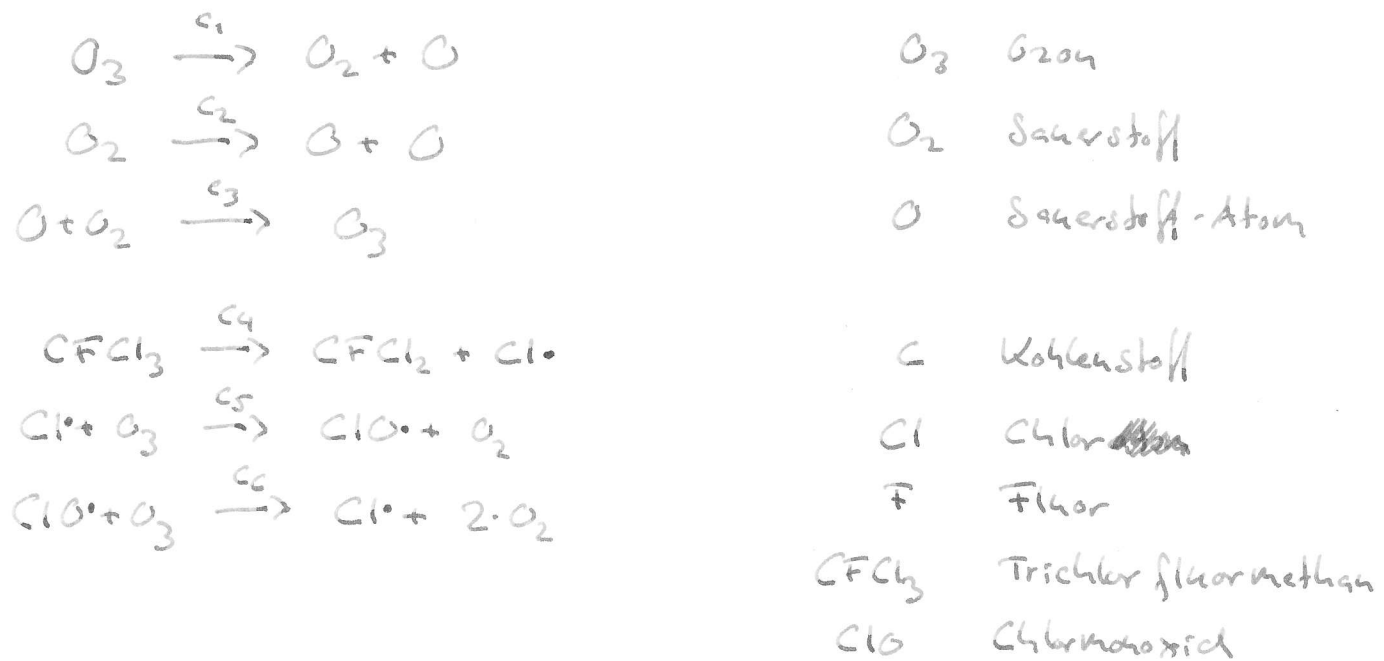


2.4 Chemische Reaktionskinetik

(57)

Beispiel: Entdeckung und Zerfall von Ozon in der Stratosphäre



22.5.12

Sei $y_1(t), y_2(t), y_3(t), y_4(t), y_5(t), y_6(t), y_7(t)$
die Menge an $O, O_2, O_3, Cl, ClO, CFCl_3, CFCl_2$

(58)

Dann kann man wie in 2.1-2.4 ein System von ODEs für das Reaktionsystem herleiten. Für $c_4 = c_5 = c_6 = 0$ lautet es

$$y_1'(t) = c_1 y_3(t) + c_2 \cdot 2 \cdot y_2(t) - c_3 y_1(t) y_2(t)$$

$$y_2'(t) = c_1 y_3(t) - c_2 y_2(t) - c_3 y_1(t) y_2(t)$$

$$y_3'(t) = -c_1 y_3(t) + c_3 y_1(t) y_2(t)$$

Im Fall $c_4, c_5, c_6 > 0$ kommen noch ODEs für $y_4(t), y_5(t)$ und $y_6(t)$ sowie weitere Terme in den ODEs für $y_1(t), y_2(t), y_3(t)$ hinzu.

Übungsaufgabe: Wie sieht das komplette ODE-System aus?

2.5 Allgemeine Reaktionssysteme

Ein Reaktionssystem besteht aus

- verschiedenen Populationen (Arten, Species) S_1, \dots, S_d ($d \in \mathbb{N}$)
- verschiedenen Reaktionskanälen R_1, \dots, R_m ($m \in \mathbb{N}$)

Jeder Reaktionskanal beschreibt ein Ereignis, das die Größe der Populationen verändert. Wie bei chemischen Reaktionen wird jeder Reaktionskanal durch ein Schema der Form



mit Konstanten $a_{jk} \in \mathbb{N}_0$, $b_{jk} \in \mathbb{N}_0$, $c_j \geq 0$ dargestellt.

Dabei ist $a_{j1}, a_{j2}, \dots, a_{jd}$ die Anzahl der S_1, S_2, \dots, S_d , die nötig sind, damit die Reaktion R_j zustande kommen kann, und $b_{j1}, b_{j2}, \dots, b_{jd}$ die Anzahl der S_1, S_2, \dots, S_d , die nach der Reaktion vorhanden sind. Der Vektor

$$v_j = \begin{pmatrix} b_{j1} - a_{j1} \\ b_{j2} - a_{j2} \\ \vdots \\ b_{jd} - a_{jd} \end{pmatrix} \in \mathbb{Z}^d$$

heißt stöchiometrischer Vektor und gibt an, wie sich die Anzahl der S_1, \dots, S_d durch den j -ten Reaktionskanal verändert.

Sei $y_k(t)$ die Größe der Population S_k ($k=1, \dots, d$) und sei

$$y(t) = \begin{pmatrix} y_1(t) \\ \vdots \\ y_d(t) \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^d$$

Weiter definieren wir Funktionen $\alpha_1(y), \dots, \alpha_m(y)$ durch

$$\alpha_j(y) = c_j \cdot \frac{y_1^{a_{j1}}}{a_{j1}!} \cdot \frac{y_2^{a_{j2}}}{a_{j2}!} \cdot \dots \cdot \frac{y_d^{a_{jd}}}{a_{jd}!}$$

Dann wird das Reaktionssystem durch die folgende ODE beschrieben:

$$y'(t) = v_1 \alpha_1(y(t)) + v_2 \alpha_2(y(t)) + \dots + v_m \alpha_m(y(t))$$

Bemerkung:

- $y(t) \in \mathbb{R}^d$ und $y'(t) \in \mathbb{R}^d$ sind zeitabhängige Vektoren.
- $v_1, \dots, v_m \in \mathbb{Z}^d$ sind konstante Vektoren.
- $\alpha_1(y), \dots, \alpha_m(y)$ sind Funktionen, die einem Vektor y eine Zahl zuordnen, d.h.

$$\alpha_j: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$$

- $c_1, \dots, c_m \geq 0$ sind Konstanten.

Bei der Modellierung komplexer Vorgänge ist es oft einfacher, zuerst ein entsprechendes Reaktionssystem aufzustellen und dieses dann nach dem obigen Schema in eine ODE zu übersetzen.

Einheitsweise Termabtrag $v_{jk} = k$ -te Eintrag von v_j

Beispiele:

(a) Logistisches Wachstum, vgl. 2.1

Eine Population ($d=1$), zwei Reaktionskanäle ($m=2$)



Also: $v_1 = (2-1) = 1$

$$\alpha_1(y) = c_1 \cdot \frac{y_1^1}{1!} = c_1 \cdot y_1$$

$v_2 = (1-2) = -1$

$$\alpha_2(y) = c_2 \cdot \frac{y_1^2}{2!} = \frac{c_2}{2} \cdot y_1^2$$

Die stöchiometrischen Vektoren haben hier die Länge $d=1$, sind also Zahlen.
 Das Reaktionssystem wird durch folgende ODE beschrieben:

$$y_1'(t) = v_1 \alpha_1(y(t)) + v_2 \alpha_2(y(t)) = 1 \cdot c_1 y_1(t) - 1 \cdot \frac{c_2}{2} y_1^2(t)$$

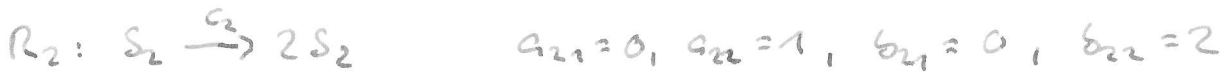
Dies entspricht genau der ODE (4) aus 2.1, $(y(t) = y_1(t))$

$$y_1'(t) = c y_1(t) - d y_1^2(t)$$

wobei man $y_1 \leftrightarrow y, c_1 \leftrightarrow c, \frac{c_2}{2} \leftrightarrow d$ ersetzt.

(b) Räuber-Beute-Modell, vgl. 2.2

Zwei Populationen ($d=2$), sechs Reaktionskanäle ($m=6$)



Also: $v_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$

$$\alpha_1(y) = c_1 y_1$$

$v_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

$$\alpha_2(y) = c_2 y_2$$

$v_3 = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix}$

$$\alpha_3(y) = c_3 \frac{y_1^2}{2}$$

$v_4 = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix}$

$$\alpha_4(y) = c_4 \frac{y_2^2}{2}$$

$v_5 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$

$$\alpha_5(y) = c_5 y_1 y_2$$