



Wilfried Rohm

wilfried.rohm@schule.at

Luftverschmutzung bei Inversionswetterlage



- **Mathematische / Fachliche Inhalte in Stichworten:**
Lineares Differentialgleichungssystem, Differenzgleichung, Differenzgleichungssystem, Laplace-Transformation, Numerische Lösung von Differentialgleichungen
- **Kurzzusammenfassung**
Das Beispiel "Luftverschmutzung bei Inversionswetterlagen" führt zu einem einfachen linearen Differentialgleichungssystem mit konstanten Koeffizienten. Die Lösung wird auf 3 Arten durchgeführt:
 - * Näherungsweise mit Hilfe eines Differenzgleichungssystems
 - * Symbolisch mit Hilfe der Laplace-Transformation
 - * Numerisch mit Hilfe der Möglichkeiten, welche Mathcad liefert (Funktion *rkfest*)**Die Lösung wird aus umweltpolitischer Sicht diskutiert.**
- **Didaktische Überlegungen / Zeitaufwand:**
Falls im Unterricht die Laplace-Transformationen behandelt werden, wird hier eine interessante Möglichkeit erläutert, jenseits elektrotechnischer Fragestellungen die Anwendung dieser Transformation zur Lösung von Differentialgleichungssystemen zu demonstrieren. Ebenso aus didaktischer Sicht interessant sind die Modellierung, die Lösung über ein Differenzgleichungssystem sowie die Diskussion der Lösung.
- **Lehrplanbezug (bzw. Gegenstand / Abteilung / Jahrgang):**
Angewandte Mathematik, 4./5. Jahrgang
- **Mathcad-Version:**
Mathcad 15
- **Literaturangaben:**
H.Heuser: Gewöhnliche Differentialgleichungen, 3.Auflage (1995), B.G. Teubner

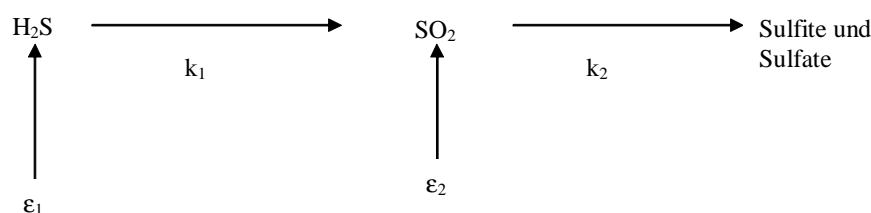


1) Die Problemstellung - Aufstellen der Differentialgleichungen

Bei sogenannter Inversionswetterlage liegen (anders als sonst) warme Luftmassen auf kalten, was dazu führt, dass der vertikale Luftaustausch behindert wird. Kommt noch eine stabile Hochwetterlage mit wenig Wind dazu, so kommt es zu einer (unter Umständen gefährlichen) Ansammlung von Schadstoffen in der Atmosphäre. In Ballungsräumen entstehen dann die bekannten "Smogsituationen."

Im vorliegenden (stark vereinfachten) Modell betrachten wir 2 verschiedene Schadstoffe:

H_2S (Schwefelwasserstoff) und SO_2 (Schwefeldioxid) und folgende Zusammenhänge:



Wir setzen nun voraus, dass **kein** Abzug von Schadstoffen erfolgt (**Inversionswetterlage !**).

$m_1(t)$ sei die Menge an Scheffelwasserstoff (H_2S) zum Zeitpunkt t

$m_2(t)$ sei die Menge an Schwefeldioxid (SO_2) zum Zeitpunkt t .

Gemäß dem obigen Schema oxidiert Scheffelwasserstoff zum Teil zu Schwefeldioxid, das wiederum zu Sulfiten und Sulfaten bzw. Schwefelsäure aufoxidiert werden kann und am sogenannten "Saurer Regen" mitbeteiligt ist. (siehe die Anmerkungen zum Begriff "Saurer Regen" auf Seite 6 dieses Artikels)

Anmerkungen: Sulfit sind Salze, welche ein SO_3^- - Ion enthalten

Sulfate sind Salze, welche ein SO_4^- - Ion enthalten

Schwefelige Säure hat die Formel H_2SO_3

Schwefelsäure hat die Formel H_2SO_4

Mit der Annahme des oben skizzierten Reaktionsschemas erhalten wir damit das folgende (gekoppelte) Differentialgleichungssystem

$$\frac{d}{dt} m_1(t) = -k_1 \cdot m_1(t) + \varepsilon_1$$

$\varepsilon_1, \varepsilon_2$

... Emissionsraten der beiden Schadstoffe

k_1

... Anteil an H_2S , der pro Zeiteinheit zu SO_2 oxidiert (und damit zur Reduktion von H_2S beiträgt und gleichzeitig zur mehr SO_2 führt)

$$\frac{d}{dt} m_2(t) = k_1 \cdot m_1(t) - k_2 \cdot m_2(t) + \varepsilon_2$$

k_2

... Anteil an SO_2 , der pro Zeiteinheit zu weiteren Stoffen (z.B. Sulfaten) umgewandelt wird

Noch zu berücksichtigen sind die Anfangsbedingungen - das sind die Stoffmengen $m_1(0)$ und $m_2(0)$.

2) Lösung mit Hilfe von Differenzgleichungen

Am einfachsten (und verständlichsten) lässt sich das Differentialgleichungssystem durch Umschreiben in ein Differenzgleichungssystem näherungsweise lösen.

Dieses Differenzgleichungssystem kann direkt (ähnlich wie in einer Tabellenkalkulation) durch rekursive Definition mit Hilfe von Vektoren gelöst werden:

$$\frac{d}{dt} m_1(t) \quad \text{wird umgeschrieben zu:} \quad \frac{\Delta m_1}{\Delta t} \quad \text{und weiter zu:} \quad \frac{m_{1n} - m_{1n-1}}{\Delta t}$$

$$\frac{d}{dt} m_2(t) \quad \text{wird umgeschrieben zu:} \quad \frac{\Delta m_2}{\Delta t} \quad \text{und weiter zu:} \quad \frac{m_{2n} - m_{2n-1}}{\Delta t}$$

$$\frac{d}{dt} m_1(t) = -k_1 \cdot m_1(t) + \varepsilon_1$$

$$\text{wird damit zu:} \quad \frac{m_{1n} - m_{1n-1}}{\Delta t} = -k_1 \cdot m_{1n-1} + \varepsilon_1$$

$$\text{und schließlich zu:} \quad m_{1n} = m_{1n-1} + \Delta t \cdot (\varepsilon_1 - k_1 \cdot m_{1n-1})$$

$$\frac{d}{dt} m_2(t) = k_1 \cdot m_1(t) - k_2 \cdot m_2(t) + \varepsilon_2$$

$$\text{wird damit zu:} \quad \frac{m_{2n} - m_{2n-1}}{\Delta t} = k_1 \cdot m_{1n-1} - k_2 \cdot m_{2n-1} + \varepsilon_2$$

$$\text{und schließlich zu:} \quad m_{2n} = m_{2n-1} + \Delta t \cdot (k_1 \cdot m_{1n-1} - k_2 \cdot m_{2n-1} + \varepsilon_2)$$

Nun die Umsetzung in Mathcad:

ORIGIN := 0

$\Delta t := 1h$ Festlegung der Konstanten

$\epsilon_1 := 200 \frac{kg}{h}$ $k_1 := 0.04h^{-1}$

$\epsilon_2 := 100 \frac{kg}{h}$ $k_2 := 0.03h^{-1}$

$m_{1_0} := 1000kg$

Die Anfangswerte werden in ein Feld als 0.Element geschrieben

$m_{2_0} := 0kg$

$n := 1..200$

$$\begin{pmatrix} m_{1_n} \\ m_{2_n} \end{pmatrix} := \begin{bmatrix} m_{1_{n-1}} + \Delta t \cdot (\epsilon_1 - k_1 \cdot m_{1_{n-1}}) \\ m_{2_{n-1}} + \Delta t \cdot (k_1 \cdot m_{1_{n-1}} - k_2 \cdot m_{2_{n-1}} + \epsilon_2) \end{bmatrix}$$

Über diesen Vektor werden die anderen Feldelemente rekursiv berechnet

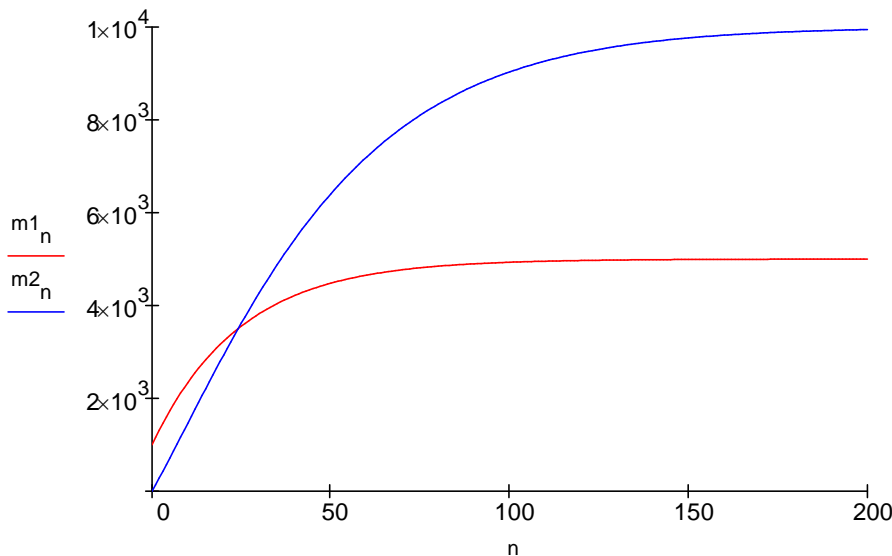
	0
0	$1 \cdot 10^3$
1	$1.16 \cdot 10^3$
2	$1.314 \cdot 10^3$ kg
3	$1.461 \cdot 10^3$
4	$1.603 \cdot 10^3$
5	...

	0
0	0
1	140
2	282.2 kg
3	426.278
4	571.932
5	...

Tabellarische Darstellung

Grafische Darstellung:

$n := 0..200$



3) Symbolische Lösung des Differentialgleichungssystem mit Laplacetransformation

Mit Hilfe der Laplace-Transformation können wir ein System von Differentialgleichungen in ein **System von algebraischen Gleichungen** umformen, das symbolisch wesentlich einfacher lösbar als im Zeitbereich ist.

Anmerkung: Die hier verwendete Mathcad-Version erlaubt nicht die Laplace-Transformation einer ganzen Gleichung - daher müssen die Gleichungen händisch oder getrennt transformiert werden:

Die Überführung in den Laplace-Bildbereich kann direkt erfolgen:

$$\frac{d}{dt}m_1(t) = -k_1 \cdot m_1(t) + \varepsilon_1 \quad \text{wird transferiert zu:} \quad s \cdot M_1(s) - m_{10} = -k_1 \cdot M_1(s) + \frac{\varepsilon_1}{s}$$

$$\frac{d}{dt}m_2(t) = k_1 \cdot m_1(t) - k_2 \cdot m_2(t) + \varepsilon_2 \quad \text{wird transferiert zu:} \quad s \cdot M_2(s) - m_{20} = k_1 \cdot M_1(s) - k_2 \cdot M_2(s) + \frac{\varepsilon_2}{s}$$

Wir erhalten also ein algebraisches Gleichungssystem im Bildbereich (Laplace-Bereich), das auch gleich (im Bildbereich!) gelöst wird

Vorgabe

$$s \cdot M_1 - m_{10} = -k_1 \cdot M_1 + \frac{\varepsilon_1}{s}$$

m_{10}, m_{20}

.... Anfangsbedingungen = Menge an den Schadstoffen H₂S bzw. SO₂ zum Zeitpunkt 0

$$s \cdot M_2 - m_{20} = k_1 \cdot M_1 - k_2 \cdot M_2 + \frac{\varepsilon_2}{s}$$

$M_1 = M_1(s), M_2 = M_2(s)$

$$\begin{pmatrix} MM1 \\ MM2 \end{pmatrix} := \text{Suchen}(M_1, M_2) \rightarrow \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon_1 + m_{10} \cdot s}{s^2 + k_1 \cdot s} \\ \frac{m_{20} \cdot s^2 + k_1 \cdot \varepsilon_1 + k_1 \cdot \varepsilon_2 + s \cdot \varepsilon_2 + k_1 \cdot m_{10} \cdot s + k_1 \cdot m_{20} \cdot s}{k_1 \cdot s^2 + k_2 \cdot s^2 + s^3 + k_1 \cdot k_2 \cdot s} \end{pmatrix}$$

MM1(s) und MM2(s) sind die Lösungen im Bildbereich.

Diese Lösungen werden nun (wiederum) als Funktion von s angeschrieben, um die Rücktransformation durchführen zu können. Zusätzlich werden der größeren Flexibilität wegen die Funktionen auch noch in Abhängigkeit von den konstanten Größen definiert.

$$M_1(s, \varepsilon_1, \varepsilon_2, k_1, k_2, m_{10}, m_{20}) := MM1 \rightarrow \frac{\varepsilon_1 + m_{10} \cdot s}{s^2 + k_1 \cdot s}$$

$$M_2(s, \varepsilon_1, \varepsilon_2, k_1, k_2, m_{10}, m_{20}) := MM2 \rightarrow \frac{m_{20} \cdot s^2 + k_1 \cdot \varepsilon_1 + k_1 \cdot \varepsilon_2 + s \cdot \varepsilon_2 + k_1 \cdot m_{10} \cdot s + k_1 \cdot m_{20} \cdot s}{k_1 \cdot s^2 + k_2 \cdot s^2 + s^3 + k_1 \cdot k_2 \cdot s}$$

Rücktransformation in den Zeitbereich:

$$m_1(t, \varepsilon_1, \varepsilon_2, k_1, k_2, m_{10}, m_{20}) := M_1(s, \varepsilon_1, \varepsilon_2, k_1, k_2, m_{10}, m_{20}) \begin{cases} \text{invlaplace, } s, t \\ \text{sammeln, } \exp(-k_1 \cdot t) \end{cases} \rightarrow \left(\frac{\varepsilon_1 - k_1 \cdot m_{10}}{k_1} \right) \cdot e^{-k_1 t}$$

$$m_2(t, \varepsilon_1, \varepsilon_2, k_1, k_2, m_{10}, m_{20}) := M_2(s, \varepsilon_1, \varepsilon_2, k_1, k_2, m_{10}, m_{20}) \text{ invlaplace, } s, t \rightarrow \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{k_2} + \frac{e^{-k_1 t} \cdot (\varepsilon_1 - k_1 \cdot m_{10})}{k_1 - k_2}$$

Da die Lösung oben über den rechten Rand hinausgeschrieben wird, wird sie hier nochmals übersichtlich angeschrieben:

$$m_1(t) = \left(\frac{\varepsilon_1 - k_1 \cdot m_{10}}{k_1} \right) \cdot e^{-k_1 t} + \frac{\varepsilon_1}{k_1}$$

$$m_2(t) = \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{k_2} + \frac{e^{-k_1 t} \cdot (\varepsilon_1 - k_1 \cdot m_{10})}{k_1 - k_2} + \frac{e^{-k_2 t} \cdot (k_2^2 \cdot m_{20} + k_1 \cdot \varepsilon_1 + k_1 \cdot \varepsilon_2 - k_2 \cdot \varepsilon_2 - k_1 \cdot k_2 \cdot m_{10} - k_1 \cdot k_2 \cdot m_{20})}{k_2^2 - k_1 \cdot k_2}$$

Der besseren Übersicht wegen kann man diese Ausdrücke noch vereinfachen, indem man die Konstanten in den flüchtigen Anteilen (das sind jene mit den e-Potenzen!) zu den "neuen" Konstanten A,B und C zusammengefasst;

$$m_1(t) = \frac{\varepsilon_1}{k_1} + A \cdot e^{-k_1 t}$$

$$m_2(t) = \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{k_2} + B \cdot e^{-k_1 t} + C \cdot e^{-k_2 t}$$

Die Konstanten A,B und C ergeben sich aus dem Vergleich mit der ermittelten symbolischen Lösung:

$$A = m_{10} - \frac{\varepsilon_1}{k_1} \quad \text{Aus der 1.Gleichung (nach händischem Vereinfachen)}$$

$$B = \frac{\varepsilon_1 - k_1 \cdot m_{10}}{k_1 - k_2} \quad \text{Aus der 2.Gleichung}$$

$$C = \frac{k_2^2 \cdot m_{20} + k_1 \cdot \varepsilon_1 + k_1 \cdot \varepsilon_2 - k_2 \cdot \varepsilon_2 - k_1 \cdot k_2 \cdot m_{10} - k_1 \cdot k_2 \cdot m_{20}}{k_2^2 - k_1 \cdot k_2}$$

Hinweis : Da in den verschiedenen Mathcad-Versionen beim symbolischen Rechnen unterschiedliche Vereinfachungen erfolgen, ist zu erwarten, dass die konkrete Darstellung der Konstanten A,B und C versionsabhängig ist!

Grafische Darstellung der Lösung:

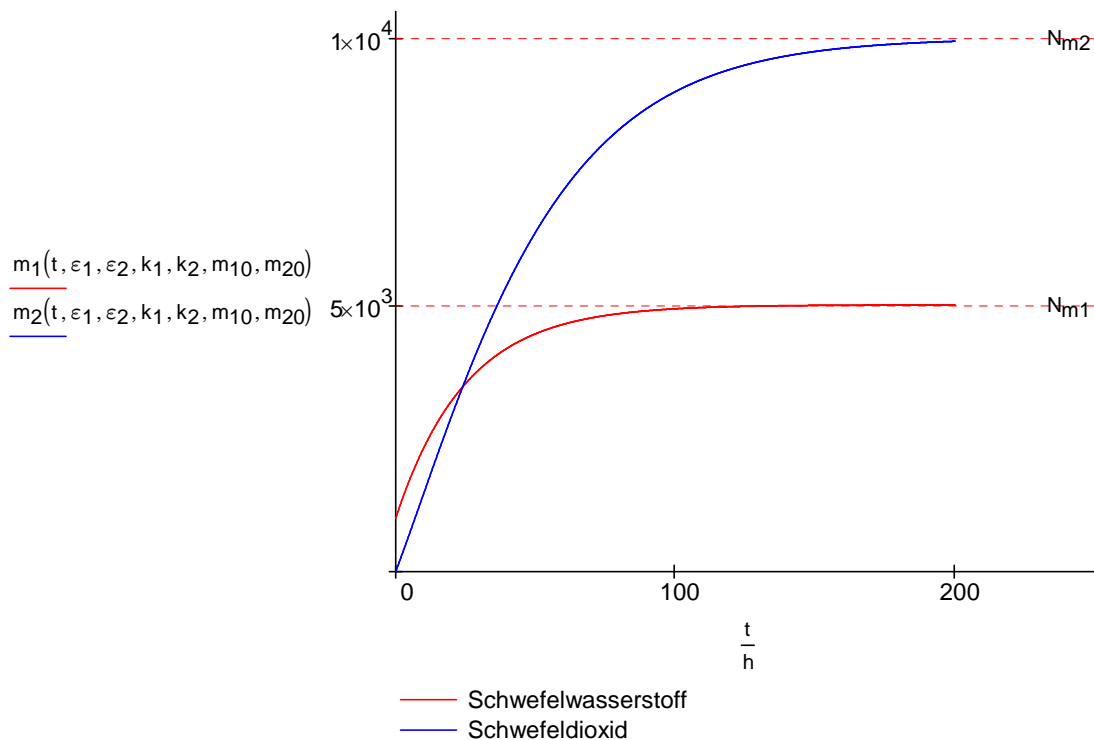
$m_{10} := 1000\text{kg}$	$m_{20} := 0\text{kg}$	Anfangsmengen zum Zeitpunkt 0
$\varepsilon_1 := 200 \frac{\text{kg}}{\text{h}}$	$\varepsilon_2 := 100 \frac{\text{kg}}{\text{h}}$	Emissionsraten von H2S und SO2
$k_1 := 0.04\text{h}^{-1}$	$k_2 := 0.03\text{h}^{-1}$	Welcher Anteil pro Zeiteinheit reagiert weiter ?

Die "Endniveaus" bzw. Sättigungswerte ergeben sich aus der oben angeführten symbolischen Lösung :
Die flüchtigen Anteile (das sind jene mit den e-Potenzen) gehen wegen dem negativen Exponenten gegen 0 für t gegen Unendlich! Daher erhält man die folgenden "Sättigungswerte" für $m_1(t)$ und $m_2(t)$:

$$N_{m1} := \frac{\varepsilon_1}{k_1}$$

$$N_{m2} := \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{k_2}$$

$t := 0h, 0.1h.. 200h$



Diskussion des Ergebnisses aus umweltpolitischer Sicht:

Für grosses t ($t \rightarrow$ unendlich) stabilisiert sich (bei Inversionswetterlage!) der Gehalt an $m_1(t)$ und $m_2(t)$ auf einem bestimmten Niveau, wenn keine externen Veränderungen (Fahrverbote ...) vorgenommen werden.

Dieses Niveau kann aber unter Umständen (in Abhängigkeit von den Konstanten und den biologischen Gegebenheiten) gesundheitsschädlich sein! Daher zeigt diese Berechnung auf, dass durch legislative Maßnahmen (z.B. Geschwindigkeitsbeschränkungen oder temporäre Fahrverbote etc.) eingegriffen werden muss, um die Konstanten (Sättigungswerte) N_{m1} und N_{m2} auf ein erträgliches Maß zu senken! Dies geschieht auch tatsächlich in der Praxis (beispielsweise zeitabhängige Geschwindigkeitsbeschränkungen an bestimmten Autobahnabschnitten in Tirol und Salzburg)

Noch eine Anmerkung zum Begriff "Saurer Regen":

Regen ist durch den Gehalt an säurebildenden Oxiden in der Luft (zum Beispiel CO_2) von Natur aus leicht sauer, unter "Saurer Regen" versteht man aber die zusätzliche Versauerung des Regens durch den Menschen (unterhalb eines pH-Wertes von 5,6). Diese wird in erster Linie durch Schwefeldioxid und Stickoxide verursacht, welche durch die Verbrennung fossiler Rohstoffe in die Luft gelangen. Dort können diese Oxide zu schwefeliger Säure, Schwefelsäure sowie Salpetersäure weiterreagieren und zur Versauerung des Regens führen. Dieses Problem war in den 70-iger und 80-iger Jahren des vorigen Jahrhunderts in Europa und Nordamerika von großer Bedeutung, verschiedene technische Maßnahmen haben das Problem des "Saurer Regens" zumindest in Europa inzwischen deutlich reduziert. Allerdings ist aktuell der Saure Regen (und nebenbei gesagt auch vor allem der "Saure Nebel") in Gegenden mit steigendem Verbrauch fossiler Rohstoffe (zum Beispiel in China!) ein großes Problem!

4) Numerische Lösung des Differentialgleichungssystems (mit der Funktion rkfest)

Ausgangspunkt ist wiederum unser Differentialgleichungssystem:

$$\frac{d}{dt}m_1(t) = -k_1 \cdot m_1(t) + \varepsilon_1$$

$$\frac{d}{dt}m_2(t) = k_1 \cdot m_1(t) - k_2 \cdot m_2(t) + \varepsilon_2$$

Die Funktion rkfest verwendet das Runge-Kutta-Verfahren vierter Ordnung mit fester Schrittweite.

ORIGIN := 1

Unter Angabe der Oxidationsraten, der Emissionsraten und der Startwerte für die Mengen lässt sich das System mit dem Befehl rkfest wie folgt lösen.

$$k := \begin{pmatrix} 0.04 \\ 0.03 \end{pmatrix} \quad \varepsilon := \begin{pmatrix} 200 \\ 100 \end{pmatrix} \quad m := \begin{pmatrix} 1000 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Index 1 entspricht Schwefelwasserstoff, Index 2 entspricht Schwefeldioxid.

Zur endgültigen Lösung wird an dieser Stelle noch die Matrix der ersten Ableitungen eingeführt.

$$D(t, m) := \begin{pmatrix} -k_1 \cdot m_1 + \varepsilon_1 \\ k_1 \cdot m_1 - k_2 \cdot m_2 + \varepsilon_2 \end{pmatrix}$$

t0 := 0 Anfangszeitpunkt

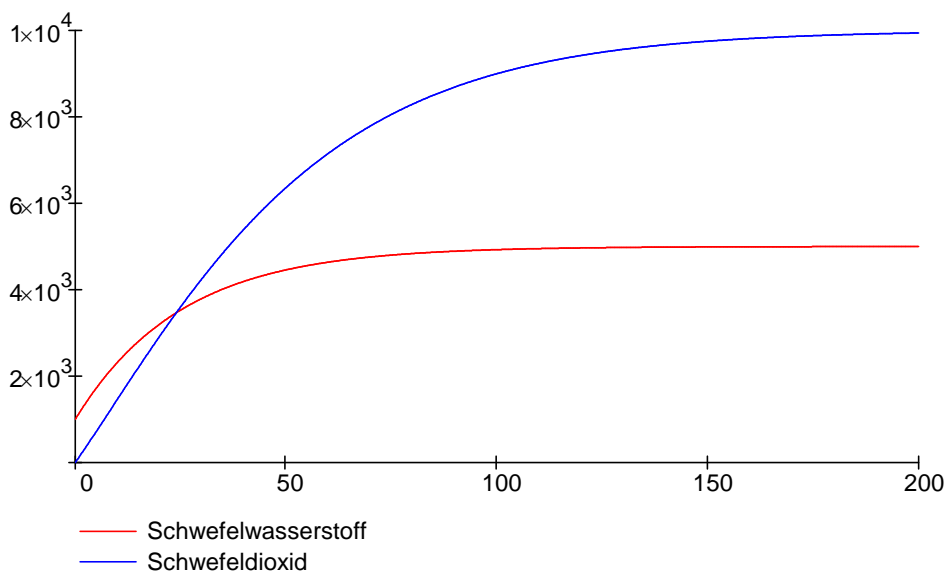
t1 := 200 Endzeitpunkt

N := 1000 Schritte

f := rkfest(m, t0, t1, N, D)

f =

	1	2	3
1	0	1·10 ³	0
2	0.2	1.032·10 ³	28.044
3	0.4	1.063·10 ³	56.173
4	0.6	1.095·10 ³	84.385
5	0.8	1.126·10 ³	112.677
6	1	1.157·10 ³	141.047
7	1.2	1.187·10 ³	169.493
8	1.4	1.218·10 ³	198.012
9	1.6	1.248·10 ³	226.602
10	1.8	1.278·10 ³	255.26
11	2	1.308·10 ³	283.984
12	2.2	1.337·10 ³	312.772
13	2.4	1.366·10 ³	341.621
14	2.6	1.395·10 ³	370.53
15	2.8	1.424·10 ³	399.495
16	3	1.452·10 ³	...



$$+ \frac{\varepsilon_1}{k_1}$$

$$+ \frac{e^{-k_2 t} \cdot (k_2^2 \cdot m_{20} + k_1 \cdot \varepsilon_1 + k_1 \cdot \varepsilon_2 - k_2 \cdot \varepsilon_2 - k_1 \cdot k_2 \cdot m_{10} - k_1 \cdot k_2 \cdot m_{20})}{k_2^2 - k_1 \cdot k_2}$$