Modellierung der Diffusion von Sauerstoff in atmendem Holz

Peter Hietz, Institut für Botanik, und
Werner Georg Nowak, Institut für Mathematik

Universität für Bodenkultur Wien
Department für Integrative Biologie

Diffusion steuert die Bewegung von Molekülen in Gasen und Flüssigkeiten und beeinflusst daher die Versorgung lebender Organismen mit Nährstoffen und Sauerstoff sowie deren Verteilung im Körper. Bei Fehlen aktiver Transportprozesse ist sie der einzige wirkende Mechanismus. Modelle für die Dynamik der Diffusion können sehr komplex sein, insbesondere wenn die diffudierende Substanz mit dem umgebenden Medium reagieren kann. Wir betrachten hier beispielhaft nicht-stationäre Diffusionsprozesse von Sauerstoff in atmendes Gewebe, z.B. Holz.

Das Modell. Eine senkrechte Ebene trenne eine Luftatmosphäre (mit zeitlich konstanter O_2-Konzentration) von einem Sauerstoff veratmenden Holzkompartment. Die Sauerstoffkonzentration im Holz sei eine Funktion der Zeit $t \geq 0$ und des Abstands $x \geq 0$ von der Grenzebene: $u = u(x,t)$. Zum Zeitpunkt $t = 0$ sei überall im Holz $u(x,0) = u_1$ konstant. Weiters folgt für die Grenzfläche $u(0,t) = u_0$ konstant für alle Zeiten $t \geq 0$. Z.B. nach einer längeren Zeit ohne Sauerstoffverbrauch (Winter) besteht der Gleichgewichtszustand $u_0 = u_1$. Berücksichtigt man sowohl die Änderung der O_2-Konzentration im Holz durch Diffusion nach dem Fickschen Gesetz als auch den Sauerstoffverbrauch durch Atmung des Holzes, dann entsteht die allgemeine Modellgleichung

(1) $$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = D\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} - R\,,$$

wobei der Respirationsterm R vom O_2-Gehalt abhängt ($R = R(u)$), evtl. auch vom Abstand zur Grenzfläche ($R = R(u,x)$).

Linearisierte Modellgleichung. Explizite Lösung. Am einfachsten ist der Ansatz, $R(u)$ als *lineare* Funktion zu wählen: $R = R(u) = \rho u$. Die entstehende Gleichung (Modell 1)

(2) $$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = D\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} - \rho u(x,t)$$

besitzt mit der obigen Rand- und Anfangsbedingung) die explizite Lösung

(3) $$\begin{aligned} u(x,t) \;=\; & \frac{u_0}{2}\exp\left(-x\sqrt{\rho/D}\right)\operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}-\sqrt{\rho t}\right)+ \\ & +\frac{u_0}{2}\exp\left(x\sqrt{\rho/D}\right)\operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}+\sqrt{\rho t}\right)+u_1\exp(-\rho t)\operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right). \end{aligned}$$

Dabei sind die sog. *Gaußschen Fehlerfunktionen* definiert durch

$$\operatorname{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^z \exp\left(-y^2\right)dy, \quad \operatorname{erfc}(z) = 1-\operatorname{erf}(z).$$

Varianten des Modells. Realitätsnäher sind Ansätze mit nicht-linearem Atmungsterm R. Z.B. kann R zunächst konstant gleich R* sein und erst bei geringer O_2-Konzentration ($u \leq u^*$) linear mit u abnehmen (Modell 2). Weiters kann die atmende Holzschicht nur eine endliche Dicke x* besitzen (Modell 3). In die Modellgleichung (1) ist dann einzusetzen

(4) $$R = \begin{cases} R^* & \text{für } u \geq u^*, \\ \dfrac{R^*}{u^*}u & \text{für } u \leq u^*, \end{cases} \qquad \text{bzw.} \qquad R = \begin{cases} \rho u & \text{für } x \leq x^*, \\ 0 & \text{für } x > x^*. \end{cases}$$

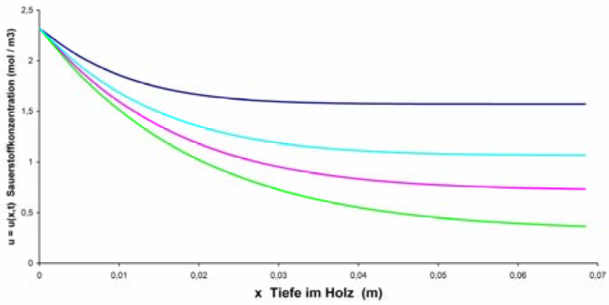
Die entstehenden Differentialgleichungen können nicht mehr in expliziter Form gelöst werden, wohl aber numerisch mittels bekannter Verfahren.

Modellparameter. Aufgrund von Plausibilitätsüberlegungen auf der Basis erhobener Messdaten wurden die hier graphisch dargestellten Modellrechnungen mit den folgenden Parameterwerten durchgeführt:

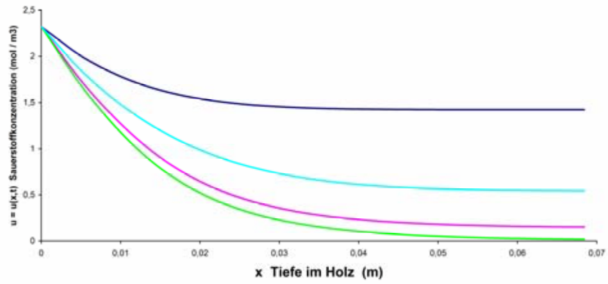
$u_0 = u_1 = 2.322$ mol m^{-3}, $D = 3.6 \times 10^{-5}$ m^2 h^{-1}, $\rho = 0.0775$ h^{-1},
$R^* = 0.18$ mol m^{-3} h^{-1}, $u^* = 0.3\,u_0$, $x^* = 0.1$ m.

Praktische Schlussfolgerungen. *Die Modellrechnungen zeigen, dass die von der Struktur und dem Wassergehalt des Holzes abhängige Gasdiffusion im Holz gerade ausreicht, um das atmende Splintholz mit Sauerstoff zu versorgen, und es in manchen Fällen auch zu Sauerstoffmangel kommen kann.*

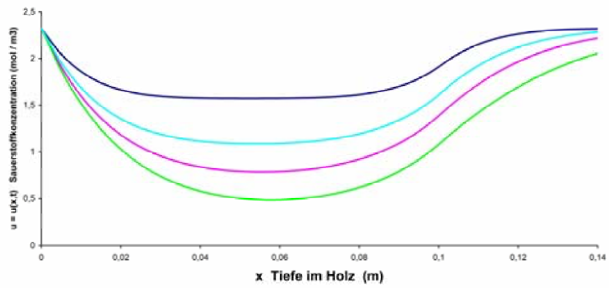
Modell 1: Atmung proportional dem Sauerstoffgehalt u
t = 5, 10, 15, 25 Stunden



Modell 2: Atmung konstant für u > 0.3 u0,
linear abnehmend mit u für u < 0.3 u0
t = 5, 10, 15, 25 Stunden



Modell 3: Atmung proportional dem Sauerstoffgehalt u
Dicke der atmenden Holzschicht x* = 0.1 m
t = 5, 10, 15, 25 Stunden



Modell 4: Dicke der atmenden Holzschicht x* = 0.1 m
Atmung konstant für u > 0.3 u0, linear abnehmend mit u für u < 0.3 u0
t = 5, 10, 15, 25 Stunden