Lösung des 2. Beispiels des 2. Blatts für Mathematische Modellierung für LAK Sommersemester 2016

Problem: Die chemische Reaktion

$$kA + lB \underset{\kappa_2}{\overset{\kappa_1}{\rightleftharpoons}} mC + nD$$

sei gegeben mit den folgenden Parametern:

$$k = 2, \quad l = 1, \quad m = 2, \quad n = 1$$

$$[A](0) = 2, \quad [B](0) = 2, \quad [C](0) = 2, \quad [D](0) = 1.$$

Bestimmen Sie das Anfangswertproblem

$$x'(t) = f(x(t); \kappa_1, \kappa_2), \quad x(0) = x_0$$

wobei

$$[A](t) = [A](0) - kx(t), \quad [B](t) = [B](0) - lx(t)$$

$$[C](t) = [C](0) + mx(t), \quad [D](t) = [D](0) + nx(t).$$

Schreiben Sie die Gleichung $f(x^*; \kappa_1, \kappa_2) = 0$ in der Form um,

$$\kappa_2/\kappa_1 = r(x^\star)$$

um eine Beziehung zwischen Gleichgewichten und dem Quotienten κ_2/κ_1 herzustellen. (Bemerken Sie, die Bedingung $\kappa_2/\kappa_1 > 0$ impliziert durch die Form von r, dass ein Gleichgewicht $x^\star > -1$ erfüllen muss.) Zeigen Sie, jedes Gleichgewicht $x^\star$ mit $r'(x^\star) < 0$ ist (lokal asymptotisch) stabil, während jedes Gleichgewicht $x^\star$ mit $r'(x^\star) > 0$ instabil ist. (Hinweis: Es gilt $f'(x^\star; \kappa_1, \kappa_2)/\kappa_1 = 4r'(x^\star)(1 + x^\star)^3$.) Leiten Sie eine entsprechende Potential-Landschaft $p(x, \kappa_2/\kappa_1)$ her, wobei $f(x; \kappa_1, \kappa_2)/\kappa_1 = -p_x(x, \kappa_2/\kappa_1)$. Für verschiedene Werte von κ_2/κ_1 stellen Sie $f(x; \kappa_1, \kappa_2)$ und $p(x, \kappa_2/\kappa_1)$ im Intervall $0 \le x \le 3$ grafisch dar, um Hysterese zu zeigen.

Lösung: Das Anfangswertproblem für die Reaktion ist:

$$x'(t) = f(x), \quad x(0) = 0$$

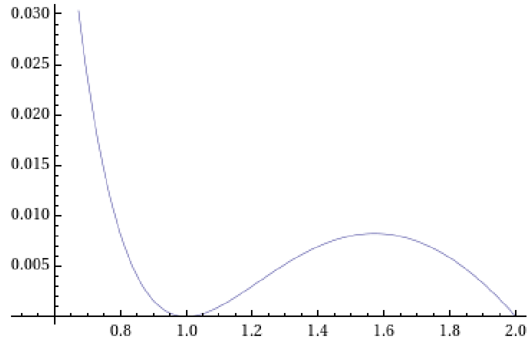
wobei

$$f(x) = \kappa_1(2 - 2x)^2(2 - x) - \kappa_2(1 + x)(2 + 2x)^2$$

Ein Gleichgewicht $x^\star$ für die Reaktion erfüllt $f(x^\star) = 0$ oder

$$0 < \frac{\kappa_2}{\kappa_1} = \frac{(1 - x^\star)^2(2 - x^\star)}{(1 + x^\star)^3} =: r(x^\star) \quad \text{für } x^\star \in (-1, 2)$$

wobei $r(x)$ den folgenden Graph hat:



Zu zeigen ist, dass jedes Gleichgewicht $x^\star$ mit

$$r'(x^\star) < 0$$

(lokal asymptotisch) stabil ist, während jedes Gleichgewicht $x^\star$ mit

$$r'(x^\star) > 0$$

instabil ist. Wegen der Rechnung

$$r'(x) = \frac{-11 + 18x - 7x^2}{(1+x)^4} = \frac{(x-1)(11-7x)}{(1+x)^4}$$

gilt

$$r'(x) < 0, \quad x \in (-1,1) \cup (11/7, +\infty) \quad \text{und} \quad r'(x) > 0, \quad x \in (1, 11/7)$$

Wegen der Rechnung

$$f'(x) = -4\left[3\kappa_2(1+x)^2 + \kappa_1(5 - 8x + 3x^2)\right] = -4\left[3\frac{\kappa_2}{\kappa_1}(1+x)^2 + (5 - 8x + 3x^2)\right]\kappa_1$$

gilt mit $\kappa_2/\kappa_1 = r(x^\star)$,

$$\frac{f'(x^\star)}{4\kappa_1} = 3r(x^\star)(1+x^\star)^2 + (5 - 8x^\star + 3x^{\star 2}) = \frac{-11 + 18x^\star - 7x^{\star 2}}{(1+x^\star)} = r'(x^\star)(1+x^\star)^3$$

und die behauptete Stabilität folgt:

$$f'(x^\star) < 0, \quad x^\star \in (-1,1) \cup (11/7, +\infty) \quad \text{und} \quad f'(x^\star) > 0, \quad x^\star \in (1, 11/7)$$

Mit

$$p(x, R) = -8x + 10x^2 - 16x^3/3 + x^4 + R(1+x)^4$$

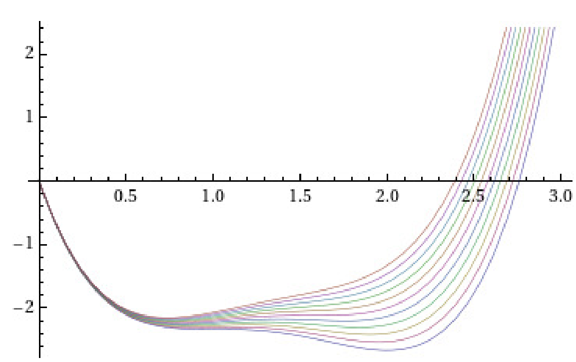
folgt

$$f(x)/\kappa_1 = -p_x(x, \kappa_2/\kappa_1)$$

und p ist eine Postential-Landschaft für die Funktion f. Für die Werte

$$R = \frac{2k}{10} \cdot r(11/7) = \frac{2k}{10} \cdot \max_{1 \le x \le 2} r(x), \quad k = 0, \ldots, 10$$

sieht die Potential-Landschaft grafisch so aus:



wobei das Index k sich von den unteren nach den oberen Kurven erhöht. Der tiefste Punkt nach rechts entspricht einem stabilen Gleichgewicht $x^\star > 11/7$ in dem gilt $r'(x^\star) < 0$. Der tiefste Punkt nach links entspricht einem stabilen Gleichgewicht $x^\star < 1$ in dem gilt $r'(x^\star) < 0$. Der höhste Punkt in der Mitte entspricht einem instabilen Gleichgewicht $x^\star \in (1, 11/7)$ in dem gilt $r'(x^\star) > 0$.

Wenn R sich von 0 nach $2 \cdot r(11/7)$ erhöht, bleibt die Lösung im Gleichgewicht im Thal nach rechts, so lang es ein Thal bleibt, auch wenn das linke Thal tiefer ist. Sobald der tiefste Punkt nach rechts nicht mehr ein Thal ist, springt das Gleichgewicht zum linken Thal. Auf der anderen Seite wenn R von $2 \cdot r(11/7)$ nach 0 sinkt, bleibt die Lösung im Gleichgewicht nach links, solang es ein Thal bleibt, auch wenn das rechte Thal tiefer ist. Sobald der tiefste Punkt nach links nicht mehr ein Thal ist, springt das Gleichgewicht zum rechten Thal. So weist das System Hysterese auf.