System = Menge von Objekten, zwischen denen Relationen bestehen

statisches Modell kann keine zeitl. Veränderung beschreiben

dynamisches Modell beschreibt zeitabhängige Antwort auf eine äussere Veränderung

jedes dynamische Modell enthält implizit ein statisches Modell

nichtautonome Modelle hängen explizit von der Zeit ab

in diskreten Modellen treten Differenzen-gleichungen an Stelle der Diff.gleichungen

I) 1-dimensionale Modelle (= mit einer Systemvariablen)

1-Box-Modell → Visualisierung

Modell = Konzept zur vereinfachten Darstellung eines komplexen Systems

Aufstellen einer *Diff.gl.*:

- linear
  - zeitunabhängige Parameter
  - zeitabhängige Parameter (zeitabhängiger Input)
- nicht linear
  - zeitunabhängige Parameter (Gl.gew.lsg., Stabilität)
  - (zeitabhängige Parameter)

a. lineare Systeme mit zeitunabhängigen Parametern

$dC/dt = k_w C_{in} - k_{tot} C$

lineare Modelle haben max. 1 Attraktor (= asymptotisch stabil = global)

Stationärzustände: Nullsetzen → $C^\infty = k_w C_{in} / k_{tot}$

Lösung = Lsg. des homogenen Systems + partikuläre Lsg.

homogen: $dC/dt = -k_{tot}C$ → $C(t) = Ae^{-k_{tot}t}$ A = Anfangsbedingung C(0)

partikulär: z. B. Stationärlsg. C^∞ → $C(t) = Ae^{-k_{tot}t} + C^\infty = (C_0 - C^\infty)e^{-k_{tot}t} + C^\infty$

Anpassungszeit: $\tau_\kappa = -\ln\kappa / k$

Anpassungszeit = Zeit, bis sich Modell innerhalb vorgegebener Grenzen seinem Stationärzustand angenähert hat

b. lineare Systeme mit zeitabhängigen Parametern (= Input)

$dC/dt = j_{in}(t) - kC$

i. exponentiell wachsender/fallender Input

$j_{in}(t) = j_{in}(0)e^{\beta t}$ → $dC/dt = j_{in}(0)e^{\beta t} - kC$

$\beta>0$ → wachsender Input
$\beta<0$ → fallender Input

Lösung: $C(t) = C(0)e^{-kt} - j_{in}(0)e^{-kt}/(k+\beta) + j_{in}(0)e^{\beta t}/(k+\beta)$

falls $t \gg k^{-1}$ → $e^{-kt} = 0$ → $C(t) = j_{in}(0)e^{\beta t}/(k+\beta) = j_{in}(t)/(k+\beta)$

Stationärlsg. zum aktuellen Input: $C^\infty(t) = j_{in}(t)/k$
(falls j_{in} zum Zeitpunkt t konst. bliebe, wäre $C^\infty(t)$ die dazugehörige Gl.gewichtslsg.)

Fall A: adiabatische Störung ($\beta \ll k$) → $C(t) = j_{in}(0)e^{\beta t}/k = j_{in}(t)/k = C^\infty(t)$

Fall B: nicht adiabatische Störung → $C(t) = j_{in}(0)e^{\beta t}/(k+\beta) = j_{in}(t)/(k+\beta)$

$\beta>0$ → wachsender Input → $C(t) < C^\infty$
$\beta<0$ → fallender Input → $C(t) > C^\infty$

System hinkt immer dem aktuellen Gl.gewichtszustand hinterher

adiabatische Störung = so langsam, dass sich System ständig an verändernden Stationärzustand anpassen kann

ii. periodische Störung (z.B. Jahreszeiten)

$j_{in}(t) = j_0 + j_0\sin(\omega t)$ → $dC/dt = j_0 + j_1\sin(\omega t) - kC$

Lösung: $C(t) = j_0/k + (C_0 - j_0/k)e^{-kt} + j_1\sin(\omega t - \text{atan}(\omega/k))/(\omega^2+k^2)^{½} + j_1\omega e^{-kt}/(k^2+\omega^2)$

falls $t \gg k^{-1}$ → $e^{-kt} = 0$ → $C(t) = j_0/k + j_1\sin(\omega t - \text{atan}(\omega/k))/(\omega^2 + k^2)^{½}$

Fall A: adiabatische Störung ($\omega \ll k$) → $k^2 + \omega^2 = k^2$ → $\text{atan}(\omega/k) = 0$
→ $C(t) = (j_0+j_1\sin(\omega t))/k = j_{in}(t)/k = C^\infty(t)$

Fall B: ($\omega \gg k$) → $k^2 + \omega^2 = \omega^2$ → $\text{atan}(\omega/k) = \pi/2$
→ $C(t) = j_0/k + j_1\sin(\omega t - \pi/2))/\omega$ (Phasenverschiebung: $-\pi/2$)

System hinkt dem Input um eine Viertelperiode hinterher

grosses ω → kleine Amplitude j_1/ω

lineare Systeme filtern externe Schwankungen, die wesentlich schneller sind als systemeigene Reaktionszeiten, aus System heraus

c. nichtlineare Systeme

$dC/dt = f(C)$ $f(C) \neq J - kC$

nichtlineare Systeme lassen sich oft stückweise durch lineare Modelle approximieren

Stationärzustände: Nullsetzen → mehr als 1 Möglichkeit: $f(C) = 0$

Stabilität der Stationärzustände: $dC/dt = f(C)$ → df/dC bestimmen → C^∞ einsetzen
$df/dC\big|_{C\infty} > 0$ → instabil
$df/dC\big|_{C\infty} < 0$ → stabil
$df/dC\big|_{C\infty} = 0$ → labil

invariante Bereiche = Abschnitte zw. Fixpunkten eines 1-dimensionalen, nichtlinearen Modells

II) **mehrdimensionale Modelle** (= mit mehreren Systemvariablen)

(Analogien zum 1-dimensionalen Fall)

Dimension eines Modells = Anzahl Systemvariablen

a. lineare Systeme mit 2 Systemvariablen

Mehrbox-Modelle stehen bezüglich ihrer Struktur zw. Einbox- und räumlich kontinuierlichen Modellen

2-Box-Modell → Visualisierung

Aufstellen eines *Diff.gl.systems*:

$dC_1/dt = J_1 + k_{11}C_1 + k_{12}C_2$
$dC_2/dt = J_2 + k_{21}C_1 + k_{22}C_2$

Stationärzustände: Nullsetzen →

$C_1^\infty = (k_{12}J_2 - k_{22}J_1)/(k_{11}k_{22} - k_{12}k_{21})$
$C_2^\infty = (k_{21}J_1 - k_{11}J_2)/(k_{11}k_{22} - k_{12}k_{21})$

Lösung = Lsg. des homogenen Systems + partikuläre Lsg.

homogen: $C_1(t) = A_{11}e^{\lambda_1 t} + A_{12}e^{\lambda_2 t}$
$C_2(t) = A_{21}e^{\lambda_1 t} + A_{22}e^{\lambda_2 t}$

λ aus charakteristischem Polynom:

$\lambda^2 - \mathrm{Spur}P\lambda + \det P = 0$ $\quad \mathrm{Spur}P = k_{11} + k_{22}$ $\quad \det P = k_{11}k_{22} - k_{12}k_{21}$

→ $\lambda_{1,2} = (k_{11}+k_{22} \pm ((k_{11}+k_{22})^2+4k_{12}k_{21})^{1/2}) / 2$

$A_{11} = ((k_{11}-\lambda_2)(C_1^\circ - C_1^\infty) + k_{12}(C_2^\circ - C_2^\infty)) / (\lambda_1 - \lambda_2)$
$A_{12} = ((k_{11}-\lambda_1)(C_1^\circ - C_1^\infty) + k_{12}(C_2^\circ - C_2^\infty)) / (\lambda_2 - \lambda_1)$
$A_{21} = (k_{21}(C_1^\circ - C_1^\infty) + (k_{22}-\lambda_2)(C_2^\circ - C_2^\infty)) / (\lambda_1 - \lambda_2)$
$A_{22} = (k_{21}(C_1^\circ - C_1^\infty) + (k_{22}-\lambda_1)(C_2^\circ - C_2^\infty)) / (\lambda_2 - \lambda_1)$

partikulär: Stationärlsg.en C_1^∞, C_2^∞

$C_1(t) = A_{11}e^{\lambda_1 t} + A_{12}e^{\lambda_2 t} + C_1^\infty$
$C_2(t) = A_{21}e^{\lambda_1 t} + A_{22}e^{\lambda_2 t} + C_2^\infty$

Regeln zu den Eigenwerten:

k_{12}, k_{21} positiv → Ew. reell
k_{12}, k_{21} positiv; k_{11}, k_{22} negativ; $-k_{11} > k_{21}$; $-k_{22} > k_{12}$ → Ew. reell, negativ
$-k_{11} = k_{21}$; $-k_{22} = k_{12}$ → ein Ew. = 0

Eigenwerte des linearen Systems bestimmen dessen zeitl. Verhalten

betragsmässig kleinster Eigenwert bestimmt i.a. Anpassungszeit eines linearen Systems

2 Spezialfälle:

i. hierarchisch: $k_{12} = 0$ oder $k_{21} = 0$ → *Dreiecksform* der Matrix P
→ $C_1(t)$ wie 1-dim. Modell, $C_2(t)$ wie exp. wachsender Input

ii. komplexe Ew.: $dC_1/dt = k_1C_2$ → $C_1(t) = A_{11}e^{\lambda_1 t} + A_{12}e^{\lambda_2 t}$
$dC_2/dt = k_2C_1$ → $C_2(t) = A_{21}e^{\lambda_1 t} + A_{22}e^{\lambda_2 t}$

charakt. Polynom: $\lambda^2 + k_1k_2 = 0$ → $\lambda_{1,2} = \pm i(k_1k_2)^{1/2} = \pm i\omega$

$C_1(t) = A_{11}e^{i\omega t} + A_{12}e^{-i\omega t}$
$C_2(t) = A_{21}e^{i\omega t} + A_{22}e^{-i\omega t}$
$e^{i\omega t} = \cos(\omega t) + i\sin(\omega t)$

nur Realteil interessiert: $C_1(t) = B_{11}\cos(\omega t) + B_{12}\sin(\omega t)$
$C_2(t) = B_{21}\cos(\omega t) + B_{22}\sin(\omega t)$

Anfangsbedingungen einsetzen → B's

lineare Modelle mit rein imaginären Eigenwerten sind strukturell instabil

Fixpunkt = Zentrum → Systemverhalten in dessen Nähe lässt sich nicht durch Linearisierung ermitteln

Stabilität der Stationärzustände:

1. $\lambda_1, \lambda_2 < 0$, reell → stabiler Stern
2. $\lambda_1, \lambda_2 > 0$, reell → instabiler Stern
3. $\lambda_1 > 0, \lambda_2 < 0$ oder $\lambda_1 < 0, \lambda_2 > 0$ → Sattelpunkt
4. λ_1, λ_2 komplex, $Re(\lambda_1, \lambda_2) < 0$ → stabil mit Oszillation
5. λ_1, λ_2 komplex, $Re(\lambda_1, \lambda_2) > 0$ → instabil mit Oszillation
6. λ_1, λ_2 komplex, $Re(\lambda_1, \lambda_2) = 0$ → ungedämpfte Oszillation (= Zentrum)

b. nicht lineare Systeme mit 2 Systemvariablen

$dC_1/dt = f_1(C_1, C_2)$
$dC_2/dt = f_2(C_1, C_2)$

natürliche Modelle sind selten wirklich linear

Stationärzustände: Nullsetzen → mehr als 1 Lösung möglich

Stabilität der Stationärzustände: Jacobi-Matrix → Ew. Bestimmen → Regeln verwenden

III) Modelle in Raum und Zeit

$\delta C/\delta t$ = Input – Output ± Produktion/Reaktion + Term für Advektion + Term für Diffusion

Fluss F = Masse pro Fläche pro Zeit

Konzentrationsgesetz (= Kontinuitätsgleichung = Satz von Gauss):
$\delta C/\delta t = -\delta F_x/\delta x = -\mathrm{div}F$ bei 3 Dimensionen: $\delta C/\delta t = -(\delta F_x/\delta x + \delta F_y/\delta y + \delta F_z/\delta z)$
$\delta F_x/\delta x < 0 \rightarrow \delta C/\delta t > 0$
$\delta F_x/\delta x > 0 \rightarrow \delta C/\delta t < 0$

a. **Advektion** (= gerichteter Transport, Geschw. v)

Fluss $F_{Adv} = vC$ $F_x = v_xC$

$\delta C_{Adv}/\delta t = -\delta(vC)/\delta x = -v\delta C/\delta x$

Mischungszeit: $\tau_{Adv} = l/v$ l: Strecke

b. **Diffusion** (= ungerichteter Transport, Diffusionskoeff. D oder K_z)

Fluss $F_{Diff} = -D\delta C/\delta x$ (= 1. Fick'sches Gesetz)

$\delta C_{Diff}/\delta t = -\delta(-D\delta C/\delta x)/\delta x = D\delta^2C/\delta x^2$ (= 2. Fick'sches Gesetz)

Mischungszeit: $\tau_{Diff} = l^2/D$

Spezialfall: Gas/Wasser-Austausch
innerhalb Grenzfilm über Wasseroberfläche: nur molekulare Diffusion
Henry-Koeff.: $H_c = p/C_{Sättg.}$ p: Partialdruck des Wassers in der Luft
$C_0 > C_{Sättg.}$ → Übersättigung
$C_0 < C_{Sättg.}$ → Untersättigung
Grenzfilm: $F = -D\delta C/\delta x = -D(C_{Sättg.}-C_0)/\Delta x$ (stationär, nur Diffusion → linear)
$F = -v_g(C_{Sättg.}-C_0) = -v_g(C(x+\Delta x)-C(x))$ v_g: Gasaustauschgeschw. [m/s]
falls Wasserkörper vollst. Durchmischt → $C_0 = C$
Änderung des Wasserinhalts: *Verdunstung*
$VdC/dt = -FA = Av_g(C_{Sättg.}-C_0)$
$dC/dt = Av_g(C_{Sättg.}-C_0)/V = v_g(C_{Sättg.}-C_0)/h = k_g(C_{Sättg.}-C_0)$ k_g: Austauschrate

c. **Diffusion und Advektion**

Mischungsvergleich: $\tau_{Diff}/\tau_{Adv} = lv/D \rightarrow l^* = D/v$
falls $l<l^*$ → Diffusion dominant
falls $l>l^*$ → Advektion dominant

Transportprozesse = gerichtet oder Folge vieler zufälliger Prozesse

$\delta C/\delta t = J - kC - v\delta C/\delta x + D\delta^2C/\delta x^2$ (=zeitabhängige *Transportgleichung*)

Stationärzustände: Nullsetzen → $C(x) = A_1e^{\lambda_1 x} + A_2e^{\lambda_2 x} + J/k$
→ $\lambda_{1,2} = (v\pm(v^2+4Dk)^{1/2}) / 2D = v(1\pm(1+4Dk/v^2)^{1/2}) / 2D$
Anfangsbedinungungen → A_1, A_2

<u>dimensionslose Grössen</u>:

Peclet-Zahl: $Pe = x_r v/D$ — x_r: typische Länge (z.B. Bachbreite)

Damköhler-Zahl: $Da = Dk/v^2$

> Peclet-/Damköhler-Zahl messen rel. Einfluss von gerichtetem und diffusivem Transport und Transformation

4 Extremfälle von Systemen mit Advektion und Diffusion:

- $Da \ll 1$, $v^2 \gg kD$ → Advektion wichtig, Reaktion unwichtig
  - $Pe \gg 1$, $v \gg D/x_r$ → $x_r \gg D/v$ → Adv. dominiert über Diff. → schnelle Adv.
  - $Pe \ll 1$, $v \ll D/x_r$ → $x_r \ll D/v$ → Diff. dominiert über Adv. → langsame Adv.
- $Da \gg 1$, $v^2 \ll kD$ → Advektion unwichtig, Reaktion wichtig
  - $k \ll D/x_r$ → Diff. dominiert über Reaktion → langsame Reaktion
  - $k \gg D/x_r$ → Reaktion dominiert über Diff. → schnelle Reaktion

> Hysterese = Abhängigkeit eines Systems von seiner Vorgeschichte

> Synergismus = Zus.wirken verschiedener externer Kräfte, sodass Gesamtwirkung kleiner als Summe der Einzelwirkungen ist