

Horst Melcher und Ewald Gerth

Sieben Aufsätze zur Reaktionskinetik

**in Anwendung auf
Atom- und Kernphysik, Strahlungstransport,
Schwingungen, Spektrallinienprofile,
Pharmakokinetik**



Herbert Utz Verlag · München

Physik



Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek: Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.d-nb.de> abrufbar.

Dieses Werk ist urheberrechtlich geschützt. Die dadurch begründeten Rechte, insbesondere die der Übersetzung, des Nachdrucks, der Entnahme von Abbildungen, der Wiedergabe auf fotomechanischem oder ähnlichem Wege und der Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen bleiben – auch bei nur auszugsweiser Verwendung – vorbehalten.

Umschlagabbildung: Reaktionsschema der Umwandlungsreihe des Uran

Copyright © Herbert Utz Verlag GmbH · 2014

ISBN 978-3-8316-4403-2

Printed in EC
Herbert Utz Verlag GmbH, München
089-277791-00 · www.utzverlag.de

Sieben Aufsätze zur Reaktionskinetik

in Anwendung auf

**Atom- und Kernphysik,
Strahlungstransport,
Schwingungen,
Spektrallinienprofile,
Pharmakokinetik**

von

Horst Melcher und Ewald Gerth

Eine Zusammenstellung von Aufsätzen,
die mehrheitlich – *als Manuskript gedruckt* –
in Wissenschaftlichen Zeitschriften der DDR
von 1970–1983 erschienen sind

Editor: Dr. Ewald Gerth

Potsdam 2014

Monografie

HORST MELCHER and EWALD GERTH

Seven articles on reaction kinetics

in application to
atomic and nuclear physics,
radiative transfer,
oscillations,
spectral line-profiles,
pharmacokinetics

Keywords:

dynamic process, reaction system, reaction-space, radiation transfer, absorption, Boltzmann's integro-differential equation, matrices, transformation, oscillations, coupling, line-profile-model, commutativity, time-reflection, impulse-behavior, pharmacokinetic reactions, bio-rhythms, frequency-pass, computer-programs

Collection of articles
printed as manuscripts
in Scientific Journals of the GDR
during the years 1970–1983

Installed in INTERNET by the web-address:
www.ewald-gerth.de/horst-melcher.pdf

Editor: Dr. Ewald Gerth

Potsdam 2014

Monograph

Vorwort

Sieben Publikationen zur Reaktionskinetik – entstanden in den Jahren 1970 bis 1983 in enger Gemeinschaftsarbeit der Autoren Prof. Dr. Dr. HORST MELCHER und Dr. EWALD GERTH – sind in dem vorliegenden Buch thematisch und methodisch zusammengestellt. Die einzelnen Artikel dieses Buches sind jedoch für sich selbständig. Für englischsprachige Leser sind am Ende eines jeden Artikels generell die zugehörigen Abstracts angefügt.

Die sieben in dem vorliegenden Buch enthaltenen Aufsätze bilden nur eine exemplarische Auswahl aus der Fülle von Prozessabläufen, welche alle Bewegungen in der Natur und sogar in der Gesellschaft bestimmen. Das gemeinsame Thema der Arbeiten ist die Beschreibung des Reaktionsverlaufes als eine Kausalfolge MARKOWScher Prozesse, welche analytisch durch Matrizen dargestellt werden kann. Die analoge Übertragung auf andere Anwendungsgebiete mit prozessartigem Charakter offenbart eine überraschende Multivalenz der Methode und liefert neue Einsichten.

Die mathematische Formulierung des reaktionskinetischen Vorganges ist durch die Transformation des Vektors der an dem Reaktionssystem beteiligten Komponenten in einem vieldimensionalen Vektorraum – dem sogenannten „Reaktionsraum“ – gegeben und entspricht einer Multiplikation des Komponentenvektors mit einer Resolventenmatrix. Jede Vertauschung der Reihenfolge von Prozessabschnitten führt zu unterschiedlichen Ergebnissen, ist also nichtkommutativ, was ein Wesensmerkmal aller Prozesse ist.

Die Publikation der Aufsätze erfolgte seinerzeit nur in wissenschaftlichen Zeitschriften auf dem begrenzten Gebiet der DDR. Darum kam es zu dem Beschluss, die Texte von den gedruckten Originalen neu aufzunehmen und sie in einer Monografie einem breiteren Leserkreis zur Verfügung zu stellen. Diese Arbeit wurde von dem Mitautor E. GERTH mit Hilfe des Textverarbeitungsprogramms LaTeX 2e durchgeführt.

Die Herausgabe des Buches durch E. GERTH erfolgte im Einvernehmen mit Prof. Dr. Dr. HORST MELCHER.

Ewald Gerth

Potsdam, im Juni 2014

Preface

Seven publications on reaction kinetics – which came into being in the years from 1970 to 1983 in close cooperation of the authors Prof. Dr. Dr. HORST MELCHER and Dr. EWALD GERTH – are comprised in the present book with their thematical and methodical relations. The single articles of this booklet are self-contained for their own. For English-speaking readers there are attached generally the abstracts at the end of each article.

The seven articles contained in the present book represent only an exemplary selection from a wealth of processes, which determine all motions in nature and even in human society. The common theme of these publications is the description of the reaction course as a causal sequence of stochastic processes after MARKOV, represented analytically by matrices. The analogous transformation to other fields of application with process-like character reveals a surprising multivalence of the method and renders new insights. The mathematical formulation of the reaction-kinetic process is given by the transformation of a vector, constituted by the components participating in the reaction system as a multidimensional vectorial space – the so-called “reaction space”, and corresponds to a multiplication of the component vector with a resolving matrix. Any exchange of the sequence of processing periods yields different results, i. e., the exchange is non-commutative, which is an essential trait of all processes.

The publication of these treatises appeared at that time only in scientific journals within the restricted zone of the GDR. Therefore, it was decided by the authors to scan the printed originals and to restore the text in a monograph in order to render it at disposition for a wider circle of readers. This task was performed by the co-author E. GERTH using the word processing program LaTeX 2e.

The edition of the book by E. GERTH was performed in agreement with Prof. Dr. Dr. HORST MELCHER.

Ewald Gerth

Potsdam, June 2014

Ergänzende Bemerkung¹

Die hier vorgelegten Arbeiten (sowie noch weitere) sind aus selbstgestellten Problemen, Aufgaben und Fragen hervorgegangen. Seinerzeit waren uns in unserer schaffensfrohen und produktiven Zeit Zwangsjacken einer Drittmittel-Einwerbung und eine hemmende Bürokratiendiktatur nicht bekannt.

Aus Alters- und Gesundheitsgründen sind mir heute wünschenswert erscheinende Erweiterungen nicht möglich. Ich bin meinem Ko-Autor Dr. Ewald Gerth für seine jahrzehntelange Begleitung sehr dankbar und herzlich verbunden.

Horst P. H. Melcher

¹Anmerkung von E. GERTH zur Herausgabe des Buches:

Am 17. 6. 2014 wurde in einer gemeinsamen Besprechung der Autoren Prof. Dr. Dr. H. MELCHER und Dr. E. GERTH eine Endredaktion unter Vorlage des fertiggestellten Manuskriptes durchgeführt und dabei Einvernehmen erzielt bezüglich der Herausgabe der Artikelserie als Buch durch E. GERTH. Außerdem wurden von Prof. MELCHER einige Ergänzungsvorschläge gemacht, welche auch die hier wiedergegebene Bemerkung betreffen.

Inhaltsverzeichnis – *Contents*

Analytische Behandlung und numerische Berechnung der Umwandlungsreihen von Radionukliden mit Hilfe von Matrixfunktionen	1
<i>Analytical treatment and numerical calculation of conversion series of radionuclides by means of matrix functions</i>	20
Behandlung von Strahlungstransportproblemen mit Matrixfunktionen	21
<i>Treatment of the radiative transfer by means of matrix functions</i>	43
Lösung des stationären Strahlungstransportproblems für Energiestreuung mit Hilfe von Matrizenfunktionen	44
<i>Solution of the stationary radiation transport problem for energy scattering using matrix functions</i>	57
Darstellung von Schwingungsvorgängen als Transformationsproblem von Matrixfunktionen	58
<i>Oscillations represented as a transformation problem of matrix functions</i>	84
Ein heuristisches Modell für Linienprofile	85
<i>A heuristic model for spectral-line-profiles</i>	92
Darstellung von Linienprofilen durch Lorentz-Funktionen n -ten Grades	93
<i>Representation of spectral line profiles by means of the Lorentz-function of n-th degree</i>	106
Kommutativität, Zeitspiegelung und Impulsverhalten pharmakokinetischer Reaktionen	107
<i>Commutativity, time-reflection, and impulse-behavior of pharmacokinetic reactions</i>	130
Nachwort	131
<i>Epilogue</i>	132

Analytische Behandlung und numerische Berechnung der Umwandlungsreihen von Radionukliden mit Hilfe von Matrixfunktionen¹

Horst Melcher und Ewald Gerth

1 Einleitung

Für die Behandlung von Reaktionsproblemen in den verschiedensten Wissenschaftsgebieten (Chemie, Physikalische Chemie, Biologie, Kinetik, Kernphysik, Photophysik, Statistik u.a.m.) erweist sich die Anwendung des Matrizenformalismus als besonders geeignet. Die auf der Grundlage der Matrixalgebra entwickelten Rechenprogramme sind vielseitig einsetzbar. In der vorliegenden Arbeit werden einige Berechnungsbeispiele für Umwandlungsreihen bei spontanen Kernumwandlungen vorgestellt.

Die Arbeiten von A. BACH [1] und A. ENDLER [2] geben Veranlassung, die von den Verfassern angegebene allgemeine Lösung ([3], [4], [5], [6]) für Reaktionen 1. Ordnung beliebiger Art auf den Spezialfall einer analytischen Behandlung der Umwandlungsreihen von Radionukliden anzuwenden, die beispielsweise in den sogenannten „natürlichen Zerfallsfamilien“ oder bei den Spaltprodukten im Reaktor auftreten.

Von A. BACH [1] wurden Matrizen nicht im Lösungsverfahren sondern lediglich als Ordnungsschema angewendet, mit dem die auf konventionelle Weise gewonnenen Lösungen des Reaktionssystems systematisiert wurden. Das von A. ENDLER [2] angegebene Rechenprogramm für die Xenonvergiftung eines Reaktors verwendet ausschließlich Näherungslösungen ohne Benutzung einer Matrixdarstellung. Analog zu den im folgenden dargelegten Beispielen kann aber mit Hilfe der Matrizen-Rechenprogramme eine exakte Lösung erhalten werden.

Zur Aufstellung der Algorithmen für die numerische Rechnung wird das allgemeine Umwandlungsproblem durch eine Differentialgleichung in Matrixform beschrieben. Die Lösung ergibt sich als Matrix-Exponentialfunktion (NEUMANNsche Reihe), die aus der iterativen Lösung der äquivalenten Integralgleichung folgt. Hierbei spielen im Unterschied zur LAPLACE-Transformation Eigenwertprobleme keine Rolle, was sich u. a. für numerische Berechnungen als vorteilhaft erweist.

¹Wiss. Ztschr. Päd. Hochsch. Erfurt-Mühlhausen **9** (1973) 21-30.

Abstract – attached at the end of this article (page 20).

- Peter Schlagheck: **Das Drei-Körper-Coulombproblem unter periodischem Antrieb**
1999 · 166 Seiten · ISBN 978-3-89675-569-8
- Markus B. Raschke: **Elementary Surface Reactions of Hydrogen and Oxygen on Silicon: An Optical Second-Harmonic Investigation**
1999 · 200 Seiten · ISBN 978-3-89675-564-3
- Thomas Rosleff Bækmark: **Polymers at Interfaces: An Experimental Study of the Phase Behavior of Block Copolymers and Lipopolymers at the Air-Water Interface**
1999 · 156 Seiten · ISBN 978-3-89675-535-3
- Ajay Pratap Singh: **Dynamik eines linearen Probemoleküls in einer glasigen Flüssigkeit**
2006 · 114 Seiten · ISBN 978-3-89675-527-8
- Markus Nauroth: **Die Dynamik von normalen und unterkühlten Flüssigkeiten: Ein Vergleich von analytischen Theorien mit Computersimulation**
1999 · 240 Seiten · ISBN 978-3-89675-510-0
- Rolf Schmidt: **Bestimmung der Nukleonendichte in der Kernperipherie mit antiprotonischen Atomen**
1999 · 120 Seiten · ISBN 978-3-89675-503-2
- Doris A. Simson: **Entwicklung und Charakterisierung einer neuen mikromechanischen Methode zur Untersuchung der kraftinduzierten Dissoziation von einzelnen, spezifischen Bindungen zwischen Biomolekülen**
1999 · 107 Seiten · ISBN 978-3-89675-498-1
- Andreas Saemann: **Erzeugung eines heißen Plasmas bei Festkörperdichte durch Einstrahlung von 150fs langen Laserpulsen**
1999 · 138 Seiten · ISBN 978-3-89675-491-2
- Johannes Nardi: **Non-Equilibrium Phenomena of Free and Bound Vesicles: Modelling Cell Adhesion and Vesicle Transport**
1999 · 152 Seiten · ISBN 978-3-89675-490-5
- Bernhard Ketzer: **Laserspektroskopie von metastabilem antiprotonischen Helium unter dem Einfluß von Fremdgasbeimischungen**
1999 · 228 Seiten · ISBN 978-3-89675-474-5
- Anja Schlicht: **Normalleitende und supraleitende Eigenschaften von Farbstoff-Einlagerungsverbindungen des Wirtgitters 2H-TaS₂**
1999 · 132 Seiten · ISBN 978-3-89675-473-8

Erhältlich im Buchhandel oder direkt beim Verlag:

Herbert Utz Verlag GmbH, München

089-277791-00 · info@utzverlag.de

Gesamtverzeichnis mit mehr als 3000 lieferbaren Titeln: www.utzverlag.de