$$y'(t) = c_1 y_1(t)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} + c_2 y_2(t)\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} + c_3 \frac{y_1^2}{2}\begin{pmatrix}-1\\0\end{pmatrix} + c_4 \frac{y_2^2}{2}\begin{pmatrix}0\\-1\end{pmatrix} + c_5 y_1 y_2 \begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}$$

Eintragsweise Notation:

$$y_1'(t) = c_1 y_1(t) - c_3 \frac{y_1^2(t)}{2} + c_5 y_1(t) y_2(t)$$

$$y_2'(t) = c_2 y_2(t) - c_4 \frac{y_2^2(t)}{2} - c_5 y_1(t) y_2(t)$$

Dies ist ein Spezialfall der ODE aus 2.2

(ersetze $d_1 \longleftrightarrow \frac{c_3}{2}$, $d_2 \longleftrightarrow \frac{c_4}{2}$, $a = b = c_5$)

25.5.2012

Inflow-Reaktionen haben die Form

$R_j: \quad * \xrightarrow{c_j} S_k \qquad$ wobei $j \in \{1, \dots, m\}$, $k \in \{1, \dots, d\}$

Diese Reaktion beschreibt einen konstanten Zustrom (Inflow) nach S_k.
Es gilt

$$a_{j1} = a_{j2} = \dots = a_{jd} = 0, \quad b_{jk} = 1, \quad b_{ji} = 0 \text{ falls } i \neq k$$

Folgerung:

$$V_j = \begin{pmatrix}0\\ \vdots\\ 0\\ 1\\ 0\\ \vdots\\ 0\end{pmatrix} \leftarrow k\text{-ter Eintrag}, \qquad \alpha_j(y) = c_j \quad \text{(konstant)}$$

Vergleiche mit

$$R_\ell : S_k \xrightarrow{c_\ell} 2 S_k$$

Hier ist $a_{\ell k} = 1$, $b_{\ell k} = 2$, $a_{\ell i} = b_{\ell i} = 0$ falls $i \neq k$

$\Rightarrow$ $V_\ell = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \leftarrow$ k-ter Eintrag, aber $\alpha_\ell(y) = c_\ell y_k$ (nicht konstant)

Beobachtung: Für j, ℓ kann gelten

$V_j \neq V_\ell$ und $\alpha_j(y) \neq \alpha_\ell(y)$

$V_j = V_\ell$ aber $\alpha_j(y) \neq \alpha_\ell(y)$

$V_j \neq V_\ell$ aber $\alpha_j(y) = \alpha_\ell(y)$

Falls $V_j = V_\ell$ und $\alpha_j(y) = \alpha_\ell(y)$, so gilt $c_j = c_\ell$ und

$b_{jk} - a_{jk} = b_{\ell k} - a_{\ell k}$ und $a_{jk} = a_{\ell k}$ für alle $k \in \{1, \dots, d\}$

Also gilt auch $b_{jk} = b_{\ell k}$ für alle $k \in \{1, \dots, d\}$, d.h. die Reaktionskanäle R_j und R_ℓ sind dann identisch $\longrightarrow$ Redundanz.

Katalytische Reaktionen:

Vergleiche die beiden Reaktionskanäle

$R_1 : 2 S_1 \xrightarrow{c_1} S_2$ $\qquad \alpha_1(y) = c_1 \frac{y_1^2}{2}$, $V_1 = \begin{pmatrix} -2 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$

$R_2 : 2 S_1 + S_3 \longrightarrow S_2 + S_3$ $\qquad \alpha_2(y) = c_2 \frac{y_1^2}{2} y_3$, $V_2 = \begin{pmatrix} -2 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$

In beiden Fällen werden zwei S_1 in ein S_2 „umgewandelt."
Die stöchiometrischen Vektoren $V_1 = V_2 = \begin{pmatrix} -2 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ sind identisch.

Aber: Bei R_2 wird die Reaktion durch S_3 katalysiert, d.h. je größer y_3, umso „öfter" wird diese Reaktion ausgeführt.
Die Menge des Katalysators wird durch R_2 jedoch nicht verändert, denn der dritte Eintrag von V_2 ist Null.

Fazit: R_1 und R_2 beschreiben unterschiedliche Prozesse!

Man darf S_3 nicht auf beiden Seiten des Reaktionsschemas abziehen.

(Das ist ein Unterschied zu Gleichungen! Z.B. sind

$$2x_1 + x_3 = x_2 + x_3 \quad \text{und} \quad 2x_1 = x_2$$

äquivalente Gleichungen.)

2.6 Hinweise für die Modellierung eines Problems

Bei der Modellierung eines biologischen Systems muss man die folgenden Fragen beantworten:

1. Kann das System als allgemeines Reaktionssystem interpretiert werden? Dies ist z.B. nicht möglich, wenn
   - manche Reaktionen so klein sind, dass die Kontinuitätshypothese keinen Sinn macht.
   - die Entwicklung des Systems stark von zufälligen Ereignissen beeinflusst wird.
   - räumliche Informationen wichtig sind (d.h. wenn es eine Rolle spielt, wo sich einzelne Menschen bzw. Tiere bzw. Moleküle usw. aufhalten.

2. Wieviele Populationen gibt es? Müssen Geschlechter, Altersgruppen usw. unterschieden werden?

3. Welche Reaktionskanäle gibt es? Auf welche Arten interagieren die Populationen?
Für jeden Reaktionskanal muss man die Koeffizienten

$a_{j1}, \ldots, a_{jd}$ und $b_{j1}, \ldots, b_{jd}$ bestimmen.

„Was braucht man, damit die Reaktion stattfinden kann?"
„Was erhält man, wenn die Reaktion einmal stattgefunden hat?"

4. Aufstellen der ODE

5. Bestimmung der Parameter $c_1, \ldots, c_m$ (aus der Literatur,

aus Experimenten, aus Messdaten, aus Schätzungen, ...)

6. Numerische Lösung der ODE ($\rightarrow$ später)