Schüler-SimuLab Kurs 2

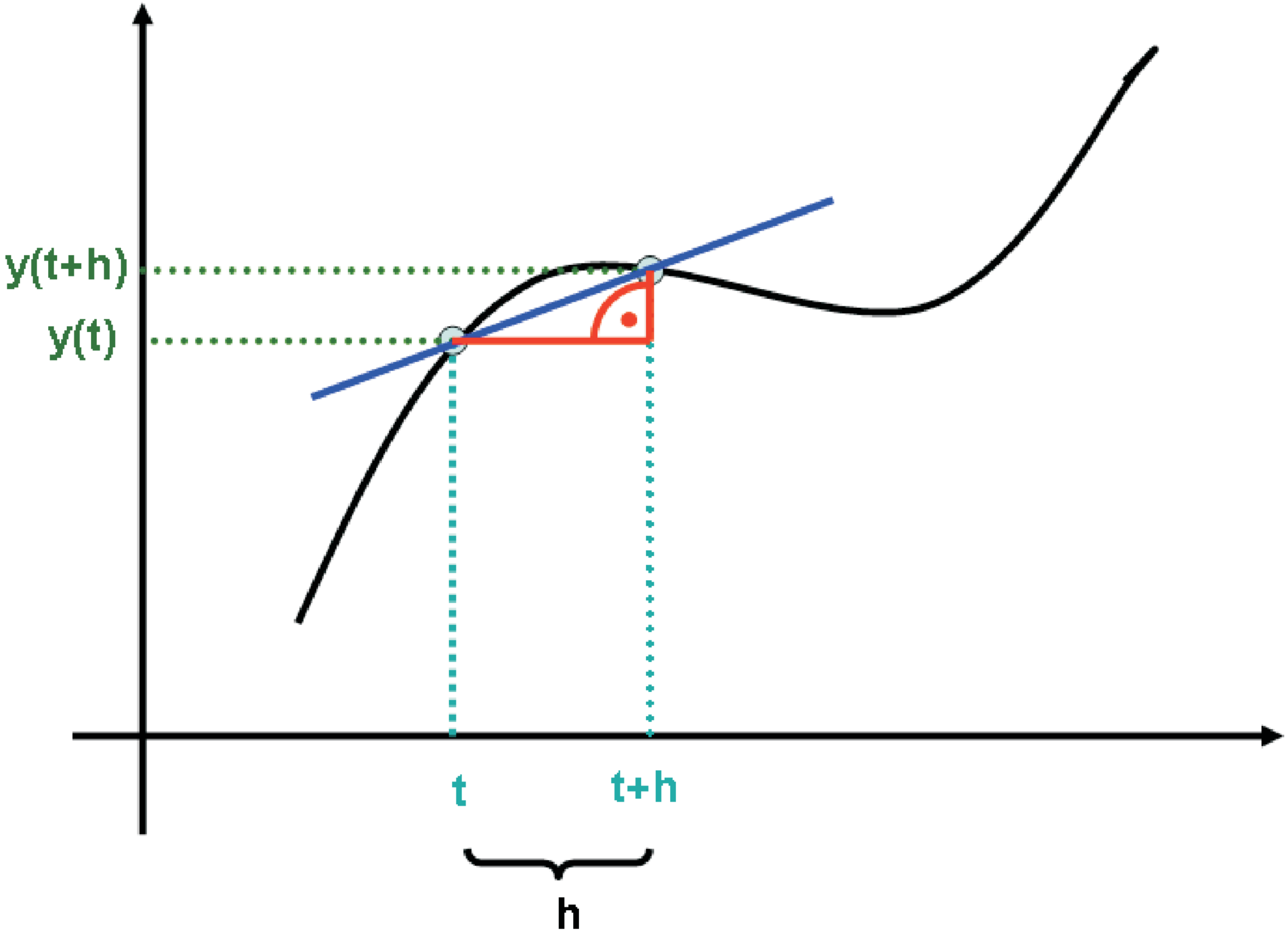
Kursreihe Simulationen in der Biologie

Dynamische Systeme in der Biologie

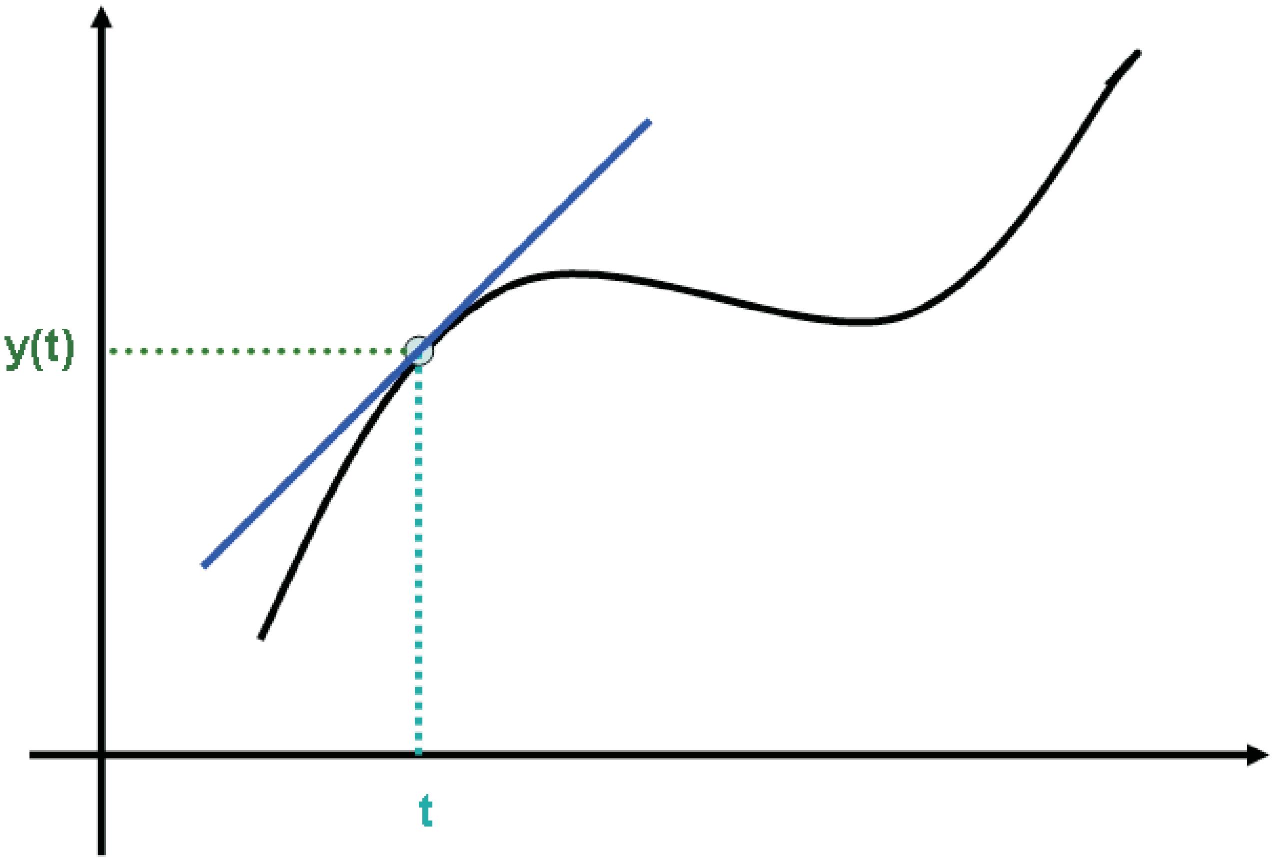
Stefan Hartmann

Forschungszentrum caesar

Differenzenquotienten



Ableitung



Umgekehrt:

Differenzenquotienten sind „für kleine h“ gute Näherungen für Ableitungen:

$$\dot{y}(t) \approx \frac{y(t+h) - y(t)}{h} \qquad \text{für kleine } h$$

Differentialgleichung

$$\dot{\boldsymbol{y}}(\boldsymbol{t}) = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{t}, \boldsymbol{y}(\boldsymbol{t}))$$

Gesucht:

Lösung mit vorgegebenem Startwert $y(0) = y_0$

Einfache Beispiele

(1) $\begin{array}{l} \dot{y}(t) = 0 \\ y(0) = 1 \end{array}$, Lösung:

(2) $\begin{array}{l} \dot{y}(t) = y(t) \\ y(0) = 1 \end{array}$, Lösung:

Weitere Beispiele

(1) Eine Population P wächst umso schneller, je größer sie ist. Jedes Individuum wächst mit der Reproduktionsrate r:

$$\dot{P}(t) = r \cdot P(t).$$

Gruppenaufgabe:

Wie lautet die Lösung dieser Differentialgleichung mit Anfangswert $P(0) = 1000$?

Zum gerade betrachteten Beispiel:

$$\dot{\boldsymbol{P}}(\boldsymbol{t}) = \boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{P}(\boldsymbol{t})$$

Lösung (mit Anfangswert $P(0) = 1000$):

$P(t) = 1000 \cdot e^{rt}$ **exponentielles Wachstum**

$$\Rightarrow \quad \lim_{t \to +\infty} P(t) = +\infty$$

Konsequenzen:

- Verschlechterung der Lebensbedingungen für die einzelnen Individuen (Konkurrenz um Raum und Nahrung,...)
- exponentielles Wachstum nur für begrenzte Zeit möglich!

(2) Radioaktives Uran zerfällt proportional zur Menge des vorhandenen Urans:

$$\dot{U}(t) = -\lambda \cdot U(t) \ .$$

<u>Lösung (bei Anfangswert $U(0) = U_0$):</u>

$$U(t) = U_0 \cdot e^{-\lambda t}$$

Bemerkungen zu Differentialgleichungen:

(1) Unter bestimmten Voraussetzungen existiert eine solche Lösung und diese ist unter weiteren Voraussetzungen zudem eindeutig bestimmt.

(2) Für viele Differentialgleichungen gibt es explizite Lösungen und Verfahren, um an diese Lösungen zu kommen. **Aber halt nicht immer!** In vielen Fällen sind **Näherungslösungen** unumgänglich!

Zu den Näherungslösungen:

Ausgangspunkt:

$$\boldsymbol{\dot{y}(t) = f(t, y(t))}$$

Ersetze die Ableitung durch den Differenzenquotienten:

$$\dot{y}(t) \approx \frac{y(t+h) - y(t)}{h}$$

Umstellen nach $y(t+h)$:

$$y(t+h) \approx y(t) + h \cdot \dot{y}(t)$$

$$\Rightarrow \quad \boldsymbol{y(t+h) \approx y(t) + h \cdot f(t, y(t))}$$

Mit solchen Näherungen sind Simulationen in die Zukunft mit Schrittweite h möglich!

Ausgangspunkt: Differentialgleichung

$$\dot{y}(t) = f(t, y(t))$$

mit Anfangswert $y(0) = y_0$

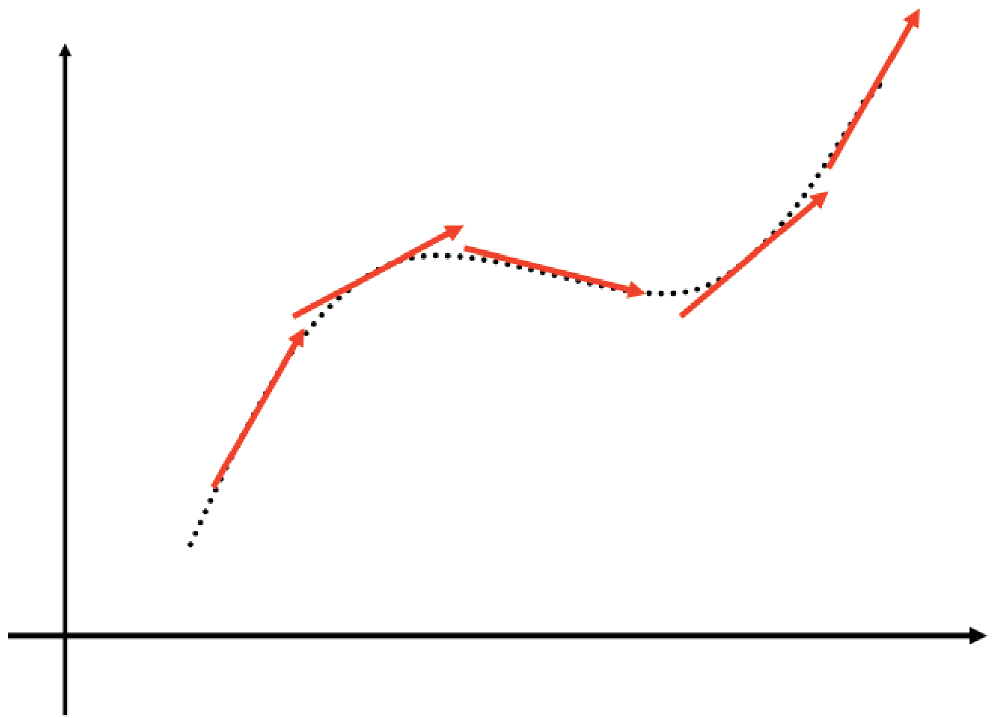
Verfahren: Euler-Schema

Setze für $i = 0, 1, 2, \ldots$

$$y_{i+1} = y_i + h \cdot f(t_i, y_i) \quad , \quad \text{wobei } t_i = i \cdot h \ .$$

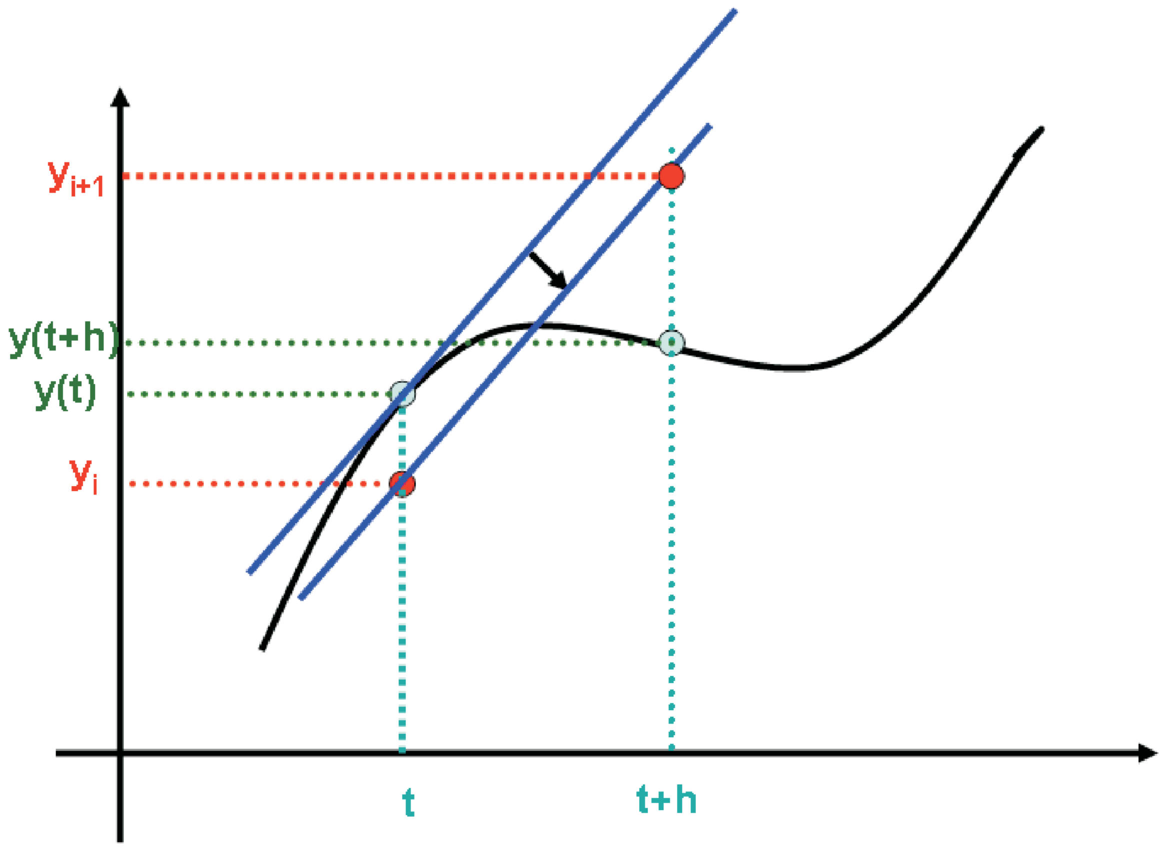
Die Approximation ist umso besser, je kleiner h ist!

Graphische Erläuterung



Bekannt sind nur die Ableitungen („die Pfeile“), also die Steigungen der Tangenten an die Lösungskurve!

Graphische Erläuterung des Euler-Schemas („Forthangeln“)



Logistisches Wachstum einer Population

Zur Erinnerung:

$$\dot{P}(t) = r \cdot P(t) \qquad \text{exponentielles} \text{Wachstum}$$

Unrealistisch über längere Zeiträume!

Nun zusätzlich: gegenseitige Behinderung beim zufälligen Zusammentreffen zweier Individuen (Streit um die gleiche Nahrung,...)

logistisches Wachstum

$$\dot{P}(t) = r \cdot P(t) - b \cdot P^2(t)$$

r: Reproduktionsrate

b: Eigenbehinderungsrate

Ausgangspunkt: logistisches Wachstum

$$\dot{P}(t) = r \cdot P(t) - b \cdot P^2(t)$$

Annäherung mit Differenzenquotienten:

$$\frac{P(t+h) - P(t)}{h} \approx r \cdot P(t) - b \cdot P^2(t)$$

Euler-Schema zum logistischen Wachstum:

$$P_0 = \text{Startwert}$$

$$P_{i+1} = P_i + h \cdot r \cdot P_i - h \cdot b \cdot P_i^2$$

$\Rightarrow$ Simulationen für zukünftige Populationsentwicklungen möglich!

logistisches Wachstum:

$$\dot{\boldsymbol{P}}(\boldsymbol{t}) = \boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{P}(\boldsymbol{t}) - \boldsymbol{b} \cdot \boldsymbol{P}^{2}(\boldsymbol{t})$$

Bemerkung: explizite Lösung:

$$P(t) = \frac{\frac{r}{b}}{1 + \left(\frac{r}{b \cdot P_0 - 1}\right) \cdot e^{-rt}} \; .$$

Aber: Allgemein sind Differentialgleichungen meistens nicht so explizit lösbar!

Daher sind Näherungslösungen in der Regel unvermeidlich und sollen daher an so einfachen Beispielen (wo man sie eigentlich nicht bräuchte) eingeübt werden.

Aufgabe 1:

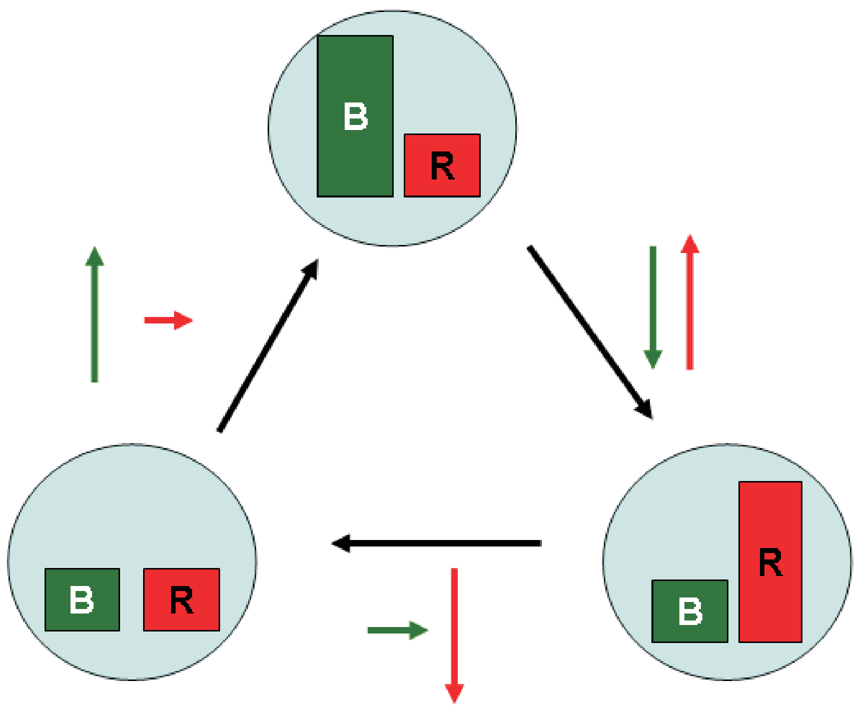
Die Anfangspopulation sei $P_0 = P(0) = 250$. Berechne mit einem Excel-Programm, bei dem der User die Parameter r und b frei wählen kann, den Wert $P(0{,}03)$ (für beliebig von dir gewählte Parameter r und b) mit verschiedenen Schrittweiten h und plotte die Funktionen $t \mapsto P(t)$ für verschiedene Schrittweiten h, aber feste Grenzen (0 und 0,03) auf der x-Achse.

Was stellst du fest?

Das Räuber-Beute-Modell

Wir haben eine Räuberpopulation und eine Beutepopulation, die sich gegenseitig beeinflussen.

Zyklus:



Mathematische Modellierung:

Beutepopulation

$$\dot{B}(t) = \underbrace{r \cdot B(t) - b \cdot B^2(t)}_{logistisches\ Wachstumsmodell} - f \cdot R(t) \cdot B(t)$$

r : Reproduktionsrate
b : Eigenbehinderungsrate
f : Fangerfolgsrate

Räuberpopulation

$$\dot{R}(t) = -m \cdot R(t) + e \cdot f \cdot B(t) \cdot R(t)$$

m : Mortalitätsrate
e : Nahrungseffizienz

<u>Räuber-Beute-Modell:</u>

$$\begin{aligned} \dot{B}(t) &= rB(t) - bB^2(t) - fR(t)B(t) \\ \dot{R}(t) &= -mR(t) + efR(t)B(t) \end{aligned}$$

Dies ist ein stark vereinfachtes (!) Modell eines solchen Räuber-Beute-Populationssystems.

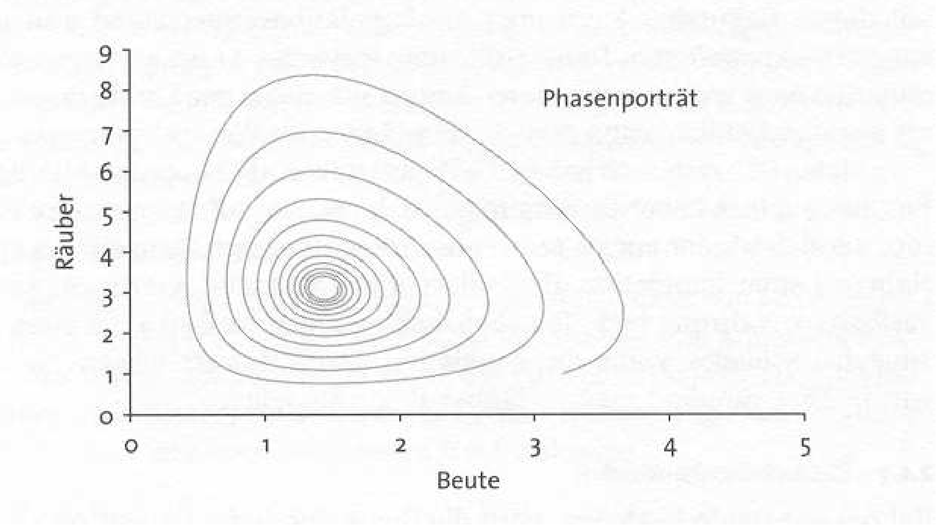
$\Rightarrow$ keine quantitativen Aussagen möglich

Aber: Grundsätzliche Phänomene werden auch in diesem einfachen Modell gut abgebildet!

Räuber-Beute-Modell:

$$\begin{aligned}\dot{B}(t) &= rB(t) - bB^2(t) - fR(t)B(t)\\ \dot{R}(t) &= -mR(t) + efR(t)B(t)\end{aligned}$$

Phasenporträt



Räuber-Beute-Modell:

$$\begin{aligned}\dot{B}(t) &= rB(t) - bB^2(t) - fR(t)B(t) \\ \dot{R}(t) &= -mR(t) + efR(t)B(t)\end{aligned}$$

Zu den **stationären Punkten**, also den Punkten $(B(t), R(t))$, für die

$$(\dot{B}(t), \dot{R}(t)) = (0, 0)$$

gilt (diese sind häufig Punkte, in die sich das System mit der Zeit einpendelt):

Ansatz:

$$\begin{aligned}0 &\overset{!}{=} rB(t) - fR(t)B(t) = B(t) \cdot (r - fR(t)) \\ 0 &\overset{!}{=} -mR(t) + efR(t)B(t) = R(t) \cdot (efB(t) - m)\end{aligned}$$

Gruppenaufgabe:

Löse dieses nichtlineare Gleichungssystem!

TIPP: Es gibt zwei Lösungen.

Man erhält das folgende **Euler-Schema**:

$$
\begin{aligned}
B_0 &= \text{Anfangspopulation der Beute} \\
P_0 &= \text{Anfangspopulation der Räuber} \\
B_{i+1} &= B_i + hrB_i - hfR_iB_i - hbB_i^2 \\
R_{i+1} &= R_i - hmR_i - hefR_iB_i
\end{aligned}
$$

<u>Aufgabe 2:</u>

Vervollständige zunächst das Excel-Program. Versuche dann herauszufinden, welche Räuber-Beute-Population sich nach langer Zeit einpendelt und untersuche dabei den Einfluss der verschiedenen Parameter.

Logistisches Thunfischmodell mit Fang

Mathematische Modellierung:

$$\dot{T}(t) = \underbrace{r \cdot T(t) - b \cdot T^2(t)}_{logistisches\ Wachstumsmodell} - Q(t)$$

r	:	Reproduktionsrate
b	:	Eigenbehinderungsrate
$Q(t)$	:	Fangquote zum Zeitpunkt t

Logistisches Thunfischmodell mit Fang:

$$\dot{T}(t) \;=\; rT(t) - bT^2(t) - Q(t)$$

Gruppenaufgabe:

Nehmen wir an, die Fangquote $Q(t)$ ist konstant, also $Q(t) = Q$. Fasse nun die Populationskurve als Funktion von T auf (d.h. vergiss für einen Moment die zeitliche Abhängigkeit):

$$f(T) = r \cdot T - b \cdot T^2 - Q \ .$$

Bei welcher Populationsgröße T_{max} ist die Zuwachsrate an Thunfischen am größten? Wie hoch kann dann die Fangquote Q_{max} gewählt werden, ohne dass die Thunfischpopulation sinkt?

Ökologische und ökonomische Konsequenzen verschiedener Strategien

$Q > Q_{\text{max}}$	: Population stirbt aus
$Q < Q_{\text{max}},\ T \geq T_{\text{max}}$	: Population pendelt sich stabil auf einen Wert $T \geq T_{\text{max}}$ ein
$T = T_{\text{max}},\ Q = Q_{\text{max}}$	: kurzfristig optimal, aber **instabil**, hohe Kosten
$T \overset{>}{\text{(geringfügig)}} T_{\text{max}}$	: Q wird nur geringfügig kleiner als Q_{max}, die Kosten werden **deutlich** gesenkt
$T = \underbrace{2T_{\text{max}}}_{\text{Maximalkapazität}}$	: Minimierung der Fangkosten! **Aber:**

Kein Fang mehr möglich, ohne den Bestand zu minimieren, denn dann ist
$\dot{T}(t) = rT(t) - bT^2(t) - Q = r \cdot \frac{r}{b} - b \cdot \frac{r^2}{b^2} - q = -Q$

Genauere wirtschaftliche Analyse

Fangkosten $\boldsymbol{K}$: $\dot{K}(t) = c \cdot \frac{Q(t)}{T(t)}$ mit $Q(t) = r \cdot T(t) - b \cdot T^2(t)$ $\quad (\Rightarrow \dot{T}(t) = 0)$

Gewinn G bei konstantem Fischpreis P

$$\begin{aligned}
\underbrace{\dot{G}(t)}_{\text{Gewinnrate}} &= \underbrace{P \cdot Q(t)}_{\text{Einnahmerate}} - \underbrace{\dot{K}(t)}_{\text{Kostenrate}} \\
&= P \cdot (rT(t) - bT^2(t)) - c(r - bT(t)) \\
&= -cr + (cb + rP)T(t) - PbT^2(t)
\end{aligned}$$

Fasse dies wieder als Funktion von T auf:

$$f(T) = -cr + (cb + rP)T - PbT^2$$

f ist maximal für $T_{\text{opt}} = \frac{cb+rP}{2Pb} = T_{\max} + \frac{c}{2P} > T_{\max}$.

Erste Konsequenzen (im Interesse der Fischfangindustrie!)

Lege eine maximale Fangquote fest, die zu einer Populationserholung führt!

$\Rightarrow$ relativ geringe Kosten, relativ hoher Ertrag

Ohne Regulierung kommt es zum Bankrott!

Achte darauf, dass man stets ungefähr die optimale Population T_{opt} beibehält, wobei:

$$\underbrace{T_{\text{max}}}_{\text{maximaler Anstieg der Population}} \quad < \quad T_{\text{opt}} \quad < \quad \underbrace{2 \cdot T_{\text{max}}}_{\text{maximale Kapazität}}$$

Parameteranpassung

Fragestellung: Welche Parameter passen am besten zu den real gemessenen Fangdaten?

Gelbflossenthunfisch	
Ertrag in Tonnen	Aufwand in SDs
53200	12800
74400	15500
82100	21400
61200	19900
58900	18600
78900	18600
84900	31900
96300	30400
109500	41600
114400	40200
114200	42700
118500	54900
115100	60200
100100	57700

Wie überprüfen wir die

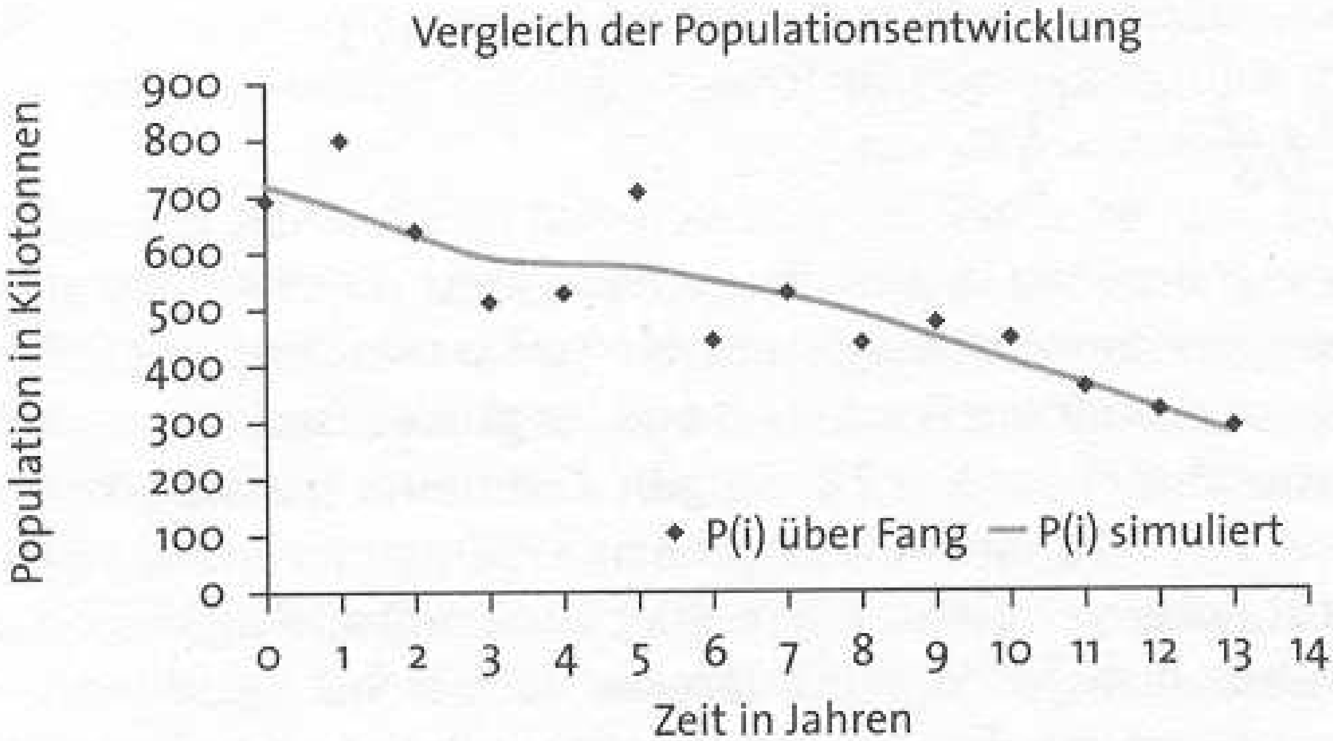
Güte

unserer Parameter?

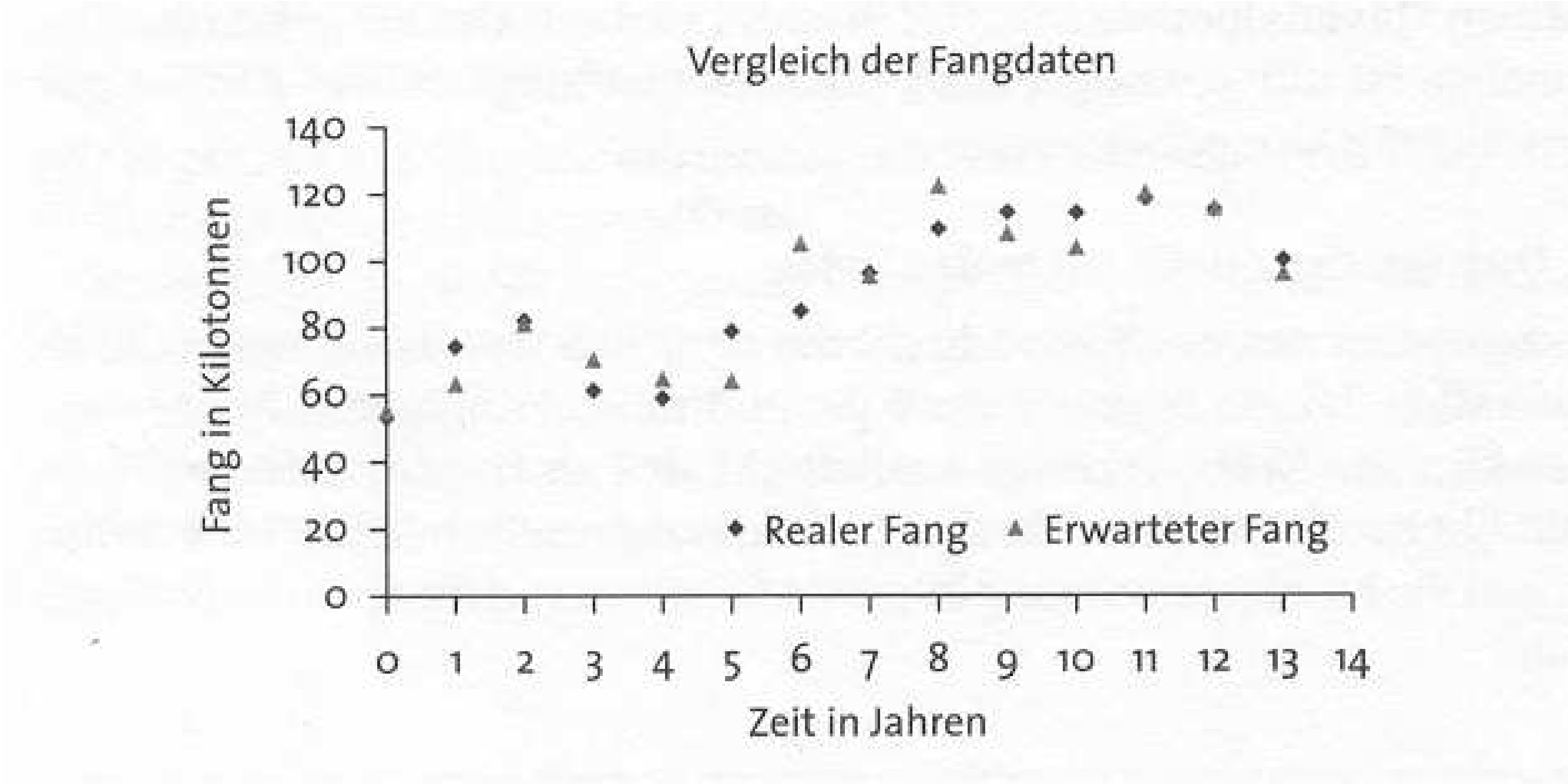
Wir führen eine

Simulation

mit den Parametern durch und überprüfen die simulierten Ergebnisse mit den realen.



Vergleich der realen (auf Grund des Fanges vermuteten) Populationsentwicklung mit der simulierten Populationsentwicklung



Vergleich der realen Fangdaten mit den simulierten Fangdaten

Aufgabe 3:

Führe eine Parameteranpassung durch, d.h. finde geeignete Werte für die Parameter r, b und a, so dass die simulierten Populationsdaten ($P(sim)$) möglichst wenig und nicht systematisch von den realen Daten (P) abweichen.

Aufgabe 4:

(a) Finde die passende feste Fangquote (nach 14 Zeitschritten), so dass der langfristige Gewinn maximiert wird.

(b) Finde den passenden festen Aufwand (nach 14 Zeitschritten), so dass der langfristige Gewinn maximiert wird.

Was fällt dir auf?

Bemerkungen und Folgerungen

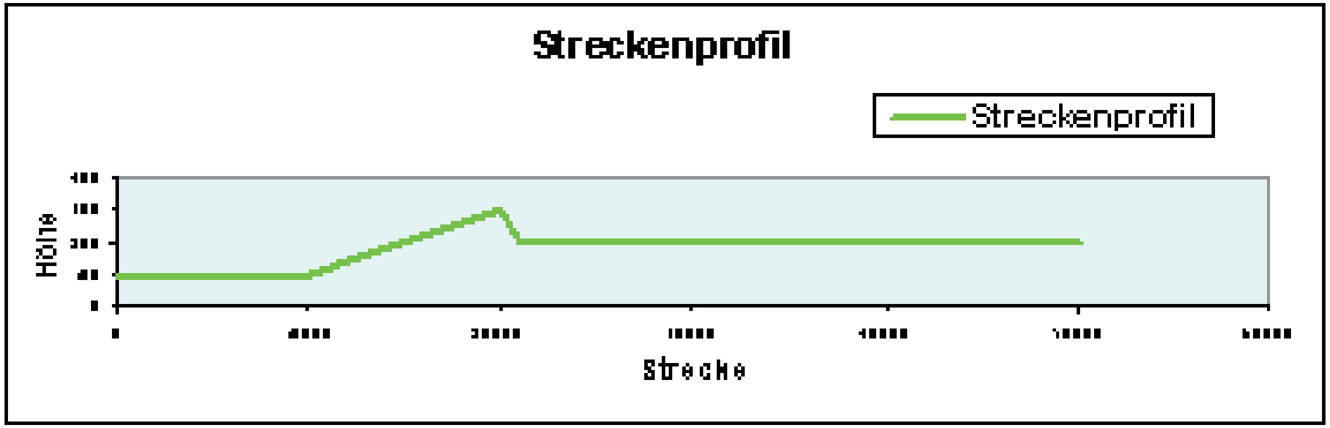
(1) Es handelt sich um ein sehr einfaches Modell, viele Parameter werden vernachlässigt (Wetter, Änderung der Lebensbedingungen, ökologische Rivalen, Beute des Thunfisches...); dennoch sind die Aussagen qualitativ (bei leichter Änderung der Parameter) stabil.

(2) Eine Empfehlung an die Fischereiindustrie sollte nun lauten:

Reduziere die Fischfangquote deutlich (um die Hälfte)!

Strategien beim Einzelzeitfahren

Auf der folgenden (stark vereinfachten) Strecke soll ein Einzelzeitfahren im Radrennen stattfinden:



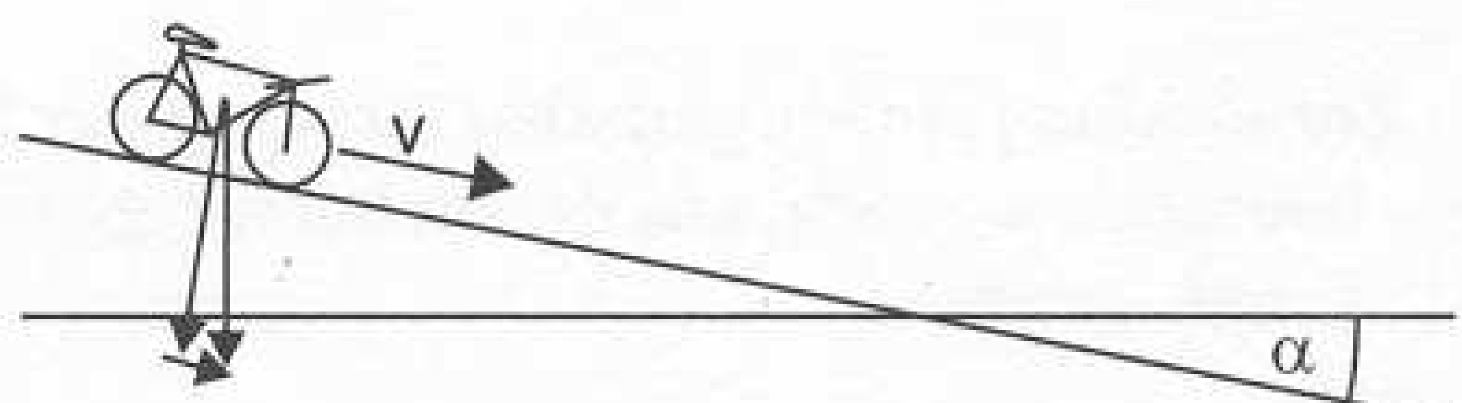
Gruppenaufgabe:

Was meint ihr: Welche Strategien führt am ehesten zum Erfolg? Sollte man eher am Berganstieg beschleunigen oder bei der Abfahrt? Sollte man am Schluss noch einmal „Gas geben“?

Bemerkungen zur Modellierung

- stark vereinfachtes Modell
- allgemeines, variables Modell, d.h. keine spezifische Anpassung an einen konkreten Fahrer
- **Zustandsgrößen**, die unser Modell beinhaltet, sind
  - **Fahrdynamik**: Ort und Geschwindigkeit des Fahrers
  - **Energiehaushalt**: verschiedene Kraftreserven
  - **Streckenprofil**

Zur Fahrdynamik (physikalische Überlegungen)



$$
\begin{aligned}
F_{\text{Neigung}}(t) &= -mg\,\sin(\alpha(x(t)) - \mu mg\,\cos(\alpha(x(t))) - \frac{1}{2}\rho c_w A v^2(t) \\
F_{\text{Antrieb}}(t) &= \frac{P(t)}{v(t)}
\end{aligned}
$$

Hierbei sind:

μ	:	Rollwiderstandsbeiwert
$c_w A$	:	Luftwiderstandsbeiwert Radfahrer
g	:	Erdbeschleunigung
m	:	Masse des Fahrers mit Rad
ρ	:	Luftdichte bei Normaltemperatur
$P(t)$	:	Leistung des Fahrers (bei konstanter Trittfrequenz)
$v(t)$	:	Geschwindigkeit

Wegen

„Kraft = Masse * Beschleunigung“

gilt:

$$\dot{v}(t) = \frac{F_{\text{Neigung}}(t) + F_{\text{Antrieb}}(t)}{m} \ .$$

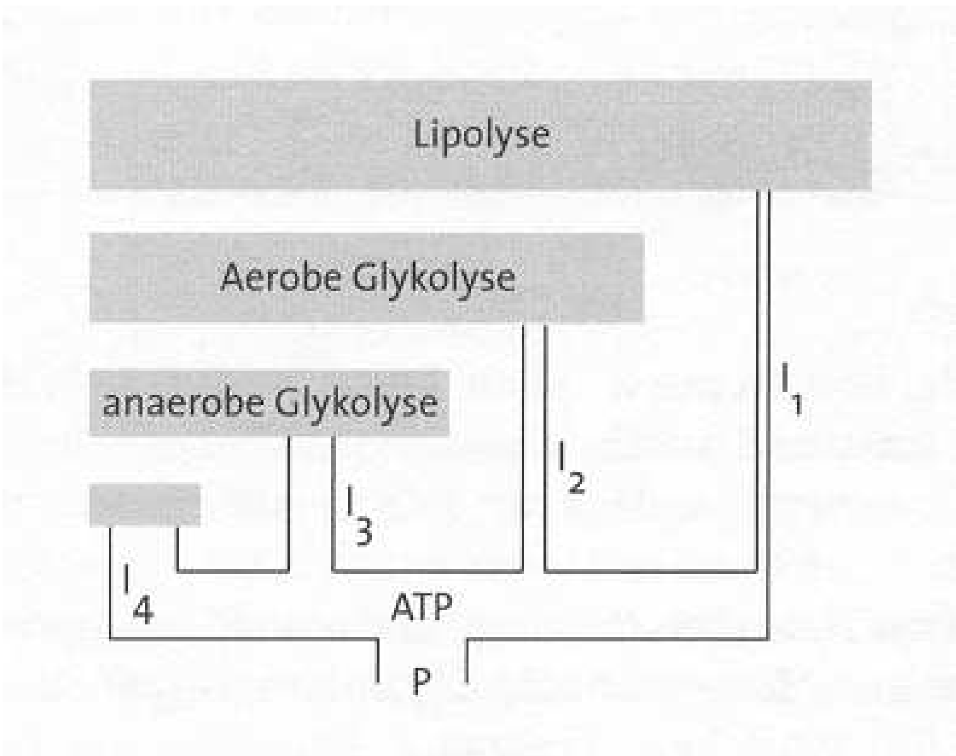
Für die Änderung des zurückgelegten Weges in x-Richtung gilt:

$$\dot{x}(t) = v(t) \cdot \cos(\alpha(x(t)))$$

Typische fahrdynamische Parameter	
Rollwiderstandsbeiwert	$\mu = 0{,}003$
Luftwiderstandsbeiwert Radfahrer	$c_w A = 0{,}39\ \mathrm{m}^2$
Erdbeschleunigung	$g = 9{,}81\ \mathrm{ms}^{-2}$
Masse des Fahrers mit Rad	$m = 80\ \mathrm{kg}$
Luftdichte bei Normaltemperatur	$\rho = 1{,}2\ \mathrm{kgm}^{-3}$

Zum Energiehaushalt (biologische Überlegungen)

Eigentlich: Vier Energieressourcen



Zu den vier Energieressourcen:

- sehr kurzfristige Energieressourcen, z.B. Kreatinphosphat (l_4):
  extrem schnell verfügbar, aber reichen nur extrem kurz (für Notfälle)

- anaerobe Glykolyse (l_3):
  liefert kurzfristig viel Energie

- aerobe Glykolyse (l_2):
  liefert kurzfristig etwas weniger Energie, aber reicht für längere Zeit

- Lipolyse (l_1):
  nahezu unerschöpflicher Energievorrat, liefert aber kurzfristig nur wenig Energie

E_1	$>$	E_2	$>$	E_3	$>$	E_4		mögliche Energiereserven
Lipolyse		aerobe Glykolyse		anaerobe Glykolyse		sehr kurzfristige Energiereserve		
L_1	$<$	L_2	$<$	L_3	$<$	L_4		maximal verfügbare Leistung

$l_i(t) = \dot{e}_i(t)$: tatsächlich entnomme Leistung des i-ten Speichers zum Zeitpunkt t

$e_i(t)$: tatsächliche Energiereserve des i-ten Speichers zum Zeitpunkt t

Bei gewünschter Leistung $P(t)$ werden, sobald ein Energiespeicher nicht gefüllt ist (also $E_j - e_j > 0$ gilt) alle Energiespeicher mit kleinerem Index maximal entleert, um ihn wieder aufzufüllen.

Dann gilt:

$$P = l_1 + l_2 + l_3 + l_4$$

$\Rightarrow$ **Modell zu kompliziert!**

Vereinfachung

E_1	$>$	E_2	mögliche Energiereserven
aerobe Glykolyse		anaerobe Glykolyse	
L_1	$<$	L_2	maximal verfügbare Leistung

$$l_1 = \begin{cases} L_1 & , \quad \text{falls } E_2 - e_2 > 0 \\ \min(L_1, P) & , \quad \text{sonst} \end{cases}$$

$$l_2 = \min(L_2, P - L_1)$$

Für einen guten Sportfahrer kann man etwa folgende Werte annehmen:

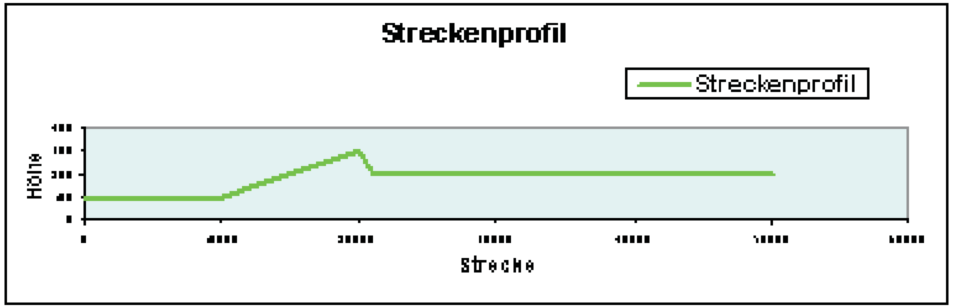
Fahrspezifische Parameter		
Tank	**maximale Leistung**	**maximales Volumen**
1	200 W	unbegrenzt
2	300 W	540000 J

- Tank 1: aerobe Glykolyse):
  liefert kurzfristig etwas weniger Energie, aber reicht (hier im Modell vereinfacht) für unbegrenzte Zeit

- Tank 2: anaerobe Glykolyse:
  liefert kurzfristig etwas mehr Energie, aber der Vorrat ist begrenzt

Zum Streckenprofil

Wir wählen ein einfaches Streckenmodell, um grundsätzliche Phänomene zu untersuchen:



Mögliches Streckenprofil					
Entfernung vom Start in m	0	10 000	20 000	21 000	50 000
Höhe in m	100	100	300	200	200

Zur Simulation

$\boldsymbol{P(t)}$: die **vorgegebene Leistung** des Fahrers zum Zeitpunkt $\boldsymbol{t}$

Approximationen

$$
\begin{aligned}
e_2(t+h) &\approx e_2(t) + h \cdot \underbrace{(P(t) - L_1)}_{\substack{\text{eigentlich ja:} \\ \min(P(t)-L_1, L_2)}} \\
F_{\text{Antrieb}}(t) &= \frac{P(t)}{v(t)} \\
F_{\text{Neigung}}(t) &= -mg \sin(\alpha(x(t))) - \mu mg \cos(\alpha(x(t))) - \frac{1}{2}\rho c_w A v(t)^2 \\
v(t+h) &\approx v(t) + h \cdot \frac{F_{\text{Antrieb}}(t) + F_{\text{Neigung}}(t)}{m} \\
x(t+h) &\approx x(t) + h \cdot v(t) \cdot \cos(\alpha(x(t)))
\end{aligned}
$$

$\alpha(x(t))$ wird in Abhängigkeit von $x(t)$ aus dem Streckenprofil ermittelt.

Aufgabe 5:

Finde die optimale Leistungsstrategie. Wo sollte man die Zwischensprints ansetzen, d.h. die Leistung erhöhen?

Lohnt sich ein Spurt am Ende des Zeitfahrens überhaupt?

Folgerungen

(1) Anpassung der Leistung an die vorgegebenen Teilstrecken bringt eine enorme Zeitersparnis im Gegensatz zum Fahren mit konstanter Leistung auf der gesamten Strecke!

Also: Das Fahren mit konstanter Leistung ist ineffektiv!

(2) Das optimale Leistungsprofil führt zu einem Fahren in nahezu konstanter Geschwindigkeit, mit einem kurzen Peek bei der Abfahrt.

(3) Die Energie muss bereits weit vor dem Ziel investiert werden; ein Schlussspurt bringt nichts.

Regel

Versuche eine konstante Geschwindigkeit zu halten (also eine höhere Leistung am Berg einzusetzen) und nehme dabei kurze Peeks bei der Abfahrt in Kauf. Ein starkes Absenken der Geschwindigkeit am Berg ist zu vermeiden!

Furfuralsynthese:

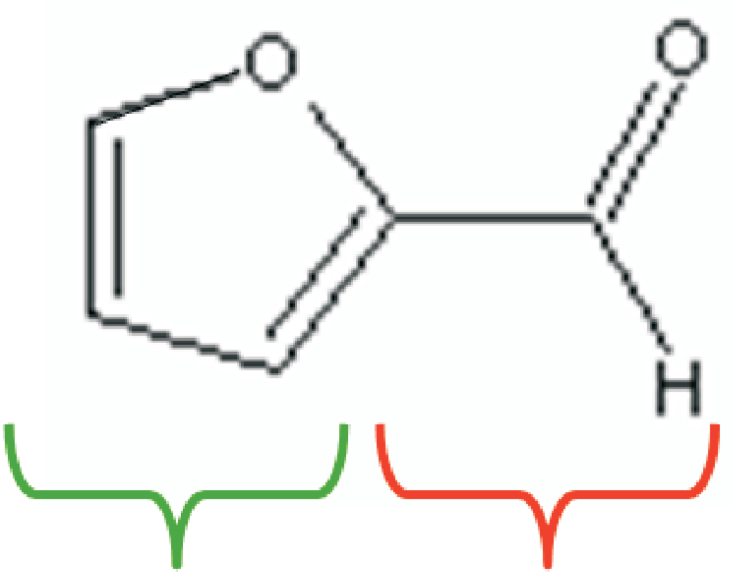
Aufklärung des Reaktionsmechanismus durch Simulation

Furfural

- auch: Furyl-2-aldehyd, Furancarbonat,...
- farbloses, flüchtiges, bei Licht- und Lufteinwirkung rötlich bis dunkelbraunes, giftiges Öl
- riecht auffällig nach Bittermandel
- ist in Wasser kaum, in Ölen und Fetten jedoch leicht löslich
- dient zur Reinigung tierischer und pflanzlicher Öle, zur Konzentrierung von Vitamin A aus Fischleberölen, zur Herstellung von Kustharzen und als Ausgangsstoff für Chemiefaserstoffe

[Quelle: wikipedia.de]

Furfural



Gewinnung aus Xylose (Holzzucker) nach der Bruttoreaktion

$$\text{Xylose} \xrightarrow{150°C,\ HCl} \text{Furfural} + 3H_20$$

Frage nach dem Reaktionsmechanismus

Welche Zwischenreaktionen finden statt?

Mögliche Alternativen:

- Reaktion 1: Xylose $\xrightarrow{k_1}$ Furfural + 3 H_2O
- Reaktion 2: Furfural $\xrightarrow{k_2}$ Harz
- Reaktion 3: Xylose $\xrightarrow{k_3}$ Zwischenprodukt
- Reaktion 4: Zwischenprodukt $\xrightarrow{k_4}$ Xylose
- Reaktion 5: Zwischenprodukt $\xrightarrow{k_5}$ Furfural
- Reaktion 6: Zwischenprodukt + Furfural $\xrightarrow{k_6}$ Kondensat
- Reaktion 7: Xylose + Furfural $\xrightarrow{k_7}$ Kondensat

Massenwirkungsgesetz

Die Reaktionsgeschwindigkeiten sind proportional zum Produkt der Konzentrationen der Edukte.

Wir erhalten hier:

$$
\begin{aligned}
v_1(t) &= k_1 \cdot c_{\text{Xylose}}(t) \\
v_2(t) &= k_2 \cdot c_{\text{Furfural}}(t) \\
v_3(t) &= k_3 \cdot c_{\text{Xylose}}(t) \\
v_4(t) &= k_4 \cdot c_{\text{Zwischenprodukt}}(t) \\
v_5(t) &= k_5 \cdot c_{\text{Zwischenprodukt}}(t) \\
v_6(t) &= k_6 \cdot c_{\text{Zwischenprodukt}}(t) \cdot c_{\text{Furfural}}(t) \\
v_7(t) &= k_7 \cdot c_{\text{Xylose}}(t) \cdot c_{\text{Furfural}}(t)
\end{aligned}
$$

Die Ableitung der Konzentration nach der Zeit ist die Reaktionsgeschwindigkeit.

Wir erhalten hier:

$$
\begin{aligned}
\dot{c}_{\text{Xylose}}(t) &= -v_1(t) - v_3(t) + v_4(t) - v_7(t) \\
\dot{c}_{\text{Furfural}}(t) &= v_1(t) - v_2(t) + v_5(t) - v_6(t) - v_7(t) \\
\dot{c}_{\text{Zwischenprodukt}}(t) &= v_3(t) - v_4(t) - v_5(t) - v_6(t) \\
\dot{c}_{\text{Kondensat}}(t) &= v_6(t) + v_7(t) \\
\dot{c}_{\text{Harz}}(t) &= v_2(t)
\end{aligned}
$$

Simulation: Euler-Schema

Es ist notwendig alle Zwischengrößen gleichzeitig zu simulieren, weil sie voneinander abhängen!

Wir erhalten hier:

$$
\begin{aligned}
c_{\text{Xylose}}(i+1) &= c_{\text{Xylose}}(i) + h \cdot [-v_1(t) - v_3(t) + v_4(t) - v_7(t)] \\
c_{\text{Furfural}}(i+1) &= c_{\text{Furfural}}(i) + h \cdot [v_1(t) - v_2(t) + v_5(t) - v_6(t) - v_7(t)] \\
c_{\text{Zwischenprodukt}}(i+1) &= c_{\text{Zwischenprodukt}}(i) + h \cdot [v_3(t) - v_4(t) - v_5(t) - v_6(t)] \\
c_{\text{Kondensat}}(i+1) &= c_{\text{Kondensat}}(i) + h \cdot [v_6(t) + v_7(t)] \\
c_{\text{Harz}}(i+1) &= c_{\text{Harz}}(i) + h \cdot v_2(t)
\end{aligned}
$$

Man sieht:

Die Simulationen hängen von den Reaktionskinetiken k_i ab!

Ziele:

Passe die Reaktionskinetiken k_i so an, dass die simulierten Konzentrationsverläufe bestmöglich mit den tatsächlich gemessenen Konzentrationsverläufen übereinstimmen!

Versuche daraus dann Rückschlüsse zu ziehen, welche Zwischenreaktionen tatsächlich stattgefunden haben!

Weitere Fragestellung: Wann ist die Gewinnausbeute maximal?

$$\begin{aligned}\text{Gewinn} \;=\; & -\ \text{Anfangsmenge Xylose}\ [mol] \cdot 150{,}1297\ [g/mol] \cdot \\ & \text{Preis für Xylose}\ [Euro/g] \\ & + \text{Ertrag Furfural}\ [mol] \cdot 96{,}08488\ [g/mol] \cdot \\ & \text{Preis für Furfural}\ [Euro/g] \\ & -\ \text{Anlagekosten}\ [Euro/min] \cdot \text{Zeit}\ [min]\end{aligned}$$

Aufgabe 6:

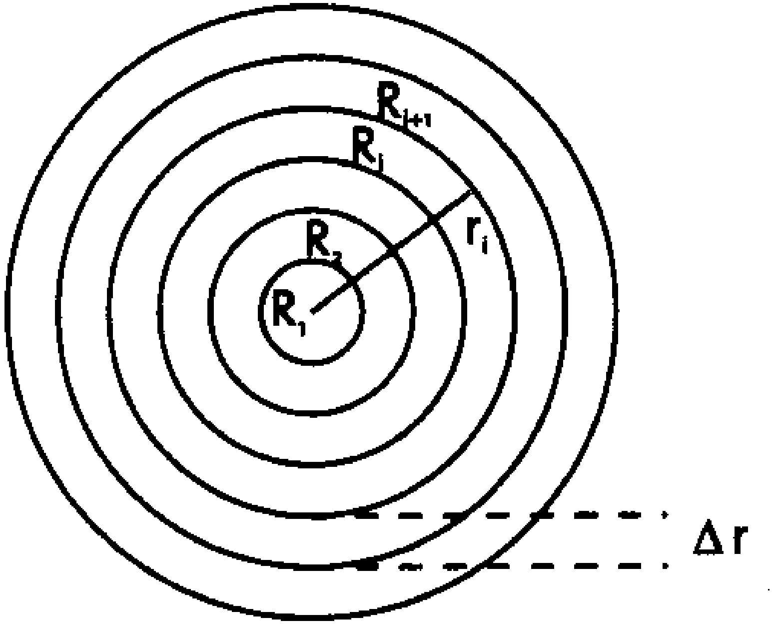
(a) Passe die Proportionalitätsfaktoren so lange an, bis für alle drei Ausgangskonzentrationen von Xylose die simulierten Konzentrationsverläufe bestmöglich mit den beobachteten Konzentrationsverläufen übereinstimmen. Welche der oben genannten (Zwischen-)Reaktionen haben damit stattgefunden und welche nicht?

(b) Nehmen wir an, Xylose kostet 500 Euro pro Tonne und Furfural erzielt einen Preis von 1400 Euro pro Tonne. Der Betrieb der Anlage kostet jede Minute 70 Cent. Wie lange sollt man den Prozess dann bei einer Anfangskonzentration der Xylose von 1 mol/l laufen lassen, um einen größtmöglichen Gewinn zu erzielen?

Sterilisation von Lebensmitteln

Thema: Konservierung von Lebensmitteln durch Sterilisation (mittels Erhitzung)

Hier: Sterilisation einer Fleischkonserve in einer Dose



Ziele:

- drastische **Reduzierung des Bakteriums** Clostridium Butolinum

- weitgehende **Erhaltung des Vitamins** Thiamin

Exponentieller Zerfall und Halbwertzeiten

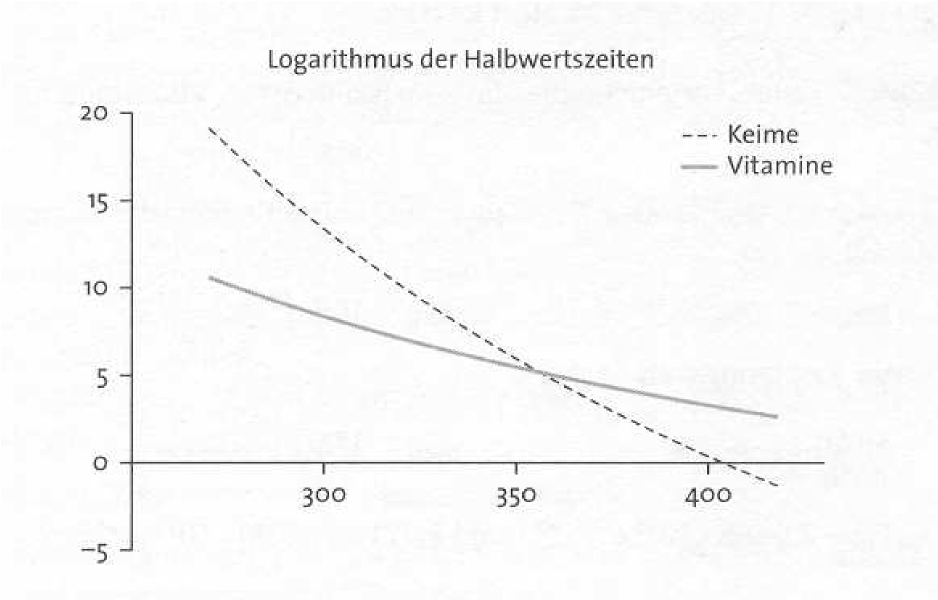
Bei konstanter Temperatur zerfallen das Bakterium und das Vitamin exponentiell:

$$
\begin{aligned}
B(t) &= B(0) \cdot e^{-k_B \cdot t} \\
V(t) &= V(0) \cdot e^{-k_V \cdot t}
\end{aligned}
$$

Gruppenaufgabe:

Berechne einen Ausdruck für die Halbwertzeiten! Gesucht sind also $t_{B,1/2}$ und $t_{V,1/2}$ mit $B(t_{B,1/2}) = \frac{B(0)}{2}$ und $V(t_{V,1/2}) = \frac{V(0)}{2}$.

Logarithmus der Halbwertzeiten



bei niedrigen Temperaturen
Vitamin zerfällt schneller als Bakterium

bei hohen Temperaturen
Bakterium zerfällt schneller als Vitamin

<u>Ziel eines optimalen Sterilisationsprozesses</u>

Erreiche schnell hohe Temperaturen, die dann nur kurzfristig bestehen müssen und meide mittlere Temperaturen!

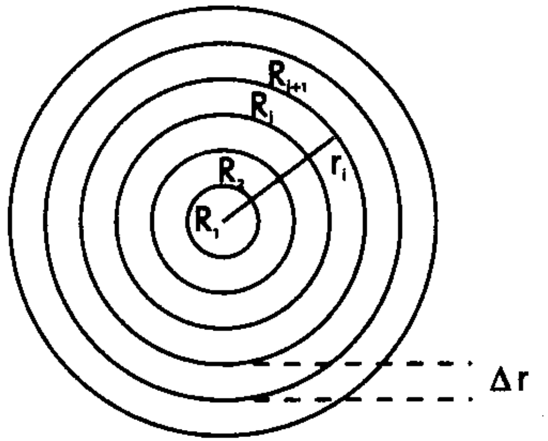
Das ist das Prinzip beim **Ultrahocherhitzen**!

Die Konservendose muss vom Rand her erwärmt werden.

Konsequenz: Bis die Bakterien im Inneren abgetötet sind, sind Vitamine am Rand der Dose weitgehend zerstört! Es kommt zu einer ungleichmäßigen Temperaturverteilung!

Für die **Simulation** bedeutet das:

Wir benötigen eine Diskretisierung nicht nur in Zeitrichtung, sondern auch im Raum, an der wir die Konzentrationsfunktionen von Vitamin und Bakterium auswerten können!



Phase	Dauer	Temperatur
Heizphase 1	?	?
Heizphase 2	?	?
Abkühlungs-phase	< 300 K	273 K

Aufgabe 7:

Passe die beiden Heizphasen so an, dass die Keimzahl auf das höchstens 10^{-7}-Fache der ursprünglichen Keimzahl reduziert wird, du zugleich aber eine möglichst hohe Vitaminausbeute erhältst.