



KINETIK

Einige Beispiele für Vorgänge, bei denen die Kinetik eine große Rolle spielt:

- enzymatische Reaktionen (z.B. Michaelis-Menten Kinetik)
- Hydrolyse von Kohlenhydraten, Proteinen usw. (chemisch oder enzymatisch)
- Herstellung von Biodiesel (Fettsäuremethylester durch Umesterung von Ölen/Fetten)
- Pyrolyse von Biomasse
- Abwasser (z.B. Nitrifikation)
- Wachstum bzw. Abtötung von Mikroorganismen
- Oxidationsreaktionen wie z.B. bei Ölen und Fetten
- Herstellung von Aromen (Lebensmittel) und 'palatability enhancers' (petfood)
- thermisch bedingter Farbstoffabbau (Chlorophyll, Carotinoide, Anthocyanidine)
- Verbrennungsreaktionen (z.B. Simulation der Verbrennung von Diesel im Motor)
- Maillard Reaktion (Umsetzung reduzierende Zuckern mit freien Aminogruppen).

Die zwei letztgenannten Reaktionen sind ausserordentlich umfangreich und mit tausenden Reaktionsschritten sehr komplex. Um solche Reaktionen zu verstehen und deshalb auch in der Praxis kontrollierbar zu machen, ist man auf eine Vereinfachung der Reaktionswege (ein Modell) und der mathematischen Simulation der Vorgänge angewiesen.

Weitere Beilagen beschreiben etwas ausführlicher verschiedene Aspekte der Reaktionskinetik (**Reaktionsgeschwindigkeit.PDF** und **ReactionKinetics.PDF**).

BERKELEY MADONNA

Ein stark vereinfachtes Modell der Maillard Reaktion wurde der Zeitschrift **Journal of Food Science** **67**, 2534 (2002) entnommen. Das entsprechende Modell für das Programm Berkeley Madonna findet sich unter **Maillard JFS.TXT**.

Die wichtigsten Einflußgrößen der Maillard Reaktion sind die Konzentrationen und Art der Reaktionspartner, der Temperaturbereich, der pH Wert, die Wasseraktivität a_w und ein eventueller Puffer.

Statt der Formulierung des Systems so wie im Beispiel gezeigt, können auch die chemischen Reaktionen selbst formuliert werden. Das Programm Berkeley Madonna erstellt über die Reaktionsgleichungen dann selbst das Modell der entsprechenden Differentialgleichungen.

Zusammenfassung

Natürlich lassen sich Systeme von Differentialgleichungen auch mit anderen Programmen berechnen. Dr. Ralph Berr hat im Newsletter 29 u.a. die frei erhältlichen Programme SciLab, Octave, Maxima genannt sowie auch das kommerzielle Paket Mathematica. Hierzu gehört auch das von mir persönlich bevorzugte Tk Solver (www.uts.com).

Mit allen Programmen werden mit unterschiedlichem Aufwand letztendlich die gleichen Resultate erhalten. **Berkeley Madonna** ist aber nach meiner Meinung sehr gut geeignet, um ein System von Differentialgleichungen auf relativ einfache Weise schnell zu untersuchen. Ein vergleichbares, aber wesentlich umfangreicheres Softwarepaket ist das kommerzielle (\$950) **Athena Visual Studio** (<http://www.athenavisual.com>).

Was leistet nun **Berkeley Madonna**?

- a) Ein Modell kann als Gleichungssystem (Differentialgleichungen für die zeitlichen Änderungen $dC/dt = \dots$ oder als $C' = \dots$, normale Gleichungen für die Definition von Geschwindigkeitskonstanten $k = \dots$, Temperatur $T = \dots$, Konstanten wie R usw.) eingegeben werden oder als FlowChart (hierfür ist Java nötig).
- b) Die Eingabe der Gleichungen kann als System von Differentialgleichungen erfolgen oder über Reaktionsgleichungen $A + B + \dots \leftrightarrow C + D + \dots$ mit den jeweiligen Konstanten für die Hin- und Rückreaktionen. Im letzteren Fall erstellt das Programm selbst alle erforderlichen Differentialgleichungen.
- c) Für z.B. Regressionszwecke können Datasets als txt-Bestand importiert werden (jeweils ein Bestand pro Variable mit Zeit und Konzentration, bei 20 Variablen sind das 20 Datensätze).
- d) Die Datensätze können gefittet werden, um so z.B. Anfangskonzentrationen oder die Geschwindigkeitskonstanten bei eigenen Daten zu erhalten.
- e) Die Integrationsmethode kann frei gewählt werden.
- f) Die Berechnungsergebnisse können wahlweise als Grafik, Tabelle, Overlay Plot usw. ausgegeben werden. Man kann sich also auch problemlos in einer Grafik die Veränderungen bei schrittweiser Erhöhung von z.B. der Temperatur anzeigen lassen.