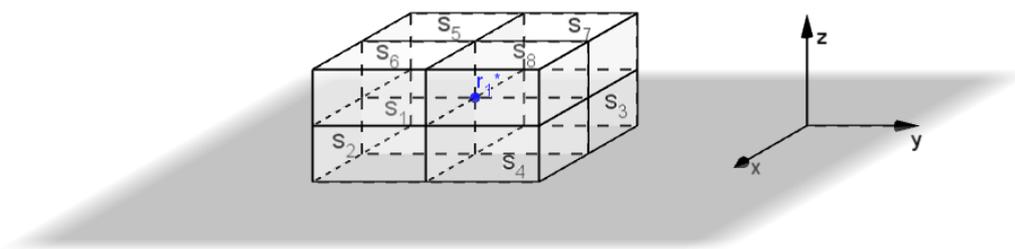


Abbildung 4.2: Unterteilung von S in acht Unterquader

Im Folgenden wird davon ausgegangen, dass die Parameter so gewählt sind, dass das Gleichgewicht  $(x_1^*, y_1^*, z_1^*)$  instabil ist, das heißt die Bedingungen (3.18), (3.20) und (3.21) sind erfüllt.

Da nach dem Satz von Vieta für Polynome vom Grad 3 die Ungleichung  $-\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 = C > 0$  gilt, folgt für die Linearisierung von  $(x_1^*, y_1^*, z_1^*)$ , dass zwei Eigenwerte einen positiven Realteil besitzen müssen, und dass der dritte Eigenwert reell und negativ ist. An dieser Stelle soll noch bemerkt werden, dass die beiden Eigenwerte mit positivem Realteil nicht zwingend komplex sein müssen. Theoretisch ist es auch möglich, dass beide Eigenwerte reell und positiv sind. Falls sie jedoch nicht reell sind, müssen sie komplex konjugiert sein. Dies ist insbesondere kein Widerspruch zur Vorzeichenregel von Descartes.

Unter diesen Voraussetzungen soll nun gezeigt werden, dass alle Lösungskurven bis auf zwei, die sich in  $S_4$  oder  $S_5$  befinden, nicht darin bleiben können, und dass keine Lösung aus S nach  $S_4$  oder  $S_5$  hineinlaufen kann. Des weiteren soll gezeigt werden, dass eine Lösung, die eine der anderen Boxen betritt, oszilliert. Dabei ist es egal, ob die Lösungskurve von außerhalb oder aus  $S_4$  oder  $S_5$  kommt. Genauer heißt das, dass eine Lösung,

<sup>2</sup> diese Abbildung wurde in GeoGebra 5.0 Beta Release erstellt

die sich zum Beispiel in  $S_3$  befindet, die Boxen in folgender Reihenfolge durchläuft:

$$S_3 \rightarrow S_1 \rightarrow S_2 \rightarrow S_6 \rightarrow S_8 \rightarrow S_7 \rightarrow S_3 \rightarrow \dots \quad (4.3)$$

Zur Veranschaulichung dient Abbildung 4.3<sup>3</sup>. Die beiden grauen Boxen sind die, in denen die Lösungen nicht bleiben können (mit Ausnahme von zweien), und die restlichen, blauen, Boxen werden wie in (4.3) durchlaufen, womit folgt, dass die Lösungen oszillieren.

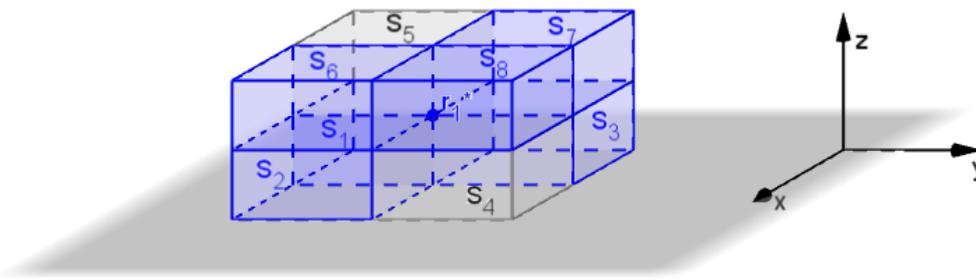


Abbildung 4.3: Unterquader von  $S$  in denen die Lösung oszilliert

Als erstes soll nun die Box  $S_4$  betrachtet werden. Diese ist definiert durch:

$$x_1^* \leq x \leq 1, \quad y_1^* \leq y \leq y_2, \quad q \leq z \leq z_1^*.$$

Man sieht sofort, dass  $z \leq x$  gilt. Damit folgt, dass  $\frac{dz}{dt} = x - z \geq 0$ . Für die Trajektorien in  $S$  gibt es daher zwei Möglichkeiten, wie sie sich verhalten können. Die erste ist, dass sie auf das Gleichgewicht  $(x_1^*, y_1^*, z_1^*)$  zulaufen. Da jedoch, wie bereits erwähnt, die Linearisierung im Gleichgewicht nur einen negativen Eigenwert besitzt, kann es in  $S_4$  nur einen solchen Orbit für  $t \rightarrow \infty$  geben. Die zweite Möglichkeit ist, dass die Lösungskurven die Seiten von  $S_4$  schneiden, die im Inneren von  $S$  liegen.

Diese werden wie folgt definiert:

$$\begin{aligned} F_1: & \quad x_1^* < x \leq 1, \quad y_1^* \leq y \leq y_2, \quad z = z_1^*; \\ F_2: & \quad x_1^* \leq x \leq 1, \quad y = y_1^*, \quad q \leq z < z_1^*; \\ F_3: & \quad x = x_1^*, \quad y_1^* < y \leq y_2, \quad q \leq z \leq z_1^*. \end{aligned}$$

Um nun die Behauptung, dass mit Ausnahme einer alle Lösungskurven aus  $S_4$  hinauslaufen, und dass keine Lösungskurve aus  $S$  hineinlaufen kann, zu zeigen, muss gezeigt werden, dass die Richtungsvektoren auf oben angegebenen Seitenflächen aus  $S_4$  hinaus zeigen.

Auf  $F_1$  gilt  $z < x$  und damit  $\frac{dz}{dt} > 0$  und somit verlässt die Lösungskurve  $S_4$ .

Auf  $F_2$  gilt, da  $z < z_1^*$  und  $-x_1^* \geq -x$

$$\frac{dy}{dt} = \frac{-qy_1^* - xy_1^* + 2fz}{\delta} < \frac{-qy_1^* - x_1^*y_1^* + 2fz_1^*}{\delta} = 0$$

<sup>3</sup> diese Abbildung wurde in GeoGebra 5.0 Beta Release erstellt

und somit verlässt die Lösungskurve auch hier  $S_4$ .

Bleibt noch  $F_3$  zu betrachten. Dies ist jedoch ein bisschen aufwendiger. Da  $\varepsilon > 0$  reicht es zwar zu zeigen, dass  $g(x, y) := qy - xy + x - x^2 < 0$  falls  $x = x_1^*, y_1^* < y \leq y_2$ , für später sind jedoch die allgemeineren Aussagen

$$g(x, y) \begin{cases} < 0, & \text{falls } x_1^* \leq x \leq 1, y_1^* < y \leq y_2 \\ > 0, & \text{falls } q < x \leq x_1^*, y_1 \leq y < y_1^* \end{cases} \quad (4.4)$$

wichtig, weshalb sie an dieser Stelle gezeigt werden sollen.

Betrachte daher als erstes  $\frac{\partial}{\partial y} g(x, y) = q - x < 0$  für  $q < x$ . Da  $g(x_1^*, y_1^*) = 0$  folgt

$$g(x_1^*, y) \begin{cases} > 0, & \text{falls } y < y_1^* \\ < 0, & \text{falls } y > y_1^* \end{cases}.$$

Bei  $x = x_1^*$  gilt für  $\frac{\partial}{\partial x} g(x, y_1^*)$  mit (3.10) und (3.12)

$$\frac{\partial}{\partial x} g(x, y_1^*) = -y_1^* + 1 - 2x_1^* = \frac{-2fq - qx_1^* - x_1^{*2}}{q + x_1^*} < 0$$

und es folgt

$$g(x, y_1^*) \begin{cases} > 0, & \text{falls } q < x < x_1^* \\ < 0, & \text{falls } x_1^* < x < 1 \end{cases}.$$

Damit gilt (4.4) und insbesondere  $\frac{dx}{dt} < 0$  auf  $F_3$ , womit die Behauptung gezeigt ist, dass keine Lösungskurve aus  $S$  nach  $S_4$  hineinlaufen kann.

Die Diskussion des Verhaltens der Lösungskurven in  $S_5$  folgt analog.

Als nächstes soll nun gezeigt werden, dass die restlichen Quader in einer bestimmten Reihenfolge durchlaufen werden. Dies ist für die Boxen  $S_2$  und  $S_7$  am einfachsten zu zeigen und daher soll mit diesen begonnen werden.

In  $S_2$  gilt genau wie in  $S_4$   $z \leq x$  und damit  $\frac{dz}{dt} \geq 0$ . Außerdem haben die beiden Unterquader eine gemeinsame Fläche  $F_3$ , für die bereits gezeigt wurde, dass die Richtungsvektoren nach  $S_2$  hinein zeigen.

Mit  $S_1$  hat  $S_2$  die gemeinsame Fläche  $x = x_1^*, y_1 \leq y < y_1^*, q \leq z \leq z_1^*$  auf der mit (4.4) gilt

$$\frac{dx}{dt} = g(x_1^*, y) > 0,$$

was bedeutet, dass auch bei dieser Seitenfläche die Richtungsvektoren nach  $S_2$  hinein zeigen.

Für die Kante  $x = x_1^*, y = y_1^*, q \leq z \leq z_1^*$  gilt

$$\frac{dy}{dt} = \frac{-qy_1^* - x_1^*y_1^* + 2fz}{\delta} < \frac{-qy_1^* - x_1^*y_1^* + 2fz_1^*}{\delta} = 0.$$

Da es in  $S_2$  außerdem keine Lösungskurve gibt, die auf das Gleichgewicht  $(x_1^*, y_1^*, z_1^*)$  zustreben kann, folgt, dass alle Trajektorien in  $S_2$  auf die Fläche  $z = z_1^*$  zustreben, und da sie nicht in  $S_2$  bleiben können, diese in Richtung  $S_6$  verlassen.

Analog folgt für  $S_7$ , dass dieser Quader von allen Lösungskurven in Richtung  $S_3$  verlassen wird. Damit wurde von (4.3) bereits folgendes gezeigt:

$$S_3 \rightarrow S_1 \rightarrow S_2 \xrightarrow{\checkmark} S_6 \rightarrow S_8 \rightarrow S_7 \xrightarrow{\checkmark} S_3 \rightarrow \dots$$

Für  $S_3$  und  $S_6$  gestaltet sich das Ganze dagegen etwas komplizierter. Da die Diskussion dieser beiden Boxen aber auch hier analog ist, wird nur  $S_3$  besprochen. In diesem Quader gibt es eine Fläche  $x = z$  oder  $\frac{dz}{dt} = 0$  die diesen diagonal in zwei Hälften  $S_{3_u}$  und  $S_{3_o}$  teilt.

Betrachte als erstes die untere Hälfte  $S_{3_u}$ . Dort gilt  $x > z$  oder  $\frac{dz}{dt} > 0$ . Setzt man  $\frac{dx}{dt} = 0$ , so erhält man mit  $y = \frac{x - x^2}{x - q}$  eine Fläche die  $S_{3_u}$  in die beiden Bereiche  $A_1$  und  $A_2$  teilt.

In  $A_1$  gilt neben  $\frac{dz}{dt} > 0$  auch  $\frac{dx}{dt} > 0$ , während in  $A_2$  neben  $\frac{dz}{dt} > 0$ ,  $\frac{dx}{dt} < 0$  gilt.

Wie  $A_1$  in  $S_3$  liegt sieht man in Abbildung 4.4.

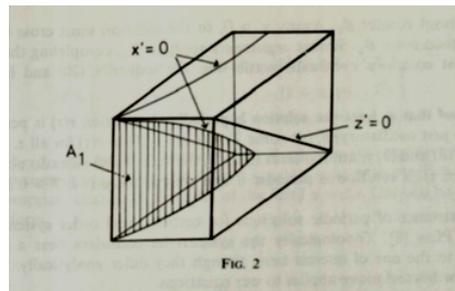


Abbildung 4.4:  $S_3$  mit den beiden Grenzflächen  $\frac{dx}{dt} = 0$  und  $\frac{dz}{dt} = 0$ , sowie dem Gebiet  $A_1$  (aus [6] übernommen)

$A_1$  hat mit  $S_1$  eine gemeinsame Fläche  $q \leq x < x_1^*$ ,  $y = y_1^*$ ,  $q \leq z < x$  durch die alle Lösungskurven aus  $A_1$  nach  $S_1$  laufen.

Um dies zu zeigen, betrachte als erstes  $\frac{dy}{dt}$  in  $A_1$  und auf der Fläche  $z = x$ ,  $y \geq y_1^*$ .

Da  $y_1^* = \frac{2fx_1^*}{q + x_1^*} < 2f$  gilt:

$$\begin{aligned} \frac{dy}{dt} &= \frac{-qy - xy + 2fz}{\delta} \leq \frac{-qy_1^* - xy_1^* + 2fx}{\delta} \\ &= \frac{-qy_1^* + (2f - y_1^*)x}{\delta} < \frac{-qy_1^* + (2f - y_1^*)x_1^*}{\delta} \\ &= \frac{-qy_1^* - x_1^*y_1^* + 2fx_1^*}{\delta} = 0. \end{aligned}$$

Außerdem können Lösungskurven  $A_1$  weder durch  $\frac{dz}{dt} = 0$  noch durch  $\frac{dx}{dt} = 0$  verlassen. Denn falls  $\frac{dz}{dt} = 0$  und  $\frac{dx}{dt} > 0$  würde folgen, dass

$$\frac{d^2z}{dt^2} = \frac{dx}{dt} - \frac{dz}{dt} = \frac{dx}{dt} > 0,$$

was ein Widerspruch ist, da in  $A_1$  gilt, dass  $\frac{dz}{dt} > 0$ .

Für  $\frac{dx}{dt} = 0$  und  $\frac{dy}{dt} < 0$  würde folgen, dass

$$\frac{d^2x}{dt^2} = \frac{1}{\varepsilon} \left( q \frac{dy}{dt} - \frac{dx}{dt} y - x \frac{dy}{dt} + \frac{dx}{dt} - 2 \frac{dx}{dt} \right) = \frac{1}{\varepsilon} \left( q \frac{dy}{dt} - x \frac{dy}{dt} \right) > 0,$$

was ebenfalls ein Widerspruch ist, da  $\frac{dx}{dt} > 0$  in  $A_1$  gilt. Zudem ist es auch nicht möglich, dass  $\frac{dz}{dt} = \frac{dx}{dt} = 0$  und  $\frac{dy}{dt} < 0$  da dann zwar  $\frac{d^2z}{dt^2} = 0$  aber  $\frac{d^3z}{dt^3} = \frac{d^2x}{dt^2} > 0$ .

Damit ist gezeigt, dass alle Trajektorien in  $A_1$  direkt nach  $S_1$  laufen.

Es ist außerdem nicht möglich, dass eine Lösung für alle Zeit in  $A_2$  bleibt, da dann  $z$  auf eine endliche Schranke zulaufen würde. Dies ist jedoch nicht möglich, da in  $S_3$  keine Lösung auf das Gleichgewicht zulaufen kann.

Betrachte als nächstes alle Lösungskurven, die sich in  $S_{3_o}$  befinden, und die die Grenzfläche  $x = z$  schneiden.

Im Schnittpunkt gilt  $\frac{dz}{dt} = 0$  und  $0 \leq \frac{d^2z}{dt^2} = \frac{dx}{dt}$  da in  $S_{3_u}$   $\frac{dz}{dt} > 0$  gilt. Falls  $\frac{dx}{dt} = 0$  (und damit auch  $\frac{d^2z}{dt^2} = 0$ ) folgt, dass  $\frac{d^3z}{dt^3} = \frac{d^2x}{dt^2} = \frac{1}{\varepsilon} \left( q \frac{dy}{dt} - x \frac{dy}{dt} \right) > 0$ , was einen Widerspruch darstellt.

Damit folgt, dass für die Lösungskurve unmittelbar nach dem Schnittpunkt  $\frac{dz}{dt} > 0$  und  $\frac{dx}{dt} > 0$  gilt. Dadurch ist jedoch  $A_1$  gekennzeichnet, was bedeutet, dass jede Lösung aus  $S_{3_o}$ , die  $x = z$  schneidet, direkt nach  $A_1$  hineinläuft.

Für alle anderen Lösungen in  $S_{3_o}$  gilt, dass sie  $S_3$  durch  $y = y_1^*$  verlassen müssen, da sie weder in  $S_{3_o}$  bleiben, noch durch eine andere Fläche verlassen können.

Von (4.3) wurde damit bereits bewiesen:

$$S_3 \xrightarrow{\checkmark} S_1 \rightarrow S_2 \xrightarrow{\checkmark} S_6 \xrightarrow{\checkmark} S_8 \rightarrow S_7 \xrightarrow{\checkmark} S_3 \rightarrow \dots$$

Folglich muss nur noch untersucht werden, wie sich die Lösungen in  $S_1$  und  $S_8$  verhalten.

Bei der Diskussion von  $S_2$  wurde bereits gezeigt, dass auf der gemeinsamen Fläche von  $S_1$  und  $S_2$  alle Richtungsvektoren nach  $S_2$  hinein zeigen.

Für eine Lösungskurve, die aus  $S_5$  kommt, kann theoretisch  $\frac{dy}{dt} > 0$  gelten, wodurch die Lösung nach  $S_3$  laufen könnte. Doch es wurde bereits gezeigt, dass sie dann aus  $S_3$  wieder nach  $S_1$  zurück laufen muss. Dann gilt jedoch  $\frac{dy}{dt} < 0$ .

Genau wie  $S_3$  wird  $S_1$  von  $x = z$  in zwei Hälften geteilt. In der oberen gilt  $\frac{dz}{dt} < 0$  und in der unteren  $\frac{dz}{dt} > 0$ . Des Weiteren gilt in ganz  $S_1$   $\frac{dx}{dt} > 0$ . Damit folgt für alle Lösungen in  $z \leq x$ , dass sie dort so lange bleiben, bis sie nach  $S_2$  laufen. Für  $\frac{dz}{dt} < 0$  gilt, dass dort  $\frac{dy}{dt} < 0$  bleibt, denn dies gilt für alle Lösungen, die aus  $S_3$  kommen, und falls  $\frac{dy}{dt} = 0$  folgt  $\frac{d^2y}{dt^2} = -\frac{dx}{dt} y + 2f \frac{dz}{dt} < 0$ , was ein Widerspruch ist. Das bedeutet, dass eine Lösungskurve nicht nach  $S_3$  zurück laufen kann und damit die Fläche  $x = z$  schneiden und dann nach  $S_2$  laufen muss.

Somit ist (4.3) gezeigt, und es wurde bewiesen, dass die Lösungskurven oszillieren müssen. Darüber hinaus wurde gezeigt, dass die Lösungskurven eine begrenzte Amplitude besitzen, und man kann Aussagen über den Wechsel der Konzentrationen von  $[HBrO_2]$ ,  $[Br^-]$  und  $[Ce^{4+}]$  machen.

## 4.4 Beweis der Existenz einer periodischen Lösung in $S$

Basierend auf den vorhergehenden Überlegungen soll in diesem Kapitel nun abschließend noch gezeigt werden, dass mindestens eine periodische Lösung existiert. Dafür muss gezeigt werden, dass ein  $T > 0$  existiert, so dass  $r(T) = r(0)$  (vergleiche (2.9)).

Im Folgenden werden die Lösungen betrachtet, für die der Anfangswert  $r(0)$  auf der Fläche  $F$  liegt. Dabei ist  $F$  die gemeinsame Fläche der Boxen  $S_2$  und  $S_6$ , die definiert ist durch

$$x_1^* \leq x(0) \leq 1, \quad y_1 \leq y(0) \leq y_1^*, \quad z(0) = z_1^*.$$

Aus den Ergebnissen des vorherigen Abschnittes ist bekannt, dass ein  $T > 0$  existiert, so dass  $r(T)$  in  $F$  liegt. Außerdem existiert für jedes  $r(0) \neq r_1^* = (x_1^*, y_1^*, z_1^*)$  ein kleinstes  $T > 0$ , so dass  $r(T) \in F$ .

Definiere eine Abbildung  $p : F \rightarrow F$  mit

$$\begin{aligned} p(r(0)) &= r(T) \quad \text{falls } r(0) \neq r_1^*, \\ p(r_1^*) &= r_1^*. \end{aligned} \tag{4.5}$$

Diese Abbildung ist stetig, da alle Lösungen  $F$  nur in eine Richtung durchqueren (siehe Diskussion zur Box  $S_2$  auf Seite 24).

Da  $p(r_1^*) = r_1^*$  ist  $r_1^*$  ein Fixpunkt von  $p$ . Falls  $p$  einen weiteren Fixpunkt besitzt, folgt, dass das Differentialgleichungssystem (2.6) eine periodische Lösung besitzt.

Um dies zu zeigen wird die Verallgemeinerung des Fixpunktsatzes von Brouwer verwendet (siehe Satz 2 auf Seite 6).

Da  $F$  den Punkt  $r_1^*$  enthält, und dieser Punkt ein Fixpunkt ist, muss gezeigt werden, dass in  $F$  eine Kurve  $\gamma$  mit folgenden Eigenschaften existiert:

1.  $r_1^*$  ist nicht in  $\gamma$  enthalten
2.  $\gamma$  liegt mit Ausnahme der beiden Endpunkte die auf den Seiten  $x = x_1^*$  und  $y = y_1^*$  liegen im Inneren von  $F$
3.  $p$  bildet  $G$  auf  $G$  ab, wobei  $G$  die Fläche in  $F$  ist, die durch  $\gamma$  von  $r_1^*$  getrennt wird.

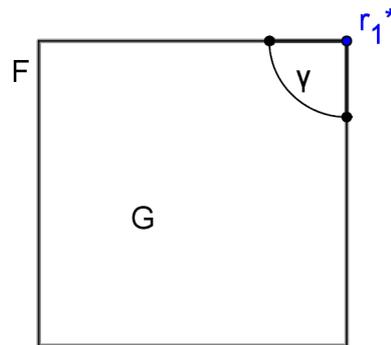
Der Fixpunktsatz wird dann auf der Fläche  $G$  angewendet, da er andernfalls den bereits bekannten Fixpunkt liefern könnte. In Abbildung 4.5 ist diese Fläche dargestellt.

Betrachte dafür die Linearisierung von (2.6) im Punkt  $r_1^*$ . Diese ist durch das System

$$\frac{du}{dt} = A_1 u \tag{4.6}$$

mit  $u \approx r - r_1^*$  und  $A_1$  aus (3.14)

$$A_1 = \begin{pmatrix} \frac{1 - 2x_1^* - y_1^*}{\varepsilon} & \frac{q - x_1^*}{\varepsilon} & 0 \\ \frac{-y_1^*}{\delta} & \frac{-q - x_1^*}{\delta} & \frac{2f}{\delta} \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Abbildung 4.5: Fläche  $G$  in  $F$ , die durch  $\gamma$  von  $r_1^*$  getrennt wird

gegeben. Wie bereits in Abschnitt 4.3 gesehen, besitzt  $A_1$  einen negativen, reellen Eigenwert  $\lambda_1$  und zwei Eigenwerte mit positiven Realteil  $\lambda_2 = \mu_2 + i\sigma$  und  $\lambda_3 = \mu_3 - i\sigma$ . Falls  $\lambda_2$  und  $\lambda_3$  komplexe Eigenwerte sind, ist  $\mu_2 = \mu_3$  und für  $\lambda_2$  und  $\lambda_3$  reell gilt  $\sigma = 0$ . Durch eine Variablentransformation der Form  $u = \Lambda v$  kann nun (4.6) in die Normalform

$$\frac{dv}{dt} = Nv \quad (4.7)$$

gebracht werden. Dabei ist

$$N = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \mu_2 & -\sigma \\ 0 & \sigma & \mu_3 \end{pmatrix}$$

und  $v = (v_1, v_2, v_3)^T$ .

Sei  $e = (e_1, e_2, e_3)^T$  der zu  $\lambda_1$  gehörende Eigenvektor von  $A_1$ . Dann existiert eine Gerade durch  $r_1^*$  und parallel zu  $e$ . Diese wird mit  $L$  bezeichnet.

Betrachte den Zylinder  $C_\alpha$  mit Achse  $L$  und elliptischen Durchschnitt, der im  $v$  Koordinatensystem definiert ist durch

$$v_2^2 + v_3^2 = \alpha \quad \forall \alpha > 0.$$

Für die Lösungskurven von (4.7)

$$\begin{aligned} \frac{dv_1}{dt} &= \lambda_1 v_1 \\ \frac{dv_2}{dt} &= \mu_2 v_2 - \sigma v_3 \\ \frac{dv_3}{dt} &= \sigma v_2 + \mu_3 v_3 \end{aligned}$$

gilt auf der Oberfläche von  $C_\alpha$

$$\begin{aligned}\frac{d(v_2^2 + v_3^2)}{dt} &= 2v_2 \frac{dv_2}{dt} + 2v_3 \frac{dv_3}{dt} \\ &= 2v_2(\mu_2 v_2 - \sigma v_3) + 2v_3(\sigma v_2 + \mu_3 v_3) \\ &= 2\mu_2 v_2^2 + 2\mu_3 v_3^2 > 0,\end{aligned}$$

da  $\mu_2$  und  $\mu_3$  positiv sind.

Damit folgt für Lösungen von (4.6), dass sie  $C_\alpha$  von innen nach außen schneiden. Mit  $\alpha$  und  $|r - r_1^*|$  entsprechend klein, gilt das selbe auch für (2.6).

Um dies zu zeigen, werden in (2.6) durch  $r - r_1^* = \Lambda \rho$  die Variablen getauscht. Dabei ist  $\Lambda$  der Variablenwechsel, der (4.6) in (4.7) überführt, und es folgt für  $|\rho| \rightarrow 0$ , dass

$$\frac{d(\rho_2^2 + \rho_3^2)}{dt} = 2\mu_2 \rho_2^2 + 2\mu_3 \rho_3^2 + o(|\rho|^2).$$

Es muss gezeigt werden, dass ein  $\delta > 0$  mit  $\rho_2^2 + \rho_3^2 \geq \delta \rho_1^2$  für  $r \in S \setminus (S_4 \cup S_5)$  existiert, so dass in  $S \setminus (S_4 \cup S_5)$  gilt

$$\frac{d(\rho_2^2 + \rho_3^2)}{dt} = 2\mu_2 \rho_2^2 + 2\mu_3 \rho_3^2 + o(\rho_2^2 + \rho_3^2).$$

Dies ist genau dann der Fall, wenn  $L \cap S$  in  $S_4 \cup S_5$  liegt und nicht auf Seitenflächen dieser Boxen, was äquivalent dazu ist, dass der Eigenvektor  $e$  keinen Eintrag besitzt der Null ist.

Betrachte dafür  $A_1 e = \lambda_1 e$  und benutze, dass  $\lambda_1 < 0$ ,  $q - x_1^* < 0$  und  $1 - 2x_1^* - y_1^* < 0$ . Letzteres kann mit Hilfe von (3.10) und (3.12) leicht gezeigt werden.

Es gilt

$$\begin{aligned}A_1 e &= \lambda_1 e \\ \Rightarrow (A_1 - \lambda_1 E) e &= 0 \\ \Rightarrow \begin{pmatrix} \frac{1 - 2x_1^* - y_1^*}{\varepsilon} - \lambda_1 & \frac{q - x_1^*}{\varepsilon} & 0 \\ \frac{-y_1^*}{\delta} & \frac{-q - x_1^*}{\delta} - \lambda_1 & \frac{2f}{\delta} \\ 1 & 0 & -1 - \lambda_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Da dies ein homogenes Gleichungssystem mit drei Unbekannten ist, existiert eine nicht-triviale Lösung, falls der Rang der Matrix  $A_1 - \lambda_1 E$  kleiner als drei ist. Um diesen zu bestimmen, wird  $A_1 - \lambda_1 E$  auf untere Zeilenstufenform gebracht:

$$A_1 - \lambda_1 E = \begin{pmatrix} B & 0 & 0 \\ \frac{1 - 2x_1^* - y_1^*}{\varepsilon} - \lambda_1 & \frac{q - x_1^*}{\varepsilon} & 0 \\ \frac{-y_1^*}{\delta} & \frac{-q - x_1^*}{\delta} - \lambda_1 & \frac{2f}{\delta} \end{pmatrix}$$

$$\text{mit } B = \left( 1 + \frac{-y_1^*}{2f} (-1 - \lambda_1) \right) + (-1 - \lambda_1) \frac{\delta}{2f} \left( \frac{-q - x_1^*}{\delta} - \lambda_1 \right) \frac{\varepsilon}{q - x_1^*} \left( \frac{1 - 2x_1^* - y_1^*}{\varepsilon} - \lambda_1 \right).$$

Da bei der Umformung auf Zeilenstufenform genau zweimal Zeilen vertauscht wurden, bleibt die Determinante unverändert und gleich dem charakteristischen Polynom. Daraus folgt, dass  $B$  dieselben Nullstellen hat, wie das charakteristische Polynom, insbesondere  $\lambda_1$ , und man erhält für  $\lambda_1$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \frac{1 - 2x_1^* - y_1^*}{\varepsilon} - \lambda_1 & \frac{q - x_1^*}{\varepsilon} & 0 \\ \frac{-y_1^*}{\delta} & \frac{-q - x_1^*}{\delta} - \lambda_1 & \frac{2f}{\delta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Der Rang der Matrix ist also zwei und es existiert eine nichttriviale Lösung. Für beliebiges  $e_1$  kann nun  $e_2$  und  $e_3$  berechnet werden.

Wähle  $e_1 = -\frac{q - x_1^*}{\varepsilon}$ , dann folgt

$$e_2 = \frac{1 - 2x_1^* - y_1^*}{\varepsilon} - \lambda_1 \text{ und } e_3 = \left( \frac{y_1^*(q - x_1^*)}{\delta\varepsilon} + \left( \frac{-q - x_1^*}{\delta} - \lambda_1 \right) \left( \frac{1 - 2x_1^* - y_1^*}{\varepsilon} - \lambda_1 \right) \right) \frac{\delta}{2f}.$$

Es gilt  $e_1 \neq 0$  und  $e_2 \neq 0$  da  $\frac{1 - 2x_1^* - y_1^*}{\varepsilon}$  kein Eigenwert von  $A_1 - \lambda_1 E$  sein kann (angenommen es wäre ein Eigenwert, dann besitzt (4.8) nur die triviale Nulllösung, was ein Widerspruch ist). Außerdem gilt

$$e_3 = \left( \frac{y_1^*(q - x_1^*)}{\delta\varepsilon} + \frac{(-q - x_1^*)(1 - 2x_1^* - y_1^*)}{\delta\varepsilon} - \frac{-q - x_1^*}{\delta} \lambda_1 - \frac{1 - 2x_1^* - y_1^*}{\varepsilon} \lambda_1 + \lambda_1^2 \right) \frac{\delta}{2f} \neq 0,$$

da  $\varepsilon$  und  $\delta$  sehr klein sind, und daher

$$\frac{y_1^*(q - x_1^*)}{\delta\varepsilon} + \frac{(-q - x_1^*)(1 - 2x_1^* - y_1^*)}{\delta\varepsilon} + \lambda_1^2 > \frac{-q - x_1^*}{\delta} \lambda_1 + \frac{1 - 2x_1^* - y_1^*}{\varepsilon} \lambda_1,$$

womit die Behauptung gezeigt ist.

Definiere nun  $\gamma := C_\alpha \cap F$  für  $\alpha > 0$  ausreichend klein. Damit folgt, dass eine Lösung  $r$  mit  $r(0) \in G$  außerhalb von  $C_\alpha$  liegt. Diese Lösung bleibt in  $S \setminus (S_4 \cup S_5)$  und kann daher  $C_\alpha$  nicht schneiden. Folglich liegt auch  $r(T)$  in  $G$  und mit dem Fixpunktsatz von Brouwer folgt, dass  $p$  in  $G$  einen Fixpunkt besitzt. An dieser Stelle soll noch bemerkt werden, dass die Konvexität, die bei der Verallgemeinerung des Brouwerschen Fixpunktsatzes (siehe (2) auf Seite 6) benötigt wird, von  $G$  bei obiger Wahl von  $\gamma$  nicht erfüllt ist (vergleiche Abbildung 4.5). Dies ist ein offener Punkt im Beweis von Hastings und Murray [6]. Auch bei Pliss [11], der die Existenz periodischer Lösungen bei bestimmten dreidimensionalen Systemen untersuchte, und auf den sich Hastings und Murray [6] beziehen, wurde die Konvexität nicht berücksichtigt.



# Kapitel 5

## Zusammenfassung und Ausblick

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass der Oregonator ein geeignetes Modell ist, um die BZ-Reaktion zu beschreiben. Es konnte nicht nur gezeigt werden, dass das Differentialgleichungssystem ein instabiles Gleichgewicht besitzt, sondern auch, dass mindestens eine periodische Lösung existiert.

Hastings und Murray weisen am Ende ihrer Arbeit [6] darauf hin, dass die Existenz periodischer Lösungen auch mithilfe der Verzweigungstheorie gezeigt werden kann. Sie bezeichnen dies jedoch als mühsam, da es sich in diesem Fall um ein dreidimensionales System handelt. Außerdem kann mit der Verzweigungstheorie nicht gezeigt werden, dass alle Lösungen oszillieren. Auch die Aussage über die Konzentrationswechsel kann dadurch nicht erhalten werden.

Dennoch haben sich viele Forscher mit der Verzweigungstheorie bei der BZ-Reaktion beschäftigt. In der Regel arbeiten sie aber alle mit einem zweidimensionalen System. Dies kann man leicht aus dem dreidimensionalen System erhalten. Zur Erinnerung:

$$\begin{aligned}\varepsilon \frac{dx}{dt} &= qy - xy + x - x^2 \\ \delta \frac{dy}{dt} &= -qy - xy + 2fz \\ \frac{dz}{dt} &= x - z\end{aligned}\tag{5.1}$$

ist die dimensionslose Form des FKN-Modells mit den dimensionslosen Parametern aus (2.4). Da  $\varepsilon \ll \delta$  kann  $\varepsilon \frac{dx}{dt} \approx 0$  gesetzt werden, und man erhält

$$\begin{aligned}qy - xy + x - x^2 &= 0 \\ \Rightarrow x = x(y) &= \frac{(1-y) + \sqrt{(1-y)^2 + 4qy}}{2}.\end{aligned}\tag{5.2}$$

Damit wird (5.1) auf ein zweidimensionales Differentialgleichungssystem in  $y$  und  $z$  reduziert:

$$\begin{aligned}\delta \frac{dy}{dt} &= 2fz - y[x(y) + q] \\ \frac{dz}{dt} &= x(y) - z.\end{aligned}\tag{5.3}$$

Ein solches zweidimensionales System lässt sich viel einfacher mithilfe der Verzweigungstheorie untersuchen.

In der Tat kann bei der BZ-Reaktion eine besondere Verzweigung gefunden werden: Eine subkritische Hopf-Bifurkation. Bar-Eli und Noyes sprechen in [1] davon, dass es bei der BZ-Reaktion nur diese Art von Verzweigung geben kann. Ein Beweis dazu findet sich zum Beispiel bei Tyson [14].

Die Idee hinter diesem Beweis ist recht einfach zu verstehen. Dafür muss man sich jedoch erst einmal bewusst machen, was eine subkritische Hopf-Bifurkation ausmacht, und wie sie sich von einer superkritischen unterscheidet.

Von einer superkritischen Hopf-Bifurkation spricht man, wenn ein stabiles Gleichgewicht in ein instabiles übergeht und dabei ein stabiler Grenzzyklus entsteht.

Hopf-Verzweigungen können in allen Phasenräumen der Dimension  $n \geq 2$  auftreten, in diesem Fall ist jedoch nur der zweidimensionale Fall interessant.

Zur Veranschaulichung dient folgende Graphik (siehe [12, S. 250]):

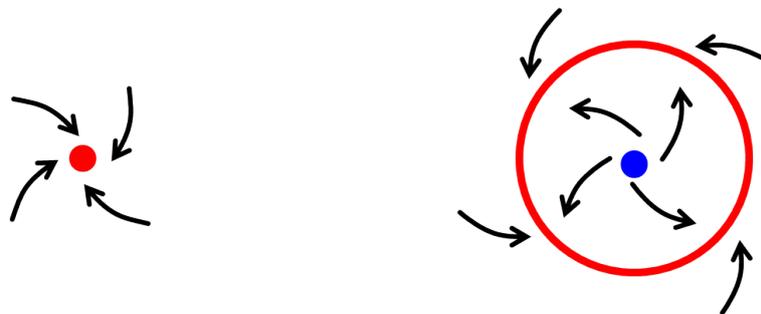


Abbildung 5.1: Stabilitätsänderung des Gleichgewichts bei einer superkritischen Hopf-Verzweigung

Im Unterschied dazu spricht man von einer subkritischen Hopf-Verzweigung, wenn ein stabiles Gleichgewicht, welches von einem instabilen Grenzzyklus umgeben ist, in ein instabiles Gleichgewicht übergeht, wobei der Grenzzyklus verschwindet.

Strogatz schreibt in [12], dass nach der Bifurkation die Trajektorien zu einem entfernten Attraktor springen müssen. Dies kann ein Gleichgewicht, ein anderer Grenzzyklus, das Unendliche oder für Dimension  $n \geq 3$  ein chaotischer Attraktor sein.

In einem zweidimensionalen System kann es also insbesondere vorkommen, dass das stabile Gleichgewicht von einem stabilen Grenzzyklus eingeschlossen wird. Der instabile Grenzzyklus befindet sich dann dazwischen. Wenn das stabile Gleichgewicht in ein instabiles übergeht, verschwindet der instabile Grenzzyklus, der stabile Grenzzyklus bleibt jedoch erhalten.

In Abbildung 5.2 wird dies noch einmal veranschaulicht (siehe [12, S. 252]).

Tyson zeigt in [14], dass bei entsprechender Wahl der Konstanten und  $f = f_c$  ein stabiles Gleichgewicht existiert, dass von einem stabilen Grenzzyklus umgeben ist. Folglich muss sich dazwischen ein instabiler Grenzzyklus befinden. Ist  $f$  dagegen so gewählt, dass das Gleichgewicht instabil ist, dann existiert ein stabiler Grenzzyklus.

Somit sind die Bedingungen für eine subkritische Hopf-Bifurkation erfüllt.

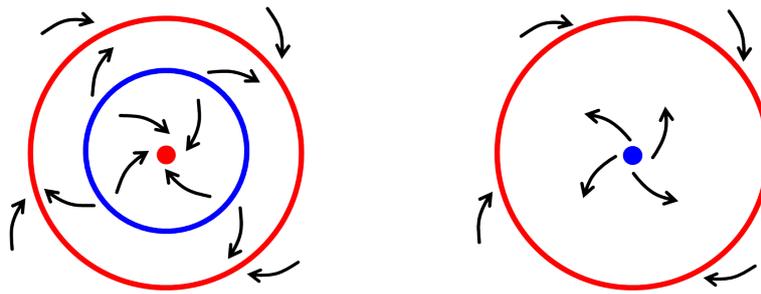


Abbildung 5.2: Stabilitätsänderung des Gleichgewichts bei einer subkritischen Hopf-Verzweigung

Diesen Beweis hier im Detail zu bringen würde zu weit gehen. Deshalb sei nochmal auf die bereits genannten Arbeiten von Tyson [14] und Bar-Eli und Noyes verwiesen [1].



# Anhang A

## Anhang

The screenshot shows the WolframAlpha interface with the following content:

- Input:**  $\frac{1}{2}((1-2f-0.0008) + \sqrt{(1-2f-0.0008)^2 + 4 \cdot 0.0008 + 8 \cdot 0.0008 f})$   
 $(1-4f-0.0008) + 2 \cdot 0.0008(1+3f) +$   
 $(0.0008 + \frac{1}{2}((1-2f-0.0008) + \sqrt{(1-2f-0.0008)^2 + 4 \cdot 0.0008 + 8 \cdot 0.0008 f})) \cdot$   
 $0.00005$
- Results:**  $0.00005 \left( \frac{1}{2} \sqrt{(0.9992 - 2f)^2 + 0.0064f + 0.0032 - 2f + 0.9992} + 0.0008 \right) +$   
 $\frac{1}{2} (0.9992 - 4f) \left( \sqrt{(0.9992 - 2f)^2 + 0.0064f + 0.0032 - 2f + 0.9992} + 0.0016(3f + 1) \right)$
- Plots:** Two plots showing the function for  $f$  from 0 to 200 and  $f$  from -750 to 1000.
- Alternate forms:**  $4f^2 + (-2\sqrt{4(f-0.9976)f + 1.0016 - 2.99285})f + 0.499625$   
 $\sqrt{4(f-0.9976)f + 1.0016 + 0.500825}$   
 $\frac{1}{50000000} (200000000f^2 - 250\sqrt{2}(16000f - 3997)\sqrt{1250f^2 - 1247f + 313} -$   
 $1.49643 \times 10^8 f + 2.50413 \times 10^7)$
- Expanded form:**  $-2f\sqrt{(0.9992 - 2f)^2 + 0.0064f + 0.0032} +$   
 $0.499625\sqrt{(0.9992 - 2f)^2 + 0.0064f + 0.0032} + 4f^2 - 2.99285f + 0.500825$
- Roots:**  $f = 0.251218$   
 $f = 1.20308$
- Series expansion at  $f=0$ :**  $1.00085 - 5.9905f + 7.89359f^2 - 0.0128196f^3 - 0.0255774f^4 + O(f^5)$
- Series expansion at  $f=0.4988-0.039984i$ :**  $-(0.00319736 + 0.039886i) - (0.167169 - 0.231131i)\sqrt{f - (0.4988 - 0.039984i)} +$   
 $(0.99755 - 0.319872i)(f - (0.4988 - 0.039984i)) -$   
 $(2.24499 + 0.245387i)(f - (0.4988 - 0.039984i))^{3/2} +$   
 $4 \cdot (f - (0.4988 - 0.039984i))^2 - (8.26864 + 0.48311i)(f - (0.4988 - 0.039984i))^{5/2} +$   
 $O((f - (0.4988 - 0.039984i))^{7/2})$

Abbildung A.1: Berechnung der kritischen  $f$  mithilfe von WolframAlpha

The screenshot shows the WolframAlpha interface with the following content:

- Input:**  $-x^3 - 1391.07x^2 + 3.56198 \times 10^6 x - 316832$
- Input interpretation:**  $-x^3 + x^2 \times (-1391.07) + 3.56198 \times 10^6 x - 316832$
- Result:**  $-x^3 - 1391.07x^2 + 3.56198 \times 10^6 x - 316832$
- Plots:**
  - Plot 1: A graph of the cubic function for  $x$  from -3000 to 1000. The y-axis ranges from  $-5 \times 10^9$  to  $2 \times 10^9$ .
  - Plot 2: A graph of the cubic function for  $x$  from -7500 to 7500. The y-axis ranges from  $-6 \times 10^{11}$  to  $4 \times 10^{11}$ .
- Alternate forms:**
  - $-(x - 1315.81)(x - 0.0889514)(x + 2706.97)$
  - $x(-x - 1391.07)x + 3.56198 \times 10^6 - 316832$
  - $x(-x - 1391.07)x + 3.56198 \times 10^6 - 316832$
- Alternate form assuming  $x$  is real:**  $-(316832 + 0. i) - x^3 - 1391.07x^2 + 3.56198 \times 10^6 x$
- Roots:**
  - $x = -2706.97$
  - $x = 0.0889514$
  - $x = 1315.81$
- Polynomial discriminant:** (The value is not explicitly shown in the image).

Abbildung A.2: Berechnung der Nullstellen des charakteristischen Polynoms für  $f=0.5$  mithilfe von WolframAlpha

# Literaturverzeichnis

- [1] Kedma Bar-Eli und Richard M. Noyes. „Relevance of a two-variable Oregonator to stable and unstable steady states and limit cycles, to thresholds of excitability, and to Hopf vs SNIPER bifurcations“. In: *The Journal of Chemical Physics* 86.4 (1987), Seiten 1927–1937.
- [2] Richard J. Field. „Das Experiment: Eine oszillierende Reaktion“. In: *Chemie in unserer Zeit* 7.6 (1973), Seiten 171–176.
- [3] Richard J. Field und Mária Burger, Herausgeber. *Oscillations and travelling waves in chemical systems*. New York: John Wiley & Sons, 1985. ISBN: 0-471-89384-6.
- [4] Richard J. Field und Friedemann W. Schneider. „Oszillierende chemische Reaktionen und nichtlineare Dynamik“. Übersetzt von Albrecht Freund. In: *Chemie in unserer Zeit* 22.1 (1988), Seiten 17–29.
- [5] Lars Grüne und Oliver Junge. *Gewöhnliche Differentialgleichungen*. Wiesbaden: Vieweg+Teubner, 2009. ISBN: 978-3-8348-0381-8.
- [6] S. P. Hastings und J. D. Murray. „The existence of oscillatory solutions in the Field-Noyes Model for the Belousov-Zhabotinskii reaction“. In: *SIAM Journal of Applied Mathematics* 28.3 (1975), Seiten 678–688.
- [7] Harro Heuser. *Lehrbuch der Analysis Teil 2*. Wiesbaden: Vieweg+Teubner, 2008. ISBN: 978-3-8351-0208-8.
- [8] Adolf Hurwitz. „Ueber die Bedingungen, unter welchen eine Gleichung nur Wurzeln mit negativen reellen Theilen besitzt“. In: *Mathematische Annalen* 46 (1895), Seiten 273–285. URL: [http://www.digizeitschriften.de/dms/img/?PPN=PPN235181684\\_0046&DMDID=dmdlog26](http://www.digizeitschriften.de/dms/img/?PPN=PPN235181684_0046&DMDID=dmdlog26) (besucht am 18.09.2013).
- [9] J. D. Murray. „On a model for the temporal oscillations in the Belousov-Zhabotinsky reaction“. In: *The Journal of Chemical Physics* 61.9 (1974), Seiten 3610–3613.
- [10] J. D. Murray. *Mathematical Biology: I. An Introduction*. New York, Berlin, Heidelberg: Springer, 2002. ISBN: 0-387-95223-3.
- [11] Viktor A. Pliss. *Nonlocal problems of the theory of oscillations*. New York, London: Academic Press, 1966.
- [12] Steven H. Strogatz. *Nonlinear Dynamics and Chaos*. Cambridge, MA: Westview Press, 2000. ISBN: 0-7382-0453-6.
- [13] William C. Troy. „Mathematical Analysis of the Oregonator Model of the Belousov-Zhabotinskii Reaction“. In: *Oscillations and travelling waves in chemical systems*. Herausgegeben von Richard J. Field und Mária Burger. New York: John Wiley & Sons, 1985. Kapitel 4, Seiten 145–170. ISBN: 0-471-89384-6.

- [14] John J. Tyson. „Analytic representation of oscillations, excitability, and traveling waves in a realistic model of the Belousov-Zhabotinskii reaction“. In: *The Journal of Chemical Physics* 66.3 (1977), Seiten 905–915.
- [15] John J. Tyson. „A Quantitative Account of Oscillations, Bistability, and Traveling Waves in the Belousov-Zhabotinskii Reaction“. In: *Oszillations and travelling waves in chemical systems*. Herausgegeben von Richard J. Field und Mária Burger. New York: John Wiley & Sons, 1985. Kapitel 3, Seiten 93–144. ISBN: 0-471-89384-6.
- [16] *Vorzeichenregel von Descartes*. URL: [http://de.wikipedia.org/wiki/Vorzeichenregel\\_von\\_Descartes](http://de.wikipedia.org/wiki/Vorzeichenregel_von_Descartes) (besucht am 15.09.2013).
- [17] Eberhard Zeidler, Hans Schwarz, Wolfgang Hackbusch, Bernd Luderer, Jochen Blath, Alexander Schied, Stephan Dempe, Gert Wanka, Juraj Hromkovic und Siegfried Gottwald. *Springer-Taschenbuch der Mathematik*. Herausgegeben von Eberhard Zeidler. Wiesbaden: Vieweg+Teubner, 2013. ISBN: 978-3-8351-0123-4.
- [18] A. M. Zhabotinskii. „Introduction: The Early Period of Systematic Studies of Oscillations and Waves in Chemical Systems“. In: *Oszillations and travelling waves in chemical systems*. Herausgegeben von Richard J. Field und Mária Burger. New York: John Wiley & Sons, 1985, Seiten 1–6. ISBN: 0-471-89384-6.

# Erklärung

Hiermit erkläre ich, dass ich diese Arbeit selbstständig und nur unter Verwendung der angegebenen Quellen und Hilfsmittel angefertigt habe.  
Diese Arbeit lag in gleicher oder ähnlicher Form noch keiner anderen Prüfungsbehörde zur Erlangung eines akademischen Grades vor.

Bayreuth, 27. September 2013

(Barbara Doleschal)