

Chemischer Oszillator

Simulation eines Lotka-Volterra Models

B. Seelbinder

Institut für Mathematik und Informatik
Universität Jena

21. Juni 2016

Gliederung

- 1 Chemisches Gleichungssystem
- 2 Modellierung mit Copasy

Gliederung

- 1 Chemisches Gleichungssystem
- 2 Modellierung mit Copasy

Das Modell - Räuber-Beute

Stoffe

- X: Kaninchen [Konzentration]
- Y: Füchse [Konzentration]
- A: Futter für Kaninchen [Konstant]
- B: verstorbene Füchse [Konzentration]

Reaktionen

- $r_1 : A + X \longrightarrow 2X$ (Vermehrung der Kaninchen)
- $r_2 : X + Y \longrightarrow 2Y$ (Vermehrung der Füchse durch Kaninchen)
- $r_3 : Y \longrightarrow B$ (Sterben der Füchse)

Das Modell - Räuber-Beute

Stoffe

- X: Kaninchen [Konzentration]
- Y: Füchse [Konzentration]
- A: Futter für Kaninchen [Konstant]
- B: verstorbene Füchse [Konzentration]

Reaktionen

- $r_1 : A + X \longrightarrow 2X$ (Vermehrung der Kaninchen)
- $r_2 : X + Y \longrightarrow 2Y$ (Vermehrung der Füchse durch Kaninchen)
- $r_3 : Y \longrightarrow B$ (Sterben der Füchse)

Dynamik des Modells

Differenzialgleichungen

$$x \quad \dot{A} = 0$$

$$x \quad \dot{B} = k_3 Y$$

$$\dot{Y} = k_2 X \cdot Y - k_3 Y = Y \cdot (k_2 X - k_3)$$

$$\dot{X} = k_1 A \cdot X - k_2 X \cdot Y = X \cdot (k_1 A - k_2 Y)$$

Ratenkonstanten

$k_1 A$ Zugabe von X (Kaninchen)

k_2 X Verbrauch durch Y & Y Zunahme durch X

k_3 Verbrauch von Y (Füchse)

Stabilität - Isoklinen

$\dot{Y} = 0$, S-Isoklinen

- 1 $Y = 0$
- 2 $X = \frac{k_3}{k_2}, \quad k_2 \neq 0$

$\dot{X} = 0$, W-Isoklinen

- 1 $X = 0$
- 2 $Y = \frac{k_1 A}{k_2}, \quad k_2 \neq 0$

Vektorfelder (1)

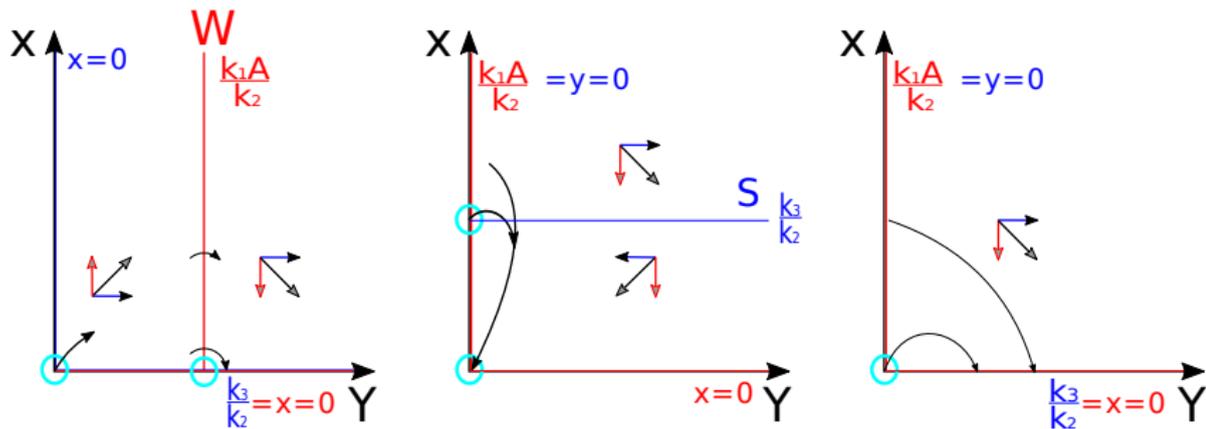


Abbildung: Vektorfelder im Zustandsraum von X und Y

Vektorfelder (2)

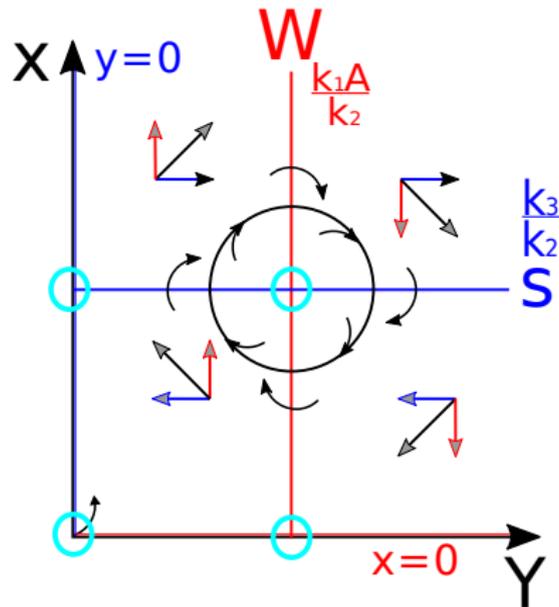


Abbildung: vermutlicher Grenzyklus von X und Y

Gliederung

- 1 Chemisches Gleichungssystem
- 2 Modellierung mit Copasy

Fixpunkt - Steady State

- $X = 2, Y = 2, k_1 = 4, k_2 = 1, k_3 = 2, A = 0.5$
- $\Rightarrow \dot{X} = 0 \wedge \dot{Y} = 0$

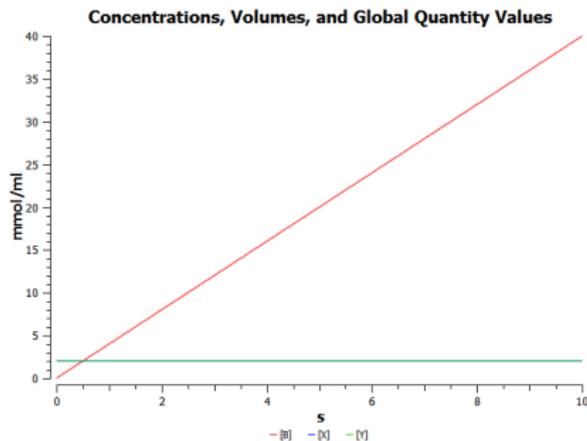


Abbildung: steady-state

Weg zum Grenzyklus - »Auslenken«

- 1 Reaktanten fixieren, Ratenkonstanten verändern
⇒ Fixpunkt-Position ändert sich, aber kein steady state
- 2 Reaktanten ändern, Ratenkonstanten fixieren ⇒ Fixpunkt gleich, aber kein steady state
- 3 Beide ändern ⇒ kann Fixpunkt ändern oder erhalten, kann aber ebenfalls wieder in steady state führen

Ein »fast« perfekter Grenzyklus

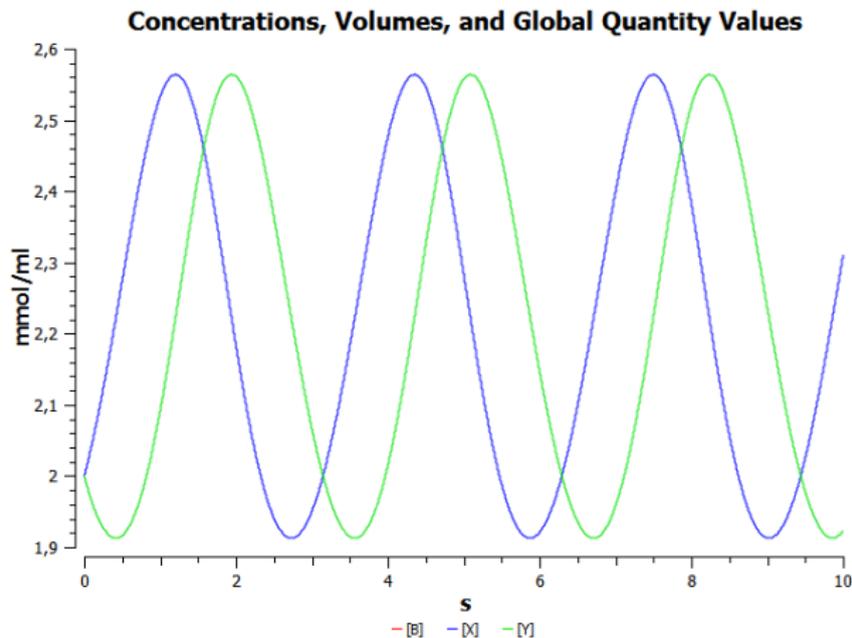


Abbildung: $k_2 = 1.9$, Grenzyklus

Grenzyklus - Zustandsraum

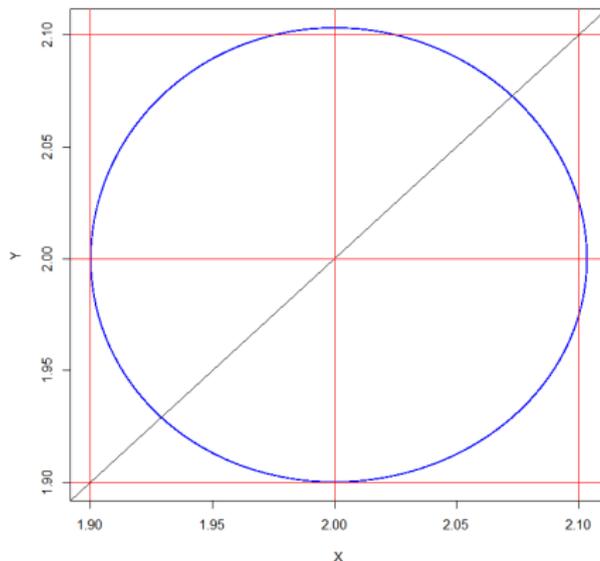


Abbildung: Grenzyklus im Zustandsraum von X und Y

Exploration: k_2

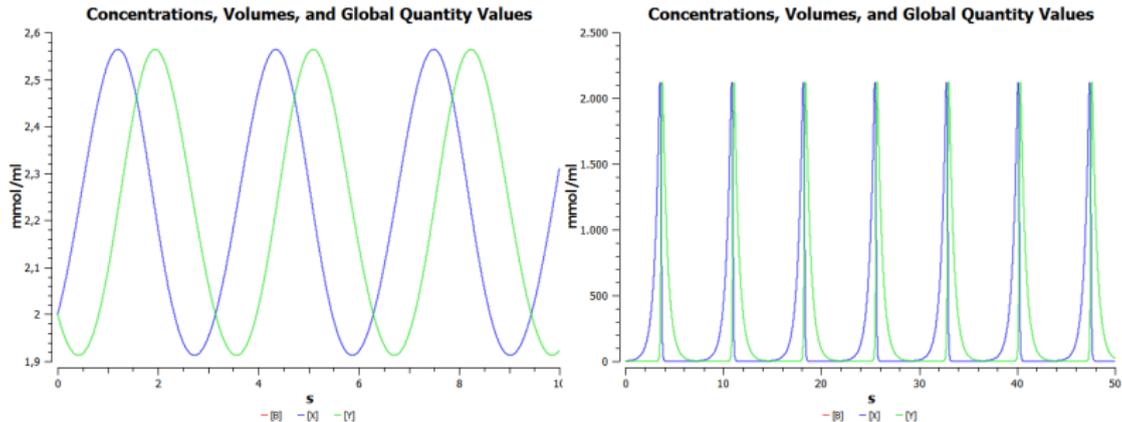


Abbildung: k_2 mit 1.9 und 0.001

Exploration: k_3 und k_1

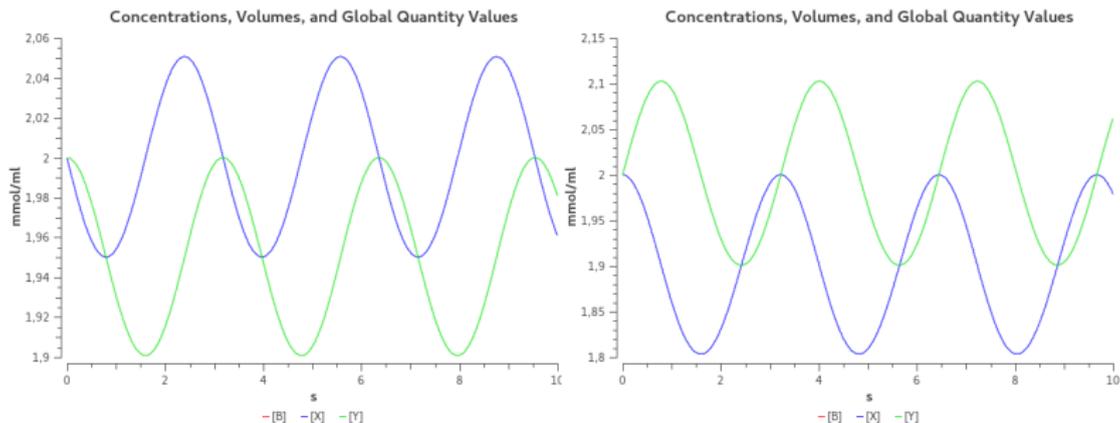
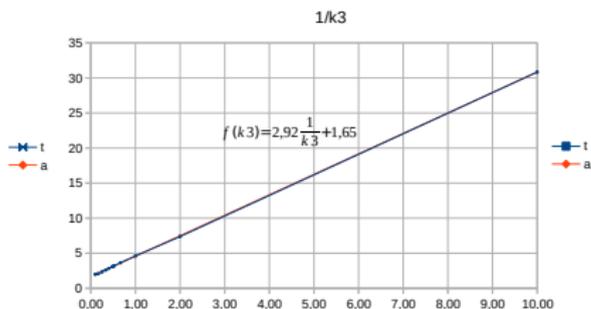
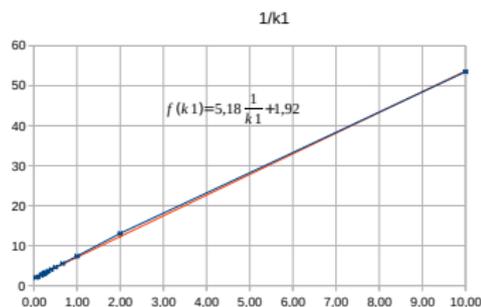


Abbildung: k_1 mit 3.9 und k_3 mit 1.9

Oszillationszeit - Do da math

Abbildung: Oszillationszeit in Abhängigkeit von k_1 und k_2

Oszillationszeit - Do da math (2)

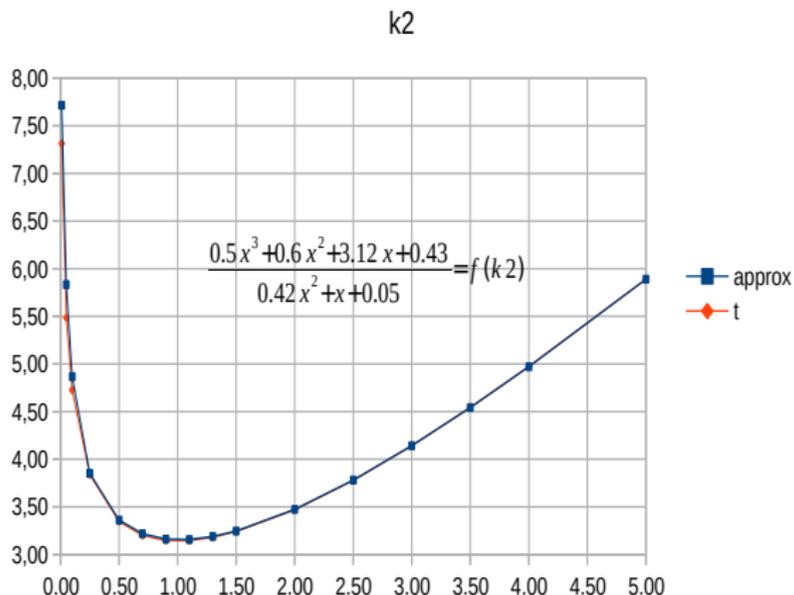


Abbildung: Oszillationszeit in Abhängigkeit von k_1 und k_2

Grenzyklen der Ratenkonstanten

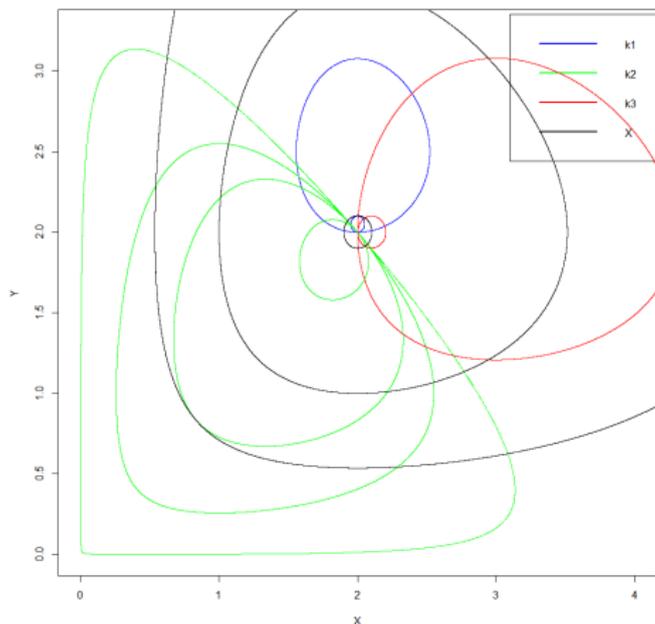
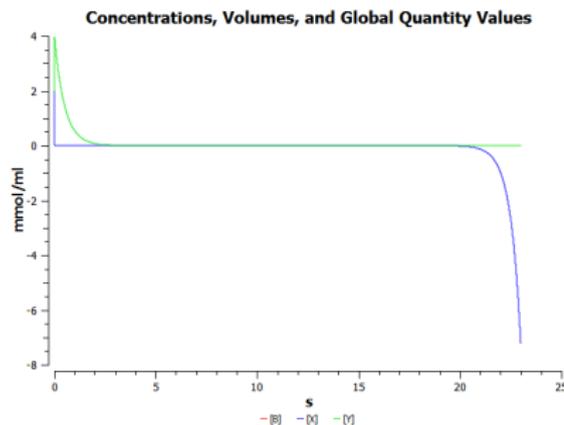
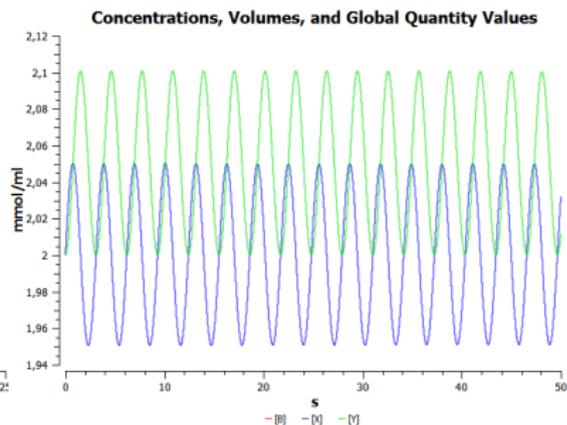


Abbildung: Grenzyklen von k_1 , k_2 , k_3 und X

Veränderung der Wellenform

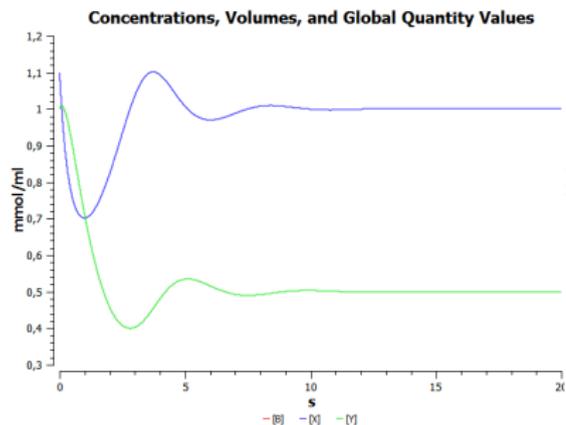


(a) Berechnungslimit $k_2 = 100$

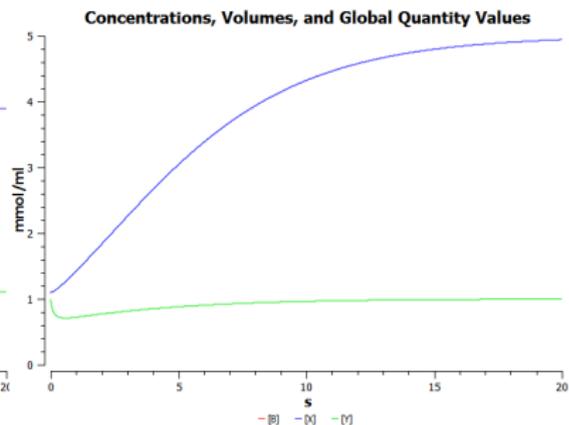


(b) 2 verschiedene Peaks

Veränderung der Wellenform



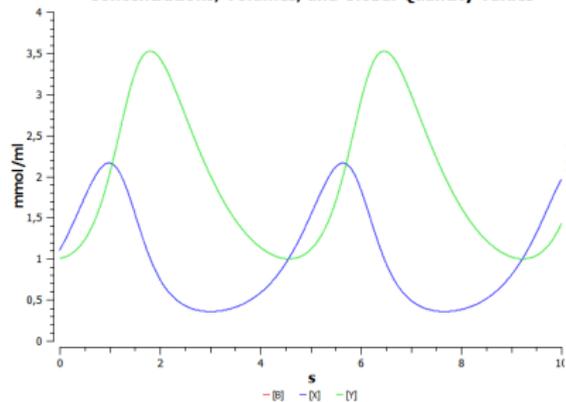
(c) $r_2: 2X + Y \rightarrow 2Y$



(d) $r_3: 5Y \rightarrow B$

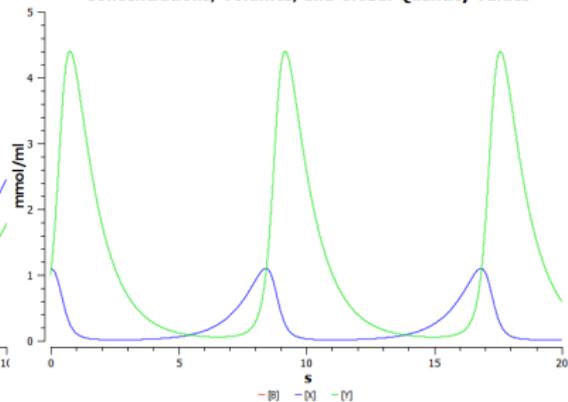
Veränderung der Wellenform

Concentrations, Volumes, and Global Quantity Values



(e) $r_1 : A + X \rightarrow 3X$

Concentrations, Volumes, and Global Quantity Values



(f) $r_2 : X + Y \rightarrow 5Y$

Das Ende (der Numerik)

