

## APPENDICE A

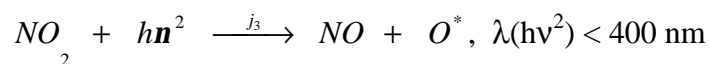
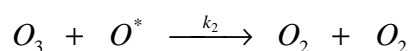
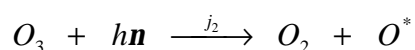
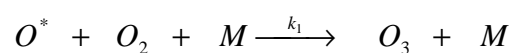
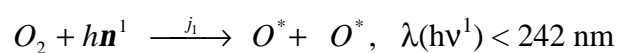
### Calcolo delle cinetiche chimiche dell'ozono per una giustificazione scientifica di strutture di modelli neuronali

L'ozono ha origini fotochimiche.

Si considerano, per i seguenti calcoli, due sorgenti di Ozono:

- l'infiltrazione di Ozono di origine stratosferica nella Troposfera;
- una sorgente antropica di ozono per fotolisi di  $\text{NO}_2$  dovuto ad inquinamento atmosferico.

Si considerino le reazioni chimiche relative a queste due sorgenti:



Le cinetiche chimiche per  $\text{O}_3$  ed  $\text{O}^*$  sono le seguenti:

$$\frac{d[\text{O}_3]}{dt} = k_1 [\text{O}^*][\text{O}_2][M] - j_2 [\text{O}_3][h\nu] - k_2 [\text{O}_3][\text{O}^*]$$

$$\frac{d[O^*]}{dt} = 2j_1 [O_2][hn^1] - k_1 [O^*][O_2][M] + j_2 [O_3][hn] - k_2 [O_3][O^*] +$$

$$+ j_3 [NO_2][hn^{11}]$$

Discretizzando  $\frac{d[O_3]}{dt}$  si ottiene la concentrazione di  $O_3$  al tempo  $t+\Delta t$ :

$$\frac{\Delta[O_3]}{\Delta t} = \frac{[O_3]_{t+\Delta t} - [O_3]_t}{\Delta t}$$

$$[O_3]_{t+\Delta t} = [O_3]_t + \Delta t \left( \frac{\Delta[O_3]}{\Delta t} \right)$$

$$= [O_3]_t + \Delta t [O_3]_t \left( -j_2 [hn]_t - k_2 [O^*]_t \right) + \Delta t k_1 [O^*]_t [O_2]_t [M]_t$$

$$= [O_3]_t \left\{ 1 + \Delta t \left( -j_2 [hn]_t - k_2 [O^*]_t \right) \right\} + \Delta t k_1 [O^*]_t [O_2]_t [M]_t$$

Discretizzando  $\frac{d[O^*]}{dt}$  è possibile ricavare la concentrazione di  $O^*$  al tempo  $t+\Delta t$ :

$$\frac{\Delta[O^*]}{\Delta t} = \frac{[O^*]_{t+\Delta t} - [O^*]_t}{\Delta t}$$

$$[O^*]_{t+\Delta t} = [O^*]_t + \Delta t \left( \frac{\Delta[O^*]}{\Delta t} \right)$$

$$= [O^*]_t + \Delta t \left\{ \begin{array}{l} j_2 [O_3]_t [hn]_t - k_2 [O_3]_t [O^*]_t + 2j_1 [O_2]_t [hn^1]_t - k_1 [O^*]_t [O_2]_t [M]_t + \\ + j_3 [NO_2]_t [hn^{11}]_t \end{array} \right\}$$

$$= [O^*]_t \left\{ 1 + \Delta t \left( -k_2 [O_3]_t - k_1 [O_2]_t [M]_t \right) \right\} + 2\Delta t j_1 [O_2]_t [hn^1]_t + \Delta t j_2 [O_3]_t [hn]_t +$$

$$+ \Delta t j_3 [NO_2]_t [hn^{11}]_t$$

Si pone:  $rad_t = \frac{1}{\mathbf{a}}[hn]_t = \frac{1}{\mathbf{b}}[hn^1]_t = \frac{1}{\mathbf{g}}[hn^{11}]_t$

le equazioni, per  $[O_3]_{t+\Delta t}$  e  $[O^*]_{t+\Delta t}$ , diventano :

$$[O_3]_{t+\Delta t} = [O_3]_t \left\{ 1 - \Delta t \left( j_2 \mathbf{a} [rad]_t + k_2 [O^*]_t \right) \right\} + \Delta t k_1 [O^*]_t [O_2]_t [M]_t$$

$$[O^*]_{t+\Delta t} = [O^*]_t \left\{ 1 - \Delta t \left( k_2 [O_3]_t + k_1 [O_2]_t [M]_t \right) \right\} + 2 \mathbf{b} \Delta t j_1 [O_2]_t [rad]_t + \mathbf{a} \Delta t j_2 [O_3]_t [rad]_t + \mathbf{g} \Delta t j_3 [NO_2]_t [rad]_t$$

considerando  $t + \Delta t = t$  e  $t = t - \Delta t$ , nella precedente equazione, si ottiene:

$$[O^*]_t = [O^*]_{t-\Delta t} \left\{ 1 - \Delta t \left( k_2 [O_3]_{t-\Delta t} + k_1 [O_2]_{t-\Delta t} [M]_{t-\Delta t} \right) \right\} + 2 \mathbf{b} \Delta t j_1 [O_2]_{t-\Delta t} [rad]_{t-\Delta t} + \mathbf{a} \Delta t j_2 [O_3]_{t-\Delta t} [rad]_{t-\Delta t} + \mathbf{g} \Delta t j_3 [NO_2]_{t-\Delta t} [rad]_{t-\Delta t}$$

Nell'ipotesi che nell'intervallo di tempo considerato vi sia una variazione della concentrazione di  $O_3$  molto piccola, possiamo effettuare le seguenti approssimazioni:

$$\left\{ 1 - \Delta t \left( k_2 [O_3]_{t-\Delta t} + k_1 [O_2]_{t-\Delta t} [M]_{t-\Delta t} \right) \right\} = \mathbf{A} = \text{cost.}$$

$$\left\{ 2 j_1 \mathbf{b} \Delta t [O_2]_{t-\Delta t} + \mathbf{a} j_2 \Delta t [O_3]_{t-\Delta t} \right\} = \mathbf{B} = \text{cost.}$$

$$\mathbf{g} \Delta t j_3 = \mathbf{C} = \text{cost.}$$

In questo modo risulta:

$$[O^*]_t = \mathbf{A} [O^*]_{t-\Delta t} + \mathbf{B} [rad]_{t-\Delta t} + \mathbf{C} [NO_2]_{t-\Delta t} [rad]_{t-\Delta t}$$

e si sostituisce l'espressione trovata per  $[O^*]_t$  in quella per  $[O_3]_{t+\Delta t}$  :

$$[O_3]_{t+\Delta t} = [O_3]_t \left\{ 1 - \Delta t \left( \mathbf{aj}_2 [rad]_t + k_2 \left( A [O^*]_{t-\Delta t} + B [rad]_{t-\Delta t} + C [NO_2]_{t-\Delta t} [rad]_{t-\Delta t} \right) \right) \right\} + \Delta t k_1 [O_2]_t [M]_t \left( A [O^*]_{t-\Delta t} + B [rad]_{t-\Delta t} + C [NO_2]_{t-\Delta t} [rad]_{t-\Delta t} \right)$$

Ponendo:

$$k_2 [O^*]_t = a$$

$$\Delta t j_2 \mathbf{a} = b$$

$$\Delta t k_1 [O_2]_t [M]_t = d$$

si ottiene la relazione tra la concentrazione di  $O_3$  al tempo  $t+\Delta t$  e la radiazione solare al tempo  $t-\Delta t$ :

$$[O_3]_{t+\Delta t} = [O_3]_t (a - b [rad]_t) + d \left( A [O^*]_{t-\Delta t} + B [rad]_{t-\Delta t} + C [NO_2]_{t-\Delta t} [rad]_{t-\Delta t} \right)$$

$$[O_3]_{t+\Delta t} = a [O_3]_t - b [O_3]_t [rad]_t + d A [O^*]_{t-\Delta t} + dB [rad]_{t-\Delta t} + d C [NO_2]_{t-\Delta t} [rad]_{t-\Delta t}$$