Cora Kohlmeier

Grundlagen mathematischer Modellierung

mit Beispielen aus der Biologie

Oldenburg, 1. Juli 2026

c.kohlmeier@uol.de
Version: 1. Juli 2026

Inhaltsverzeichnis

1 Einführung **10**
1.1 Was ist ein Modell ? . . . 10
1.2 Was ist Modellbildung – mathematische Modellierung . . . 11
1.2.1 Arten von Modellen . . . 11
1.2.2 Modell-Simulation . . . 14

2 Empirische Modelle **15**
2.1 Parameteranpassung . . . 15
2.2 Lineare Regression . . . 17
2.3 Logarithmischer Zusammenhang . . . 22
2.4 Verallgemeinerung der linearen Regression . . . 24
2.4.1 Fourieranalyse * . . . 25

3 Eindimensionale diskrete Modelle **30**
3.1 Beispiel Bohnenwachstum . . . 30
3.2 Beispiel Bakterienwachstum . . . 31
3.3 Logistisches Wachstum . . . 35
3.4 Zusammenfassung der Wachstumstypen . . . 39

4 Eindimensionale Differentialgleichungsmodelle **42**
4.1 Exponentielles Wachstum . . . 42
4.1.1 Zur numerischen Lösung der Differentialgleichung . . . 44
4.2 Logistisches Wachstum . . . 45
4.2.1 Beispiel Bohnenwachstum . . . 47
4.3 Richtungsfeld . . . 47
4.4 Fixpunkte . . . 49
4.4.1 Stabilität von Fixpunkten . . . 49
4.4.2 Bestimmung der Stabilität . . . 50
4.4.3 Beispiel: Schafe am Deich . . . 52

5 Zweidimensionale Differentialgleichungsmodelle **58**
5.1 Räuber-Beute-Modelle . . . 58
5.2 Lotka-Volterra-Modell . . . 58
5.2.1 Bemerkung zur Struktur des Modells . . . 60
5.2.2 Bemerkung zu Parametern, Einheiten und Dimensionen . . . 61
5.2.3 Fixpunkte . . . 63
5.2.4 Richtungsfeld . . . 64
5.2.5 Teilgleichgewichte (Halbgleichgewichte, Isoklinen) . . . 65
5.3 Rosenzweig-MacArthur-Modell . . . 65
5.3.1 Kapazität . . . 66
5.3.2 Sättigung . . . 67
5.3.3 Effizienz . . . 69
5.3.4 Modellgleichungen und Simulation . . . 69
5.4 PZ-Modell . . . 71

6 Zweidimensionale diskrete Modelle **75**
6.1 Fibonacci und die Kaninchen . . . 75
6.2 Das Fibonacci-Modell als zweidimensionales Modell . . . 77
6.3 Lösung des Systems . . . 78
6.4 Überlagerung von Lösungen – Anfangswertproblem * . . . 80
6.5 Fibonacci und der goldene Schnitt * . . . 82

7 Altersklassenmodelle **83**

8 Zelluläre Automaten **87**
8.1 Universum nach Stephan Wolfram* . . . 87
8.2 Conway's Game of Life . . . 89
8.3 Zirkulärer Raum* . . . 89
8.4 Charakteristika von zellulären Automaten . . . 90

9 Transportprozesse **92**
9.1 Advektion . . . 92
9.1.1 Diskretisierung der Advektionsgleichung . . . 94
9.2 Diffusion . . . 95
9.2.1 Zweidimensionale Advektion und Diffusion* . . . 98
9.2.2 Numerische Diffusion* . . . 99
9.3 Temperaturverteilung im Sediment . . . 102

10 Agentenbasierte Systeme und Tracer-Modelle **104**
10.1 Wachstum von Dendriten . . . 104
10.2 Ameisenstraßen . . . 105
10.3 Larvenansiedlung im Meer . . . 106

11 Epidemiemodelle **107**
11.1 Das Epidemiemodell nach Kermack & McKendrick . . . 108
11.1.1 SI-Modell* . . . 110
11.1.2 Basisreproduktionszahl* . . . 111
11.1.3 Mittleren Dauer der infektiösen Periode* . . . 112
11.1.4 Bestimmung der Basisreproduktionszahl aus der finalen Suszeptiblenzahl* . . . 113
11.2 Vergleich von Räuber-Beute-Modell und Epidemiemodell . . . 115
11.3 Das SIS-Modell . . . 116

12 Fraktale* **118**
12.1 Cantor Menge . . . 118
12.2 Kochsche Schneeflockenkurve . . . 119
12.3 Sierpinski-Dreieck . . . 119
12.4 Fraktale Dimension . . . 120
12.4.1 Kästchenzählmethode . . . 121
12.5 Das Chaos-Spiel . . . 122
12.5.1 Cantor-Menge . . . 122
12.5.2 Sierpinski-Dreieck . . . 123
12.5.3 Der Barnsley-Farn . . . 124
12.6 Mandelbrot-Menge . . . 126
12.6.1 Julia-Mengen . . . 127
12.7 Anwendungen . . . 129

II Weitere Modellbeispiele* **130**

13 Atlantische Umwälzzirkulation **131**
13.1 Das Modell nach Stommel . . . 132
13.1.1 Dichte des Meerwassers . . . 132
13.1.2 Strömungsstärke . . . 133
13.1.3 Modellgleichungen . . . 134
13.1.4 Differentialgleichung für Stromstärke q . . . 134
13.1.5 Fixpunkte der Strömungsstärke . . . 135

14 NPZ-Modell **137**
14.1 Modellbeschreibung . . . 137

14.1.1 Prozessbeschreibungen . . . 138
14.2 Gleichungen . . . 141
14.3 Parameter . . . 141
14.4 Simulationsergebnisse . . . 142

15 Ausbreitung von Borkenkäfern 143
15.1 Borkenkäfer-Dynamik . . . 143
15.2 Wald-Dynamik . . . 146
15.3 Räumliche Ausdehnung des Modells . . . 148
15.3.1 Bekämpfung . . . 149

16 Der Wasserstand eines Sees 150
16.1 Verbale Beschreibung und Ziel des Modells . . . 151
16.2 Festlegung der Zustandsvariablen und Schematisierung des Modellsystems . . . 151
16.3 Festlegung des Modellsystems - Topographie des Sees . . . 152
16.4 Festlegung der Prozesse . . . 153
16.5 Festlegung der Randbedingungen und Antriebe (Forcing) . . . 155
16.5.1 Niederschlag und Zufluss . . . 156
16.5.2 Temperatur . . . 156
16.6 Prozessbeschreibungen . . . 157
16.6.1 Zufluss . . . 157
16.6.2 Abfluss . . . 158
16.6.3 Verdunstung . . . 158
16.7 Bestimmung der Parameterwerte . . . 159
16.8 Prüfung des Modells auf Konsistenz . . . 161
16.9 Programmierung, Simulation, Sensitivitätsuntersuchung . . . 161
16.10 Modellverbesserung . . . 163
16.11 Anwendungen des Modells, Dokumentation der Ergebnisse . . . 164
16.12 Schadstoffeinleitung . . . 165
16.12.1 Vermeidung hoher Schadstoffkonzentrationen . . . 166
16.12.2 Bakterieller Abbau . . . 168

17 Modell zum Alkoholabbau 171

18 Masern-Modell 175

19 Covid-19 Ausbreitung in Deutschland 179

20 HIV-Modell 184

21 Kinetik chemischer Reaktionen 190

22 Das Karbonatsystem des Ozeans 193
22.1 Atmosphäre-Ozean-Gleichgewicht . . . 195

III Anhang 201

A Basics aus der Mathematik 202
A.1 Funktionen . . . 202
A.1.1 Folgen . . . 203
A.2 Potenzfunktion . . . 204
A.3 Polynome . . . 205
A.3.1 Quadratische Gleichungen . . . 205
A.4 Exponentialfunktion und Logarithmus . . . 205
A.4.1 Beispiel pH-Wert . . . 208
A.4.2 Beispiel Radiokarbonmethode . . . 208
A.4.3 Einfach-logarithmische Darstellung . . . 209

A.4.4 Doppelt-logarithmische Darstellung . . . 210
A.5 Einheiten sicher umrechnen . . . 211
A.5.1 Ein nicht ganz ernst gemeintes Beispiel . . . 211
A.5.2 Ein Beispiel aus dem Alltag der Umweltwissenschaften . . . 212
A.6 Periodische Funktionen – Winkelfunktionen . . . 214
A.6.1 Additionstheoreme . . . 215
A.7 Monod-Funktion . . . 215
A.8 Komplexe Zahlen * . . . 216
A.8.1 Komplexe Exponentialfunktion . . . 217
A.9 Modulo-Funktion * . . . 217
A.10 Differentialrechnung . . . 218
A.10.1 Kettenregel . . . 219
A.11 Integralrechnung . . . 220
A.11.1 Integrale (Stammfunktionen) einiger wichtiger Funktionen . . . 222
A.11.2 Rechenregeln . . . 222
A.11.3 Beispiel: Flächeninhalt unter der Normalparabel . . . 222
A.11.4 Beispiel: Flächeninhalts „unter“ dem Sinus . . . 223
A.11.5 Herleitung der Flächenberechnung * . . . 224
A.11.6 Substitutionsregel . . . 225
A.11.7 Einfaches Beispiel zur Substitution . . . 227
A.11.8 Beispiel zur Substitution, bei dem die Ableitung $\varphi'(x)$ nicht erkennbar ist . . . 227
A.11.9 Partielle Integration . . . 227
A.11.10Beispiel zur partiellen Integration . . . 228
A.12 Taylorpolynom * . . . 228
A.12.1 Beispiel: Taylorentwicklung von $y(t) = e^{r \cdot t}$ . . . 229
A.13 Nullstellenbestimmung mit dem Newton-Verfahren . . . 230

B Freier Fall und Wurfparabel * 231
B.1 Der freie Fall . . . 231
B.2 Die Wurfparabel . . . 231
B.2.1 Skalierung . . . 235
B.2.2 Die Einhüllende . . . 235

C Differentialgleichungen 237
C.1 Gewöhnliche Differentialgleichungen 1. Ordnung . . . 237
C.1.1 Richtungsfeld . . . 238
C.1.2 Anfangswertproblem (AWP) . . . 239
C.1.3 Beispiel: Lösung eines Anfangswertproblems . . . 239

D Numerisches Lösen von Differentialgleichungen 243
D.1 Euler Verfahren . . . 243
D.1.1 Beispiel $y' = y$, $y(0) = 1$ . . . 243
D.1.2 Implementierung in des Euler-Verfahrens in Matlab * . . . 244
D.2 Runge-Kutta-Verfahren 2. Ordnung *
(Verbessertes Euler-Verfahren, Heun-Verfahren) . . . 245
D.3 Runge-Kutta-Verfahren 4. Ordnung * . . . 245
D.4 Fehlerabschätzung * . . . 247

E Vektoren und Matritzen 249
E.1 Vektoren . . . 249
E.1.1 Vektoren im Koordinatensystem . . . 249
E.1.2 Rechenregeln für Vektoren . . . 250
E.1.3 Zeilen- und Spaltenvektoren . . . 251
E.1.4 Multiplikation von Zeilen- mit Spaltenvektor . . . 251
E.1.5 Inneres Produkt oder auch Skalarprodukt . . . 251

E.2 Matrizen . . . 252
E.2.1 Rechenregeln für Matrizen . . . 253
E.2.2 Quadratische Matrizen . . . 254
E.2.3 Gleichungssysteme . . . 256

F Zweidimensionale lineare Abbildungen **257**

G Mehrdimensionale Analysis* **261**
G.1 Die Ableitung skalarer 2-dimensionaler Funktionen . . . 261
G.2 Totales Differential . . . 262
G.3 Massenerhaltung . . . 263
G.4 Reaktionsterme . . . 264
G.5 Die Ableitung vektorwertiger 2-dimensionaler Funktionen . . . 264

H Skalierung von Modellen* **267**
H.1 Skalierung des logistischen Wachstumsmodells . . . 267
H.2 Skalierung des Lotka-Volterra-Modells . . . 268
H.3 Skalierung des Rosenzweig-MacArthur-Modells . . . 270

I Stabilitätsanalyse autonomer Systeme* **271**
I.1 Fixpunkte . . . 271
I.2 Geschlossene Bahnen . . . 271
I.2.1 Teilgleichgewichte (Isoklinen) . . . 272
I.3 Stabilität der Fixpunkte . . . 272
I.4 Analyse des skalierten Rosenzweig MacArthur-Modell . . . 276
I.4.1 Teilgleichgewichte (Isoklinen) . . . 280
I.4.2 Analyse des SIR-Modells . . . 281

J Vergleich der Stabilitätsanalyse diskreter und kontinuierlicher linearer Modelle* **282**

K Griechische Buchstaben **284**

Literaturverzeichnis **285**

Index **287**

Vorwort

Dieses Skript ist zur Vorlesung „Grundlagen mathematischer Modellierung“ für Masterstudierende des 1. Fachsemester des Studiengangs „Marine Umweltwissenschaften“ am Institut für Chemie und Biologie des Meeres (ICBM) der Carl von Ossietzky Universität Oldenburg entstanden. Es richtet sich an Studierende, die in ihrem bisherigen Bachelorstudium keine oder eine sehr geringe Mathematikausbildung erhalten haben. Daher werden viele Aspekte der Schulmathematik noch einmal aufgegriffen und in den Kontext der mathematischen Modellierung gestellt.

Dank geht an Wolfgang Ebenhöh, meinen Mentor und Doktorvater, für die Überlassung vieler Textinhalte und Modellbeispiele und an Christoph Feenders für das Korrekturlesen.

Oldenburg, März 2025 *Cora Kohlmeier*

Mathematische Modellierung im Studium

Es stellt sich die Frage, warum die „Mathematische Modellierung“ ein Teil des Studiums für angehende Umweltwissenschaftler sein sollte.

Einfache Modelle ermöglichen das Verständnis wichtiger Zusammenhänge. Durch das Aufstellen mathematischer Modelle wird die Fähigkeit zur Abstraktion, „Wichtiges“ von „Unwichtigem“ zu unterscheiden, geschult und der Blick für das „Wesentliche“ geschärft. Die Modellierung und Implementierung der Modelle ist eine Fähigkeit, die in nahezu allen Forschungsgebieten bei der Analyse und Planung komplexer Experimente, der Datenhaltung und Datenanalyse sowie der Präsentation eigener Ergebnisse benötigt wird.

Modelle sind zumeist „problemorientiert“ und damit fast von selbst interdisziplinär, da die Probleme interdisziplinär sind. Im Studium der Umweltwissenschaften sind mathematische Modelle deshalb ein wichtiges Mittel, um die einzelnen Fachdisziplinen zu verbinden.

Immer mehr politische und ökonomische Entscheidungen, wie z.B. die Entscheidungen über Maßnahmen währen der Covid-19 Pandemie im Jahre 2020, werden auf

der Basis von Modellrechnungen getroffen. Modelle werden heutzutage zu immer größeren Verbundmodellen gekoppelt („Modell-Aggregation“, „nested modelling“). Die großen Modelle, ihre Aussagen und Grenzen kann man nur dann einordnen, wenn man zumindest mit kleinen Modellen selbst gearbeitet hat. Anträge zur Finanzierung von Forschungsprojekten werden häufig kaum noch bewilligt, wenn sie keine Modellierungsansätze beinhalten. Es ist heutzutage nicht mehr möglich diese Technik auszuklammern. Um mit Modellierern kommunizieren und kooperieren zu können, sollte man einige Grundlagen der mathematischen Modellierung kennen.

Anmerkungen

Die Notation von Dezimalzahlen folgt der internationalen Schreibweise mit einem Dezimalpunkt. Zur besseren Lesbarkeit wurde im Text die männliche Form gewählt. In Abschnitt 1 werden grundlegende Inhalte mit einfachen Beispielen vermittelt, Abschnitt 2 enthält weitere, etwas umfangreichere Modellbeispiele. Im Anhang werden für das Skript benötigte Grundlagen aus der Schul- und Uni-Mathematik kurz dargestellt. Sie ersetzen keine Mathematikvorlesungen und erheben keinen Anspruch auf Vollständigkeit. Aus Gründen der Übersichtlichkeit wird häufig auf die Überprüfung und Angabe von Voraussetzungen verzichtet. Allen Studierenden, die bisher keine ausreichenden Mathematikkenntnisse erworben haben, wird daher dringend empfohlen, diese Inhalte zu vertiefen. Hierzu hilfreich sind einführende Lehrbücher für Nebenfächler (Mathe für Biologen, Mathe für Ingenieure), der Online Brückenkurs OMB+ `https://www.ombplus.de` oder auch Schulbücher.

Im Anhang werden zudem weiterführende Techniken zur mehrdimensionalen Analysis und zur Stabilitätsanalyse zweidimensionaler Modellsysteme kompakt dargestellt. Dies soll Studierenden, denen die Themen in anderen Veranstaltungen begegnet sind, erleichtern, sich in der hier verwendeten Notationen zurecht zu finden. Es ersetzt keinesfalls weiterführenden Veranstaltungen zu den jeweiligen Themen.

Abschnitte, die mit einem Stern (*) gekennzeichnet sind, dienen der Vertiefung und können auch übersprungen werden. An einigen wenigen Stellen sind kurze Code-Beispiele in Matlab [4] angegeben, die sehr leicht auch in andere Programmiersprachen übersetzt werden können.

1 Einführung

1.1 Was ist ein Modell ?



Quelle: Pixabay

Modelle kommen in allen Lebensbereichen vor. Ein Globus ist ein Modell der Welt. Der Globus stellt auf den ersten Blick die gesamte Erdkugel dar. Es fehlen aber sehr viele Dinge, wie zum Beispiel Pflanzen, Tiere, Menschen, Kriege etc. Der Globus ist auf eine gewisse Art und Weise eine idealisierte Darstellung der Welt. Ähnlich verhält es sich mit Teildarstellungen der Erde. Sowohl ein Landschaftsbild als auch eine Straßenkarte stellen einen Teil der Welt dar. Und auch Wettermodelle bilden einen Teil unserer Welt ab. Sie alle haben charakteristische Merkmale. Ein wesentliches Merkmal vieler Modelle ist die Vereinfachung, d.h. dass nur die wesentlichen Aspekte durch das Modell beschrieben werden. Beschreibt man einen Würfel mit dem mathematischen Modell $V = a^3$, so beschreibt das Modell das Volumen V (bei gegebener Kantenlänge a) aber nicht die Farbe oder das Material des Würfels.

Ein weiteres Merkmal vieler Modelle ist die Skalierung in Raum und Zeit. Ein Atommodell stellt das Atom in einer Größe dar, die wir sehen können, ein Globus ist so klein, dass er bequem auf dem Schreibtisch stehen kann. Eine zeitliche Skalierung ist beim Wettermodell notwendig, da man meistens eine Vorhersage erhalten möchte. Das Modell muss also schneller als die Realität sein. Eine Konsequenz der Vereinfachung und Skalierung ist der begrenzte Gültigkeitsbereich der Modelle. So gelten die Newtonschen Gesetze nicht nahe der Lichtgeschwindigkeit, ein Globus taugt nicht zur Navigation im Straßenverkehr und ein in Klimamodell wird keine Wettervorhersage liefern. Somit sind Modelle also nicht eindeutig sondern sie sind zweckgebunden. Ein und derselbe Aspekt können je nach Zielsetzung durch unterschiedliche Modelle dargestellt werden. Man könnte also einen Definitionsversuch wagen:

Ein Modell ist ein Objekt oder Konzept, das benutzt wird, um einen realen Aspekt so darzustellen, dass er in Hinblick auf eine Zielfrage verstanden werden kann.

1.2 Was ist Modellbildung – mathematische Modellierung

Die mathematische Modellbildung oder mathematische Modellierung versucht Teile der Realität mathematisch begreifbar zu machen. Die mathematische Modellierung ist nicht an eine spezielle Wissenschaft gebunden und wird auf Fragestellungen in Naturwissenschaften, Technik, Ökonomie, Soziologie etc. angewendet. In der (Natur)-Wissenschaft werden Modelle aufgestellt, um eine vorgegebenen Fragestellung zu beantworten. Wie beim Modell selbst bereits erwähnt ist hierbei die Zielsetzung von entscheidender Bedeutung.

Jedes Modelliervorhaben braucht eine Leitfrage oder ein Ziel!

Die Art und die Komplexität eines Modells hängt von dieser Zielvorgabe ab. Ein Modell soll einen Teilaspekt der Realität so darstellen, dass es die Information liefern kann, die zur Beantwortung einer Leitfrage notwendig ist. Zum Beispiel taugt ein Klimamodell nicht zur Wettervorhersage, ein Regentropfenmodell aber auch nicht.

1.2.1 Arten von Modellen

Die Einteilung von Modellen in unterschiedliche Arten kann auf verschiedene Weise geschehen und ist keinesfalls eindeutig. Eine Möglichkeit ist die Unterteilung in

- qualitative Modelle, die Grundprinzipien eines Systems beschreiben und meistens einheitenfrei und normiert sind, und
- quantitative Modelle, die z.B. Budgetieren ermöglichen und meistens einheitenbehaftet sind.

Grob gesprochen ist das Bild einen Schokoladenkuchens ein eher qualitatives Modell, das Backrezept ein quantitatives. Eng damit verknüpft ist die Aufteilung in

- einfache Modelle, die Prinzipien erklären, und
- komplexe Modelle, die günstigstenfalls Vorhersagen erlauben.

Ein einfaches Modell wäre z.B. die Beschreibung des radioaktiven Zerfalls durch die Exponentialfunktion oder das Wechselspiel von Arten in der theoretischen Ökologie. Einfache Modelle sind häufig qualitative Modelle. Komplexe Modell wären z.B. Klimamodelle, die die Atmosphäre und die Ozeanströmungen berücksichtigen. Komplexe Modelle sind häufig quantitative Modelle.

Eine wichtige Unterscheidung besteht darin, ob man Messdaten mithilfe eines Modells beschreiben möchte, ohne deren Zustandekommen zu berücksichtigen oder ob man aufgrund der Prozesse, die zu den Daten geführt haben, ein Modell erstellt. Man unterscheidet dann zwischen

- empirischen Modelle, die "nur" einen funktionalen Zusammenhang der Messdaten liefern und
- prozessorientierten Modelle, die versuchen die Prozesse eines Systems zu beschreiben.

Ein weit verbreitetes Beispiel für ein empirisches Modell ist die lineare Regression (Methode der kleinsten Quadrate). Ein prozessorientiertes Modell wäre z.B. ein Klimamodell, das u.a. die Beschreibung der Verdunstung und der damit verbundenen Wolkenbildung berücksichtigt

Eine eher technische Unterteilung, die aber weitreichende Konsequenzen hat, ist die Unterteilung in

- diskrete Modelle, die den Zustand eine Systems in vordefinierten Zeitschritten bestimmen, wie z. B. Altersklassenmodelle, die die Bevölkerungsstruktur von Jahr zu Jahr berechnen, und
- kontinuierliche Modelle, die die Änderung des Systemzustands bestimmen und in Form von Differentialgleichungen aufgeschrieben werden.

Altersklassenmodelle, die die Bevölkerungsstruktur von Jahr zu Jahr berechnen, sind meistens diskrete Modelle. Ein Modell zur Bestimmung der Schadstoffkonzentration in einem See würde man eher kontinuierlich ansetzen.

Man unterscheidet weiterhin

- deterministische Modelle, die nach dem Prinzip "aus A folgt B" arbeiten und

- stochastische Modelle, die die Wahrscheinlichkeiten für das Eintreten von Ereignissen bestimmen, z.B. die Regenwahrscheinlichkeit.

Ein typisches stochastisches Modell steckt hinter der Regenwahrscheinlichkeit. Aber nicht jedes Modell, das Zufallskomponenten besitzt, ist gleich ein stochastisches Modell ist. Dann gibt es verschiedene Arten räumlicher Modelle, wie z.B.

- 0D- Modelle, die keine räumliche Aufteilung des Untersuchungsgebiets berücksichtigen und meistens bei gut durchmischten Systemen angewendet werden und
- räumliche höherdimensionale Modelle (1D, 2D, 3D), die die räumlichen Unterschiede an verschieden Orten des Untersuchungsgebiets berücksichtigen.

Für die Beschreibung von Chemostaten und Planktotronen reicht häufig ein 0D-Modell. Zur Beschreibung von Tidegewässern kommt man meist nicht um ein höherdimensionales Modell herum.

Man erkennt an diesem Versuch der Klassifizierung schon, dass eine eindeutige Definition der Zugehörigkeit eines Modells nicht möglich ist. Einfache Modelle können sowohl diskret als auch kontinuierlich sein, Auch ein hochaufgelöstes 3D-Modell kann ein einfaches Modell sein, wenn z.B. die Verteilung von "marine snow" nur das verdriften der Partikel im Strömungsfeld beschreibt und die Struktur und Fraktalität der Partikel außer acht lässt.

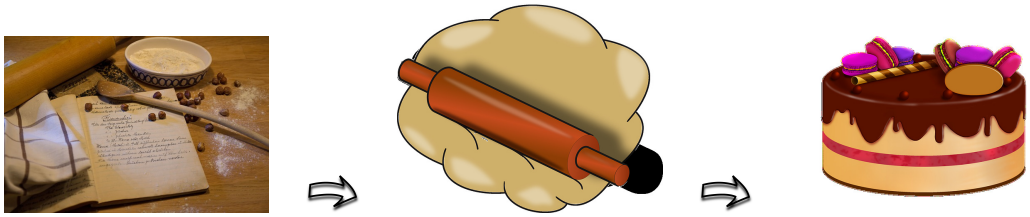
Weiterhin kann man Modelle nach ihrem mathematischen "Charakter" unterscheiden. Es gibt z.B.

- Differenzengleichungssysteme - diskrete Modelle, die die Änderung des Systemzustand beschreiben,
- Differentialgleichungssysteme (dynamische Systeme) - kontinuierliche Modelle in der Zeit,
- partielle Differentialgleichungssysteme - kontinuierliche Modelle in Raum und Zeit,
- agentenbasierte Modelle - zumeist diskrete Systeme, die die aktive Bewegung von z.B. Personen oder KFZ etc. beschreiben,
- Netzwerkmodelle - beschreiben die Beziehung von Objekten, z.B. die Verlinkung von Webseiten im Internet.

1.2.2 Modell-Simulation

Ergebnisse von Modellen erhält man durch eine Simulation. Hierzu wird ausgehend von einer Anfangskonstellation (Anfangswerte) sukzessive das Systemverhalten zu späteren Zeitpunkten bestimmt. Diese Simulation liefert eine Realisierung des Modells. Das Modell gibt die Einsicht in die Zusammenhänge, die Simulation liefert ein Ergebnis, das z.B. mit Messdaten verglichen werden kann. Wird dieser Vergleich für ausreichend gut befunden, so kann das Modell den beschriebenen Sachverhalt reproduzieren. Zeigt der Vergleich von Simulationsergebnis mit den Daten Abweichungen, so muss dass Modell verbessert werden.

Grob könnte man sagen, dass das Backen des Kuchens anhand des Backrezepts eine Simulation oder Realisierung ist.



Quelle: Pixabay

2 Empirische Modelle

Bei der empirischen Modellierung wird ausgehend von einem oder mehreren Datensätzen versucht, einen funktionalen Zusammenhang zu bestimmen, der diese Daten ausreichend gut reproduziert. Dabei ist es streng genommen unerheblich was der Datensatz beschreibt. Informationen, die über die Daten (Zahlen) hinausgehen, werden bei empirischen Modellen im allgemeinen nicht berücksichtigt.

2.1 Parameteranpassung

Bei der Parameteranpassung wird eine Funktion vorgegeben und die Parameter der Funktion anhand der Messdaten bestimmt. Es seien z.B. folgende Werte für die Wassertemperatur an der Nordseeküste gegeben (Abbildung 2.1): Diese Werte

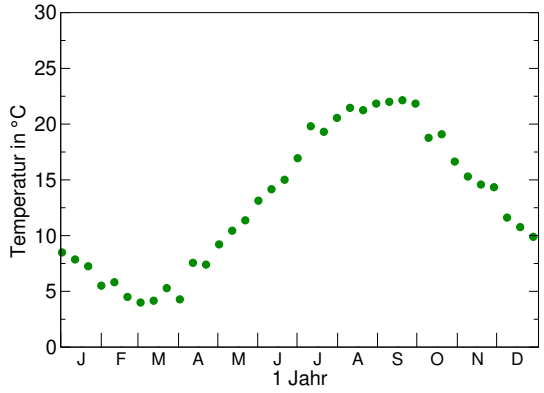
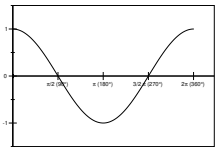
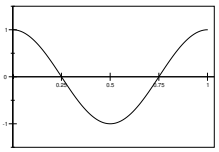
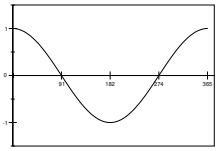
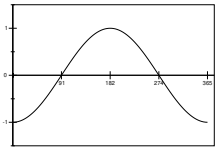
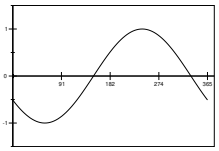
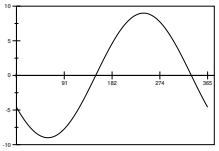
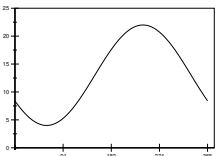


Abbildung 2.1: Beispiel eines Jahresgangs der Wassertemperatur an der Nordseeküste.

sollen nun durch eine Kosinusfunktion approximiert werden. Aus der Grafik erkennt man, dass der kälteste Zeitraum Mitte Februar bis Mitte März ist. Wir nehmen als kältesten Tag den Tag 60 an. Die kälteste gemessene Temperatur beträgt ca. 4 °C, die wärmste ca. 22 °C. Die Temperaturdifferenz beträgt somit18 °C, und die mittlere Temperatur ca. 13 °C. Die Kosinusfunktion soll nun so verändert werden, dass sie zu den Daten passt:

Die Kosinusfunktion:	$T = \cos(t)$	
Skalierung auf $[0, 1]$	$T = \cos(2\pi\, t)$	
Skalierung auf 1 Jahr	$T = \cos(\frac{2\pi\, t}{365})$	
Im Winter soll es kalt sein	$T = -\cos(\frac{2\pi\, t}{365})$	
Der kälteste Tag ist Tag 60	$T = -\cos(\frac{2\pi(t-60)}{365})$	
Die Amplitude beträgt9 °C	$T = -9\cos(\frac{2\pi(t-60)}{365})$	
Der Mittelwert beträgt 13 °C	$T = 13 - 9\cos(\frac{2\pi(t-60)}{365})$	

Man erhält so eine Kurve, die recht gut zu den Daten passt (Abbildung 2.2). Es bleibt die Frage offen, ob es eine bessere Anpassung gibt. Wenn man weiß, wie es geht, können die Zwischenschritte natürlich weggelassen werden.

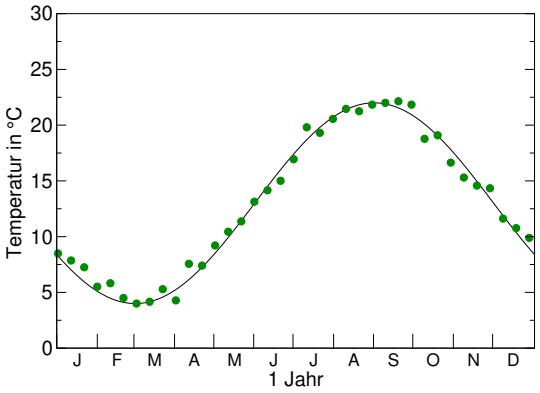


Abbildung 2.2: Jahresgang der Wassertemperatur an der Nordseeküste und daran angepasste Kosinusfunktion.

2.2 Lineare Regression

Im vorherigen Beispiel haben wir die Parameter der Kosinuskurve anhand weniger Charakteristika, wie die Lage der Extrema bestimmt. Im folgenden wird ein Verfahren beschrieben, dass die Anpassung einer Geraden an gegebene Messwerte unter Berücksichtigung aller Messwerte erreicht. Später werden wir sehen, dass das Verfahren auch für die Kosinusfunktion funktioniert.

Die lineare Regression ist ein statistisches Verfahren, mit dem versucht wird, eine beobachtete abhängige Variable durch eine oder mehrere unabhängige Variablen zu erklären. Bei der linearen Regression wird dabei ein lineares Modell angenommen. Im einfachsten Fall ist das lineare Modell eine Gerade $y = m \cdot x + b$ mit der unabhängigen Größe x und der abhängigen Größe y. Zu gemessenen Daten der Form (x_i, y_i) werden dann die Werte für m und b bestimmt, so dass die Gerade die Daten möglichst gut beschreibt.[1]

Beispiel: Wachstum einer Bohnenpflanze

Für das Wachstum einer Bohnenpflanze seien folgende Messwerte für die Zeit in Tagen seit der Pflanzung und die zu dieser Zeit gemessene Höhe der Bohne gegeben:

Zeit t in Tagen	3	5	10	15	20	30	40	50	60	70	80	100
Höhe y in cm	0.5	1	2	7	15	30	70	130	170	230	248	252

[1] In der Literatur findet man folgende Notation: $y_i = \beta_0 + \beta_1 \cdot x_i + \varepsilon_i$, i = 1...n Hier entspricht β_0 dem Parameter b und β_1 dem Parameter m. Der Fehler der Abweichung der Geraden vom tatsächlichen Wert ist hier ε_i, der normalverteilt ist. Die Parameter β_0 und β_1 heißen Regressionskoeffizienten.

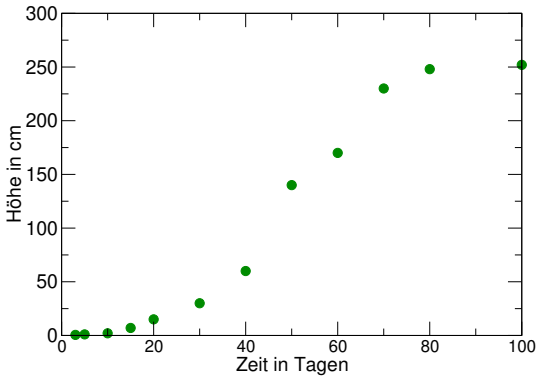


Abbildung 2.3: Messwerte des Bohnenwachstums.

In Abbildung 2.3 erkennt man, dass im Bereich zwischen dem 20. Tag und dem 70. Tag wahrscheinlich ein linearer Zusammenhang zwischen der Wachstumszeit und der Wachstumshöhe besteht. Diesen Zusammenhang kann man durch eine Geradengleichung beschreiben:

$$y = m \cdot t + b$$

Die Zeit t ist hier die unabhängige Größe, die Höhe y der Bohne die abhängige Größe. Man schreibt für die Zeit meistens t statt x. Wir wollen nun m und b bestimmen. Uns interessiert insbesondere m, die Steigung der Geraden. Sie ist ein Maß für die Wachstumsgeschwindigkeit. Eine solche Gerade kann man z.B. erhalten, wenn man zwei beliebige Punkte in diesem Bereich miteinander verbindet. Handelt es sich tatsächlich um einen linearen Zusammenhang und sind die Messungen nicht fehlerbehaftet, so kann man so die Steigung und damit die Wachstumsgeschwindigkeit erhalten. Liegen aber nicht alle Punkte auf dieser Geraden, so wird die Lage der Geraden von der Wahl der Punkte abhängen.

In der Realität wird aber weder das Wachstum exakt einem linearen Zusammenhang folgen (Bohnen wissen gar nicht, was das ist) noch wird man die Höhe derart exakt messen. In Abschnitt 2.2 wird daher ein Verfahren vorgestellt, eine Gerade zu bestimmen, die allen Punkten in diesem Bereich Rechnung trägt.

Aber nehmen wir mal beispielsweise die Gerade, die durch die Punkte bei $t = 20$ und $t = 70$ läuft, dann gilt:

$$\begin{aligned} 15 &= m \cdot 20 + b \\ 230 &= m \cdot 70 + b \end{aligned}$$

Auflösen ergibt $m = 4.3$ und $b = -71.0$.

Man kann die Steigung m auch erhalten, indem man ein Steigungsdreieck betrachtet:

$$m = \frac{\Delta y}{\Delta x} = \frac{230\,\text{cm} - 15\,\text{cm}}{70\,\text{Tage} - 20\,\text{Tage}}$$

Im betrachteten Zeitintervall wächst die Bohne also 4.3 cm/Tag.

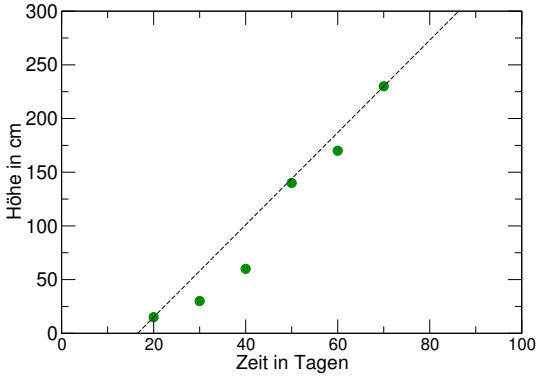


Abbildung 2.4: Bohnenwachstum: Messwerte und die Gerade, die durch die Punkte (20,15) und (70,230) geht.

Die Methode, nur zwei Punkte zu berücksichtigen, ist natürlich falsch, da sich Messfehler und Abweichungen in diesen Punkten stark auf die Lage der Geraden auswirken. Besser ist es alle Punkte zu berücksichtigen, die im Bereich des linearen Wachstums liegen. Hierzu gibt es die Methode der kleinsten Quadrate auch lineare Regression genannt.

Lineare Regression oder Methode der kleinsten Quadrate

Seien $t_1 < t_2 < \cdots < t_n$ die n Zeitpunkte, an denen die n Messwerte $y_1, y_2, \cdots, y_n$ gemessen wurden. Der Datenbereich des Beispiels aus Abschnitt 2.2, in dem lineares Wachstum angenommen wird, ist durch

Zeit t_i	20	30	40	50	60	70
Höhe y_i	15	30	70	130	170	230

gegeben.

Es soll nun eine Gerade $y(t) = m \cdot t + b$ so bestimmt werden, dass die Summe der Quadrate der Abweichungen von Messdaten und Geraden (Abbildung 2.5) minimal

wird.

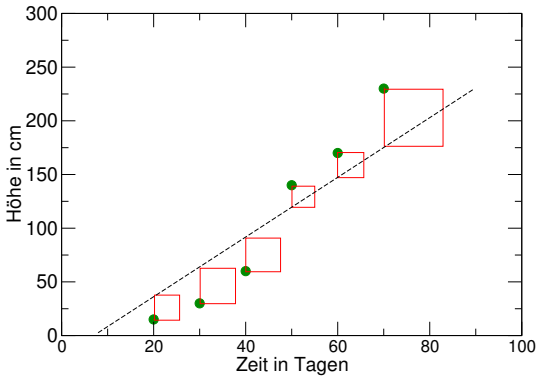


Abbildung 2.5: Bohnenwachstum: Messwerte, mögliche Gerade und ihre Abstandsquadrate.

$$Q(m,b) := \sum_{i=1}^{n}(y_i - y(t_i))^2 = \sum_{i=1}^{n}(y_i - (m \cdot t_i + b))^2$$

soll also minimal werden. Im Beispiel muss also

$$\begin{aligned} Q(m,b) &:= (15 - (m \cdot 20 + b))^2 + (30 - (m \cdot 30 + b))^2 + (70 - (m \cdot 40 + b))^2 \\ &+ (130 - (m \cdot 50 + b))^2 + (170 - (m \cdot 60 + b))^2 + (230 - (m \cdot 70 + b))^2 \end{aligned}$$

minimal werden.

Um das Minimum zu bestimmen, werden die partiellen Ableitungen von Q nach m und b bestimmt und gleich Null gesetzt:

$$\frac{\partial Q(m,b)}{\partial m} = 2\sum_{i=1}^{n}(y_i - (m \cdot t_i + b)) \cdot (-t_i) =: 0$$

$$\frac{\partial Q(m,b)}{\partial b} = 2\sum_{i=1}^{n}(y_i - (m \cdot t_i + b)) \cdot (-1) =: 0$$

Man erhält also zwei Gleichungen mit den zwei Unbekannten m und b. Formal muss man natürlich zeigen, dass es sich tatsächlich um ein Minimum handelt!

Methode der kleinsten Quadrate (lineare Regression)
Es seien n Messwerte $y_i, i = 1 \cdots n$ zu den Zeitpunkten $t_i, i = 1 \cdots n$ gegeben. Die Summe der Abstandsquadrate der Messwerte von der Geraden $y(t) = m \cdot t + b$ wird durch

$$m = \frac{\sum_{i=1}^{n} t_i \cdot y_i - n \cdot \bar{t} \cdot \bar{y}}{\sum_{i=1}^{n} t_i^2 - n \cdot \bar{t}^2} \qquad b = \bar{y} - m\bar{t}$$

mit den Mittelwerten $\bar{t} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} t_i$ und $\bar{y} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i$ minimiert.

Mit den Größen Varianz und Kovarianz ausgedrückt gilt $m = \frac{\mathrm{Cov}(t,y)}{V(t)}$ mit $V(t) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(t_i - \bar{t})^2$ und $\mathrm{Cov}(t,y) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(t_i - \bar{t}) \cdot (y_i - \bar{y})$.

Im Beispiel erhält man die Gerade

$$y = 4.44 \cdot t - 92.43$$

Das so bestimmte Wachstum beträgt also 4.44 cm pro Tag. In Abbildung 2.6 sieht man, dass die Gerade zwar keinen der Messpunkte genau trifft, aber trotzdem besser ist als die Gerade in Abbildung 2.3. Dies liegt daran, dass Ausreißer weniger stark einfließen.

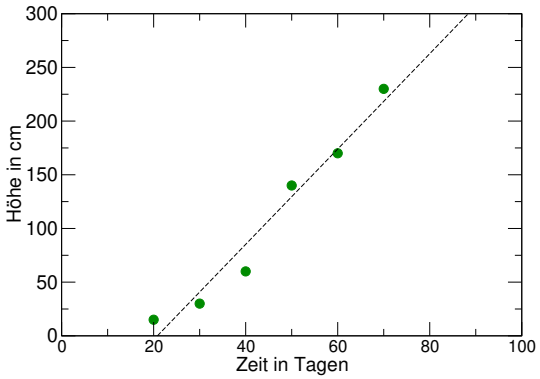


Abbildung 2.6: Bohnenwachstum: Messwerte, für die ein lineares Wachstum angenommen wird, und die Ausgleichsgerade, die sich nach der Methode der kleinsten Quadrate ergibt.

Das Verfahren der linearen Regression ist in vielen wissenschaftlichen Taschenrechnern und Tabellenkalkulationsprogrammen implementiert. Diese geben meistens zusätzlich zu den Parametern das sogenannte Bestimmtheitsmaß r^2 an. Hierbei ist

r durch

$$r = \frac{Cov(t, y)}{\sqrt{V(t) \cdot V(y)}}$$

gegeben. Das Bestimmtheitsmaß r^2 gibt den Anteil der durch die unabhängige Größe t erklärten Varianz an der Gesamtvarianz von y an. Liegen die Werte exakt auf einer Geraden, so ist $r^2 = 1$.

2.3 Logarithmischer Zusammenhang

Häufig folgen natürliche Prozesse keinem linearen Zusammenhang. Am folgenden Beispiel soll gezeigt werden, wie die Methode der linearen Regression auf Prozesse angewendet werden kann, die einem logarithmischen Zusammenhang folgen.

Beispiel: Karzinogenese bei Ratten
Durch Gabe von Diethylnitrosamin, kann bei Ratten Krebs ausgelöst werden. Je höher die tägliche Dosis ist, desto schneller entwickeln die Ratten einen Tumor. Die Zeit von der Diethylnitrosamingabe bis zur Ausbildung des Tumors heißt Latenzzeit. Es besteht folgender Zusammenhang

Dosis in mg/kg/Tag	0.075	0.15	0.3	0.6	1.25	2.5	5.0	10.0
Latenzzeit in Tagen	1020	645	480	360	265	225	150	120

Auf den ersten Blick kann man nicht entscheiden, welcher Zusammenhang besteht (Abbildung 2.7). Trägt man die Datenpunkte doppelt logarithmisch auf so erkennt

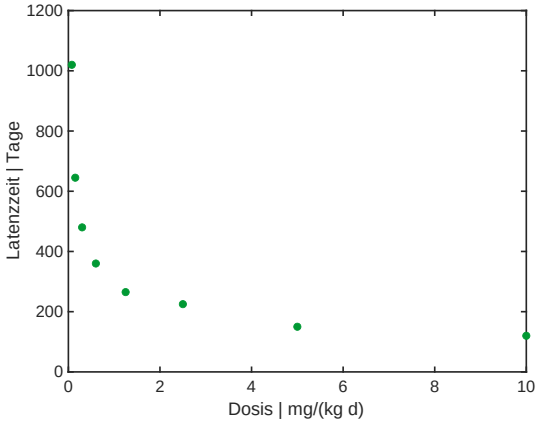


Abbildung 2.7: Karzinogenese bei Ratten. Aufgetragen sind die Dosis an Diethylnitrosamin und die zugehörige Zeit bis zur Ausbildung eines Tumors (Latenzzeit).

man den Zusammenhang (Abbildung 2.8). Doppelt logarithmisch bedeutet, dass sowohl die x- als auch die y-Achse logarithmisch sind. Hierbei ist es unerheblich, ob man die Achsenskalierungen logarithmisch wählt oder die Werte in der Tabelle logarithmiert und die Achsen linear skaliert (siehe Achsen in Abbildung 2.8). Es scheint ein linearer Zusammenhang zwischen dem Logarithmus der Dosis und dem Logarithmus der Latenzzeit zu bestehen:

$$\log(\text{Latenzzeit}) = m \cdot \log(\text{Dosis}) + b$$

Die Parameter m und b kann man nun mit der Methode der kleinsten Quadrate

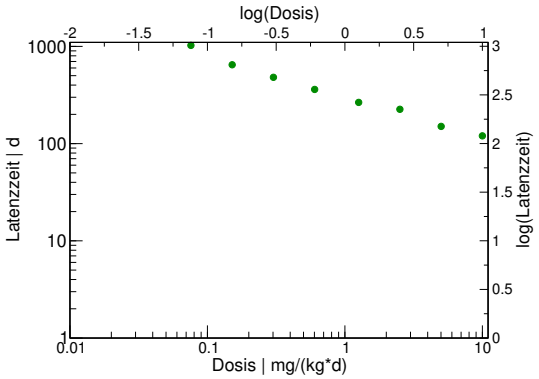


Abbildung 2.8: Karzinogenese bei Ratten. Aufgetragen sind die Dosis an Diethylnitrosamin und die zugehörige Zeit bis zur Ausbildung eines Tumors (Latenzzeit) in doppelt logarithmischer Darstellung.

bestimmen. Hierzu macht man sich zuerst die Wertetabelle der logarithmierten Werte. Man beachte, dass diese Werte keine Einheit haben!!:

log(Dosis)	-1.12	-0.82	-0.52	-0.22	0.1	0.4	0.7	1
log(Latenzzeit)	3.009	2.810	2.681	2.556	2.423	2.352	2.176	2.079

Man erhält $m = -0.42$ und $b = 2.48$.

Aus $\log(\text{Latenzzeit}) = m \cdot \log(\text{Dosis}) + b$ folgt

$$\text{Latenzzeit} = 10^{m \cdot \log(\text{Dosis}) + b} = 10^b \cdot \text{Dosis}^m \left(= e^{b \cdot \ln(10) + m \cdot \ln(\text{Dosis})} \right)$$

Im Beispiel gilt also

$$\text{Latenzzeit} = 10^{2.48} \cdot \text{Dosis}^{-0.42} \approx 302 \cdot \text{Dosis}^{-0.42}$$

Dieser funktionale Zusammenhang ist in Abbildung 2.9 dargestellt. Man hat nun eine Funktion, mit der man zu einer gegebenen Dosis die Latenzzeit bestimmen

kann. In der Praxis wird die tatsächliche Latenzzeit davon abweichen (Ratten sind keine Computer). Auch weiß man nicht, welchen Gültigkeitsbereich das Gesetz hat (bei sehr hohen Dosen werden die Ratten vermutlich viel schneller Tumore entwickeln, bei sehr niedrigen eventuell gar keine).

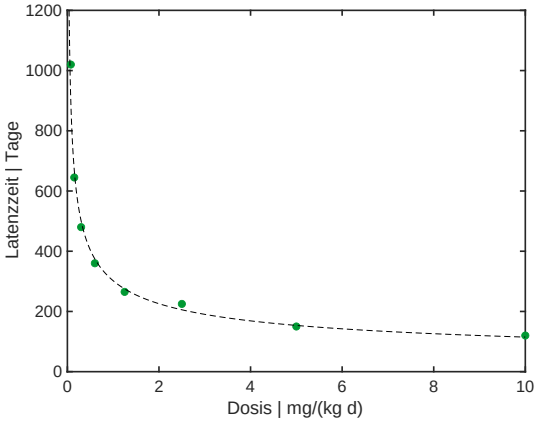


Abbildung 2.9: Karzinogenese bei Ratten. Aufgetragen sind die Dosis an Diethylnitrosamin und die zugehörige Zeit bis zur Ausbildung eines Tumors (Latenzzeit) sowie der funktionale Zusammenhang, der sich nach der Methode der kleinsten Quadrate ergibt.

2.4 Verallgemeinerung der linearen Regression

Weiß man, dass der Zusammenhang zwischen abhängiger und unabhängiger Variablen einem anderen Gesetz folgt, so kann man auch hierauf optimieren. Viele Softwarepakete und Taschenrechner haben hierzu eine Reihe von Funktionen implementiert:

$f(x) = \beta_1 x + \beta_0$	linear
$f(x) = \beta_2 x^2 + \beta_1 x + \beta_0$	quadratisch
$f(x) = \beta_3 x^3 + \beta_2 x^2 + \beta_1 x + \beta_0$	kubisch
...	...

Bei der Optimierung mit Hilfe der angegebenen Funktionen handelt es sich auch um lineare Regressionen, da die Parameter β_i nicht in höherer Potenz vorkommen. Allgemein handelt es sich um eine lineare Überlagerung von einfachen Funktionen:

$$f(x) = \sum_{j=1}^{J} \beta_j \cdot h_j(x)$$

Die Parameter β_j heißen **Regressionskoeffizienten** und es gilt $h_j(x) = x^j$.

Die Lösung eines Optimierungsproblems läuft analog wie im Falle der Geraden. Man leitet die Funktion der Summe der Abstandquadrate nach den Parametern

ab, setzt diese gleich Null und erhält J Gleichungen mit J Unbekannten.

2.4.1 Fourieranalyse *

Nun ist es nicht zwingend, dass die Funktionen h_j Potenzen von x sind. Hat man Messwerte, von denen man weiss, dass sie einer Periodizität unterliegen, wie z.B. der Temperaturverlauf eines Jahres, so kann man auch periodische Funktionen als Basis wählen. Das bekannteste Beispiel hierfür ist die Fourier-Analyse. Man wählt als Funktion eine Überlagerung aus Sinus- und Kosinusfunktionen:

$$h_k(t) = \cos(2\pi k\frac{t}{T}) \qquad g_k(t) = \sin(2\pi k\frac{t}{T})$$

wobei die Funktionen hier von der Zeit t abhängen und T die Periodenlänge ist. Der Index k gibt die Ordnungszahl der Harmonischen das Vielfache der Grundfrequenz $2\pi/T$ an. Diese basisfunktionen sind in Abbildung 2.10 dargestellt.

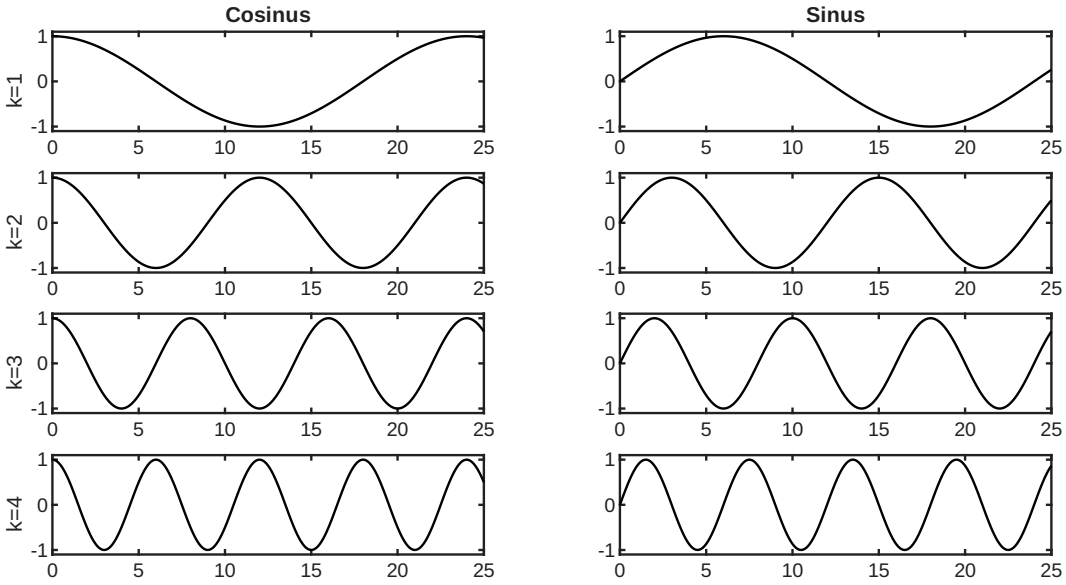


Abbildung 2.10: Basisfunktionen $h_k(t)$ und $g_k(t)$ der Fourieranalyse. Dargestellt ist jeweils die Grundwelle (k=1) und 3 Oberwellen k=2,3,4 für den Cosinus (links) und den Sinus (rechts) .

Die Funktion wird nun wie folgt rekonstruiert:

$$\begin{aligned} f(t, a_0, a_1, \ldots, a_J, b_1, \ldots, b_J) &= a_0 + \sum_{k=1}^{J} a_k \cdot h_k(t) + b_k \cdot g_k(t) \qquad (2.1) \\ &= a_0 + \sum_{k=1}^{J} \left(a_k \cdot \cos(2\pi k\frac{t}{T}) + b_k \cdot \sin(2\pi k\frac{t}{T}) \right) \end{aligned}$$

Der erste Term a_0 beschreibt den Mittelwert oder auch Gleichanteil, der Laufindex k ist die Ordnungszahl der Harmonischen, dem Vielfachen der Grundfrequenz $2\pi/T$. Die Grundfrequenz ($k = 1$) ergibt die sogenannte erste Harmonische, für $k = 2$ erhält man die 2. Harmonische oder auch erste Oberwelle, usw. Sind die Stützwerte t_i der Messwerte y_i, $i = 1, \ldots, N$ äquidistant über die Periode T verteilt, so ergibt sich für die optimalen Parameter

$$a_0^* = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} y_i \qquad a_k^* = \frac{2}{N}\sum_{i=1}^{N} y_i \cdot \cos(2\pi k\frac{t_i}{T}) \qquad b_k^* = \frac{2}{N}\sum_{i=1}^{N} y_i \cdot \sin(2\pi k\frac{t_i}{T}) \tag{2.2}$$

Gleichung 2.1 nennt man **Fouriersumme** (für $J \to \infty$ **Fourierreihe**). Die Koeffizienten a_k, b_k (2.2) heißen **Fourierkoeffizienten**. Sie sind hier die Regressionskoeffizienten. Die Zahl der zu bestimmenden Koeffizienten ist $2J + 1$, daher muss die Zahl der äquidistanten Messwerte N mindestens dieser Anzahl entsprechen:

$$N \geq 2J + 1 \tag{2.3}$$

Diese Beziehung findet man unter dem Begriff **Abtasttheorem**. Andersherum ausgedrückt, wenn man N äquidistante Abtastwerte hat, kann man das Signal maximal bis zur Harmonischen J rekonstruieren.

Für die Fourieranalyse gibt es viele verschiedene Darstellungsweisen. So kann man als Basisfunktionen nur Kosinusfunktionen nehmen oder auch komplexe Exponentialfunktionen. Daher ist es schwierig, sich in der Literatur zurechtzufinden, da alle Notationen sehr ähnlich aussehen. Glücklicherweise muss man dies alles nicht selber programmieren. Für viele Programmpakete, wie z.B. MatLab oder R gibt es getestete Implementierungen der Fourieranalyse.

Beispiel: Temperatur an einem Septembertag

In diesem Beispiel liegen nun stündliche Temperaturdaten eines Septembertages vor (Abbildung 2.11). Diese sollen nun mit Hilfe der Fourieranalyse und anschließender Synthese durch eine Überlagerung von Sinus und Kosinusfunktionen beschrieben werden. Die Anzahl der Messwerte is N=24. damit ergibt sich für die Anzahl der Harmonische J=11 ($N \geq 2J + 1$). Das Ergebnis ist in Abbildung 2.12

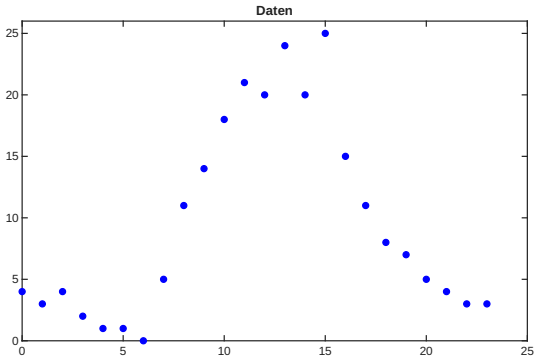


Abbildung 2.11: Temperaturdaten an einem Septembertag.

(rechts) zu sehen. Die einzelnen Messdaten werden von der Funktion getroffen. In

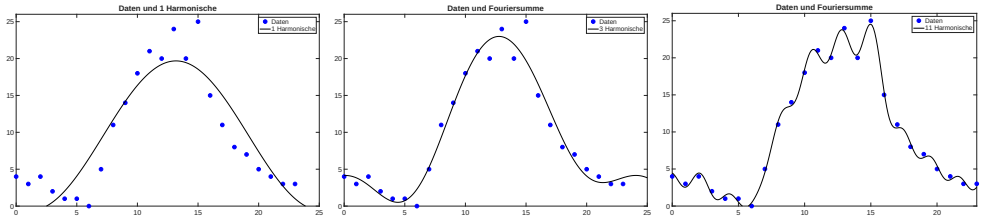


Abbildung 2.12: Fouriersynthese. Dargestellt sind die Messwerte zusammen mit der Synthese aus 1, 2 und 11 Harmonischen (von links nach rechts).

Abbildung 2.12 (links) sieht man die Approximation durch die Grundwelle (1. Harmonische).Die zugehörige Funktion bis zur 1. Harmonischen lautet entsprechend Gleichung (2.1)

$$f(t, a_0, a_1, b_1) = a_0 + a_1 \cdot \cos(2\pi \frac{t}{T}) + b_1 \cdot \sin(2\pi \frac{t}{T}) \tag{2.4}$$

$$= a_0 + A \cdot \cos(2\pi \frac{t}{T} + \varphi) \tag{2.5}$$

mit den Parametern $a_0 = 9.46$, $a_1 = -9.54$, $b_1 = -2.96$ (gerundet). Die letzte Zeile ergibt sich aus den Additionstheoremen für trigonometrische Funktionen, wobei $A = \sqrt{a_1^2 + b_1^2}$ und $\tan\varphi = -\frac{b_1}{a_1}$ gilt.[2] Damit handelt es sich bei der 1. Harmonischen um eine phasenverschobene Kosinusfunktion. Dies entspricht in etwa dem Ergebnis zu den Nordseedaten, das in Abschnitt 2.1 beschrieben wurde. Nur dass hier aufgrund der Konstruktion über die Methode der kleinsten Quadrate die beste Anpassung gefunden wird. Man kann so auch die gesamte Fouriersumme (Gleichung 2.1) nur mit Kosinusfunktionen darstellen. Man hat dann als Parameter die Amplituden A_k und die Phasenwinkel φ_k. Diese Darstellung nennt man auch spektrale Darstellung. In Abbildung 2.13 sind exemplarisch ein paar Harmonische

[2] Es gilt: $\cos(x + y) = \cos x \cdot \cos y - \sin x \cdot \sin y$
Ansatz: $A \cdot \cos(x + \varphi) = A \cdot \cos x \cdot \cos\varphi - A \cdot \sin x \cdot \sin\varphi = a_1 \cdot \cos x + b_1 \cdot \sin x$

einzeln dargestellt. Man sieht gut, wie sich die Frequenz mit zunehmender Zahl erhöht. Summiert man den Wert jeder Harmonischen zusammen mit dem Gleichanteil zu jedem Zeitpunkt auf, so erhält man gerade den rekonstruierten Wert zu diesem Zeitpunkt.

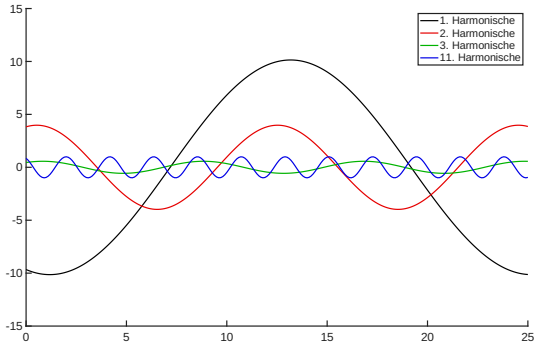


Abbildung 2.13: Darstellung der 1. , 2., 3. und 11. Harmonischen.

Beispiel: Heizungsthermostat

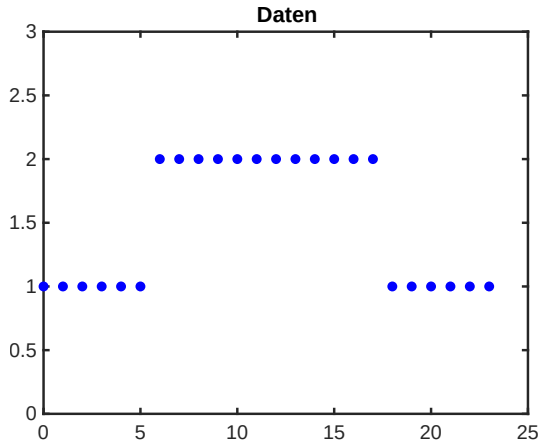


Abbildung 2.14: Solltemperaturen eines Heizungsthermostats.

Nehmen wir an, dass eine Heizung so gesteuert wird, dass sie nachts 18°C und tagsüber 21°C erreichen soll. Dieses Schema kann man nun z.B. über stündliche Angaben wie in Abbildung 2.14 erreichen. Will man dies durch eine einzelne Funktion ausdrücken, so geht dies genauso wie bei dem Beispiel zuvor. Schaut man sich auch hier einzelne Harmonische an (Abschnitt 2.16), so fällt auf, dass hier die geraden Harmonischen Null sind. In der spektralen Darstellung (Gleichung 2.5) bedeutet dies, dass alle Phasenwinkel $\varphi_k = 0$ sind, also keine Phasenverschiebung vorkommt. Zwischen den vorgegebenen Zeitpunkten (zwischen den vollen Stunden) entspricht das Ergebnis nicht unserer intuitiven Erwartung. Für diese Werte liegt aber keine Information vor, da die Synthese sicher nur 24 Werte exakt trifft (Abtasttheorem).

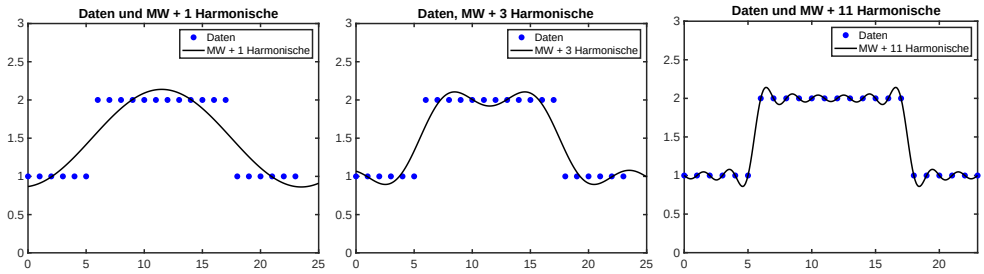


Abbildung 2.15: Fouriersynthese. Dargestellt sind die Messwerte zusammen mit der Synthese von 1, 3 und 11 Harmonischen (von links nach rechts).

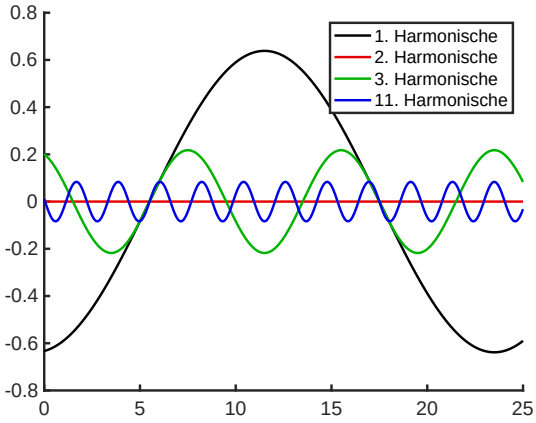


Abbildung 2.16: Einzelne Harmonische. Dargestellt sind exemplarisch die 1. 2. 3. und 11. Harmonische

Beispiel: Jahresgang der Wassertemperatur

Zu Beginn haben wir in Abschnitt 2.2 eine Kosinusfunktion „von Hand“ an die Daten der Wassertemperatur in der Nordsee angepasst. Wenn man dies mittels der Fourieranalyse durchführt, erhält man das Ergebnis in Abbildung 2.17. Man erkennt, dass die Messwerte durch die Fouriersynthese genau getroffen werden.

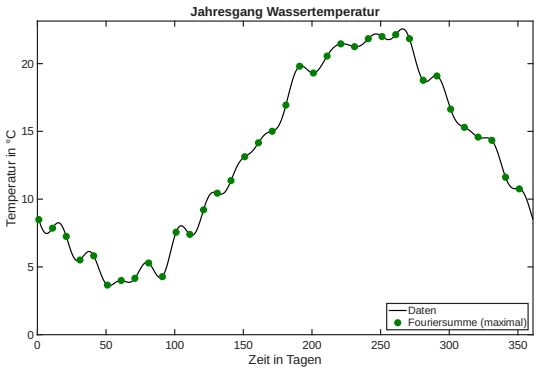


Abbildung 2.17: Daten aus 2.1 und Fouriersynthese bis zur Harmonischen.

3 Eindimensionale diskrete Modelle

Im vorherigen Kapitel haben wir ausgehend von Messwerten einen funktionalen Zusammenhang hergestellt. Häufig ist man aber nicht nur an der Rekonstruktion von Daten interessiert (oder es gibt gar keine Daten) sondern man möchte die Zusammenhänge und Prozesse eines natürlichen Systems verstehen. In diesem Fall fragt man die Experten, z.B. Biologen oder Physiker, wie sich das System, das man durch ein Modell beschreiben möchte, verhält[1]. Modelle, die auf den dem System zu Grunde liegenden Prozesse basieren, nennt man auch prozessorientierte Modelle.

3.1 Beispiel Bohnenwachstum

Aus den empirischen Messungen des Wachstums der Bohnenpflanze wissen wir, dass die Pflanze in der Hauptwachstumsphase mit einer Wachstumsrate von $m = 4.4\,\text{cm/Tag}$ wächst. Somit können wir ein Modell für die Hauptwachstumsphase aufstellen. Am Tag 0 der Hauptwachstumsphase (Tag 20 seit der Keimung) ist die Pflanze 15 cm hoch. Wir bezeichnen diesen Tag mal mit t_0 und den zugehörigen Wert mit x_0. Anhand dieser Information stellen wir folgendes Wachstumsmodell auf:

Zeit	**Bohnenhöhe**
t_0 (Tag 20)	x_0
t_1 (Tag 21)	$x_1 = x_0 + m$
t_2 (Tag 22)	$x_2 = x_1 + m = x_0 + m + m = x_0 + 2 \cdot m$
$\vdots$	$\vdots$
t_n (Tag 20+n)	$x_n = x_{n-1} + m = x_0 + n \cdot m$
t_{n+1} (Tag 20+n+1)	$x_{n+1} = x_n + m = x_0 + (n+1) \cdot m$

Dies ist das Modell des **linearen Wachstums** oder auch **arithmetischen Wachstums**. Für das Beispiel des Bohnenwachstums gilt das Modell nur für die Hauptwachstumsphase, also bis n=50 (Tag 70).

[1] Das Wissen der Experten basiert dabei im allgemeinen natürlich auch auf Messungen und deren Interpretation.

Allgemein können wird das Modell mit dem Startwert x_0 auf verschiedene Arten aufschreiben:

1. $x_n = x_{n-1} + m \qquad n = 1, 2, ...$
2. $x_{n+1} = x_n + m \qquad n = 0, 1, 2, ...$
3. $x_n = x_0 + n \cdot m \qquad n = 1, 2, ...$
4. $x_{n+1} = x_0 + n \cdot m \qquad n = 0, 1, 2, ...$

Die ersten beiden Formen nennt man **implizite Darstellung**en, da der Folgewert aus dem vorherigen berechnet wird. Die letzteren beiden sind **explizite Darstellung**en, da der Wert jeweils direkt aus dem Startwert x_0 bestimmt wird. Es handelt sich aber bei allen Darstellungen um dasselbe Modell.

3.2 Beispiel Bakterienwachstum

Aus der Mikrobiologie sei bekannt, dass sich Bakterien einer bestimmten Art ca. alle 20 Minuten teilen. Wir nehmen vereinfachend an, dass sich dabei auch die Bakterienbiomasse alle 20 Minuten verdoppelt. Ein Bakterium hat in etwa einen Durchmesser von 0.5 μm.

Zielfrage: Wie viele Bakterien entstehen aus einer vorgegebenen Anzahl in einer vorgegebenen Zeit?

Anhand der uns zur Verfügung stehenden Information stellen wir folgendes Wachstumsmodell auf:

Zeit	**Bakterienzahl**
$t_0 = 0\,\text{min}$	x_0
$t_1 = 20\,\text{min}$	$x_1 = 2 \cdot x_0$
$t_2 = 40\,\text{min}$	$x_2 = 2 \cdot x_1 = 2 \cdot 2 \cdot x_0$
$\vdots$	$\vdots$
$t_n = n \cdot 20\,\text{min}$	$x_n = 2 \cdot x_{n-1} = 2 \cdot \cdots \cdot 2 \cdot x_0 = 2^n \cdot x_0$
$t_{n+1} = (n+1) \cdot 20\,\text{min}$	$x_{n+1} = 2 \cdot x_n = 2 \cdot \cdots \cdot 2 \cdot x_0 = 2^{n+1} \cdot x_0$

Man erhält das **Wachstumsmodell des exponentiellen Wachstums** in **expliziter Darstellung**.[2]. Das Modell wird in Form einer mathematischen Folge aufgeschrieben (siehe Anhang A.1.1) , entweder explizit als

$$x_n = 2^n \cdot x_0 \quad n = 1, 2, ...$$

oder in **impliziter (rekursiver) Darstellung**

$$x_n = 2 \cdot x_{n-1} \quad n = 1, 2, ...$$

wobei jeweils x_0 als Anfangswert vorgegeben wird. Die implizite Darstellung wird häufig auch in der Form

$$x_{n+1} = 2 \cdot x_n \quad n = 0, 1, 2, ...$$

geschrieben. Beide Darstellungen beschreiben dasselbe Modell. Der Unterschied liegt nur in der Indizierung.

Das Modell kann man auch mit der e-Funktion aufschreiben. Dazu formt man die explizite Darstellung mit Hilfe der Rechenregeln für Exponentialfunktionen und Logarithmen (siehe Anhang A.4) um:

$$2^n = \exp(\ln 2^n) = \exp(n \cdot (\ln 2))$$

Überprüfung der Plausibilität des Modells

Zunächst müssen wir überprüfen, ob das Modell plausibel ist, d.h., dass es der Realität entspricht. Wir stellen die Frage:

Wie viele Bakterien gibt es nach einem Tag und welches Volumen nehmen sie ein ?

[2]Beweis der expliziten Formel durch vollständige Induktion *:
Induktionsanfang: $n = 0 : x_0 = 2^0 \cdot x_0$
Induktionsschritt $n - 1 \rightarrow n$:
Es gelte $x_{n-1} = 2^{n-1} \cdot x_0$, dann ist $x_n = 2 \cdot x_{n-1} = 2 \cdot 2^{n-1} \cdot x_0 = 2^n \cdot x_0$.

Ein Tag hat 24·3·20 Minuten, entspricht also 72 Zeitschritten. Unter der Annahme, dass zu Anfang ein Bakterium existiert, hat man nach 72 Zeitschritten

$$x_{72} = 2^{72} = 10^{72 \log 2} \approx 10^{21.674} \approx 4.7 \cdot 10^{21} \qquad \text{Bakterien.}$$

Nun, solch eine Zahl sagt uns anschaulich nicht viel [3] Schauen wir uns daher das Volumen an. Wir nehmen der Einfachheit halber an, dass die Bakterien kugelförmig sind und trotzdem dicht an dicht (ohne Lücken) gepackt liegen. Damit unterschätzen wir das tatsächliche Volumen. Das Volumen V_B eines Bakteriums mit einem Durchmesser von
$d = 0.5\,\mu m = 0.5 \cdot 10^{-6}\,m$ beträgt

$$V_B = \frac{4}{3}\pi \left(\frac{d}{2}\right)^3 = \frac{4}{3}\pi \left(0.25 \cdot 10^{-6}\right)^3 m^3 = \frac{1}{48}\pi \cdot 10^{-18} m^3$$

Das Gesamtvolumen V beträgt also nach einem Tag

$$V = x_{72} \cdot V_B = 47 \cdot 10^{20} \cdot \frac{1}{48} \cdot \pi \cdot 10^{-18} m^3 \approx 3 \cdot 10^2\, m^3$$

Dieses Volumen entspricht einem Quader der Kantenlänge $3\,m \times 10\,m \times 10\,m$, also in etwa einem großen Seminarraum. Upps, das kann irgendwie nicht richtig sein! Vielleicht ist die von uns angenommene Wachstumsrate zu groß. Bisher ist die Zahl der Bakterien, die pro Zeitschritt hinzukommt, genauso groß wie die Zahl bereits existierender Bakterien. Die Änderung der Zellzahl ist also zu jeder Zeit die Zellzahl selbst:

$$x_{n+1} = 2 \cdot x_n = x_n + x_n = x_n + 1 \cdot x_n$$

Die Wachstumsrate beträgt somit 1. Bei einem Zeitschritt von 20 min entspricht dies also gerade der Verdopplung, die uns aus der Mikrobiologie genannt wurde. Vielleicht müssen wir diese Wachstumsrate verringern. Setzen wir anstelle von 1 nun den Kontrollparameter r ein, so erhalten wir folgendes Modell:

$$x_{n+1} = x_n + r \cdot x_n = (1 + r) \cdot x_n \qquad r \in \mathbb{R}^+ \tag{3.1}$$

[3] Zum Vergleich: Avogadro-Konstante (Anzahl Teilchen pro Mol): $N_A \approx 6,022 \cdot 10^{23}$. Diese Anzahl ist also in etwa 128 mal größer als die von uns berechnete. Damit hat ein Diamant (12g Kohlenstoff/Mol) der Masse $M = 12\,g : 128 \approx 0.093\,g$ die von uns bei den Bakterien errechnete Anzahl an Atomen. Das Volumen dieses Diamanten (Dichte $\varrho = 3.52\,g/cm^3$) beträgt
$V = 0.093\,g : 3.52\,g/cm^3 = 0.0266 cm^3 = 26.6\,mm^3$.
Dies entspricht einem Würfel mit Kantenlänge 3 mm.

Wir erhalten nun folgende explizite Darstellung:

$$x_{n+1} = (1+r) \cdot x_n = (1+r) \cdot (1+r) \cdot x_{n-1} = \ldots = (1+r)^{n+1} \cdot x_0$$

oder anders geschrieben

$$x_n = x_0 \cdot (1+r)^n = x_0 \cdot e^{\ln(1+r)^n} = x_0 \cdot e^{n \cdot \ln(1+r)}$$

Es handelt sich also auch hier um das Modell des exponentiellen Wachstums. Für r=1 haben wir unser bisheriges Modell. Wir könnten nun r verringern, aber für jede Wachstumsrate $r > 0$ wächst die Zahl der Bakterien schließlich über alle Grenzen. (Abbildung 3.1). Ein Matlab-Code zur expliziten Berechnung des exponentiellen

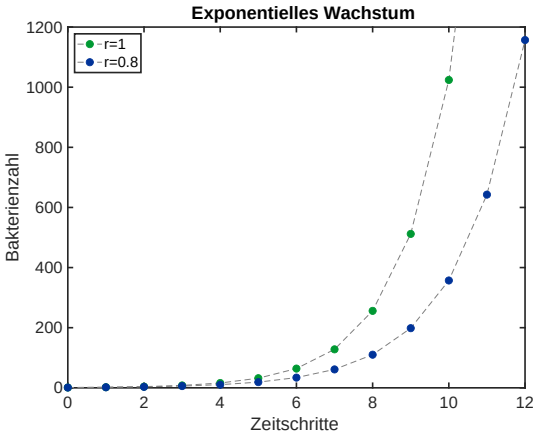


Abbildung 3.1: Vergleich des exponentiellen Wachstums für die Wachstumsrate $r = 1$ (grün) und $r = 0.8$ (blau).

Wachstums ist in Listing 3.1 angegeben.

Listing 3.1: Matlab-Code zur expliziten Berechnung des exponentiellen Wachstums

```
r=1;        % parameter
n=1:10;       % time steps
x0=1;         % initial value
x=x0*(1+r).^n;% calculating values
plot(x,'k*')  % plotting values
```

Die implizite Darstellung kann man in Matlab wie in Listing 3.2 angegeben numerisch lösen[4].

Achtung: MatLab beginnt mit der Indizierung bei 1. Somit ist der Startwert in x(1) und der 10. Wert in x(11).

Listing 3.2: Matlab-Code zur impliziten Berechnung des exponentiellen Wachstums

[4] Geht in MatLab allerdings auch eleganter

```
x(1)=1; % initial value
N=10; % number of time steps
r=1;  % parameter
% loop until N
for n=1:N
   x(n+1)=x(n)+r*x(n);
end
plot(x,'k*')  % plotting values
```

3.3 Logistisches Wachstum

Nun, irgendetwas ist also im Bakterienmodell immer noch falsch. Wir haben bisher eine sehr grobe Zielfrage im Auge gehabt. Anfangs wurde nicht spezifiziert, für welche Zeiträume das Modell Gültigkeit haben soll. Wenn wir die Zahl der Bakterien nach wenigen Stunden bestimmen, so scheint das Modell plausible Ergebnisse zu liefern.

Wir müssen also entweder den Gültigkeitsbereich einschränken oder das Modell an den gewünschten Gültigkeitsbereich anpassen. Zuerst stellt sich die Frage, warum der Gültigkeitsbereich eingeschränkt ist.

Bakterien brauchen zum Wachstum Nährstoffe und Sauerstoff[5]. Lässt man eine Bakterienkultur in einer Petrischale auf Nährlösung wachsen, so wird die Nährlösung nach und nach verbraucht. Je dicker der Bakterienrasen wird, desto schlechter werden innen liegende Zellen mit Sauerstoff und Nährstoffen versorgt. Es gibt also eine Nährstofflimitierung und eine Limitierung durch den zur Verfügung stehenden Platz. Bakterien werden also mit abnehmendem Nährstoff- und Raumangebot immer langsamer wachsen und sich dementsprechend auch immer seltener teilen. Wir müssen die Wachstumsrate mit zunehmender Bakterienzahl abnehmen lassen, also

$$x_{n+1} = x_n + R(x_n) \cdot x_n$$

wobei R nun eine Funktion der Bakterienzahl ist, die monoton fallend sein soll, also z.B. $R(x) = r \cdot (1 - \frac{x}{K})$ (Abb. 3.2) mit der Kapazität K und der maximalen Wachstumsrate r. Für sehr kleine Bakterienzahlen beträgt R nahezu r, und wird immer kleiner, je mehr sich die Zahl der Bakterien der Kapazität K nähert. Wir

[5] Sofern es sich um aerobe Bakterien handelt.

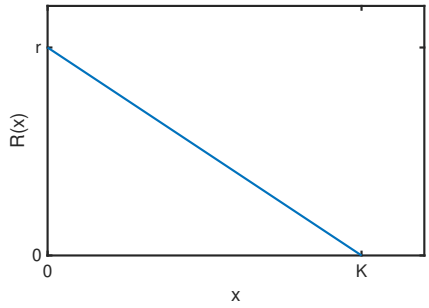


Abbildung 3.2: Verringerung der Wachstumsrate mit zunehmender Bakterienzahl. Die Funktion $R(x) = r \cdot (1 - \frac{x}{K})$.

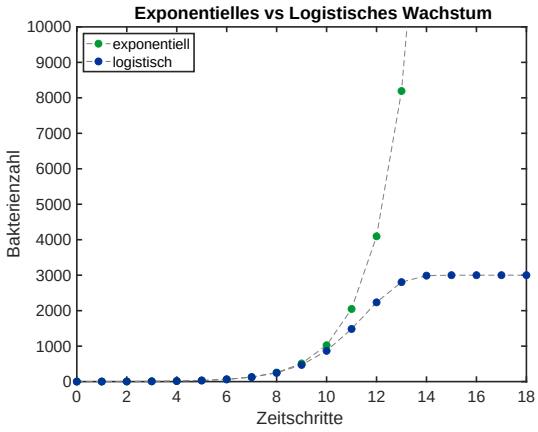


Abbildung 3.3: Vergleich zwischen exponentiellem Wachstum und logistischem Wachstum mit $r = 1$ und $K = 3000$. Der Startwert ist jeweils $x_0 = 1$.

erhalten also das verbesserte Modell:

$$x_{n+1} = x_n + r \cdot \left(1 - \frac{x_n}{K}\right) \cdot x_n$$

Dieses ist das **Modell des logistischen Wachstums**. Für kleine Bakterienzahlen wächst die Population nahezu ungebremst. Je größer die Population wird, desto langsamer wächst sie (Abbildung 3.3). Ist die Zellzahl sehr klein gegenüber der Kapazität, beträgt die Wachstumsrate nun in etwa r.

Die rechte Seite kann man nun als Funktion der Zellzahl x schreiben. Sie gibt an, wie groß die Zellzahl im jeweils nächsten Zeitschritt ist:

$$f(x) = x + r \cdot \left(1 - \frac{x}{K}\right) \cdot x = -\frac{r}{K}x^2 + (1 + r) \cdot x$$

Die Zellzahl ist also als Funktion der Zellzahl im vorherigen Zeitschritt zu verstehen. In Abbildung 3.4 ist der Graph der Funktion f für $r = 1$ gegeben. Es handelt sich um eine nach unten geöffnete und nach rechts verschobene Parabel.

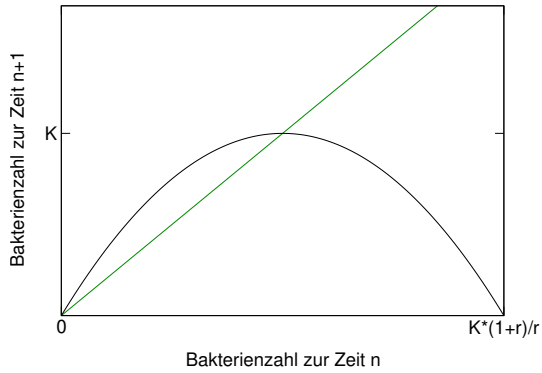


Abbildung 3.4: "Rechte Seite" des Modells zum logistischen Wachstum für r = 1 (schwarz) und die Gerade y = x (grün).

Es gilt:

- f(0)=0, d.h wenn keine Bakterien da sind, entstehen auch keine,
- f(K)=K, wenn die Bakterienzahl gerade gleich der Kapazität ist, verändert sie sich nichts mehr,
- für $0 < x < K$, gilt $f(x) > x$, die Zellzahl nimmt zu,
- für $x > K$, gilt $f(x) < x$, die Zellzahl nimmt ab.

Der Schnittpunkt der Geraden $y = x$ mit dem Graphen der Funktion gibt gerade die Zellzahlen an, bei denen sich nichts mehr ändert, also $f(x) = x$ gilt. In unserem Beispiel also, wenn

$$x + r \cdot \left(1 - \frac{x}{K}\right) \cdot x = x \quad \text{oder} \qquad r \cdot \left(1 - \frac{x}{K}\right) \cdot x = 0$$

gilt. Dies gilt für $x = 0$ und $x = K$.

Man kann das Modell auch graphisch simulieren. Dazu wählt man einen Anfangswert für die Zellzahlen und bestimmt die Zellzahlen der folgenden Schritte, wie in Abbildung 3.5 dargestellt.

Vergrößert man die Wachstumsrate r passieren merkwürdige Dinge. Das System erreicht nicht mehr zwingend den Fixpunkt bei K sondern oszilliert oder macht sogar Chaos (Abbildung 3.6). Dies ist eine Folge des diskreten Zeitschritts. Befindet sich das System zur Zeit $n-1$ unterhalb der Kapazität und ist die Wachstumsrate groß, schießt es mit dem nächsten Schritt n über die Kapazität hinaus. Im Schritt $n+1$ fällt es dann wieder unter K. Um dieses Verhalten zu vermeiden, muss man den Zeitschritt verkleinern, infinitesimal werden lassen. Dies wird in Kapitel 4 behandelt.

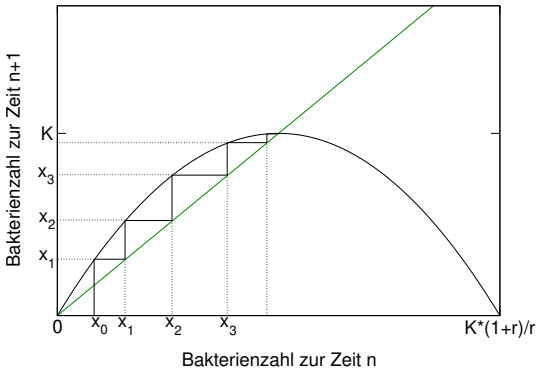


Abbildung 3.5: "Rechte Seite" des Modells zum logistischen Wachstum mit grafischer Lösung (Cobweb plot)

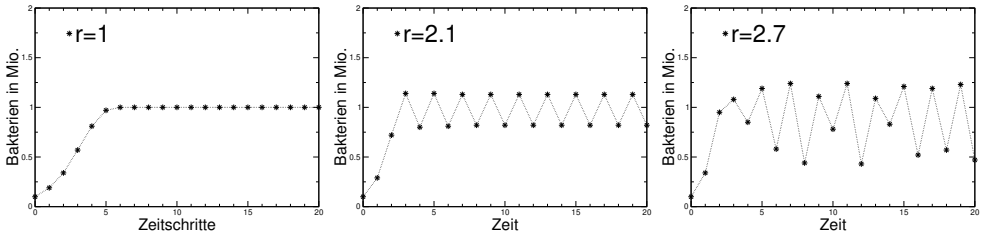


Abbildung 3.6: Logistisches Wachstum für die Wachstumsraten r = 1.0 (links), r = 2.1 (Mitte) und r = 2.7 (rechts). Startwert x_0 = 0.1 Mio., K= 1 Mio.

Trägt man die Lösung des Systems (ohne die ersten Schritte, in denen sich das System noch einschwingt) über der Wachstumsrate r auf so erhält man ein sogenanntes **Bifurkationsdiagramm** (Abbildung 3.7).

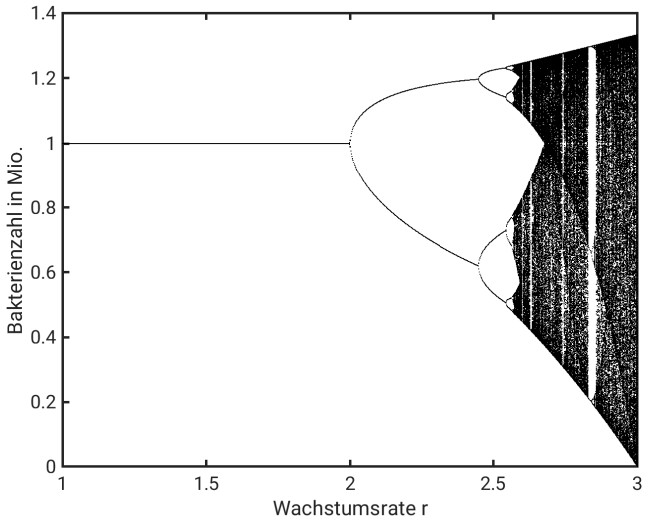


Abbildung 3.7: Bifurkationsdiagramm des logistischen Wachstums.

3.4 Zusammenfassung der Wachstumstypen

Bisher haben wir das lineare, dass exponentielle und das logistische Wachstum betrachtet. Das lineare Wachstum ist durch einen konstanten Zuwachs, das exponentielle Wachstum durch eine konstante Wachstumsrate gekennzeichnet. Beim exponentiellen Wachstum ist das Wachstum proportional zum aktuellen Wert, wobei die konstante Wachstumsrate gerade die Proportionalitätskonstante ist. Es ist durch einen unbegrenzten immer steiler werdenden Anstieg gekennzeichnet. Das exponentielle Wachstum lässt sich leicht in rekursiver und expliziter Darstellung aufschreiben. Beim logistischen Wachstum nimmt die Wachstumsrate mit zunehmenden Wert der betrachteten Größe linear ab. Das logistische Wachstum ist dadurch gekennzeichnet, dass das Wachstum mit zunehmender Größe (Abundanz) immer geringer wird und auf die sogenannte Kapazität zustrebt.

Arithmetisches Wachstum (lineares Wachstum)

rekursive Darstellung: $x_{n+1} = x_n + m$
explizite Darstellung: $x_n = x_0 + n \cdot m$

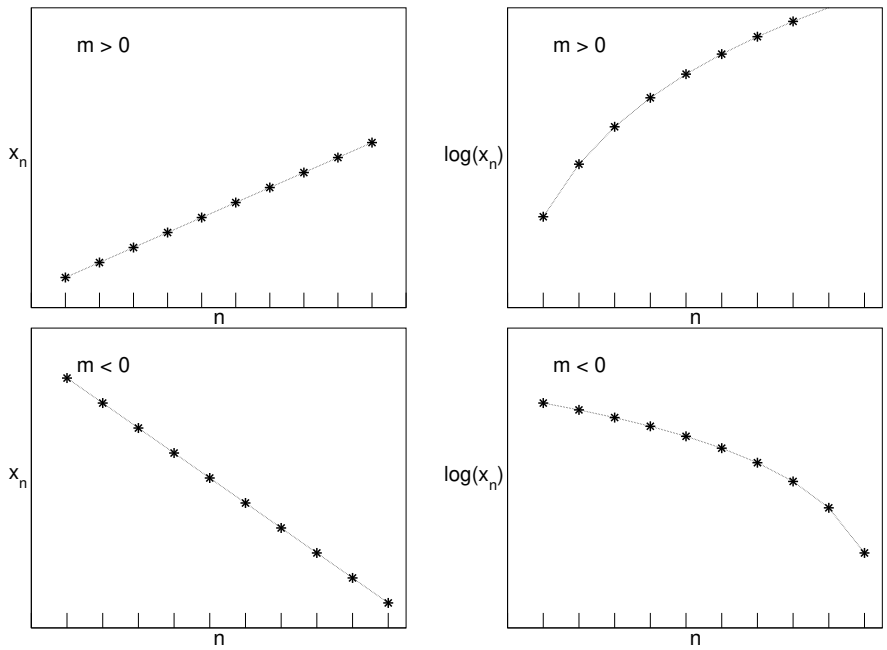


Abbildung 3.8: Arithmetisches Wachstum in linearer Darstellung (links) und logarithmischer Darstellung (rechts) für positiven Wachstumsparameter (oben) und negativen Wachstumsparameter (unten).

Exponentielles Wachstum

rekursive Darstellung: $x_{n+1} = r \cdot x_n$

explizite Darstellung: $x_n = x_0 \cdot r^n = x_0 \cdot e^{\ln(r) \cdot n}$

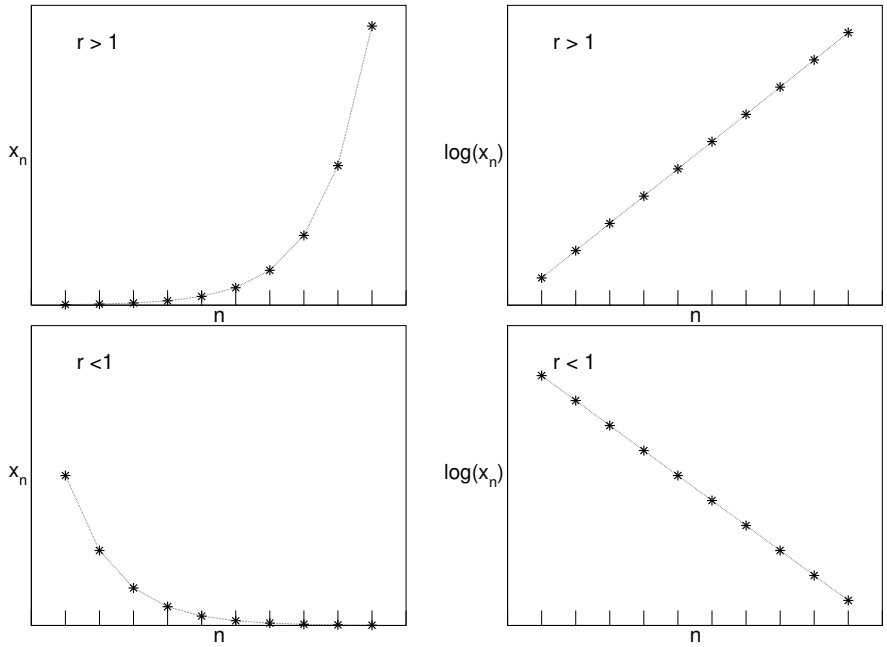


Abbildung 3.9: Exponentielles Wachstum in linearer Darstellung (links) und logarithmischer Darstellung (rechts) für $r > 1$ (oben) und $r < 1$ (unten).

Logistisches Wachstum

rekursive Darstellung: $x_{n+1} = x_n + r \cdot (1 - \frac{x_n}{K}) \cdot x_n$, $0 < x_0 < K$, $r > 0$, r klein

In der logarithmischen Darstellung sieht man, dass das Wachstum zu Beginn nahezu exponentiell ist.

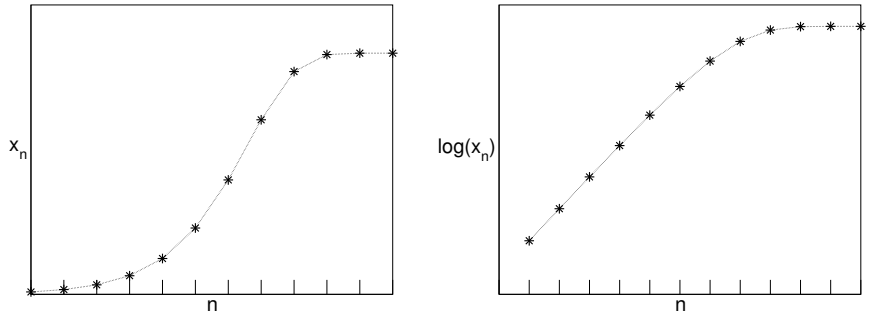


Abbildung 3.10: Logistisches Wachstum in linearer Darstellung (links) und logarithmischer Darstellung (rechts) für kleines $r > 0$.

4 Eindimensionale Differentialgleichungsmodelle

4.1 Exponentielles Wachstum

Gehen wir noch einmal zurück zu dem diskreten Modell des exponentiellen Wachstums (Gleichung 3.1) aus Abschnitt 3.2:

$$x_{n+1} = x_n + r \cdot x_n$$

Dieses Modell berechnet zu einem Anfangswert x_0 die Bakterienzahl von Zeitschritt zu Zeitschritt ($n \to n+1$).

Betrachtet man nun die Bakterienzahl zu einer Zeit t und wählt den Zeitschritt Δt, so bleibt mit

$$x(t + \Delta t) = x(t) + r \cdot x(t) \cdot \Delta t \,,$$

für $\Delta t = 1$ alles beim Alten. Nun stellen wir die Gleichung um und lassen Δt immer kleiner werden. Der Differenzenquotient geht über in den Differentialquotienten

$$\begin{aligned} \Delta x = \frac{x(t+\Delta t)-x(t)}{\Delta t} &= r \cdot x(t) \\ \downarrow & \\ \frac{dx(t)}{dt} &= r \cdot x(t) \end{aligned}$$

Man erhält die gewöhnliche Differentialgleichung (Differentialgleichung) des exponentiellen Wachstums:

$$\frac{dx(t)}{dt} = r \cdot x(t) \quad \text{kurz} \quad x' = r \cdot x \quad \text{oder} \quad \dot{x} = r \cdot x \,, \tag{4.1}$$

sie hat die Lösung

$$x(t) = C \cdot e^{r \cdot t} \,. \tag{4.2}$$

C ist eine freie Konstante, die durch den Anfangswert bestimmt wird. Der Parameter r heißt Wachstumsrate.

Ist ein Anfangswert $x(t_0) = x_0$ vorgegeben, so nennt man die Suche nach der Lösung der Differentialgleichung, die zu diesem Anfangswert gehört, ein **Anfangs-**

wertproblem (AWP):

Man kann leicht überprüfen, dass 4.2 eine Lösung von Gleichung 4.1 ist. Hierzu leitet man 4.2 nach t ab:

$$\frac{dx(t)}{dt} = r \cdot C \cdot e^{r \cdot t} = r \cdot x(t) \ .$$

Für alle, die noch keine Vorlesung zu Differentialgleichungen gehört haben, sei an dieser Stelle der Anhang C empfohlen.

Vergleich diskretes Modell und Differentialgleichung*

Betrachten wir noch einmal den diskreten Fall

$$x_{n+1} = (1 + r) \cdot x_n = x_0 \cdot (1 + r)^{n+1} = x_0 \cdot e^{(n+1) \cdot \ln(1+r)}$$

Für n=0 ergibt sich $x_1 = x_0 \cdot e^{\ln(1+r)}$. Im stetigen Fall gilt $x(1) = x_0 \cdot e^{a \cdot 1}$. Um also mit dem diskreten und dem stetigen Modell dasselbe Wachstum zu erreichen, muss $a = \ln(1 + r)$ gesetzt werden.

$$x(t) = x_0 \cdot e^{(\ln(1+r)) \cdot t} = x_0 \cdot e^{\ln(1+r)^t} = x_0 \cdot (1 + r)^t \ ,$$

Die Wachstumsrate a ist also immer kleiner als r. Warum ist dies so? Betrachtet man das Modell diskret, so wird immer für einen ganzen Zeitschritt Δt die Änderung auf der Basis der Bakterienzahl zu Beginn des Zeitschritts t_0 angenommen:

$$\Delta x = r \cdot x(t_0) \cdot \Delta t \tag{4.3}$$

Im Intervall $[t, t + \Delta t]$ wird also x als konstant angenommen. Im kontinuierlichen Fall nimmt die Zahl der Bakterien aber stetig zu (Abbildung 4.1).

Will man also ganz speziell im Differentialgleichungs-Modell nach einem Zeitschritt eine Verdopplung (r=1) erreichen, so gilt $a = \ln 2 \approx 0.69$:

$$x(t) = x_0 \cdot e^{(\ln 2) \cdot t} = x_0 \cdot e^{\ln 2^t} = x_0 \cdot 2^t \ ,$$

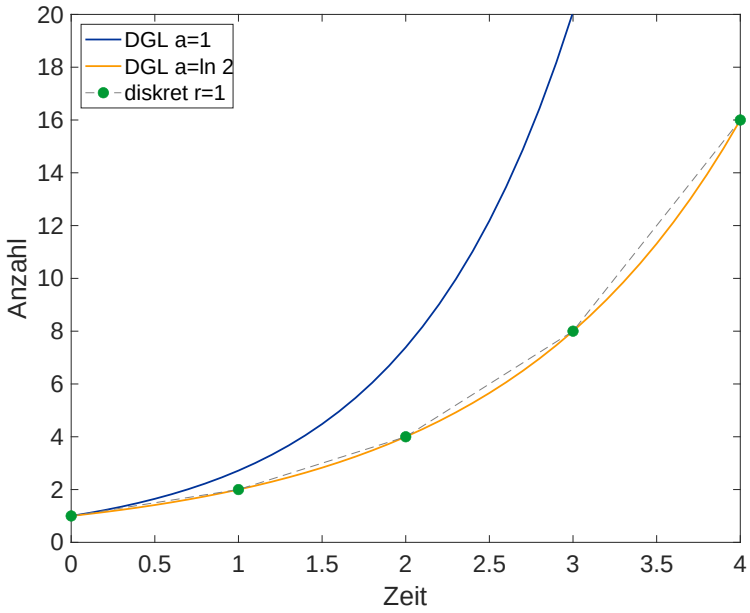


Abbildung 4.1: Vergleich des exponentiellem Wachstums für das diskrete Modell mit der Wachstumsrate $r = 1$ (grün) und das Differentialgleichungs-Modell mit der Wachstumsrate $a = 1$ (blau) und $a = \ln(1 + r)$ (gelb).

Umgekehrt gilt für $a = 1$, dass man nach einem Zeitschritt eine ver-e-fachung der ursprünglichen Größe erhält:

$$x(t) = x_0 \cdot e^{1 \cdot t} .$$

4.1.1 Zur numerischen Lösung der Differentialgleichung

Betrachten wir noch einmal das AWP

$$\dot{x}(t) = r \cdot x(t), \quad x(0) = 1$$

dessen Lösung $x(t) = e^{r \cdot t}$ ist. Für $r = 1$ gilt also $x(t) = e^t$ und somit $x(10) = e^{10} \approx 22026$.

Die Lösung kann numerisch durch das **Euler-Verfahren** (Anhang D.1) approximiert werden:

$$x_{k+1} = x_k + r \cdot x_k \cdot \Delta t \qquad k = 0, 1, ..$$

Δt ist die Schrittweite des Verfahrens. Je kleiner Δt desto genauer das Ergebnis.

Das Euler-Verfahren liefert für $\Delta t = 0.1$ als Lösung $x(10)$=13781. Dies ist sehr weit von der tatsächlichen Lösung entfernt. Verkleinert man den Zeitschritt, wird das Ergebnis besser. Für $\Delta t = 0.001$ liefert es das Ergebnis $x(10)$= 21917. Man kann

zwar den Zeitschritt weiter verkleinern, dies verlängert die Rechenzeit erheblich und das Ergebnis wird dadurch nicht unbedingt besser. Das Euler-Verfahren ist nicht geeignet, um numerisch exakte Ergebnisse zu bekommen.

Setzen wir nun den Zeitschritt auf $\Delta t = 1$, dann liefert das Verfahren x(10)=1024. Dies ist genau die Lösung, die uns das diskrete Modell

$$x_{n+1} = x_n + r \cdot x_n \qquad n = 0, 1, ..$$

für $r = 1$ und $y_0 = 1$ liefert.

Es ist wichtig zu verstehen, dass das diskrete Modell und die Differentialgleichung zwei unterschiedliche Sachverhalte beschreiben. Beim diskreten Modell geht man davon aus, dass die Werte von Schritt zu Schritt berechnet werden. Es wird also keine Lösung approximiert, die diskreten Werte sind die Lösung. Bei der numerischen Lösung der Differentialgleichung wird die Lösungsfunktion durch das numerische Verfahren approximiert. Das einfachste dieser Verfahren, das Euler-Verfahren, ist gerade die Approximation durch das diskrete Modell. Dieses Verfahren macht aber bei der Lösung große Fehler. Die Approximation an die tatsächliche Lösung der Differentialgleichung gelingt umso besser, je besser das Verfahren ist bzw. je kleiner der Zeitschritt ist. Letzteres funktioniert aber nur in begrenztem Maße. Eine Implementierung in Matlab ist in Abschnitt D.1.2 angegeben.

4.2 Logistisches Wachstum

In Abschnitt 3.2 haben wir das logistische Wachstum kennen gelernt. Im diskreten Fall hatte das logistische Wachstum folgende Form

$$x_{n+1} = x_n + r \cdot \left(1 - \frac{x_n}{K}\right) \cdot x_n \ .$$

Diese Gleichung geht nun in

$$\frac{dx(t)}{dt} = r \cdot \left(1 - \frac{x}{K}\right) \cdot x \tag{4.4}$$

über.

Die Lösungen der logistischen Differentialgleichung weisen im Unterschied zur Differenzengleichung unabhängig von der Parametrisierung nun kein Chaos mehr auf.

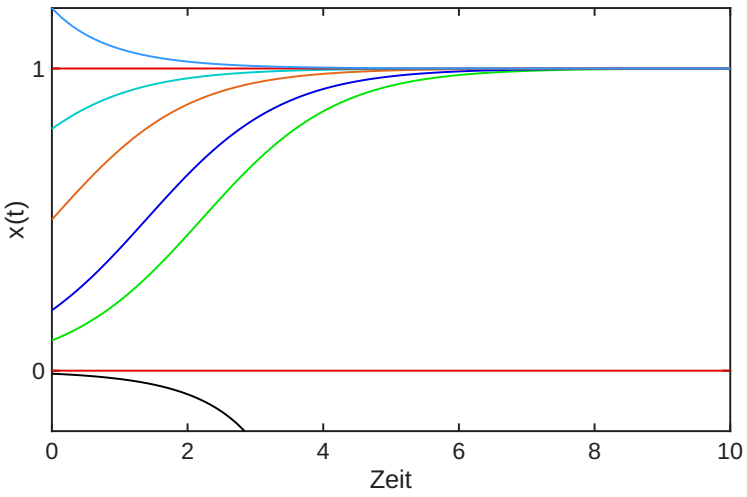


Abbildung 4.2: Lösungen des logistischen Wachstums (r=1, K=1) für verschiedene Anfangswerte.

Man kann folgende Lösungstypen unterscheiden:

1. Lösungen, die zwischen 0 und K bleiben und monoton wachsen
2. Lösungen, die sich monoton fallend K annähern
3. Lösungen, die von kleiner 0 gegen $-\infty$ streben
4. Lösungen, die konstant sind ($x \equiv 0$ und $x \equiv K$)

Das logistische Wachstum weist für den 1. Lösungstyp für kleine Anfangswerte x_0 zunächst ein exponentielles Wachstum auf, denn in diesem Fall gilt

$$\frac{dx(t)}{dt} = r \cdot \left(1 - \frac{x}{K}\right) \cdot x = r \cdot x - \frac{r}{K} \cdot x^2 \approx r \cdot x\,.$$

Für Startwerte in der Nähe von $K/2$ ist das Wachstum zunächst linear.

Die sigmoiden Lösungen ($0 < x_0 < K/2$) der logistischen Differentialgleichung sind punktsymmetrisch am Wendepunkt. Daher nähern sich Lösungen in der Nähe von K exponentiell dem Wert K.

Die logistische Differentialgleichung kann man noch analytisch lösen, die beschränkten Lösungen lauten

$$x(t) = K \cdot \frac{e^{r(t-m)}}{1 + e^{r(t-m)}} \qquad -\infty < m < \infty$$

Dies ist eine Funktionenschar, der Schar-Parameter m kann alle reellen Werte annehmen und hängt für das Anfangswertproblem $x(0) = x_0$ von x_0 ab.

Weitere Informationen zu Differentialgleichungen findet man in Anhang C*.

4.2.1 Beispiel Bohnenwachstum

Abbildung 4.3 zeigt, dass man mit dem kontinuierlichen Modell zum logistischen Wachstum nach Gleichung 4.4 die Daten des Bohnenwachstums aus Abschnitt 2.2 einigermaßen reproduzieren lassen. Eine gute Anpassung an die Daten der Hauptwachstumsphase erhält man allerdings nur, wenn man einen Anfangswert annimmt, der deutlich größer als der gemessene ist. Die kann daran liegen, dass die Anfangs sehr kleinen Werte einen Messfehler aufweisen. Wahrscheinlicher ist aber, dass sich das reale Wachstum nicht exakt mit einem so einfachen Modell beschreiben lässt, weil es durch viele weitere Faktoren wie z.B. Temperatur und Lichtintensität beeinflusst ist.

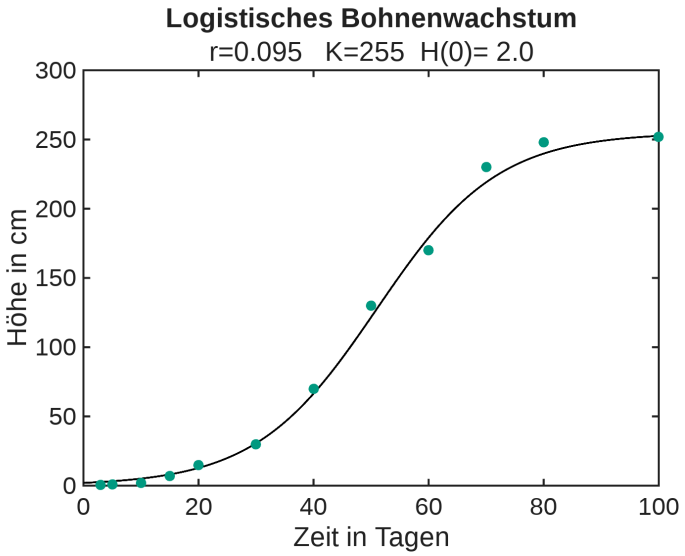


Abbildung 4.3: Simulation des Modells zum logistischen Wachstum nach Gleichung 4.4 mit der Wachstumsrate r, der Kapazität K und dem Anfangswert H(0) (schwarz) verglichen mit den Daten aus Abschnitt 2.2 (grün).

4.3 Richtungsfeld

Kann man einer Differentialgleichung ihren Lösungsverlauf „ansehen“?

Betrachten wir zum Beispiel $\dot{x} = a \cdot x$. Die Steigung (Ableitung) der Funktion x an der Stelle t ist proportional zum Funktionswert an der Stelle t.

Um dies zu visualisieren betrachtet man ein t, x-Koordinatensystem. Zu beliebig vielen Paaren (t, x)-Paaren zeichnet man nun die Steigung an diesem Punkt ein, indem man an (t, x) ein Linienelement oder einen Vektor mit der Steigung $\dot{x} = f(t, x)$ einzeichnet (siehe Abbildung 4.4). Ohne die Lösungen der Differentialgleichung zu kennen, weiß man, dass eine Lösung, die durch einen Punkt (t, x) geht, das Linienelement als Tangente haben muss. Zeichnet man viele Linienelemente, so kann man am Richtungsfeld den Verlauf der Lösungen „sehen“.

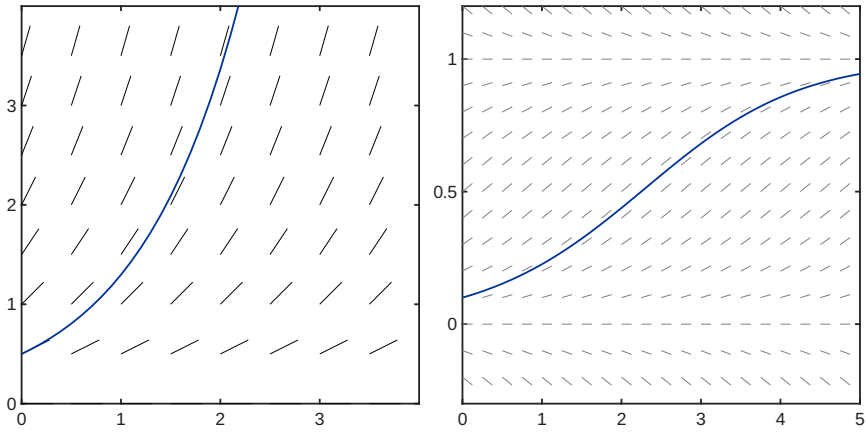


Abbildung 4.4: Richtungsfeld von $\dot{x} = x$ (links) und $\dot{x} = rx(1 - x/K), r = 1, K = 1$ (rechts). Die Richtungsfelder sind t-translationsinvariant, da die Differentialgleichungen autonom sind. Zusätzlich sind die Lösungen zum Anfangswert x(0)=0.5 (links) und x(0)=0.1 (rechts) eingezeichnet (blau).

Die kleinen Striche im Richtungsfeld haben keinen bestimmten Namen, wir nennen sie hier mal Linienelemente. Sie werden von den Lösungskurven niemals durchkreuzt. Die Lösungsbahnen verlaufen immer tangential zu den Linienelementen. Verschiedene Lösungen können sich also nicht schneiden! Zu jedem Anfangswert $x(t_0) = x_0$ gibt es meistens genau eine Lösung[1]. Ist die Differentialgleichung autonom, d.h. die rechte Seite hängt nicht explizit von der Zeit ab, ist das Richtungsfeld t-translationsinvariant. Dies bedeutet, dass sich die Steigungen in t-Richtung nicht verändern.

[1] Dies gilt nicht für alle Differentialgleichungen. Weiter hilft hier der Satz von Picard-Lindelöf: f muss Lipschitz-Bedingung für y erfüllen.

4.4 Fixpunkte (Stationäre Zustände, Gleichgewichtszustände)

Autonome Systeme[2] der Form $\dot{x} = f(x)$ haben häufig spezielle Lösungen der Form

$$x(t) = x^* = \text{konstant}\,,$$

d.h. dass die Änderung von x gleich Null ist, also $\dot{x} = 0$. Die Konstante x^* erfüllt also die Gleichung

$$f(x^*) = 0\,.$$

Diese zeitlich unveränderlichen Lösungen heißen stationäre Zustände, stationäre Lösungen, Gleichgewichtszustände, Gleichgewichtslösungen oder kurz Fixpunkte.

Im Fall des logistischen Wachstums gibt es, wie oben erwähnt, die zwei stationären Lösungen $x^* = 0$ und $x^* = K$.

4.4.1 Stabilität von Fixpunkten

Es gibt zwei Arten von Fixpunkten

1. **stabil**: kleine Abweichungen wachsen nicht, genauer:

   asymptotisch stabil: kleine Abweichungen verschwinden

   marginal stabil: kleine Abweichungen wachsen nicht

2. **instabil**: es gibt kleine Abweichungen, die wachsen

Für das logistische Wachstum gilt, dass $x^* = 0$ instabil ist. Sobald man vom Fixpunkt auch nur ein wenig abweicht, fängt die Lösung an zu wachsen. $x^* = K$ ist stabil. Sobald man ein wenig von K abweicht, läuft das System zu K zurück.

[2] Systeme, die nicht explizit von der Zeit abhängen.

Mathematisch präzise*

Ein Fixpunkt heißt **stabil**, wenn es zu jedem $\varepsilon > 0$ ein $\delta > 0$ gibt, so dass alle Lösungen, die anfangs höchstens um δ vom Fixpunkt abweichen, für alle späteren Zeiten höchstens um ε vom Fixpunkt abweichen.

Diese Definition schließt die „marginal" stabilen Fälle ein. Ein Fixpunkt heißt auch dann „instabil", wenn nicht alle kleinen „Störungen" zu wachsenden Abweichungen führen. Es muss nur solche wachsenden Störungen geben.

4.4.2 Bestimmung der Stabilität

Bei autonomen Systemen mit einer Zustandsvariablen kann schnell festgestellt werden, ob ein Fixpunkt stabil ist oder nicht. Man schaut sich hierzu die Änderung an (Abbildung 4.5): Betrachtet man den Fixpunkt $x^* = 0$, so sieht man, dass die Änderung positiv wird, sobald man nur ein wenig von x^* nach rechts abweicht. Damit wird x immer weiter erhöht. Man sagt der Fixpunkt $x^* = 0$ ist instabil, weil kleine Störungen dazu führen, dass die Lösung vom Fixpunkt weg läuft. Anders ist es bei $x^* = K$. Verringert man x ein wenig, so ist die Änderung positiv, x nimmt also wieder zu. Damit kommt das System von $x^* = K$ nicht weg, der Fixpunkt ist stabil. Analytisch kann man die Stabilität also bestimmen, indem man

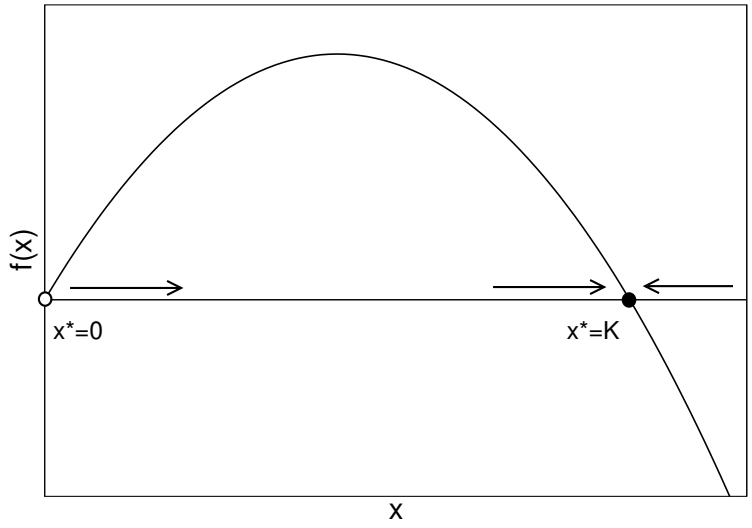


Abbildung 4.5: Differentialgleichung des logistischen Wachstums. Aufgetragen ist die rechte Seite der Differentialgleichung $f(x) = r \cdot x \cdot (1 - \frac{x}{K})$ über x. Für $f > 0$ nimmt x zu, für $f < 0$ nimmt x ab und für $f = 0$ bleibt x unverändert, da f gerade die Änderung von x angibt (rechte Seite der Differentialgleichung). Die Pfeile geben die Änderung von x an.

die Steigung der rechten Seite der Differentialgleichung bezogen auf x untersucht. Steigt die Funktion f, so ist der Fixpunkt instabil, fällt sie ist er stabil. Man bildet hierzu also die Ableitung $\frac{df(x^*)}{dx}$ der rechten Seite der Differentialgleichung nach der Zustandsvariablen x im stationären Zustand[3]. Es gilt :

$\frac{df(x^*)}{dx} > 0$, dann ist x^* ist instabil
$\frac{df(x^*)}{dx} < 0$, dann ist x^* ist stabil
$\frac{df(x^*)}{dx} = 0$, es sind weitere Analysen erforderlich

Für das logistische Wachstum erhält man nun folgende Stabilitäten

$$\dot{x} = f(x) = r \cdot \left(1 - \frac{x}{K}\right) \cdot x \qquad r > 0$$

gilt

$$\frac{df(x)}{dx} = r - \frac{2r}{K} \cdot x$$

Für $x^* = 0$ gilt: $\frac{df(x^*)}{dx} = r > 0$, der Zustand ist instabil

Für $x^* = K$ gilt: $\frac{df(x^*)}{dx} = r - 2r < 0$, der Zustand ist stabil

Was im Detail passiert*

Man betrachte x als Abweichung vom Fixpunkt x^* mit der Störung z:

$$x(t) = x^* + z(t)$$

Für x gilt

$$\dot{x}(t) = \frac{dx(t)}{dt} = \frac{d(x^* + z(t))}{dt} = \frac{dx^*}{dt} + \frac{dz(t)}{dt} = \frac{dz(t)}{dt} = \dot{z}(t)$$

da $\frac{dx^*}{dt} = 0$, weil x^* konstant ist.

[3] Achtung: Hier wird nun f(x) nach x abgeleitet. Die Funktion f selbst beschreibt die Änderung von x nach der Zeit.

Andererseits gilt die Taylorentwicklung (siehe Anhang A.12*)

$$\dot{x}(t) = f(x(t)) = f(x^* + z(t)) = f(x^*) + \frac{df(x^*)}{dx} \cdot z(t) + \cdots$$

Betrachtet man nun die Taylorentwicklung nur bis zum ersten Glied[4], so erhält man eine neue, lineare Differentialgleichung für die Störung $z = x^* - x$.

$$\dot{z}(t) = f(x^*) + \frac{df(x^*)}{dx} \cdot z(t) = \frac{df(x^*)}{dx} \cdot z(t) \tag{4.5}$$

mit der Lösung

$$z(t) = z_0 \cdot e^{\frac{df(x^*)}{dx} \cdot t}$$

Damit wächst die „Störung“ für $\frac{df(x^*)}{dx} > 0$ exponentiell (instabil) und zerfällt exponentiell für $\frac{df(x^*)}{dx} < 0$ (stabil). Dieses Verfahren nennt man auch „Linearisierung am stationären Zustand“. Man sagt, man habe die ursprüngliche Differentialgleichung linearisiert. Nun ist auch klar, warum man für $\frac{df(x^*)}{dx} = 0$ keine Aussage über die Stabilität des Fixpunkts der ursprünglichen Gleichung treffen kann. Da die Störung unverändert bleibt, hängt die Stabilität nun womöglich von den höheren Termen der Taylorentwicklung ab, die beim linearisierten System vernachlässigt wurden.

4.4.3 Beispiel: Schafe am Deich



4

$$f(x_0 + \Delta t) \approx f(x_0) + f'(x_0) \cdot \Delta t$$

Es soll bestimmt werden, wie viele Schafe einen Deich beweiden können. Es muss sichergestellt werden, dass das Gras nicht vollständig abgefressen wird, um die Stabilität des Deiches nicht zu gefährden. Hierzu wird nun ein sehr einfaches konzeptionelles Modell aufgestellt. Dieses kann ganz sicher noch nicht das konkrete Problem lösen, zeigt aber das Herangehen an eine solche Fragestellung.

Die Änderung der Vegetation wird durch ihr Wachstum und ihre Beweidung bestimmt:

Änderung der Vegetation = Wachstum - Beweidung

Durch nicht weiter berücksichtigte Umweltfaktoren wird das Gras (Vegetation V) auch ohne Beweidung nur bis zu einer Kapazität K wachsen. Ohne Beweidung ist also die Annahme des logistischen Wachstums sinnvoll:

$$\frac{dV(t)}{dt} = r \cdot \left(1 - \frac{V(t)}{K}\right) \cdot V(t)$$

Nimmt man nun eine Beweidung durch Herbivoren an, so hängt die gefressene Menge Gras sowohl von der Anzahl der Herbivoren H als auch von der zur Verfügung stehenden Grasmenge V ab. Je mehr Schafe auf dem Deich, desto mehr wird gefressen. Nicht jedoch gilt, dass je mehr Gras vorhanden ist umso mehr gefressen wird, da die Schafe nur eine begrenzte Aufnahmekapazität haben – sie werden satt bzw. benötigen eine gewisse Zeit zur Beweidung. Daher ist der Ansatz mit einem Sättigungsterm sinnvoll. Dieser wird später noch ausführlicher diskutiert.

Hier gehen wir davon aus, dass die maximale Fressrate b erst bei sehr großer Nahrungsmenge erreicht wird und die Fressrate bei einer Grasmenge V_H gerade zur Hälfte erreicht wird. Deshalb heißt dieser Parameter auch Halbsättigungskonstante. Die gesamte Gleichung für die Vegetation V lautet nun (die Zeitabhängigkeit von V wird hier nun nicht mehr mit aufgeschrieben):

$$\frac{dV}{dt} = r \cdot V \cdot (1 - \frac{V}{K}) - b \cdot \frac{V}{V + V_H} \cdot H$$

Hierbei ist es nun wichtig zwischen der Zustandsvariablen V genauer V(t) und den Parametern r, K, b, V_H und H zu unterscheiden. Parameter sind Größen deren Werte wir vorgeben. Die Zustandsvariable ist unsere gesuchte Funktion, deren zeit-

lichen Verlauf wir suchen. Insbesondere interessiert uns, wann die Zustandsvariable konstant ist, d.h. keine Änderung erfährt. Wir suchen also die Fixpunkte.

Um das Ganze nun zu vereinfachen und so an dieser Stelle viel Rechnerei zu vermeiden setzen wir r=b=V_H=1 und K=10. Dies dient hier der Übersichtlichkeit der Rechnungen. In einem realistischen Modell ist es natürlich komplizierter. Insbesondere haben die Parameter alle unterschiedliche Einheiten und können zwar denselben Zahlenwert haben, sind damit aber noch lange nicht gleich.

Wir betrachten nun also das vereinfachte Modell

$$\frac{dV}{dt} = V \cdot (1 - \frac{V}{10}) - \frac{V}{V+1} \cdot H \tag{4.6}$$

Gesucht sind nun die Fixpunkte von 4.6 in Abhängigkeit von H. Wir haben zwar bisher von Schafen gesprochen, dies bedeutet aber nicht, das H nur ganzzahlige Werte annehmen kann. Dies versteht man, wenn man H eher als Herbivorenbiomasse auffasst.

Die Fixpunkte von 4.6 erhält man, wenn man die rechte Seite gleich Null setzt:

$$V \cdot (1 - \frac{V}{10}) - \frac{V}{V+1} \cdot H = 0 \tag{4.7}$$

Dies ist für V=0 erfüllt. Damit hat man den ersten Fixpunkt $V_1^* = 0$ gefunden.

Es gilt aber auch für

$$\begin{aligned}
(1 - \frac{V}{10}) - \frac{1}{V+1} \cdot H = 0 &\iff \\
V + 1 - \frac{1}{10}V^2 - \frac{V}{10} - H = 0 &\iff \\
-V^2 + 9V + 10 - 10H = 0 &\iff \\
V^2 - 9V - 10 + 10H = 0 &
\end{aligned}$$

Löst man diese quadratische Gleichung so erhält man zwei weitere Lösungen

$$V_{2/3}^* = \frac{9}{2} \pm \sqrt{\frac{9^2}{4} - 10H + 10} = 4,5 \pm \sqrt{30,25 - 10H}$$

Ist der Term unter der Wurzel positiv ($1 \leq H \leq 3,025$), so existieren also zwei

weitere Fixpunkte. Diese sind für uns aber nur interessant, wenn sie nicht negativ sind, das es sich ja um Vegetation handelt. Der Fixpunkt V_2^* ist immer positiv, wenn er existiert, V_3^* nur dann , wenn $4,5 - \sqrt{30,25 - 10H} > 0$ gilt, also für $H > 1$.

Die Lage der Fixpunkte ist in Abbildung 4.6 dargestellt.

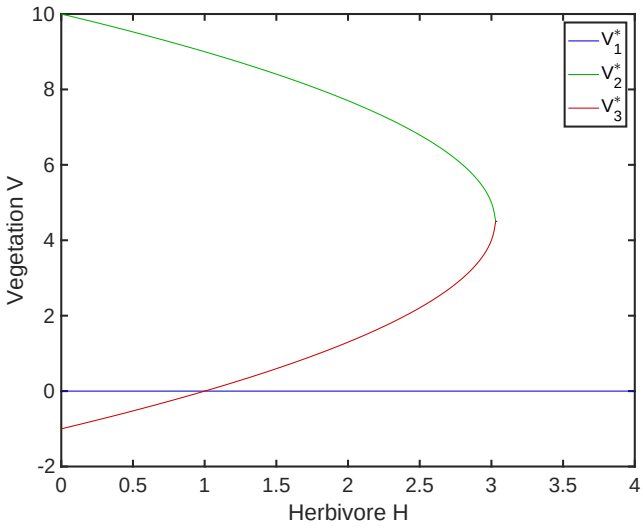


Abbildung 4.6: Lage der Fixpunkte der Vegetation (Gras am Deich) in Abhängigkeit von der Herbivorenbiomasse (Schafe)

Man sieht, dass es für kleine "Schafzahlen" ($H < 1$) nur zwei nicht-negative Fixpunkte gibt. Entweder die Vegetation hat sehr hohe Werte oder ist Null. Wenn das Modell sinnvoll ist, sollte sich bei geringer Schafzahl natürlich der hohe Wert als stabil erweisen. Für größere Schafzahlen existieren bis zu dem kritischen Wert von $H_{crit} = 3,025$, bei dem die Wurzeläste zusammenlaufen, drei Fixpunkte. Für noch größere Schafzahlen gibt es als stationäre Lösung nur noch "kein Gras mehr" als Lösung ($V_1^* = 0$). Der Deich ist also überweidet, sofern sich der Fixpunkt $V_1^* = 0$ als stabil erweist, also alle Lösungen dorthin streben. Dies würde bedeuten, dass sobald man eine größere Menge Schafe auf den Deich bringt, das Grass komplett abgefressen wird. Für kleinere Schafzahlen ($1 < H < H_{crit}$) könnte sich das System auf einen der beiden Wurzeläste zu bewegen, wenn einer der beiden stabil ist. Dies gilt es zu untersuchen.

Hierzu wird zunächst gemäß 4.4.2 $\frac{df(V)}{dV}$ bestimmt:

$$\frac{df(V)}{dV} = 1 - \frac{2V}{10} - \frac{1}{(V+1)^2} \cdot H \tag{4.8}$$

Die Bestimmung der Stabilität der Fixpunkte erfolgt nun wieder durch Einsetzen.

Zunächst wird $V_1^* = 0$ in Gleichung 4.8 eingesetzt:

$$\frac{dfV_1^* = 0}{dV} = 1 - \frac{2 \cdot 0}{10} - \frac{1}{(0+1)^2} \cdot H = 1 - H$$

V_1^* ist also stabil für $1 - H < 0$ also für $H > 1$ und instabil für $1 - H > 0$ also für $H < 1$ genau wie wir es erwartet haben. Die Bestimmung der Stabilität von V_2^* und V_3^* erfolgt genauso, ist aber deutlich rechenintensiver und wird hier mal ausgelassen. Man kann dies durchaus noch von Hand rechnen. Einfacher ist es mit Maple oder der Symbolic-Toolbox von Matlab. Das Ergebnis ist in Abbildung 4.7 dargestellt. Man erkennt in Abbildung 4.7, dass bei Werten von H unter 1 (wenig

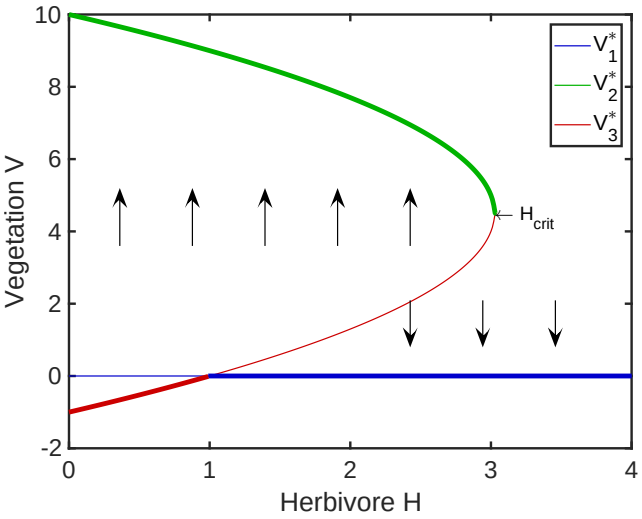


Abbildung 4.7: Stabilität der Fixpunkte der Vegetation (Gras am Deich) in Abhängigkeit von der Herbivorenbiomasse (Schafe). Die Bereiche der Stabilität sind fett dargestellt. Die Pfeile geben die Bewegungsrichtung der Lösungen an.

Schafe), die Vegetation startend von einem beliebigen Anfangswert zum stabilen Fixpunkt V_2^* strebt. Im Bereich $1 < H < H_{crit}$ wird die Vegetation wachsen, sofern der Startwert oberhalb von V_3^* liegt. Ist der Anfangswert unterhalb von V_3^*, stirbt die Vegetation aus und der Deich ist gefährdet. Oberhalb von H_{crit} sind zu viele Schafe auf dem Deich. Egal, wie viel Vegetation da ist, letztlich wird alles weggefressen, der einzige stabile Zustand $V_1^* = 0$ wird angestrebt. Der zeitliche Verlauf wird deutlich, wenn man sich die einzelnen Lösungskurven für verschiedene Werte von H im jeweiligen Richtungsfeld anschaut (siehe Abbildung 4.8).

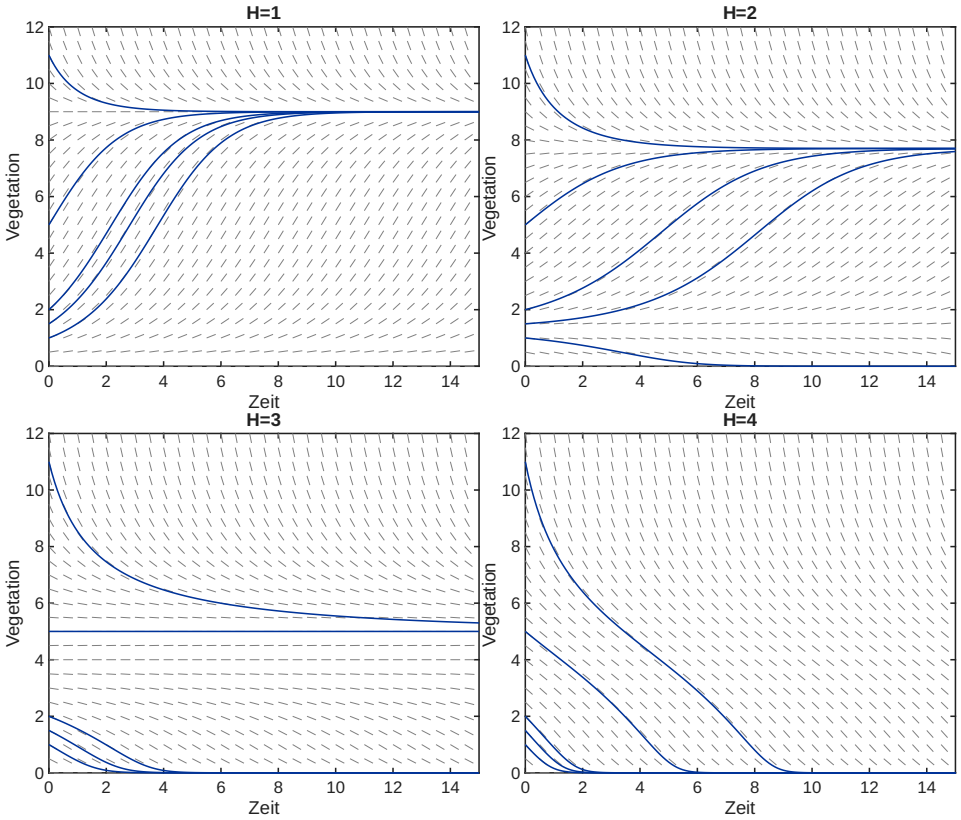


Abbildung 4.8: Richtungsfelder (grau) und Lösungskurven zu verschiedenen Anfangswerten der Vegetation (blau) für verschiedene Werte von Herbivoren (H=1 bis H=4).

5 Zweidimensionale Differentialgleichungsmodelle

5.1 Räuber-Beute-Modelle

Beim Beispiel des Bakterienwachstums sind wir davon ausgegangen, dass die Abnahme der Wachstumsrate von der Bakterienbiomasse selbst abhängt. Je mehr Bakterien da sind, umso schlechter kann die Population wachsen. Dies nennt man auch intraspezifische Konkurrenz. Im folgenden wollen wir überlegen was passiert, wenn eine andere Art die Population dezimiert und deren Biomasse also von der ersten Art abhängt. Solche Modelle werden auch Räuber-Beute-Modelle genannt.

5.2 Lotka-Volterra-Modell

In diesem Abschnitt soll also das Zusammenspiel zwischen einer Beutepopulation, den Hasen, und einer Räuberpopulation, den Luchsen, simuliert werden (Abbildung 5.2). Das Modell geht auf **Lotka und Volterra** [9, 19] zurück. Mit Hilfe dieses sehr einfachen Modells kann man die Schwankungen in der Hasen- und Luchspopulation in Nord-Kanada beschreiben (Abbildung 5.1).

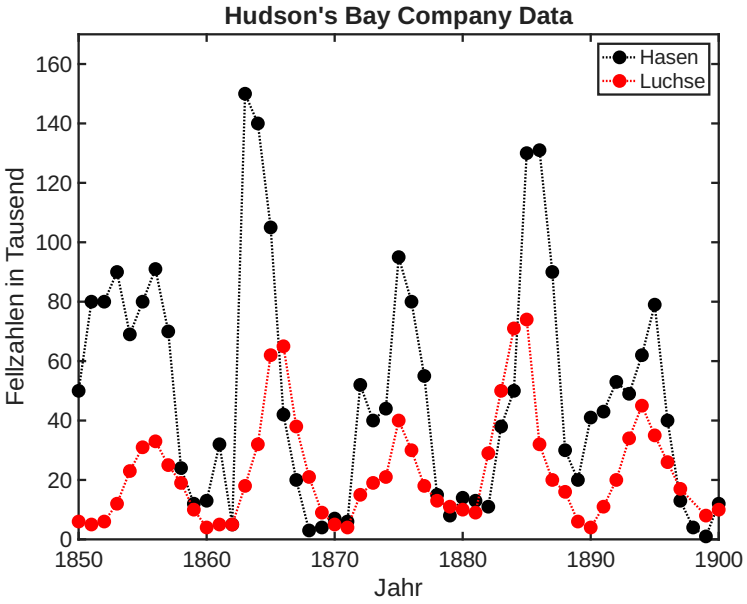


Abbildung 5.1: Fellzahlen von Hasen und Luchsen, die bei der Hudson's Bay Company von Trappern zwischen 1850 bis 1900 abgegeben wurden.

Wir machen folgende Annahmen

1. Hasen wachsen proportional zur aktuellen Hasenzahl
2. Luchse fressen einen Teil der Hasen, umso mehr, je mehr Hasen da sind.
3. Ein Teil der Luchse stirbt.

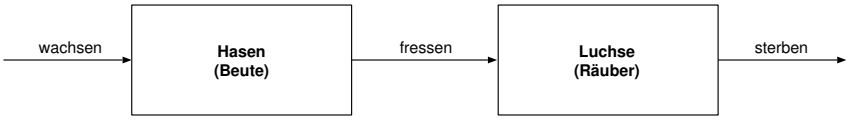


Abbildung 5.2: Diagramm des Räuber-Beute-Systems. Die Pfeile geben den Biomassenfluss an.

Sei B(t) (Beute) die Anzahl der Hasen und R(t) (Räuber) die Anzahl der Luchse zur Zeit t. Wir nehmen in Kauf, dass auch nicht-ganzzahlige Werte vorkommen können. Wen das stört, der kann als Einheit auch kg Hasen und kg Luchse wählen. Das Wachstum der Hasen wird wie in Abschnitt 3.2 durch

$$\dot{B} = r \cdot B$$

beschrieben. Hierbei ist r die **Wachstumsrate** der Hasen. Die Abnahme der Räuber ist durch

$$\dot{R} = -s \cdot R$$

beschrieben.Hierbei ist s die **Sterberate** der Räuber.

Nun müssen wir noch berücksichtigen, wie viel ein Luchs frisst. Klar ist, dass er nichts zu fressen findet, wenn es keine Hasen gibt, und dass er umso mehr frisst, je mehr Hasen da sind (er muss dann nicht so lange jagen). Das Wachstum der Luchse wird also von der Hasenzahl abhängen, z.B. kann man annehmen, dass sie linear mit der Beute wächst. Die Wachstumsrate der Räuber sei hier also eine Funktion der Beute $f(B) = b \cdot B$. Diese Rate könnte man auch als Fressrate oder Aufnahmerate bezeichnen.

$$\dot{R} = b \cdot B \cdot R$$

Alles zusammengenommen erhält man dann das Räuber-Beute-Modell von **Lotka**

und Volterra (1926):

$$\dot{B} = r \cdot B \; - \; b \cdot B \cdot R \tag{5.1}$$

$$\dot{R} = b \cdot B \cdot R \; - \; s \cdot R$$

Simuliert man nun die Anzahl der Hasen- und Luchse (Abbildung 5.3), so fällt folgendes auf: Beide Populationen oszillieren. Zuerst steigt die Zahl der Hasen. Dadurch steht den Luchsen mehr Nahrung zur Verfügung und ihre Zahl steigt kurz darauf ebenfalls. Dies reduziert die Zahl der Hasen wieder und den Luchsen steht wieder weniger Nahrung zur Verfügung.

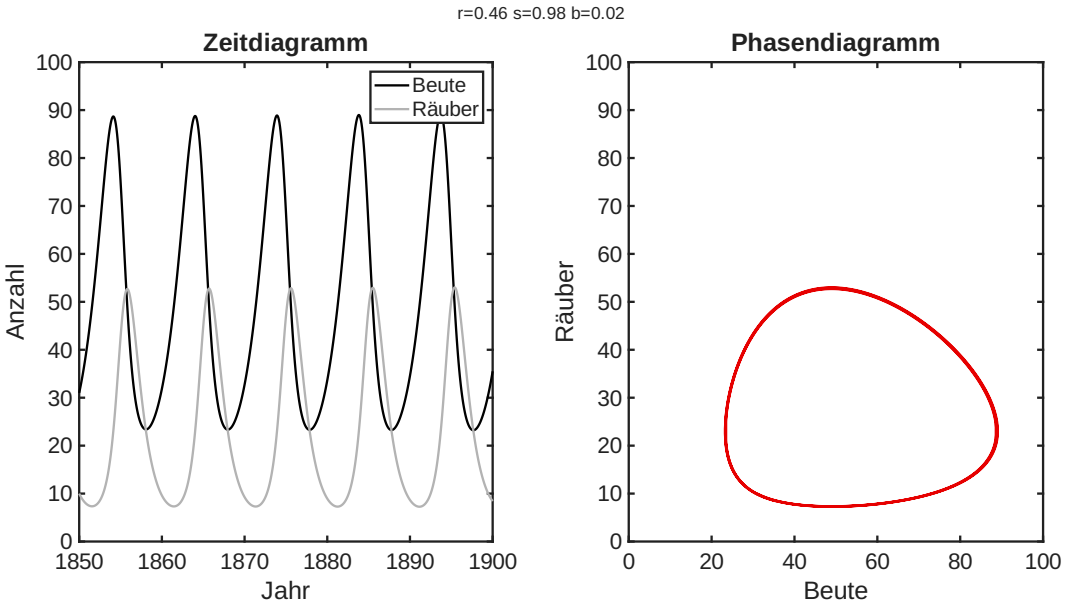


Abbildung 5.3: Lösungskurven des Räuber-Beute-Modells

5.2.1 Bemerkung zur Struktur des Modells

Das Modell nach Lotka und Volterra (5.1) besteht ja nun bereits aus vielen „Buchstaben“. Hier ist es nun wichtig genau zu verstehen worum es sich jeweils handelt. Auf der linken Seite der Gleichheitszeichen stehen die Änderungen oder Ableitungen ($\dot{B}$ und $\dot{R}$) der Zustandsvariablen (B und R). Zustandsvariablen sind also Funktionen der Zeit (B(t) und R(t)), deren Funktionswerte gesucht sind. Da die Funktionen selbst nicht bekannt sind, werden ihre Änderungen (Ableitungen) durch

das Modell beschrieben (auf der rechten Seiten der Gleichheitszeichen). Die Änderungen kann man als Funktionen der Zustandsgleichungen auffassen

$$\frac{dB(t)}{dt} = f_1(R(t), B(t)) \qquad \dot{B} = f_1(R, B)$$

kurz

$$\frac{dR(t)}{dt} = f_2(R(t), B(t)) \qquad \dot{R} = f_2(R, B)$$

Man hat also nun die Funktionen f_1 und f_2 die jeweils von B und R abhängen. Sie sind Funktionen von Funktionen.

5.2.2 Bemerkung zu Parametern, Einheiten und Dimensionen

Die rechten Seiten der Gleichungen von 5.1 beschreiben also die Änderungen der Zustandsvariablen B und R. Diese Änderungen werden meistens mit Hilfe sogenannter Parameter aufgeschrieben. Als Parameter bezeichnet man in der Modellierung Größen, deren Wert man festlegt, deren Wert sich also während einer Simulation nicht ändert. Man könnte also anstelle eines Platzhalters (Buchstaben) auch den jeweiligen Wert schreiben. Dies ist jedoch umständlich, das sich die Werte durch neue Erkenntnisse aus der Literatur verändern und man diesen Wert dann an allen Stellen im Modell verändern müsste. Im Lotka-Volterra-Modell taucht z.B. der Parameter b an zwei Stellen auf.

Der Begriff Parameter bezeichnet in der Modellierung also etwas anderes als in der Biologie. Dort sind Parameter meistens Größen, die gemessen werden.

Zustandsvariablen werden häufig mit großen Buchstaben aber auch mit x oder y bezeichnet. In größeren Modellen erhalten sie aber auch länger Namen. Parameter werden in der Modellierung häufig mit kleinen Buchstaben, auch gerne aus dem griechischen Alphabet, bezeichnet. Dies ist aber nicht streng festgelegt.

Bei Modellen, deren Simulationsergebnisse mit der Realität (Messdaten) verglichen werden sollen, ist es wichtig, dass die Dimensionen und Einheiten aller Größen richtig sind, da man sonst sprichwörtlich Äpfel mit Birnen vergleicht.

In einem System drückt die Dimension einer Größe deren qualitative Eigenschaf-

ten aus. So können Räuber und Beute als Anzahl oder (Bio)-Masse angegeben werden. Werden sie als Biomasse angegeben, so muss jeweils eine Einheit z.B. Kilogramm (k) oder auch Kilogramm pro Quadratkilometer (kg/m^2) festgelegt werden. Günstigstenfalls haben Räuber und Beute dieselbe Einheit. Beim Aufstellen eines Modells ist es wichtig, sich immer über Dimension und Einheiten aller auftretender Größen im Klaren zu sein und bei jeder Gleichung die Einheiten auf Konsistenz zu überprüfen, um Fehler beim Aufstellen der Gleichungen zu vermeiden. Hierbei überprüft man, ob Terme, die aufsummiert werden, dieselbe Einheit haben und ob rechts und links vom Gleichheitszeichen dieselbe Einheit steht.

Nehmen wir hier mal an, dass wir Räuber und Beute jeweils mit der Dimension Biomasse in der Einheit Kilogramm angeben. Da beide Größen Funktionen der Zeit sind, müssen wir auch eine Zeiteinheit vorgeben. In diesen Modell sei die Einheit der Zeit Jahr (a). Auf der linken Seite stehen nun die zeitlichen Änderungen der Zustandsvariablen, also die Änderung der Biomasse mit der Zeit in der Einheit Kilogramm pro Jahr (kg/a). Auf der rechten Seite müssen alle Terme dieselbe Einheit haben, also sind $r \cdot B$, $r \cdot B \cdot R$ und $s \cdot R$ auch in kg/a. daraus ergib sich sofort, dass r in 1/a angegeben werden muss, da B die Einheit kg hat. Dasselbe gilt für die Sterberate s. Schwieriger wird es bei b. Der Term $b \cdot B \cdot R$ hat die Einheit kg/a. Da B und R die Einheit kg haben, muss b die Einheit $1/(kg \cdot a)$ haben. Dies ist einfacher zu verstehen, wenn man sich erinnert, dass $b \cdot B$ die Aufnahmerate war, also $b \cdot B$ die Einheit 1/a hat.

Beispiel für konsistente Einheiten im Lotka-Volterra-Modell

$$\begin{array}{rcccc} \dot{B} & = & r \cdot B & - & b \cdot B \cdot R \\ [\frac{kg}{a}] & = & [\frac{1}{a}] \cdot [kg] & - & [\frac{1}{kg \cdot a}] \cdot [kg] \cdot [kg] \\ \dot{R} & = & b \cdot B \cdot R & - & s \cdot R \\ [\frac{kg}{a}] & = & [\frac{1}{kg \cdot a}] \cdot [kg] \cdot [kg] & - & [\frac{1}{a}] \cdot [kg] \end{array}$$

Wir haben im Modell nun also drei Raten, die Wachstumsrate der Beute r, die Sterberate der Räuber s und die Aufnahme- oder Fressrate der Räuber $b \cdot B$. Alle drei haben die Einheit 1/a. Man erkennt, dass b alleine keine Rate darstellt. Die Wachstumsrate r wird in der Ökologie auch **per capita growth rate** (Pro-Kopf-Wachstumsrate) genannt.

5.2.3 Fixpunkte

Ähnlich wie beim eindimensionalen Modell kann man die stationären Zustände des Modells bestimmen. Hierzu werden beide Gleichungen gleich Null gesetzt. Man erhält ein Gleichungssystem aus zwei Gleichungen mit den zwei Unbekannten B und R.

$$\dot{B} = r \cdot B - b \cdot B \cdot R = (r - b \cdot R) \cdot B = 0 \tag{5.2}$$

$$\dot{R} = b \cdot B \cdot R - s \cdot R = (b \cdot B - s) \cdot R = 0$$

Man braucht es nicht als Gleichungssystem zu lösen, sondern kann die Lösungen auch durch scharfes Hinsehen finden: Die erste Gleichung ist null, wenn entweder

$$B = 0 \quad \text{oder} \quad r - b \cdot R = 0$$

gilt. Die zweite Gleichung ist null, wenn entweder

$$R = 0 \quad \text{oder} \quad b \cdot B - s = 0$$

gilt. Damit gibt es 4 mögliche Kombinationen:

1. B=0 und R=0
2. B=0 und $b \cdot B - s = 0$
3. $r - b \cdot R = 0$ und R=0
4. $r - b \cdot R = 0$ und $b \cdot B - s = 0$

Fall 1 führt zur trivialen Lösung, dass B und R Null sind. Ökologisch bedeutet das, das weder Räuber noch Beute da sind. Wir haben also den Fixpunkt

$$(B_1^*, R_2^*) = (0, 0)$$

Der Fixpunkt wird wiederum durch $*$ gekennzeichnet. Betrachtet man den Fall 2 so bedeutet dies das B=0 und $B = \frac{s}{b}$ gelten soll. Das ist aber nicht möglich, da wir $r, s > 0$ angenommen haben. Hieraus ergibt sich also kein Fixpunkt. Dasselbe

gilt für Fall 3. Einen weiteren Fixpunkt erhalten wir, wenn wir in Fall 4 nach R bzw. B auflösen. Der zweite Fixpunkt lautet dann

$$(B_2^*, R_2^*) = (\frac{s}{b}, \frac{r}{b})$$

Wenn das System genau diesen Zustand hat, wird sich nichts mehr ändern. Sowohl Beute als auch Räuber haben eine konstante Populationsgröße. Eine kurze Zusammenfassung zur Analysis mehrdimensionaler Systeme und zur Stabilitätsanalyse zweidimensionaler Systeme ist in Anhang G*und I*beschrieben.

5.2.4 Richtungsfeld

Für ein autonomes 2-dimensionales System kann man ebenfalls ein Richtungsfeld zeichnen. Man betrachtet hierzu

$$\frac{dR}{dB} = \frac{\frac{dR}{dt}}{\frac{dB}{dt}}$$

d.h. die Änderung des Räubers nach der Beute. Im Falle des Lotka-Volterra-Modells gilt

$$\frac{dR}{dB} = \frac{b \cdot B \cdot R \; - \; s \cdot R}{r \cdot B \; - \; b \cdot B \cdot R}$$

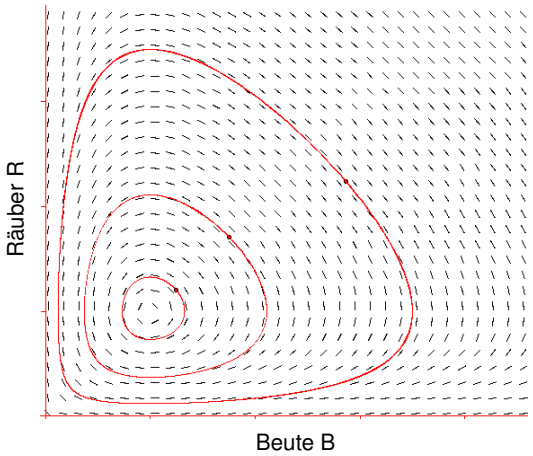


Abbildung 5.4: Richtungsfeld des Lotka-Volterra-Modells mit Lösungskurven zu verschiedenen Anfangswerten.

Die R-B-Ebene nennt man auch **Zustandsraum** oder **Phasenraum** des Systems, eine Lösungskurve auch Bahn oder Trajektorie[1]. Beides zusammen heißt auch **Pha-**

[1]Diese Bezeichnung ist etwas ungenau. Streng genommen ist die Trajektorie eine Abbildung

sendiagramm.

5.2.5 Teilgleichgewichte (Halbgleichgewichte, Isoklinen)

Im Richtungsfeld kann man zwei ausgezeichnete Richtungen erkennen. Die, wo die Richtungslinien, waagerecht verlaufen und die, wo die Richtungslinien senkrecht verlaufen. Diese ergeben sich, wenn man die Gleichungen aus 5.2 einzeln betrachtet. Die Gleichung für die Beute

$$\dot{B} = r \cdot B - b \cdot B \cdot R = (r - b \cdot R) \cdot B = 0$$

gilt für $B = 0$ und für $R = \frac{r}{b}$. Für diese Werte gilt, dass sich B nicht ändert. Die Richtungslinien laufen senkrecht. Das Teilgleichgewicht von B kann man also als die Menge aller Punkte im Phasenraum, für die B keine Änderung erfährt, definieren:

$$\text{Teilgleichgewicht von } B = \{\dot{B} = 0\} = \{(B, R) | (r - b \cdot R) \cdot B = 0\}$$

Analog kann man das Teilgleichgewicht für die Räuber definieren:

$$\dot{R} = b \cdot B \cdot R - s \cdot R = (b \cdot B - s) \cdot R = 0$$

gilt für $R = 0$ und $B = \frac{s}{b}$. Für diese Werte gilt, dass sich R nicht ändert. Die Richtungslinien laufen waagerecht.

$$\text{Teilgleichgewicht von } R = \{\dot{R} = 0\} = \{(B, R) |\ (b \cdot B - s) \cdot R = 0\}$$

Die Teilgleichgwichte sind in Abbildung 5.5 dargestellt. Die Schnittpunkte der Teilgleichgewichte sind gerade die Fixpunkte. Teilgleichgewichte werden auch Halbgleichgewichte oder Isoklinen genannt.

5.3 Rosenzweig-MacArthur-Modell

Das bisherige Modell kann natürlich verbessert werden. Folgende Verbesserungen fallen einem sofort ein:

der Zeit in den Zustandsraum, eine Lösung des Anfangswertproblem. Die Bahn ist das Bild, enthält also die Zeitinformation nicht mehr.

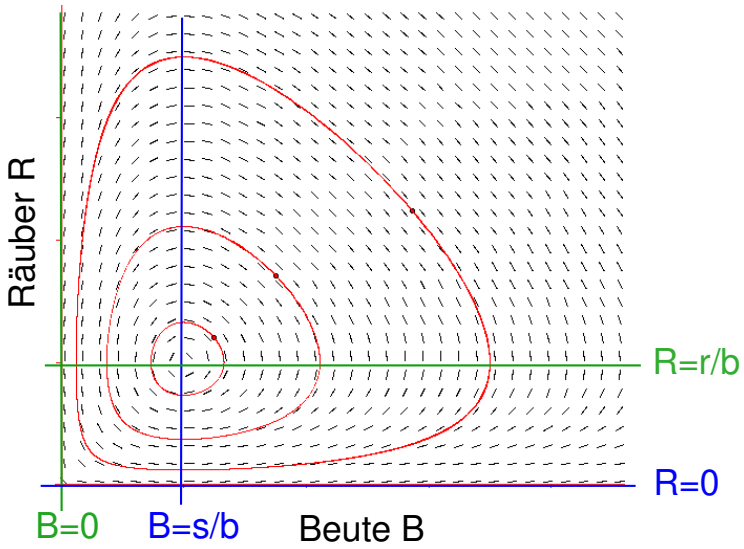


Abbildung 5.5: Teilgleichgewichte für das Lotka-Volterra-Modell. Die blauen Linien zeigen das Teilgleichgewicht $\{\dot{R} = 0\}$, die grünen Linien das Teilgleichgewicht $\{\dot{B} = 0\}$.

- Die Hasen dürfen nicht unbegrenzt wachsen, wenn keine Luchse da sind. Es muss eine Kapazität wie in Abschnitt 3.2 geben.
- Die Luchse müssen satt werden. Die Zunahme der Wachstumsrate der Luchse darf nicht linear von der Zahl der Hasen abhängen.
- Nur ein Teil der Hasen kann als Nahrung verwertet werden (Nahrungsverwertungseffizienz, "Fell und Knochen werden ausgeschieden").

5.3.1 Kapazität

Verbessern wir das Lotka-Volterra-Modell aus 5.2 nun dahingehend, dass wir eine Kapazität für Hasen berücksichtigen. In diesem Fall wird das Wachstum der Hasen durch Gleichung 4.4 beschrieben, und das vollständige Modell lautet:

$$\begin{aligned} \dot{B} &= r \cdot B \cdot \left(1 - \frac{B}{K}\right) - b \cdot B \cdot R \\ \dot{R} &= b \cdot B \cdot R - s \cdot R \end{aligned} \tag{5.3}$$

Die Modellergebnisse sind in Abbildung 5.4 für $K = 250$ und $K = 500$ dargestellt (andere Parameter wie bisher). Die Oszillationen sind nun mehr oder weniger stark gedämpft. Die Zahl der Hasen und Luchse strebt letztlich auf konstante Werte zu.

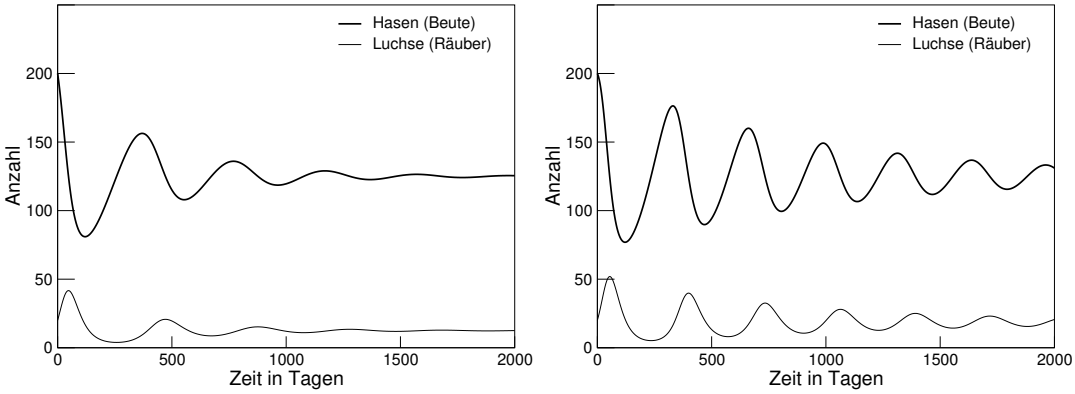


Abbildung 5.6: Lösungskurven des Räuber-Beute Systems mit einer Kapazität für die Hasen (Beute) von $K = 250$ (links) und $K = 500$ (rechts).

5.3.2 Sättigung

Will man nun zusätzlich berücksichtigen, dass die Luchse satt werden, so muss man anstelle der monoton steigenden Fressrate $b \cdot B$ eine Fressrate annehmen, die durch einen maximalen Wert begrenzt ist. Diese maximale Fressrate gibt an wie viel ein Luchs pro Zeiteinheit maximal fressen kann. Dies ist u.a. von der so genannten „handling time“ abhängig, der Zeitspanne, die ein Luchs benötigt, die Nahrung aufzunehmen (den Hasen zu zerlegen). Ein weiterer Faktor ist die Stoffwechselgeschwindigkeit, d.h. wie schnell Biomasse aus der Nahrung aufgebaut werden kann. Die tatsächliche Fressrate soll vom Nahrungsangebot abhängen. Hierbei kann man davon ausgehen, dass die Rate anfangs mehr oder weniger linear ansteigt und sich dann dem Maximalwert nähert.

Hierzu geeignet ist die **Monod-Funktion** (siehe Anhang A.7):

$$f(B) = b \cdot \frac{B}{B + M}$$

Die Funktion f geht für $B \to \infty$ gegen b. Somit ist b die maximale Wachstumsrate. Der Wert M ist die sogenannte Halbsättigungskonstante. Setzt man M in die Funktion f ein, so gilt $f(M) = \frac{b}{2}$. Es wird als gerade die Hälfte der maximalen Rate b erreicht. Die Wachstumsrate b ist in der Dimension 1/Zeit und hat z.B. die Einheit 1/Jahr, M hat dieselbe Dimension und Einheit wie B, also zum Beispiel Biomasse in kg. Der Graph der Monod-Funktion ist in Abbildung 5.8 für große und kleine Werte von M gegeben. Die Steigung bei $B = 0$ beträgt $\frac{1}{M}$. Für sehr kleine Halbsättigungskonstanten M ist die Fressrate f(B) für nahezu alle Beutekonzentrationen konstant. Der Räuber reagiert quasi nicht auf die Beutekonzentration. Beute

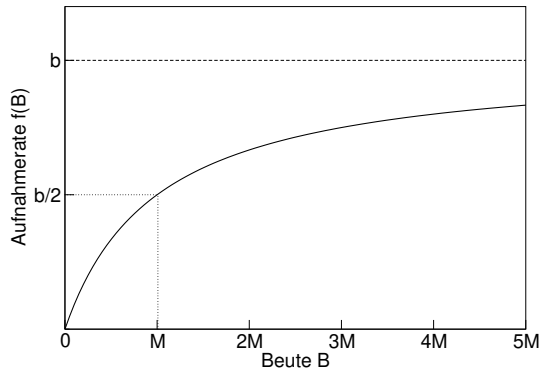


Abbildung 5.7: Graph der Monod-Funktion mit der Halbsättigungskonstanten M und dem Grenzwert b.

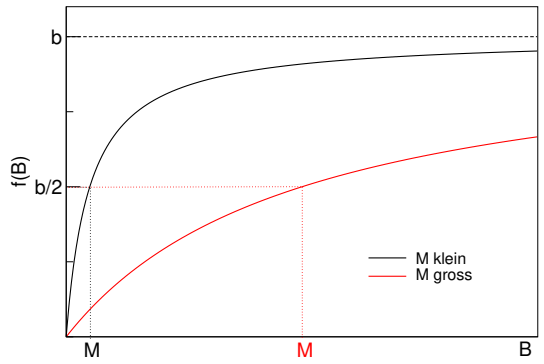


Abbildung 5.8: Graph der Monod-Funktion mit großer (rot) und keiner (schwarz) Halbsättigungskonstanten M und b = 1.

und Räuber schwingen sehr stark. Für große Halbsättigungskonstanten reagiert der Räuber auf die Beutekonzentration, das System wird stabilisiert (Abbildung 5.9). Für sehr große Werte von M (M >> K) wird die Fressrate nahezu null, der Räuber stirbt aus.

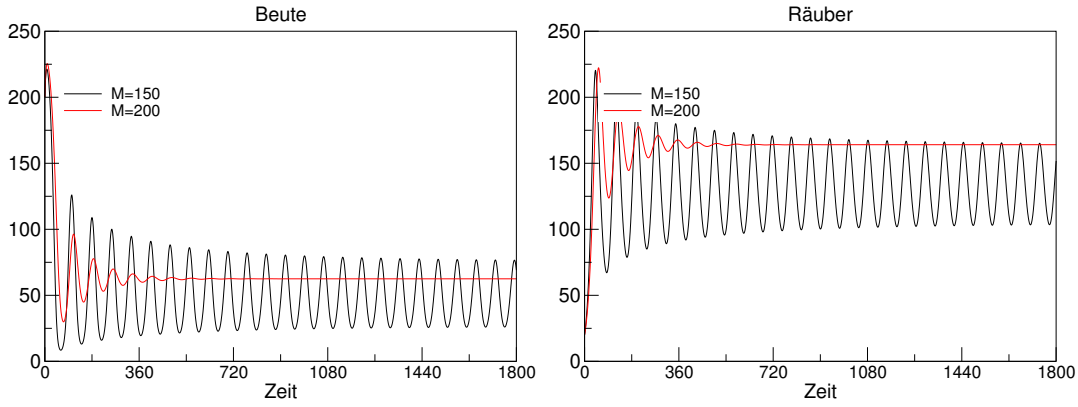


Abbildung 5.9: Simulationsergebnisse des Modells mit der Formulierung in Gleichung A.13 für M = 150 und M = 200. Weitere Parameterwerte: r = 0.25, K = 250, n = 0.7 s = 0.05, b = 0.3

5.3.3 Effizienz

Um zu berücksichtigen, dass nicht die gesamte durch den Räuber aufgenommene Beutebiomasse zu eigener Biomasse wird, wird ein dimensionsloser Parameter n eingeführt. Er kann Werte zwischen Null (keine Verwertung) und Eins (100%ige Verwertung) annehmen. Letzteres ist praktisch allerdings unmöglich. Dies geht auf ein physikalisches Grundprinzip zurück, den 2. Hauptsatz der Thermodynamik.

5.3.4 Modellgleichungen und Simulation

Man erhält nun folgendes allgemeinere Räuber-Beute-Modell ähnlich dem Modell von Rosenzweig und MacArthur [14] mit den Zustandsvariablen B und R und den Parametern gemäß Tabelle 5.1:

$$\begin{aligned} \dot{B} &= r \cdot B \cdot \left(1 - \frac{B}{K}\right) - b \cdot \frac{B}{B+M} \cdot R \\ \dot{R} &= n \cdot b \cdot \frac{B}{B+M} \cdot R - s \cdot R \end{aligned} \tag{5.4}$$

r	Wachstumsrate der Beute
K	Kapazität der Beute
b	maximale Aufnahmerate des Räubers
M	Halbsättigungskonstante des Räubers
n	Nahrungsaufnahmeeffizienz des Räubers
s	Sterberate des Räubers

Tabelle 5.1: Parameter des Rosenzweig-MacArthur-Modells

Eigentlich gibt es **das** Rosenzweig-MacArthur-Modell nicht. Es handelt sich vielmehr um eine Klasse von Modellen mit ähnlicher Struktur. Hier wird eine typische Realisierung behandelt.

Die Simulationsergebnisse sind in Abbildung 5.10 gegeben. Man sieht, dass das System bei bestimmten Parameterkonstellationen einen sogenannten **Grenzkreis** erreicht. Ein Grenzkreis stellt selbst eine geschlossen Lösung des Systems dar. Lösungen, die sich dem Grenzkreis nähern, erreichen diesen aber nicht erreichen, ihm aber beliebig nahe kommen.

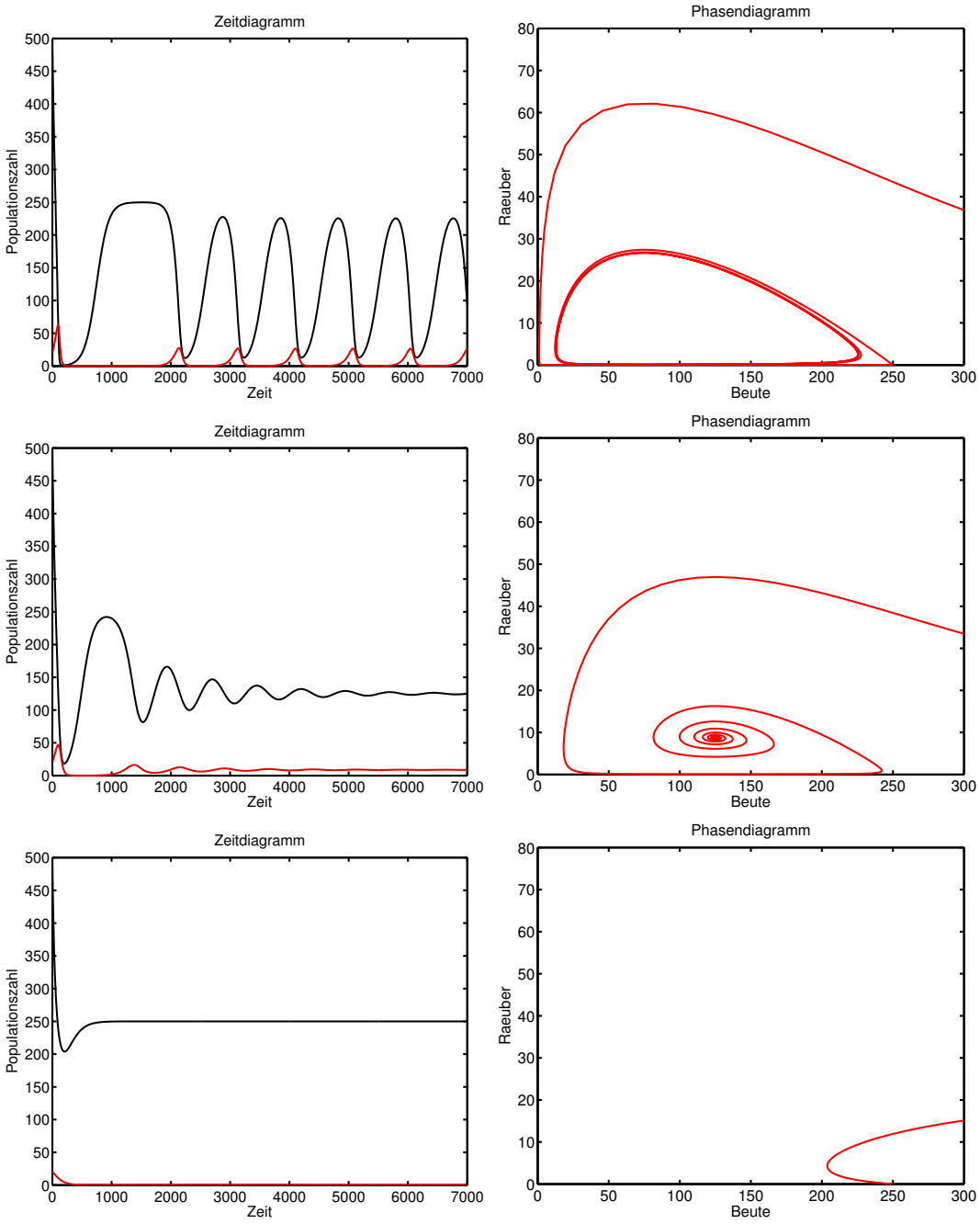


Abbildung 5.10: Simulationsergebnisse für das allgemeine Räuber-Beute-Modell nach 5.4 mit den Parametern r = 0.01, K = 250, M = 30, s = 0.05, n = 0.7, b = 0.1 (oben), r = 0.01, K = 250, M = 50, s = 0.05, n = 0.7, b = 0.1 (mitte) und r = 0.01, K = 250, M = 30, s = 0.07, n = 0.7, b = 0.1 (unten). Links ist jeweils das Zeitdiagramm (Beute:schwarz, Räuber:rot), rechts das Phasendiagramm dargestellt.

5.4 PZ-Modell

Das Räuber-Beute Modell lässt sich gut auf aquatische Systeme übertragen. Ein sehr einfaches Planktonmodell hat die zwei Zustandsvariablen Phytoplanktondichte (P) und Zooplanktondichte (Z). Wir geben diese Dichten in Biomasse an, z.B. $\mathrm{mg\,C\,m^{-3}}$. Zunächst wird das bisherige autonome Rosenzweig-MacArthur-Modell aus Abschnitt 5.3 betrachtet, eine Sommersituation ohne jahreszeitliche Veränderung. Für die Beute B wird das Phytoplankton P, für die Räuber R wird Zooplankton Z eingesetzt.

$$\dot{P} = r \cdot P \cdot \left(1 - \frac{P}{K}\right) - b \cdot \frac{P}{P+M} \cdot Z \tag{5.5}$$

$$\dot{Z} = n \cdot b \cdot \frac{P}{P+M} \cdot Z - m \cdot Z$$

Die Ratenkonstanten r, b und m tragen die Einheiten $\mathrm{d^{-1}}$, und n ist die Effizienz, die angibt, welcher Anteil der gefressenen Phytoplankton-Biomasse zum Aufbau von Zooplankton-Biomasse verwendet wird. Mit Erfahrung und der Hilfe von Planktologen lassen sich Schätzwerte für die 6 Parameter angeben (Tabelle 5.2). In Abbildung 5.11 sind Simulationsergebnisse mit dem Modell (5.5) und der angegebenen Parametrisierung dargestellt. Der Wert des Parameters M wurde einmal unter, einmal über dem kritischen Wert gewählt ($M = 900\,\mathrm{mg\,C\,m^{-3}}$ und $M = 1200\,\mathrm{mg\,C\,m^{-3}}$):

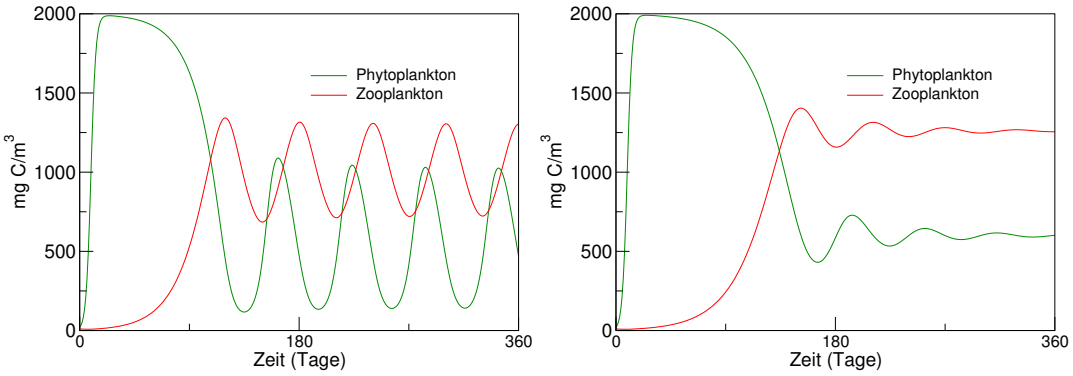


Abbildung 5.11: Simulationsergebnisse für das Planktonmodell (5.5). Je nach Parametrisierung sind die Räuber-Beute-Schwingungen ungedämpft (stabiler Grenzkreis) oder gedämpft (stabiler Fixpunkt).
Links: $M = 900\,\mathrm{mg\,C\,m^{-3}}$, rechts $M = 1200\,\mathrm{mMol\,N\,m^{-3}}$.

Das Planktonsystem ist in Wirklichkeit kein autonomes System, wie bisher ange-

$r = 0.5\,d^{-1}$	Phytoplanktonzellen teilen sich unter günstigen Bedingungen etwa alle 1-2 Tage: $r = \ln 2/G$ (Generationszeit G).
$K = 2000\,mg\,C\,m^{-3}$	Kapazität des Phytoplanktons
$b = 0.5\,d^{-1}$	Zooplankter, z.B. Copepoden, nehmen unter günstigsten Bedingungen etwa 50% des Körpergewichtes pro Tag auf
$M = 900\,mg\,C\,m^{-3}$	Konzentration des Phytoplanktons, bei der Zooplankton mit halber maximaler Geschwindigkeit frisst. Dies ist ein sehr unsicherer Parameter. In Wirklichkeit hängt die Fressgeschwindigkeit von der Vorgeschichte und vielen anderen Faktoren ab, die alle nicht berücksichtigt werden.
$n = 0.3$	30% der aufgenommenen Biomasse wird zum Aufbau neuer Biomasse verwertet.
$m = 0.05\,d^{-1}$	ca. 5% des Zooplanktons stirbt pro Tag. Das enthält alle Todesursachen: Fische, Krankheiten, aber auch die Ruherespiration (rest respiration). Auch dieser Parameter ist sehr unsicher und variabel.

Tabelle 5.2: Parameterwerte für das PZ-Modell

nommen. Vielmehr sind die jahreszeitlichen Veränderungen besonders in unseren Breiten von größter Bedeutung. Licht (Tageslänge und Einfallswinkel) und Temperatur ändern sich wesentlich. Dies führt zu der sogenannten Frühjahresblüte des Phytoplankton, nach niedrigen Abundanzen im Winter (Abbildung 5.12). Um diese Verläufe mit dem Modell simulieren zu können, muss das Modell (5.5) erweitert werden.

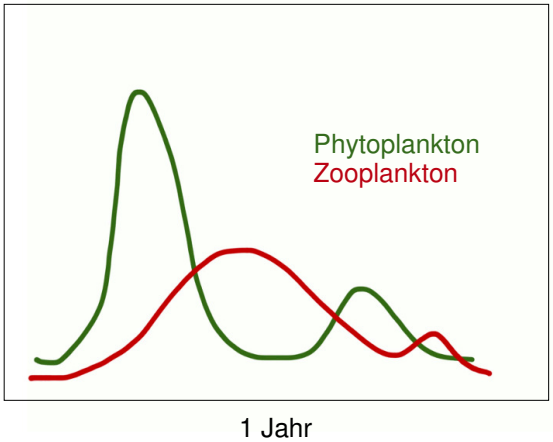


Abbildung 5.12: Schematische Darstellung der Jahresgänge von Phyto- und Zooplankton in gemäßigten Breiten.

Die Sonneneinstrahlung wird im folgenden als externer Antrieb für das Phytoplanktonwachstum berücksichtigt. Vereinfachend nehmen wir folgende Einstrahlungskurve an, bei der wir die Länge eines Modelljahrs auf 360 Tage setzen:

$$L(t) = 140\,W\,m^{-2} - 120\,W\,m^{-2} \cdot \cos\left(2\pi \frac{t + 10d}{360d}\right) \qquad \text{Einstrahlung in } W\,m^{-2}$$

Es handelt sich hierbei um Tagesmittelwerte. Die Einstrahlung ändert sich aufgrund der Tageslänge und durch den Kosinus des mittleren Sonnenstandes. Sie schwankt hier zwischen ca. $20\,W\,m^{-2}$ und $260\,W\,m^{-2}$. Dies gilt für gemäßigte Breiten (südliche Nordsee). Die Änderung durch wechselnde Bewölkung wird vernachlässigt.

Man bestimmt nun anhand von L(t) einen dimensionslosen Regulationsfaktor e_L, der die Wachstumsrate des Phytoplanktons beeinflusst. Die zeitabhängige tagesaktuelle Wachstumsrate r(t) ist dann

$$r(t) = r \cdot e_L$$

Der Faktor e_L soll in etwa zwischen 0.1 und 1 (für die gemäßigten Breiten also z.B. für die Nordsee). In diesem Fall kann der Parameter r als maximale Wachstumsrate interpretiert werden. Am einfachsten ist es also, L(t) zu skalieren:

$$e_L = \frac{L(t)}{L_{max}} \qquad \text{Lichtregulationsfaktor} \tag{5.6}$$

Der Parameter L_{max} ist die Einstrahlung, bei der e_L gerade 1 wird, also die Assimilation maximal wird.

Bemerkung: In realistischeren Modellen muss berücksichtigt werden, dass es sich bei L(t) um die astronomische Einstrahlung handelt. Daher muss der Einstrahlungswinkel entsprechend des Breitengrades, Streuung und Bewölkung in L_{max} berücksichtigt werden. Weiterhin kann Phytoplankton i.a. nicht die Energie des gesamten Spektrums nutzen sondern nur den PAR-Anteil (photosynthetic available radiance). Ein Daumenwert ist, dass 50% der Energie des sichtbaren Lichts genutzt werden können.

Man erhält nun das System

$$\dot{P} = r \cdot e_L \cdot \left(1 - \frac{P}{K}\right) \cdot Z - b \cdot \frac{P}{P+M} \cdot P \tag{5.7}$$

$$\dot{Z} = n \cdot b \cdot \frac{P}{P+M} \cdot Z - m \cdot Z$$

Setzt man den Regulationsfaktor auf 1, so hat man wieder das System (5.5).

In Abbildung 5.13 sind Simulationsergebnisse dargestellt. Die Anfangsbedingungen am ersten Simulationstag sind nicht bekannt, sie hängen in der Realität vom Vorjahr ab. Nach zwei Jahren sind Anfangsbedingungen nahezu "vergessen"- das System hat sich eingeschwungen. Die Parameterwahl für das Modell entspricht

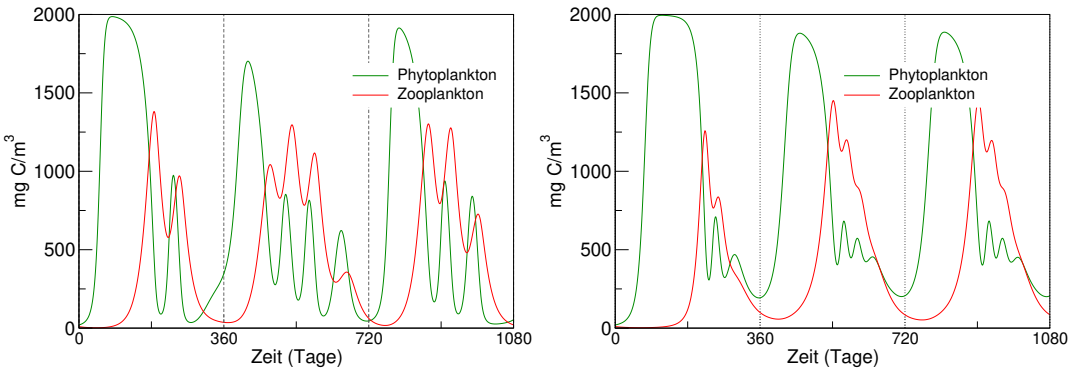


Abbildung 5.13: Simulationen des Modells (5.7) mit Lichtforcing für 3 Modelljahre. Links treten im Sommer starke Schwingungen auf ($M = 900\,mg\,C\ m^{-3}$), rechts sind die Schwingungen gedämpft ($M = 1200\,mg\,C\ m^{-3}$)

nur sehr weitläufig den realen Gegebenheiten. Das Modell ist noch zu einfach, um die Realität gut widerspiegeln zu können. Insbesondere wird in unseren Breiten ein wesentlich schmaleres Frühjahresmaximum des Phytoplanktons beobachtet, da Zooplankton erfolgreiche Überwinterungsstrategien besitzt. Seine Dichte sinkt im Winter viel weniger ab als im Modell.

6 Zweidimensionale diskrete Modelle

6.1 Fibonacci und die Kaninchen

Leonardo da Pisa, auch Fibonacci (Leonardus filius Bonacij, Sohn des Bonacci, geboren ca. 1170) genannt, war italienischer Mathematiker und gilt als der bedeutendste Mathematiker des Mittelalters. Er brachte das arabische Zahlensystem nach Europa. Bekannt sind heute vor allem die nach ihm benannten Fibonacci-Zahlen.

Die Fibonacci-Zahlen sind eine Zahlenfolge, die sich daraus ergibt, dass eine Zahl jeweils die Summe ihrer beiden Vorgänger ist. Begonnen wird hierbei mit 1 1:

1 1 2 3 5 8 13 21 34 55 ...

Das Bildungsgesetz kann man wie folgt formalisieren:

$$x_{n+1} = x_{n-1} + x_n$$

wobei $x_0 = 1$ und $x_1 = 1$ die sogenannten Anfangswerte sind.

In seinem "Buch der Rechenkunst" (ca. 1202) beschreibt er die Zahlenfolge anhand des Beispiels eines Kaninchenzüchters der herausfinden will, wie viele Kaninchenpaare innerhalb eines Jahres aus einem einzigen Paar entstehen, wenn jedes Paar ab dem zweiten Lebensmonat ein weiteres Paar pro Monat zur Welt bringt. Er kann somit als Begründer der mathematischen Modellierung angesehen werden.

Fibonacci veranschaulichte diese Folge durch die mathematischen Modellierung des Wachstums einer Kaninchenpopulation:

1. Zu Beginn gibt es ein Paar geschlechtsreifer (reproduktiver) Kaninchen.
2. Jedes neugeborene Paar wird im zweiten Lebensmonat geschlechtsreif.
3. Jedes geschlechtsreife Paar wirft pro Monat ein weiteres Paar.
4. Es kommen keine Tiere von außen in die Population oder verlassen diese

Das erste Paar erzeugt seinen Nachwuchs im ersten Monat. Jeden Folgemonat

kommt dann zu der Anzahl der Paare, die im letzten Monat gelebt haben, eine Anzahl von neugeborenen Paaren hinzu, die gleich der Anzahl der Paare ist, die bereits im vorletzten Monat gelebt haben, da genau diese geschlechtsreif sind und sich nun vermehren (Abbildung 6.1).

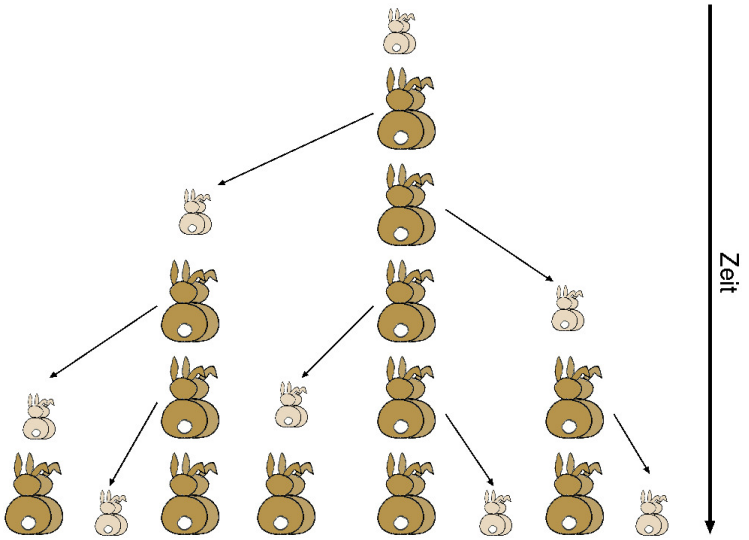


Abbildung 6.1: Kaninchenwachstum nach Fibonacci.

Festlegung der Zustandsvariabelen

Die Kaninchenpaare (im folgenden kurz Kaninchen genannt) unterscheiden sich durch die Eigenschaft der Reproduktivität. Es gibt Neugeborene, die sich noch nicht vermehren können, und bereits Reproduktive. Da wir Aussagen über die Anzahl der Kaninchen von Monat zu Monat bestimmen wollen, liegt es Nahe die Zeit in Monatsschritten zu betrachten. Somit liegt es nahe, als Zustandsvariablen die Neugeborenen zur Zeit (N_n) und die Reproduktiven zur Zeit t (R_n) zu beschreiben. Wir erhalten also die Zustandsvariablen

N_n,	$n \in \mathbb{N}_0$	die Anzahl der Neugeborenen(paare)
R_n,	$n \in \mathbb{N}_0$	die Anzahl der Reproduktiven(paare)

Die Gesamtzahl der Kaninchen(paare) F_n ergibt sich dann zu

$$F_n = N_n + R_n$$

F_n ist keine Zustandsvariable, sondern eine abgeleitete Größe.

Prozessbeschreibungen

Gesucht ist eine Funktion f (hier eine Folge), die zu jeder Zeit n die Werte N_n und R_n angibt:

$$\begin{array}{rcl} f : \mathbb{N} & \longrightarrow & \mathbb{N} \times \mathbb{N} \\ n & \mapsto & (N_n, R_n) \end{array} \tag{6.1}$$

Die Prozesse, die f bestimmen, sind:
Reproduktion: Reproduktive Kaninchen bringen Neugeborene hervor
Altern: Neugeborene Kaninchen werden reproduktiv

Man erhält folgende Gleichungen

$$\begin{array}{lll} N_{n+1} & = N_n + R_n - N_n & = R_n \\ R_{n+1} & = R_n + N_n & = R_n + N_n \end{array}$$

Diese Gleichungen sind nun die Vorschrift, wie man aus den Kaninchenzahlen zur Zeit n die Zahl zur Zeit $n + 1$ bestimmt. Zusammen mit der Anfangsbedingung $N_0 = 1$, $R_0 = 0$ hat man das System nun vollständig beschrieben.

Das Modell "arbeitet" mit diskreten Zeitschritten. Mathematisch handelt es sich daher um ein Differenzenmodell.

6.2 Das Fibonacci-Modell als zweidimensionales Modell

Das Modell kann man nun auch als zweidimensionales Modell auffassen, bei dem die Zustände N und R nun zu einem Zustandsvektor zusammengefasst werden:

$$\begin{pmatrix} N_{n+1} \\ R_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_n \\ R_n + N_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} N_n \\ R_n \end{pmatrix} \tag{6.2}$$

Der Zustand zur Zeit $n + 1$ wird also aus dem Zustand zur Zeit n durch Multiplikation mit einer Matrix mit konstanten Elementen erreicht. Solche Modelle nennt

man **lineare Modelle**. Informationen zu Vektoren und Matrizen sind in Anhang E zusammengefasst. Weitere Informationen zu Matrizen als lineare Abbildungen findet man in Anhang F.

6.3 Lösung des Systems

Viele einfache Modelle kann man noch analytisch lösen. Dies bedeutet, dass man eine Funktion findet, die den Systemzustand für jeden Zeitpunkt explizit angibt. Bei größeren Modellen ist dies meistens nicht mehr möglich. Man löst sie iterativ, d.h. man berechnet den Verlauf von Schritt zu Schritt. Wenn man dies für das Kaninchenmodell tut, stellt man fest, dass die abgeleitete Größe $F_n = N_n + R_n$, die die Gesamtzahl der Kaninchen angibt, gerade die Fibonacci-Zahlen sind.

n	0	1	2	3	4	5	...
N	1	0	1	1	2	3	...
R	0	1	1	2	3	5	...
F	1	1	2	3	5	8	...

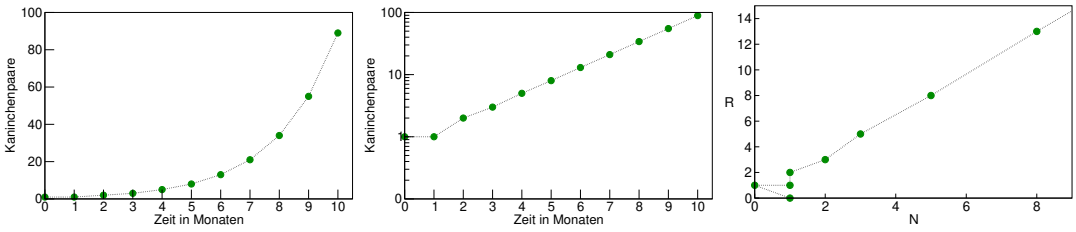


Abbildung 6.2: Das Kaninchenmodell nach Fibonacci. Die ersten Schritte, links linear, mitte logarithmisch, rechts Phasenraum.

Wie Abbildung 6.2 (Mitte) zeigt, besteht ein linearer Zusammenhang, wenn man den Logarithmus der Ergebnisse betrachtet:

$$\log F_n \sim n \qquad \text{resp.} \qquad \log F_n = r \cdot n \qquad \text{resp.} \qquad F_n = 10^{r \cdot n}$$

Es handelt sich also um ein exponentielles Wachstum mit der Proportionalitätskonstanten r (hier nicht weiter bestimmt).

Iterativ bestimmt man die Lösung des Fibonacci-Modells, indem man die Fibonacci-

Matrix

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

immer wieder auf den Vektor $x = \begin{pmatrix} N \\ R \end{pmatrix}$ anwendet, wobei mit $x_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ gestartet wird:

$$\begin{aligned} x_1 &= A \cdot x_0 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ x_2 &= A \cdot x_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \\ &\dots \\ x_n &= A \cdot x_{n-1} = A^n \cdot x_0 \end{aligned}$$

Man erhält so die Lösung

$$\left[\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}, \dots \right]$$

Wir haben hier also allgemein betrachtet ein lineares System der Form

$$x_{n+1} = A \cdot x_n \tag{6.3}$$

wobei A eine Matrix und x_n resp. x_{n+1} Vektoren sind.

Trägt man N_n und R_n des Fibonacci-Modells 6.2 im sogenannten Phasenraum auf (Abbildung 6.2, rechts), so sieht man, dass sich das System nach kurzer Einschwingphase nur noch in eine Richtung bewegt, also dass das Verhältnis von Neugeborenen zu Reproduktiven konstant wird. Dieses Verhältnis bzw. Richtung kann man bestimmen. Wenn sich das System nur noch in eine Richtung bewegt, bedeutet das, das ein Vektor unter Anwendung der Matrix seine Richtung nicht ändert, also nur gestreckt oder gestaucht wird. Einen solchen Vektor nennt man auch **Eigenvektor**, den Streckungs- bzw. Stauchungswert **Eigenwert** (siehe Anhang E und Anhang F). Wenn wir diese Richtung, in die das System läuft bestimmen wollen, müssen wir also Eigenwerte und Eigenvektoren bestimmen. Man sucht also

eine Zahl λ, den Eigenwert, und einen Vektor v, den Eigenvektor, für die gilt

$$A \cdot v = \lambda \cdot v$$

Dies bedeutet, dass die Matrix A den Eigenvektor v gerade um den Eigenwert λ streckt[1].

Um die Eigenwerte zu bestimmen, löst man die sogenannte **charakteristische Gleichung** (siehe auch Anhang F):

$$\det(A - \lambda \cdot I) = \det\left(\begin{pmatrix} 0-\lambda & 1 \\ 1 & 1-\lambda \end{pmatrix}\right) = -\lambda \cdot (1-\lambda) - 1 = 0$$

Im Falle der Fibonacci-Matrix erhält man 2 verschiedene reelle Eigenwerte mit ihren zugehörigen Eigenvektoren:

$$\lambda_1 = \frac{1+\sqrt{5}}{2} = 1.618 \qquad v_1 = c_1 \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ \lambda_1 \end{pmatrix}, c_1 \neq 0$$

In die Richtung von v_1 findet eine Streckung um den Faktor λ_1 statt.

$$\lambda_2 = \frac{1-\sqrt{5}}{2} = -0.618 \qquad v_2 = c_2 \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ \lambda_2 \end{pmatrix}, c_2 \neq 0$$

In die Richtung von v_2 findet eine alternierende Stauchung um den Faktor λ_2 statt, die Bedeutung dieser Richtung wird also immer kleiner. Nach einer gewissen Zeit "wirkt" nur noch λ_1. Letztlich gilt also näherungsweise $x_{n+1} = \lambda_1 \cdot x_n$.

6.4 Überlagerung von Lösungen – Anfangswertproblem*

Die Mathematik liefert uns einen weiteren sehr weitreichenden Aspekt. Wenn man verschiedene Lösungen eines linearen Systems gefunden hat, dann ist jede Linearkombination dieser Lösungen auch eine Lösung. Wir haben bisher zwei Lösungen gefunden, die das Systemverhalten beschreiben, nämlich

$$x_n = \lambda_1^n \cdot v_1 \tag{6.4}$$

[1] Eigenwerte werden in der Literatur fast ausnahmslos mit dem griechischen Buchstaben λ (Lambda) bezeichnet.

und

$$x_n = \lambda_2^n \cdot v_2 \tag{6.5}$$

Welche Lösung ist denn nun die „Richtige“? Diese Frage kann man nur beantworten, wenn man nach einer bestimmten Lösung zu einem bestimmten Anfangswert sucht. Hierbei ist natürlich zu berücksichtigen, dass ein Anfangswert hier ein Anfangsvektor ist (Anzahl neugeborener und Anzahl Reproduktiver).

Die bisherigen gefunden Lösungen sagen bisher folgendes aus: Startet man mit einem Verhältnis von Neugeborenen zu Reproduktiven, dass dem eines Eigenvektors v_1 zum ersten Eigenwert λ_1 entspricht, so bleibt dieses Verhältnis bestehen. Die Lösung zu diesem Anfangswert v_1 ist dann (6.4). Das gleiche gilt für einen Eigenvektor v_2 zum zweiten Eigenwert λ_2. Die Lösung ist dann (6.5). Es handelt sich jeweils um eine spezielle Lösung zu einem gegebenen Anfangswert. Zu Anfangswerten, die nicht dem Verhältnis der Eigenwerte entsprechen, ergibt sich die spezielle Lösung aus der Überlagerung der Lösungen (6.4) und (6.5), da es sich um ein lineares Modell handelt. Man nennt dies auch **Superposition**. Seien v_1 und v_2 nun Eigenvektoren zu λ_1 und λ_2, so heißt

$$x_n = a_1 \cdot \lambda_1^n \cdot v_1 + a_2 \cdot \lambda_2^n \cdot v_2 \tag{6.6}$$

für beliebige $a_1, a_2 \in \mathbb{R}$ eine **allgemeine Lösung**.

Um eine spezielle Lösung zu einem bestimmten Anfangswert zu erhalten, muss man a_1 und a_2 bestimmen.

Angenommen, wir haben den Anfangswert x_0 gegeben, dann setzt man in Gleichung 6.6 n=0 und erhält[2]:

$$x_0 = a_1 \cdot \lambda_1^0 \cdot v_1 + a_2 \lambda_2^0 \cdot v_2 = a_1 \cdot v_1 + a_2 \cdot v_2$$

Man hat so ein Gleichungssystem mit den zwei Unbekannten a_1 und a_2, das zu lösen ist.

[2]Haben wir zum Beispiel zu Beginn ein paar Neugeborene und keine Reproduktiven, so lautet der Anfangsvektor $x_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$

6.5 Fibonacci und der goldene Schnitt*

Zwei aufeinanderfolgende Fibonacci-Zahlen stehen im Verhältnis $\lambda_1 : 1$ zueinander: $F_{n+1} = \lambda_1 \cdot F_n$, also $F_{n+1} : F_n = \lambda_1 = \frac{1+\sqrt{5}}{2} \approx 1.618$. Dieses Verhältnis ist eine berühmte Zahl und beschreibt in Kunst und Architektur ein Verhältnis, das als besonders harmonisch empfunden wird. Es heißt auch **goldener Schnitt** und findet sich z.B. bei Bilderrahmen: Ein Rechteck mit den Seitenlängen a und b ($a > b$) genügt dem goldenen Schnitt wenn, gilt:

$$(a + b) : a = a : b$$

Zum Beweis setzt man b=1 und löst nach a auf.

7 Altersklassenmodelle

Streng genommen ist das Kaninchenmodell nach Fibonacci (Abschnitt 6.1) ein Altersklassenmodell. Dort wurde zwischen neugeborenen und reproduktiven Kaninchenpaaren unterschieden. Dieses Prinzip kann man natürlich weiter verfeinern. Bei vielen Arten macht es Sinn, mehr als 2 Altersklassen zu betrachten. Beim antarktischen Krill ist es aufgrund seines Lebenszyklus' sinnvoll zwischen Larven, juvenilem Krill und adultem Krill zu unterscheiden. Aus adultem Krill gehen Larven hervor, von denen nur ein geringer Anteil das Juvenilenstadium erreichen. Juveniler Krill reift zu adulten Tieren[1]. Dies kann man mit einem Modell beschreiben:
Sei $x_1(n)$ die Anzahl der Larven, $x_2(n)$ die Anzahl der Juvenilen und $x_3(n)$ die Anzahl der Adulten zum Zeitpunkt n, wobei, wie bei Altersklassenmodellen üblich, nur die weiblichen Tiere gezählt werden. Geht man nun davon aus, dass jedes adulte Weibchen eine gewisse Anzahl von Eiern legt, aus denen in einem Zeitschritt 600 Larven hervorgehen, so gilt für die Larven

$$x_1(n+1) = 600 \cdot x_3(n) \tag{7.1}$$

Dabei wird angenommen, dass sämtliche Larven zur Zeit n im nächsten Zeitschritt entweder verstorben oder zu Juvenilen herangewachsen sind. Geht man weiterhin davon aus, dass ca. 1% der Larven tatsächlich zu Juvenilen reifen und alle bisherigen Juvenilen entweder versterben oder zu Adulten heranreifen, gilt

$$x_2(n+1) = 0.01 \cdot x_1(n) \tag{7.2}$$

und mit der Annahme, dass tatsächlich nur 10% das Adultenstadium erreichen und in jedem Zeitschritt 50% der Adulten versterben gilt

$$x_3(n+1) = 0.1 \cdot x_2(n) - 0.5 \cdot x_3(n) \tag{7.3}$$

Diese Modell kann man nun kompakt mit einer Matrix L schreiben

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}_{n+1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 600 \\ 0.01 & 0 & 0 \\ 0 & 0.1 & 0.5 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}_n = L \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}_n \tag{7.4}$$

[1] Man könnte natürlich auch die Eier als erste Altersklasse betrachten und dann insgesamt 4 Klassen berücksichtigen.

Wie lang ein Zeitschritt sinnvollerweise gewählt wird, ergibt sich aus dem tatsächlichen Lebenszyklus des Krills. Falls die Reifung von Larven zu Juvenilen bzw. von Juvenilen zu Adulten zu unterschiedlich ist, muss man gegebenenfalls mehr Altersklassen einführen. Man erhält dann ganz allgemein das „Altersklassenmodell nach Leslie“ mit N Altersklassen:

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_N \end{pmatrix}_{n+1} = \begin{pmatrix} f_1 & f_2 & f_3 \dots & f_{N-1} & f_N \\ s_1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & s_2 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & s_{N-1} & s_N \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_N \end{pmatrix}_n = L \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_N \end{pmatrix}_n \tag{7.5}$$

Die Matrix L heisst auch Übergangsmatrix. Für $s_N = 0$ erhält man die klassische Leslie-Matrix[2]. Die Parameter f_1 bis f_N geben an, wie viele Nachkommen die jeweiligen Altersklassen hervorbringen (f steht für fertility). Es wird angenommen, dass die Nachkommen in Altersklasse 1 geboren werden. Meistens ist $f_1 = 0$. Im Krillmodell bringt nur die Klasse der Adulten Nachkommen hervor. Die Parameter s_1 bis s_{N-1} geben an, wie viele Individuen einer Altersklasse altern und in die nächste Klasse kommen. Der Rest stirbt (s steht für survival). Der Parameter s_N gibt an, wie viele Individuen der letzten Altersklasse überleben und dort bleiben. Für $s_N = 0$ erhält man das klassische Leslie-Modell, bei dem angenommen wird, dass alle Individuen der letzten Altersklasse innerhalb eines Zeitschritts sterben.

Zusammen mit der Anfangsverteilung $\vec{x}_0 = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_N \end{pmatrix}_0$ ist das Modell vollständig beschrieben.

Eine häufige Fragestellung bei der Untersuchung von Populationen ist, inwieweit die Population über die Zeit stabil ist, d.h. ob das Verhältnis der Größen der Altersklassen untereinander gleich bleibt und inwieweit die Populationsgröße als ganzes konstant bleibt oder ob die Population ausstirbt oder wächst.

Betrachten wir dazu das Krillmodell (7.4) und formalisieren wird zunächst die Fragestellung nach der Populationszusammensetzung:
Die Frage ist, ob letztlich (also für immer weiter wachsendes n) die Verhältnisse

[2]Häufig wird die Indizierung bei 0 begonnen. Dies macht aber die Umsetzung in Matlab schwieriger.

$x_1 : x_2$, $x_1 : x_3$ und $x_3 : x_1$ konstant werden. Dies bedeutet anschaulich, dass der Vektor $(x_1, x_2, x_3)_n$ mit wachsendem n letztlich seine Richtung nicht mehr verändert. Nach dem Superpositionsprinzip (vgl. 6.4) ist die allgemeine Lösung des Modells durch die Eigenwerte λ und die zugehörigen Eigenvektoren $\vec{v}$ der Matrix L bestimmt:

$$\vec{x}_n = a_1 \cdot \lambda_1^n \cdot \vec{v}_1 + a_2 \cdot \lambda_2^n \cdot \vec{v}_2 + a_3 \cdot \lambda_3^n \cdot \vec{v}_3 \tag{7.6}$$

für beliebige $a_1, a_2, a_3 \in \mathbb{R}$. Eine spezielle Lösung erhält man, indem man die a_i, $i = 1, 2, 3$ aus dem Anfangswert $\vec{x}_0$ bestimmt. Das Modell hat einen reellen und zwei komplexe Eigenwerte. Der reelle Eigenwert beträgt $\lambda_1 \approx 1.05$, die komplexen Eigenwerte haben Beträge kleiner als 1. Für wachsendes n wird die Lösung also in Richtung des ersten Eigenvektors streben, da für großes n gilt

$$\vec{x}_n \approx a_1 \cdot \lambda_1^n \cdot \vec{v}_1 \tag{7.7}$$

Die Richtung des ersten Eigenvektors gibt an, in welchem Verhältnis die einzelnen Altersklassen langfristig stehen, der erste (betragsmäßig größte) Eigenwert gibt an, um wie viel die Population in jedem Zeitschritt wächst (hier ca. 5%).

Das Ergebnis ist in Abbildung 7.1 dargestellt. Die Population wächst nach einer

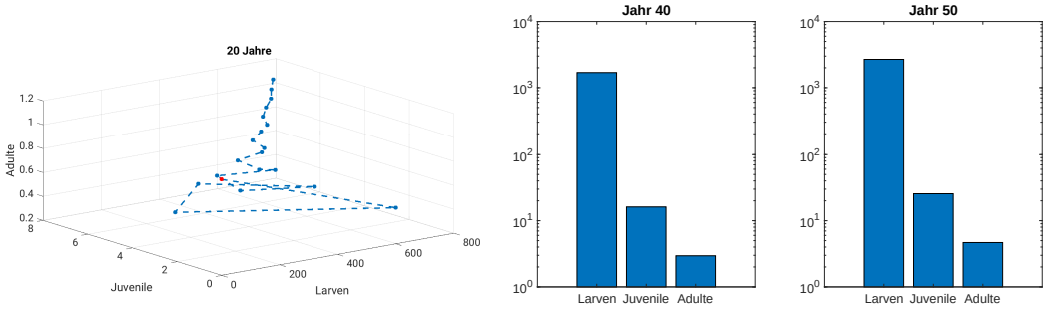


Abbildung 7.1: Links: Wachstum des Krills über 20 Jahre. Der Anfangswert ist rot markiert. Nach ein paar Jahren stellt sich eine stabile Altersverteilung zwischen Larven (x_1), Juvenilen (x_2) und Adulten (x_3) ein. Rechts: Absolutzahlen der Altersklassen nach 40 (Mitte) bzw. 50 (rechts) Jahren und zugehörige Verhältnisse (unten).

gewissen Zeit in die Richtung des ersten Eigenvektors. Die Struktur der Altersverteilung ändert sich also nicht mehr. Die Populationsgröße nimmt von Zeitschritt zu Zeitschritt zu, da der maßgebliche Eigenwert größer als eins ist.

Konstante Populationsgröße

Ist der größte Eigenwert genau eins, bleibt die Populationsgröße und die Altersstruktur nach einer gewissen Zeit konstant. Das Modell hat dort einen Fixpunkt, denn mit $\lambda_1 = 1$ gilt dann für große n

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}_{n+1} = L \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}_n = \lambda_1 \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}_n = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}_n \tag{7.8}$$

Die Vektoren $\overrightarrow{x}_{n+1}$ und $\overrightarrow{x}_n$ stimmen also für große n überein. Damit verändert sich an den Abundanzen nichts mehr. Es handelt sich aber natürlich um ein Fließgleichgewicht.

8 Zelluläre Automaten

Bei der Beschreibung von Prozessen in der Natur spielt nicht nur die Veränderung der Zustandsgrößen im Laufe der Zeit eine Rolle. Häufig möchte man zusätzlich auch Informationen über die räumliche Verteilung haben. Stellt man sich eine Rasenfläche vor, und möchte man die Grasmenge auf dieser Fläche modellieren, so kann man natürlich ein Modell entwickeln, dass die Grasmenge auf dieser Fläche im Laufe der Jahreszeiten beschreibt. Dann hat man aber keinerlei Informationen darüber, ob auf dieser Rasenfläche an einigen Stellen braune Stellen oder dicke Grasbüschel existieren. Hierzu benötigt man ein Modell, das die Grasfläche räumlich beschreibt. Hierzu kann man die Rasenfläche zum Beispiel in Quadrate einteilen. Man kann nun Wachstumsregeln aufstellen, die das Graswachstum beschreiben. Ist z.B. ein Quadrat von braunen Stellen umgeben, d.h., dass auf den Nachbarquadraten sehr wenig Gras ist, so wird das Gras auch in der Mitte schlecht wachsen, da der Schutz vor Wind fehlt. Sind um ein Quadrat dicke Grasbüschel, so werden die Nährstoffe knapp und auch dann kann das Gras schlecht wachsen.

Das Konzept der sogenannten zellulären Automaten wurde 1940 vom Mathematiker Stanislav Ulam (1909-1984) entwickelt. John von Neumann (1903-1957), ein bedeutender Mathematiker und Begründer der Informatik, entwickelte das Konzept weiter. Einer der berühmtesten Automaten ist **Game of Life** ($\sim$1970) von John Horton Conway (1937-2020).

8.1 Universum nach Stephan Wolfram*

Ein eindimensionaler Automat wurde vom britischen Physiker Stephen Wolfram (*1959) entwickelt. Wolfram ist der Entwickler von Mathematica und der Suchmaschine Wolfram Alpha. Sein Buch [20] beschreibt viele Anwendungen zellulärer Automaten.

Ein einfaches Beispiel ist folgender Automat: Wir teilen den Raum in eine Reihe von Zellen auf (z.B. 150). Jede Zelle kann den Zustand tot oder lebendig (0 oder 1) annehmen. Nun kann man mit einer lebendigen Zelle in der Mitte starten.

Die Konstellation im nächsten Schritt ergibt sich nach folgender Regel:

- Eine Zelle erhält den neuen Zustand 1, wenn in dem Dreierblock aus ihr

selbst und ihren zwei Nachbarn ein oder zwei lebendige Zellen waren.

- Eine Zelle erhält den neuen Zustand 0, wenn in dem Dreierblock aus ihr selbst und ihren zwei Nachbarn null oder 3 lebendige Zellen waren.

Nun kann man die Generationen untereinander auftragen und erhält folgendes Ergebnis (Abbildung 8.1).

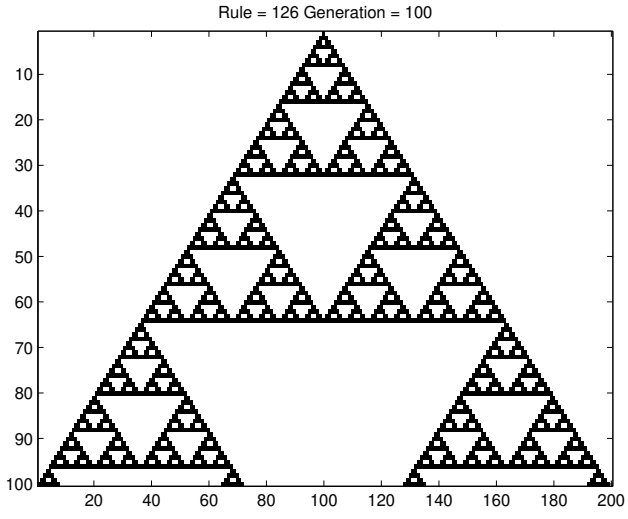


Abbildung 8.1: Wolfram Universum. Die Zeit läuft von oben nach unten

Wenn die letzte Zelle wieder an die erste angehängt wird (Ring), haben auch die Randzellen 2 Nachbarn. Man kann dann mehr Generationen rechnen, ohne Randeffekte zu erhalten.

Man kann die Regeln wie folgt formalisieren:

1	1	1	1	1	0	1	0	1	1	0	0	0	1	1	0	1	0	0	0	1	0	0	0
	↓			↓			↓			↓			↓			↓			↓			↓	
	0			1			1			1			1			1			1			0	

Man kann sich nun viele Regeln ausdenken, die jeweils eindeutig durch eine achtstellige Binärzahl dargestellt werden, wenn man sich auf die Reihenfolge der Triplets einigt. Wolfram hat die obige Reihenfolge benutzt und die achtstellige Binärzahl in eine Dezimalzahl gewandelt. So konnte er alle möglichen Regeln einfach von 0 bis

255 "benennen". Insgesamt gibt es also 256 Regelsätze. Die obige Regel ist dann die Nummer 126 (Binär 01111110).

8.2 Conway's Game of Life

Ein berühmter Automat ist LIFE. Er wurde von John Horton Conway im Jahre 1970 zur Beschreibung einer fiktiven Bevölkerung entwickelt. Jedes Quadrat, auch Zelle genannt, kann hierbei zwei Zustände annehmen, tot (0) oder lebendig (1). Conway hat folgende Regeln aufgestellt:

1. Eine Zelle wird geboren, wenn sie drei lebende Nachbarn hat.
2. Eine Zelle bleibt am Leben, wenn sie zwei oder drei lebende Nachbarn hat.
3. Eine Zelle stirbt an Vereinsamung oder Überbevölkerung, wenn sie weniger als zwei oder mehr als drei lebende Nachbarn hat.
4. Nachbarn sind die 8 Zellen um eine Zelle herum.

Mit diesen Regeln ergeben sich interessante Ergebnisse. Es gibt Konstellationen, die sich über die Zeit nicht ändern, andere die Zyklen durchlaufen, welche die sich über das Feld bewegen (Gleiter) und solche, die in gewissen Abständen Gleiter aussenden.

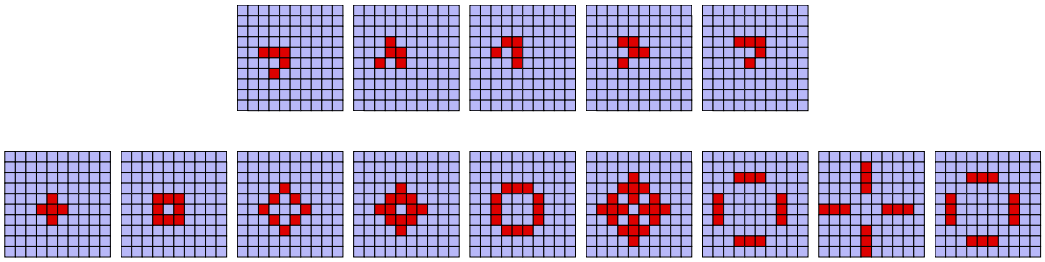


Abbildung 8.2: Gleiter (oben) und Zyklus (unten) in Life

8.3 Zirkulärer Raum*

Der zirkuläre Raum ist ein berühmtes Beispiel für Selbstorganisation. Nach einer geringen Anzahl von Schritten bilden sich Strukturen heraus.

- Es gibt N mögliche Zustände

- Der Zustand der Zelle wird um Eins erhöht, wenn mindestens ein Nachbar den Zustand der Zelle plus Eins hat.
- Jede Zelle hat 4 Nachbarn (links, rechts, oben und unten)
- Der Zustand 0 wird mit dem Zustand N gleichgesetzt

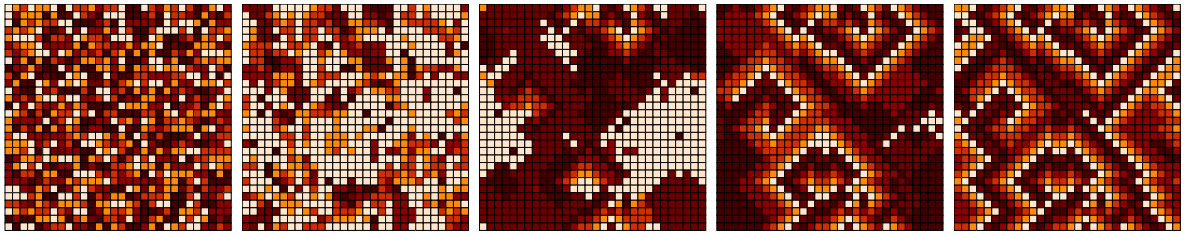


Abbildung 8.3: Selbstorganisation im zirkulären Raum mit N=6 Zuständen. Zwischen den Bildern liegen jeweils 6 Generationen

8.4 Charakteristika von zellulären Automaten

Die Charakteristika von zellulären Automaten kann man wie folgt zusammenfassen:

- Entwicklung in Raum und Zeit
- diskrete Anzahl an Zellen
- endliche Anzahl an Zuständen für jede Zelle (kann man aufweichen)
- Änderung der Zustände in diskreten Zeitschritten
- Zustand hängt von den Nachbarzellen (und evtl. der Zelle selbst) ab
- alle Zellen Verhalten sich nach den gleichen Regeln

Nachbarschaftsbeziehungen

Der Zustand einer Zelle hängt von den Zuständen seiner Nachbarn ab. Man kann verschiedene Nachbarschaftsbeziehungen betrachten.

- 4 Nachbarn (oben,unten, rechts und links)
- 8 Nachbarn (alle direkt angrenzenden Zellen)
- die Zelle selbst kann zu den Nachbarn gezählt werden
- entferntere Zellen werden hinzugenommen

Randbedingungen

Man kann die Ränder offen lassen, so dass die Randzellen einfach weniger Nachbarn haben. In diesem Fall wird der Zustand der Randzellen je nach Automat anders ausfallen als der der Zellen in der Mitte. Will man dies vermeiden schließt man das Feld zu einem Torus. Dann haben alle Zellen gleich viele Nachbarn.

Erweiterungen

Man kann neben diskreten Zuständen auch kontinuierliche Werte für die einzelnen Zellen zulassen. Damit lassen sich Prozesse wie Diffusion und Advektion beschreiben (siehe Kapitel 9).

9 Transportprozesse

Lässt man in zellulären Automaten aus Kapitel 8 auch kontinuierliche Werte zu, und betrachtet die einzelnen Zellen als Diskretisierung eines kontinuierlichen Bereichs (z.B. eines Sees), so kann man mit der "Automatenstruktur" auch Strömungsprozesse beschreiben. Von besonderer Bedeutung sind hierbei die Advektion (von lat. advehi = heranbewegen; bezeichnet allgemein das Heranführen von Dingen) und die Diffusion. Mit Advektion bezeichnet man z.B. den Transport von einer in Wasser gelösten Substanz bzw. das durch eine Strömung transportierte Wasser.

Beispiel: Man nimmt einen durchsichtigen Gartenschlauch und injiziert an einer Stelle etwas Tinte in den Schlauch. Macht man dieses Experiment in der Realität, wird man feststellen, das die Bande aus Tinte mit der Zeit breiter und heller wird. Dies liegt daran, dass die Tintenteilchen im realen System das Bestreben haben, die Konzentration im Schlauch auszugleichen. Dieses Bestreben nennt man Diffusion. Dreht man nun das Wasser auf, so strömt die Tinte entsprechend der angelegten Geschwindigkeit durch den Schlauch. Dieses bezeichnet man als Advektion.

9.1 Advektion

Die Beschreibung der Advektion (Strömung), die durch die Strömungsgeschwindigkeit v bestimmt ist, lässt sich im eindimensionalen Fall wie folgt beschreiben: Angenommen, wir betrachten ein kleines Volumenelement $V = \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z$ des Schlauchs (Abbildung 9.1), in das mit der Geschwindigkeit v (in m/s) Wasser strömt. Das Wasser sei inkompressibel und die Konzentration bzw. Dichte der Tinte sei durch die noch unbekannte Funktion $c(t, x)$ (in mg/m^3) beschrieben. Vereinfachend nehmen wir an, dass in y- und z-Richtung nichts passiert. Die Strömung verlaufe nur in x-Richtung. Die Masse an Tinte, die nun in einem Zeitschritt Δt durch

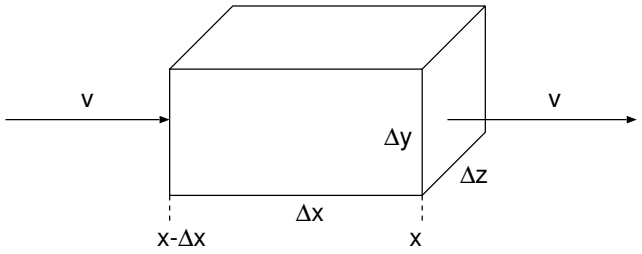


Abbildung 9.1: Das Volumenelement $V = \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z$, in das in x-Richtung mit der Geschwindigkeit v Wasser strömt..

die Strömung mit der Strömungsgeschwindigkeit v in das Volumen $\Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z$ gelangt, ist durch

$$m_{in} = c(t, x - \Delta x) \cdot v(t, x - \Delta x) \cdot \Delta t \cdot \Delta y \cdot \Delta z \tag{9.1}$$

wobei t die aktuelle Zeit und $x - \Delta x$ der linke Rand des Volumenelements ist. Ist die Flüssigkeit inkompressibel, fließt dasselbe Volumen raus. Die Masse, die herau sfließt, ist nun durch

$$m_{out} = c(t, x) \cdot v(t, x) \cdot \Delta t \cdot \Delta y \cdot \Delta z \tag{9.2}$$

gegeben Die Massendifferenz beträgt also

$$\Delta m = [c(t, x) \cdot v(t, x) - c(t, x - \Delta x) \cdot v(t, x - \Delta x)] \cdot \Delta t \cdot \Delta y \cdot \Delta z \tag{9.3}$$

Sie ist positiv, wenn Masse aus dem Volumen heraus fließt. Die zeitliche Änderung der Masse im Volumen $V = \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z$ innerhalb eines Zeitschritts entspricht also gerade dem negativen von diesem Wert, da die Masse in V abnimmt, wenn etwas heraus fließt:

$$m(t + \Delta t, x) - m(t, x) = -\Delta m \tag{9.4}$$

Durch Erweiterung der rechten Seite mit $\frac{\Delta x}{\Delta x}$ erhält man schließlich

$$m(t + \Delta t, x) - m(t, x) = -\frac{c(t, x) \cdot v(t, x) - c(t, x - \Delta x) \cdot v(t, x - \Delta x)}{\Delta x} \cdot V \cdot \Delta t$$

Division durch $V \cdot \Delta t$ ergibt für konstantes V und mit $c = m/V$

$$\frac{c(t + \Delta t, x) - c(t, x)}{\Delta t} = -\frac{c(t, x) \cdot v(t, x) - c(t, x - \Delta x) \cdot v(t, x - \Delta x)}{\Delta x} \tag{9.5}$$

Die Grenzübergänge $\Delta t \to 0$ und $\Delta x \to 0$ führen nun zu

$$\frac{\partial c(t, x)}{\partial t} = -\frac{\partial (c(t, x) \cdot v(t, x))}{\partial x} \tag{9.6}$$

Mit der Produktregel erhält man

$$\frac{\partial c(t, x)}{\partial t} = -\left[c(t, x) \cdot \frac{\partial v(t, x)}{\partial x} + v(t, x) \cdot \frac{\partial c(t, x)}{\partial x} \right] \tag{9.7}$$

Für konstante Geschwindigkeit v gilt daher

$$\frac{\partial c(t,x)}{\partial t} = -v \cdot \frac{\partial c(t,x)}{\partial x} \tag{9.8}$$

Gleichung 9.8 heißt **Advektionsgleichung** (für konstante Geschwindigkeiten). Es handelt sich um eine partielle Differentialgleichung, da die Ableitungen nach t und nach x auftauchen.

9.1.1 Diskretisierung der Advektionsgleichung

Um nun Gleichung 9.8 numerisch zu lösen, muss die Gleichung diskretisiert werden. Der Schlauch wird durch ein eindimensionales Gitter simuliert. Hierzu wird die die x-Achse in Abschnitte der Länge Δx unterteilt. Jeder Abschnitt beschreibt ein kurzes Stückchen des Schlauches (Gitterzelle), in dem die Substanz als homogen verteilt angenommen wird. Es wird nun die zeitliche Änderung der Konzentration in der i-ten Gitterzelle bestimmt. Hierzu werden zuerst die Gradienten zu benachbarten Gitterzellen diskretisiert, indem man Differenzenquotienten betrachtet:

$$\frac{c(t+\Delta t,x) - c(t,x)}{\Delta t} + v \cdot \frac{c(t,x) - c(t,x-\Delta x)}{\Delta x} = 0 \tag{9.9}$$

Dies entspricht wieder Gleichung 9.5, was aber nicht zwingend ist. Es gibt andere Diskretisierungen. In Gleichung 9.9 ist die räumliche Ableitung nicht symmetrisch sondern stromaufwärts verschoben. Man nennt dies daher auch **Upstream-Schema**. Solch ein Schema macht Sinn, wenn v nicht die Richtung wechselt ($v > 0$). Es ist höchstens dann stabil, wenn

$$v \cdot \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1 \qquad \textbf{Courant-Friedrichs-Lewy-Kriterium (CFL)} \tag{9.10}$$

gilt. Die Größe $|v \cdot \frac{\Delta t}{\Delta x}|$ heißt **Courant-Zahl**. Sie beschreibt, welche Wegstrecke $(v \cdot \Delta t)$ in einem Zeitintervall Δt zurückgelegt wird. Diese Strecke darf die räumliche Diskretisierung Δx nicht überschreiten. Betrachtet man nun Gitterzellen mit

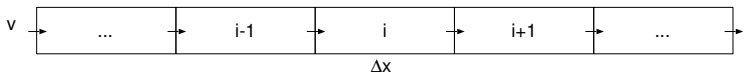


Abbildung 9.2: Diskretisierung des Schlauchs in Gitterzellen der Länge Δx, in die in x-Richtung mit der Geschwindigkeit v Wasser strömt.

Abstand Δx, erhält man folgendes Rechenschema.

$$c(t + \Delta t, i) = c(t, i) + v \cdot \frac{c(t, i-1) - c(t, i)}{\Delta x} \cdot \Delta t$$

Diese Art der Diskretisierung nennt man auch **Methode der finiten Differenzen**. Das Problem bei der Diskretisierung der Advektion ist, dass Δx und Δt genau zueinander "passen" müssen. Dies kann man aber höchstens zufällig bei konstanter Geschwindigkeit v erreichen. Ansonsten "verschmiert" das Signal, die Bande aus Tinte wird immer breiter. Dieses sieht ähnlich wie eine Diffusion aus. Daher wird dieses Phänomen, das sich aufgrund der Diskretisierung ergibt, auch **numerische Diffusion** genannt. Man kann zeigen, dass es sich bei dem Fehler, den man durch die Diskretisierung macht, tatsächlich um einen Diffusionsterm handelt.

9.2 Diffusion

Die Diffusion kann man wie folgt formalisieren: Angenommen wir betrachten den Schlauch als eindimensional (x-Richtung) und geben die Tinte als Konzentration c an. Dann ist $c(t, x)$ die Konzentration zur Zeit t am Ort x.

Nach dem 1. Fickschen Gesetz ist die Teilchenstromdichte (der Fluss) J proportional zum Konzentrationsgradienten entgegen der Diffusionsrichtung:

$$J = -D\frac{\partial c}{\partial x}$$

Hierbei ist D die Proportionalitätskonstante, die Diffusionskonstante. Das Minuszeichen bewirkt, dass der Fluss entgegen dem Konzentrationsgradienten wirkt, also von höherer zu niedrigerer Konzentration. Ist die Konzentration c z.B. in mol/m^3 angegeben und die Zeit in s, so ist die Einheit des Flusses J mol/m^2s. Die Einheit der Diffusionskonstanten ist m^2/s.

Die zeitliche Änderung der Konzentration ergibt sich aus der Kontinuitätsgleichung, die besagt, dass keine Masse verloren geht oder entsteht, bzw. aus der Advektionsgleichung 9.8, bei der der Fluss $c \cdot v$ nun durch J ersetzt wird:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial J}{\partial x} = 0$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\frac{\partial J}{\partial x} = -\frac{\partial}{\partial x}\left[-D \cdot \frac{\partial c}{\partial x}\right]$$

Für eine Diffusionskonstante unabhängig von x ergibt sich

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \cdot \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$$

Um die Diffusionsgleichung für ein System zu lösen, muss man eine Anfangsbedingung vorgeben. In unserem Fall die Konzentration an jeder Stelle x zur Zeit $t = 0$, also $c(0, x)$ für alle x.

Bisher haben wir noch keine Angabe über die Länge des Schlauches gemacht. Wir sind von einem unendlich langen Schlauch ausgegangen. Will man die Verteilung in einem endlichen Schlauchstück beschreiben, so muss man auch Randbedingungen definieren. Hier gibt es zwei Möglichkeiten: Entweder man setzt die Konzentration am Anfang (x=0) und am Ende des Schlauchstücks (x=L) fest, also

$$c(t, 0) \text{ und } c(t, L) \text{ f.a } t \geq 0 \qquad \textbf{Dirichlet-Problem}$$

oder man gibt die Ableitungen am Rand vor

$$\frac{\partial c}{\partial t} c(t, 0) \text{ und } \frac{\partial c}{\partial t} c(t, L) \text{ f.a } t \geq 0 \qquad \textbf{Neumann-Problem}$$

Der Unterschied ist wie folgt: Sind die Konzentrationen am Rand vorgegeben, so bestimmen diese letztlich nach einer gewissen Zeit die Konzentration im Schlauchstück. Vom Rand her diffundiert Substanz (Tinte) in den Schlauch hinein. Hält man den Gradienten am Rand fest, z.B. setzt in gleich null, dann bedeutet dies, dass keine Substanz aus dem Schlauch oder in den Schlauch diffundieren kann. Die Menge im Schlauch bleibt konstant und verteilt sich mit der Zeit gleichmäßig.

Im allgemeinen ist es sehr schwierig, Anfangs- und Randwertprobleme analytisch zu lösen. Daher ist es meistens sinnvoll solche Probleme numerisch zu behandeln. Hierzu gibt es hervorragende Verfahren. Das Grundprinzip soll im folgenden mit einem sehr elementaren Verfahren erläutert werden:

Diskretisierung der Diffusionsgleichung

Der Schlauch wird wieder durch ein eindimensionales Gitter simuliert. Hierzu wird die die x-Achse in Abschnitte der Länge Δx unterteilt. Jeder Abschnitt beschreibt ein kurzes Stückchen des Schlauches (Gitterzelle), n dem die Substanz als homogen verteilt angenommen wird. Es wird nun die zeitliche Änderung der Konzentration in

der i-ten Gitterzelle bestimmt. Hierzu werden zuerst die Gradienten zu den benachbarten Gitterzellen diskretisiert, indem man die jeweiligen Differenzenquotienten betrachtet:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial c(t,x)}{\partial t} &\approx D \cdot \frac{\frac{\partial c(t,x+\Delta x)}{\partial x} - \frac{\partial c(t,x)}{\partial x}}{\Delta x} \\
&\approx D \cdot \frac{\frac{c(t,x+\Delta x)-c(t,x)}{\Delta x} - \frac{c(t,x)-c(x-\Delta x)}{\Delta x}}{\Delta x} \\
&= D \cdot \frac{c(t,x+\Delta x) - 2 \cdot c(t,x) + c(x-\Delta x)}{\Delta x^2}
\end{aligned}$$

Die zeitliche Diskretisierung führt zu

$$c(t+\Delta t,x) = c(t,x) + D \cdot \frac{c(t,x+\Delta x) - 2 \cdot c(t,x) + c(t,x-\Delta x)}{\Delta x^2} \cdot \Delta t \quad (9.11)$$

Betrachtet man nun Gitterzellen mit Abstand Δx so erhält man folgende Formel:

$$c(t+\Delta t,i) = c(t,i) + D \cdot \frac{c(t,i+1) - 2 \cdot c(t,i) + c(i-1)}{\Delta x^2} \cdot \Delta t$$

Diese Art der Diskretisierung nennt man **forward in time und centered in space (FTCS)**. Man muss nun Δx und Δt so wählen, dass tatsächlich ein Konzentrationsausgleich geschaffen wird, und dass das diskretisierte System nicht oszilliert. Dies ist für

$$D < \frac{1}{2} \cdot \frac{\Delta x^2}{\Delta t}$$

der Fall. Dies versteht man leicht, wenn man berücksichtigt, dass pro Zeitschritt aus einer Zelle nicht mehr (Masse) herausfließen darf als drin ist. Dies bedeutet, dass

$$\frac{2D \cdot c(t,x)}{\Delta x^2} \cdot \Delta t < c(t,x)$$

gelten muss, da in Gleichung 9.11 die Konzentration in den Nachbarzellen schlimmstenfalls null ist.

9.2.1 Zweidimensionale Advektion und Diffusion*

Eine sehr einfache Möglichkeit, die Transportprozesse im zweidimensionalen Fall zu beschreiben, funktioniert ähnlich wie bei den Automaten. Man betrachtet jetzt nicht nur die Nachbarzellen rechts und links, sondern auch oben und unten. Man definiert also für jede Zelle vier Austauschflüsse. Nehmen wir vereinfachend an, dass die räumliche Diskretisierung in beide Koordinatenrichtung gleich $\Delta x = \Delta y$, so gilt für die Verfahren erster Ordnung für die **Advektion** mit den Geschwindigkeiten $v_x > 0$ und $v_y > 0$ in die Koordinatenrichtungen

$$\begin{aligned} c(t + \Delta t, i, j) = c(t, i, j) \\ + v_x \cdot \frac{c(t, i-1, j) - c(t, i, j)}{\Delta x} \cdot \Delta t \\ + v_y \cdot \frac{c(t, i, j-1) - c(t, i, j)}{\Delta x} \cdot \Delta t \end{aligned} \tag{9.12}$$

Das CFL-Kriterium muss nun für beide Raumrichtungen und die Raumdiagonale erfüllt sein. Man kann zeigen, dass dies für

$$(v_x + v_y) \cdot \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1 \tag{9.13}$$

gilt. Man sollte aber nicht "=1" ausreizen, da die Numerik der verwendeten Programmiersprache (Zahldarstellung) zu falschen Ergebnissen führen kann.

Für die **Diffusion** ergibt sich das Schema

$$\begin{aligned} c(t + \Delta t, i, j) = c(t, i, j) \\ + D \cdot \frac{c(t, i+1, j) - 2 \cdot c(t, i, j) + c(t, i-1, j)}{\Delta x^2} \cdot \Delta t \\ + D \cdot \frac{c(t, i, j+1) - 2 \cdot c(t, i, j) + c(t, i, j-1)}{\Delta x^2} \cdot \Delta t \end{aligned} \tag{9.14}$$

mit der Stabilitätsbedingung

$$D < \frac{1}{4} \cdot \frac{\Delta x^2}{\Delta t}$$

9.2.2 Numerische Diffusion*

Die angegebene Diskretisierung der Advektion (Gleichung 9.5) lässt sich auch herleiten, indem man die Konzentration als Taylorpolynom (siehe Abschnitt A.12) in t und x darstellt. Hierbei muss wiederum die Asymmetrie der räumlichen Ableitung berücksichtigt werden.

$$c(t+\Delta t, x) = c(t,x) + \frac{\partial c(t,x)}{\partial t}\cdot\Delta t + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 c(t,x)}{\partial t^2}\cdot\Delta t^2 + \mathcal{O}(\Delta t^3) \quad (9.15)$$

$$c(t, x-\Delta x) = c(t,x) - \frac{\partial c(t,x)}{\partial x}\cdot\Delta x + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 c(t,x)}{\partial x^2}\cdot\Delta x^2 + \mathcal{O}(\Delta x^3) \quad (9.16)$$

Bei der hier dargestellten Entwicklung bis zum quadratischen Term sind die Fehler $\mathcal{O}$ von dritter Ordnung und werden in der nachfolgenden Rechnung vernachlässigt. Löst man die Gleichungen nach $\frac{\partial c(t,x)}{\partial t}$ bzw. $\frac{\partial c(t,x)}{\partial x}$ auf und setzt das Ergebnis in Gleichung 9.8 ein, so erhält man

$$\frac{c(t+\Delta t,x)-c(t,x)}{\Delta t} - \frac{1}{2}\frac{\partial^2 c(t,x)}{\partial t^2}\cdot\Delta t$$

$$+v\cdot\left(\frac{c(t,x)-c(t,x-\Delta x)}{\Delta x} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 c(t,x)}{\partial x^2}\cdot\Delta x\right) = 0 \quad (9.17)$$

Die zweite zeitliche Ableitung wird man wieder los, indem man Gleichung 9.8 berücksichtigt und annimmt, dass v konstant ist:

$$\frac{\partial c(t,x)}{\partial t} = -v\cdot\frac{\partial c(t,x)}{\partial x}$$

also

$$\frac{\partial^2 c(t,x)}{\partial t^2} = -v\cdot\frac{\partial}{\partial t}\left[\frac{\partial c(t,x)}{\partial x}\right] = -v\cdot\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\partial c(t,x)}{\partial t}\right] = -v\cdot\frac{\partial}{\partial x}\left[-v\cdot\frac{\partial c(t,x)}{\partial x}\right]$$

$$= v^2\cdot\frac{\partial c(t,x)}{\partial x^2} \quad (9.18)$$

Setzt man dies nun in Gleichung 9.17 ein und fasst zusammen, so erhält man

$$\frac{c(t+\Delta t,x)-c(t,x)}{\Delta t}+v\cdot\frac{c(t,x)-c(t,x-\Delta x)}{\Delta x} \tag{9.19}$$

$$=\frac{1}{2}\cdot v^2\cdot\frac{\partial^2 c(t,x)}{\partial x^2}\cdot\Delta t-\frac{1}{2}\cdot v\cdot\frac{\partial^2 c(t,x)}{\partial x^2}\Delta x$$

$$=-\frac{1}{2}\cdot v\cdot(\Delta x-v\cdot\Delta t)\cdot\frac{\partial^2 c(t,x)}{\partial x^2}$$

Dieses Schema ergibt nun bis auf die höheren Terme die richtige Lösung. Vergleicht man es mit dem Upstream-Schema fällt der Term auf der rechten Seite auf. Beim Upstream-Schema wird also zusätzlich das Negative dieses Terms berechnet:

$$\frac{1}{2}\cdot v\cdot(\Delta x-v\cdot\Delta t)\cdot\frac{\partial^2 c(t,x)}{\partial x^2} \tag{9.20}$$

Hierbei handelt es sich um einen Diffusionsterm mit der Diffusionskonstanten $D=\frac{1}{2}\cdot v\cdot(\Delta x-v\cdot\Delta t)>0$. Dies ist die sogenannte numerische Diffusion. Aus der Tatsache, dass eine Diffusionskonstante positiv sein muss, folgt sofort dass das Schema nur für $v>0$ angewendet werden darf. Dreht man die Stromrichtung um, muss man das numerische Schema anpassen. Für negatives D fliegt uns das ganze sonst um die Ohren, da keine Massenerhaltung vorliegt. Weiterhin folgt für $v>0$ sofort, dass $\Delta x-v\cdot\Delta t>0$ gelten muss und man erhält die Stabilitätsbedingung 9.10.

Durch die Vernachlässigung der Terme zweiter Ordnung beim Upstream-Schema entsteht ein Fehler, der sich wie eine Diffusion auswirkt. Man kann das Verfahren verbessern, indem man den Term auf der rechten Seite von Gleichung 9.19 berücksichtigt, indem man ihn wie in Abschnitt 9.2 diskretisiert. Das Verfahren, das man

so erhält, heißt **Lax-Wendroff-Verfahren**:

$$c(t + \Delta t, x) = c(t, x) + a \cdot (c(t, x - \Delta x) - c(t, x)) \tag{9.21}$$

$$- \frac{a - a^2}{2} \cdot (c(t, x + \Delta x) + c(t, x - \Delta x) - 2 \cdot c(t, x))$$

mit der Courantzahl $a = \frac{v \cdot \Delta t}{\Delta x}$.

9.3 Temperaturverteilung im Sediment

Ein Beispiel für die Anwendung des Diffusionsmodells hat sich in der Forschergruppe BioGeoChemie des Watts ergeben. In der AG Mikrobiogeochemie wurden Temperaturdaten im Rückseitenwatt von Spiekeroog gemessen (Abbildung 9.3).

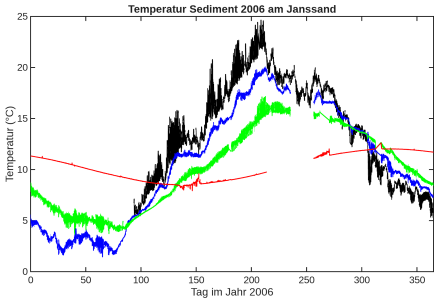


Abbildung 9.3: Temperaturdaten vom Janssand (rot, grün, blau, M. Beck, 2006), Rückseitenwatt von Spiekeroog und vom Messpfahl (grau, M. Grunwald, 2006)

Die Frage, die sich stellt ist, welche Ursache die Phasenverschiebung in den Temperaturkurven in unterschiedlichen Tiefen hat. Die Hypothese dazu ist, dass die Phasenverschiebung allein durch die Wärmeleitung erklärt werden kann. Da die Wärmeleitung in einem Medium durch die Diffusionsgleichung beschrieben werden kann, wurde das Modell aus Abschnitt 9.2 verwendet. Als Randbedingung wurden Wassertemperaturdaten vom Messpfahl verwendet. Da diese Daten nur von April bis Dezember zur Verfügung stehen, wird zuerst eine Kosinusfunktion an die Daten gefittet (vgl Abschnitt 2.2) um einen vollständigen Jahresgang zu erhalten.

Es wird das eindimensionale Diffusionsschema nach Gleichung 9.11 verwendet, wobei die erste Zelle die Sedimentoberfläche und die letzte Zelle die Sedimentuntergrenze bei 10m beschreibt. Insgesamt werden 100 Zellen verwendet.

Als Anfangsbedingung wird für die Zellen 2-99 die mittlere Temperatur gewählt.

Die approximierte Kosinusfunktion wird zur Bestimmung der Temperatur an der Sedimentoberfläche verwendet (Dirichlet-Problem). Dies wird technisch dadurch gelöst, indem der Wert der ersten Zelle in jedem Zeitschritt auf den Funktionswert der Kosinusfunktion gesetzt wird.

Die untere Randbedingung wird in der Tiefe von 10 m gesetzt (Zelle 100). Es wird angenommen, dass in dieser Tiefe kein Wärmefluss mehr auftritt, der Gradient also Null ist (Neumann-Problem). Dies wird technisch erreicht, indem der Wert der letzten Zelle (100) in jedem Zeitschritt auf den Wert der vorletzten Zelle (99)

gesetzt wird.

Die Temperatur wird nun für 3 Jahre mit einem Zeitschritt von $\Delta t = 0.01$ Jahr berechnet. Das Simulationsergebnis für $D{=}9.5 \cdot 10^{-7} \frac{m^2}{s}$ ist in Abbildung 9.4 dargestellt.

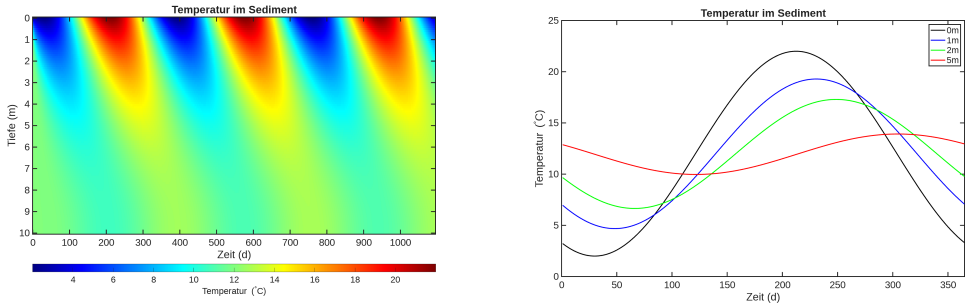


Abbildung 9.4: Simulationsergebnis zur Temperaturverteilung im Sediment über drei Jahre (links) und im Vergleich zu den Messdaten zur Temperaturverteilung im Sediment für das dritte Jahr (rechts).

Man erkennt, dass das System nach kurzer Zeit die recht willkürlich gesetzten Anfangswerte vergessen hat. Vergleicht man nun die Simulationsergebnisse des dritten Jahres in den jeweiligen Tiefen mit den gemessenen Daten erkennt man eine recht gute Übereinstimmung in der Phasenlage (Abbildung 9.3 und Abbildung 9.4 (rechts)).

Man kann also die zeitliche Phasenverschiebung mit der Wärmeleitung erklären. Es bleibt zu überprüfen, inwieweit der angenommene Diffusionskoeffizient für den am Janssand vorliegenden Sedimenttyp realistisch ist und als Konstante betrachtet werden darf. Um eine noch bessere Übereinstimmung zu erhalten, würde man anstelle der Kosinuskurve die realen Daten als Randbedingung einsetzen. Die fehlenden Daten könnte man mittels einer Fourieranalyse approximieren (vgl. Abschnitt 2.4.1).

10 Agentenbasierte Systeme und Tracer-Modelle

Eng mit den zellulären Automaten verknüpft sind die agenten- oder individuenbasierten Modelle. In diesen Modellen haben die Individuen (Agenten) Entscheidungsmöglichkeiten. Als Beispiel kann man sich den Straßenverkehr vorstellen. Die Agenten sind hier die einzelnen Autos bzw. dessen Fahrer. Das System-Verhalten, der Verkehrsfluss, resultiert dann aus dem Verhalten der einzelnen Autos und wird nicht auf Systemebene vorgegeben. Agentenbasierte Modelle bieten die Möglichkeiten heterogenes Verhalten und Abhängigkeiten von anderen Individuen darstellen zu können. Diese Art der Modellierung findet Anwendung, wenn untersucht werden soll, inwieweit sich ein System veränderten Rahmenbedingungen anpassen kann (Robustheit). Das Entscheidungsverhalten wird auf der Ebene der Individuen implementiert (Mikroebene), um das Systemverhalten (Makroebene) zu beschreiben.

Anwendungsbeispiele:

- Verkehrsmodelle, Entstehung von Staus
- Fluchtverhalten im Katastrophenfall
- Entstehung von Ameisenstraßen
- Wachstum von Dendriten
- Wirtschaftssysteme
- Sozialverhalten
- Larvenansiedlung in aquatischen Systemen

10.1 Wachstum von Dendriten

In einem Rechteck aus Zellen werden nacheinander Teilchen freigelassen, die sich zufällig bewegen, bis sie „kleben“ bleiben. Der Klebebereich besteht aus dem Rand des Rechteck und den schon klebenden Teilchen. Die Teilchen bewegen sich in jedem Zeitschritt in eine der vier angrenzenden Zellen (Abbildung 10.1).

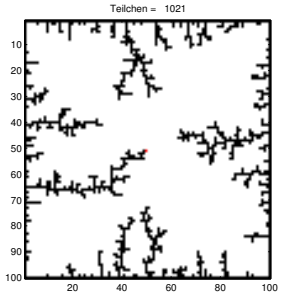


Abbildung 10.1: Wachstum von Dendriten

10.2 Ameisenstraßen

Ameisen einer Kolonie bilden auf Futtersuche Straßen aus. Dies sind Wege, die von immer mehr Ameisen genutzt werden. Dies kann durch Duftstoffe induziert sein, die die Ameisen als Spur hinterlassen. Hierzu ein sehr einfaches Modell: Die Zellen einer Ebene können schwarz oder weiß sein (verschiedene Gerüche). Die Ameise bewegt sich von Zelle zu Zelle nach folgenden Regeln:

- Die Ameise geht einen Schritt. Ist die erreichte Zelle weiß, dreht sie sich um 90° nach links, ist sie schwarz um 90° nach rechts.
- Die Farbe der verlassenen Zelle ändert sich

Zu Beginn sind alle Zellen weiß, die Ameise sitzt in der Mitte mit einer vorgegeben Bewegungsrichtung. Nach einer langen Vorlaufzeit (ca. 10000 Schritte) mit einem chaotischen Muster bildet sich eine Struktur, die wie eine Straße aussieht (Abbildung 10.2). Dieses Phänomen ist ein Beispiel für Selbstorganisation.

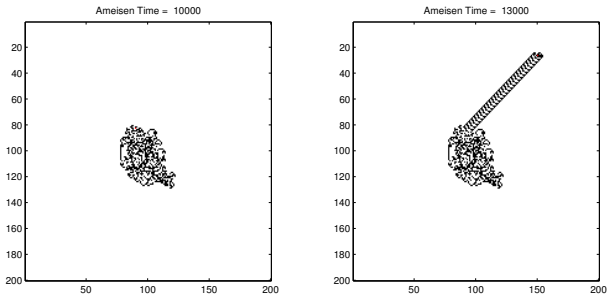


Abbildung 10.2: Ameisenstraße: Links nach 10000 Schritten, rechts nach 13000 Schritten.

10.3 Larvenansiedlung im Meer

Die Ansiedelung von Larven an Substrat könnte mit einem individuenbasierten Modell beschrieben werden. Larven bewegen sich je nach Art zumeist passiv in der Meeresströmung bis sie auf einen Untergrund treffen, auf dem sie sich ansiedeln können. Die Entscheidung sich anzusiedeln, kann hierbei von verschiedenen Faktoren abhängen. Da sich die Larven hier passiv in der Strömung bewegen, kann die Larvenansiedlung auch mit einem Tracer-Modell oder Lagrange-Modell beschrieben werden. Hierbei bewegen sich die Larven passiv in einem Strömungsfeld bewegen und entscheiden nicht selbst, wohin sie sich bewegen und ob sie sich ansiedeln oder nicht. Die Ansiedlung findet für alle Larven z. B. immer dann statt, wenn sie auf ein Substrat treffen. Sie treffen also selbst keine Entscheidung.

Um dies zu modellieren braucht man für das Gebiet, in dem sich die Ausbreitung und Ansiedlung stattfindet, ein Strömungsfeld. Hierzu wird das Gebiet in Gitterpunkte aufgeteilt und an jedem Gitterpunkt zu jeder Zeit eine Geschwindigkeit bestimmt. Solche Modelle, die dies leisten. heißen auch General Circulation Models (GCM) und werden von Hydrodynamikern erstellt. Wir benötigen hier davon nur das Simulationsergebnis. Dies ist ein Datensatz, der für jeden Gitterpunkt die x- und y-Koordinate sowie die Geschwindigkeitskomponenten in x- und y-Richtung enthält. Diese Information muss für genügend viele Zeitpunkte des Simulationszeitraums vorliegen.

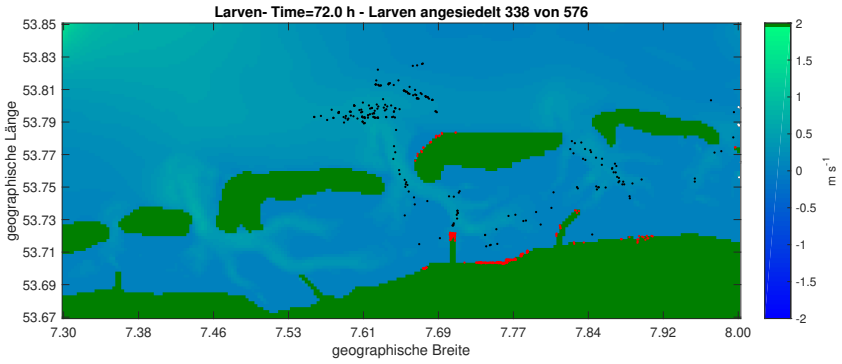


Abbildung 10.3: Screenshot eines Tracermodells zur Ansiedlung von Larven im Rückseitenwatt der ostfriesischen Inseln. Schwarz: schwimmende Larven, rot: angesiedelte Larven. Die Ansiedelung am Ende der Fahrrinnen ist ein Artefakt, der sich aus dem zugrunde liegenden Strömungsfeld ergibt. Quelle: Strömungsdatensatz: K. Lettmann, Modell: C.Feenders & C. Kohlmeier

11 Epidemiemodelle

Unter einer Epidemie (aus dem Griechischen für „im Volk verbreitend„) versteht man ein stark gehäuftes örtlich und zeitlich begrenztes Vorkommen einer Erkrankung, insbesondere von Infektionskrankheiten. Bei einer Ausbreitung über mehrere Länder und Kontinente spricht man von einer Pandemie.

Mathematische Epidemiemodelle beschreiben die Dynamik und Ausbreitung von Epidemien. Sie liefern ein Verständnis der Auswirkungen krankheitsspezifischer Eigenschaften auf den Epidemieverlauf, wie z.B. die Auswirkung der Länge der Inkubationszeit. Die Inkubationszeit, ist die Zeitspanne zwischen der Infektion (Eindringen des Erregers in den Körper) bis zum Auftreten der ersten Symptome (bei Masern 8-14 Tage). Die Inkubationszeit ist zu unterscheiden von der Latenzzeit, Zeitspanne zwischen den Eindringen des Erregers und dem Beginn der Infektiosität. Fast alle modernen Epidemiemodelle, die die Ausbreitung z.B. von HIV (AIDS) oder SARS-CoV-2 (COVID-19) beschreiben, gehen letztlich auf das klassische Epidemiemodell von [8] zurück.

Historische Meilensteine der Epidemiologie

- Hippokrates 459 - ca. 370 v. Chr.: Begründer der wissenschaftlichen Medizin, erste Aufzeichnungen von Krankheitsverläufen
- Louis Pasteur 1822-1895: Begründer der Mikrobiologie, Entwicklung der Schutzimpfungen gegen Hühnercholera, Milzbrand und Tollwut
- Robert Koch 1843 - 1910: Infektionslehre, Tropenmedizin und Epidemiologie
- 19. Jahrhundert: Aufzeichnung von Krankheitsverläufen und Erklärungsversuche von Epidemien (Cholera, Typhus, Pocken)
- Ende des 19 Jahrhundert: erste Modelle
- Kermack & McKendrick (1927): Klassisches Epidemiemodell (SIR), Schwellenwertsatz der Epidemiologie

Wichtige Faktoren bei der Modellierung von Epidemien

- Übertragungswege Zwischenwirte, Blutkontakt, Tröpfcheninfektion
- Immunität durch Erkrankung, durch Impfung
- Latenzzeit und Inkubationszeit
- Krankheitsverlauf, Dauer, Letalität, bei Kindern/Erwachsenen
- Populationsstruktur, Dichte, Verteilung
- Reaktion auf Fallzahlen, Schulschließungen, Impfungen, Quarantäne, Verhaltensänderungen

Statistische Kenngrößen von Epidemien

- relative Prävalenz: Anteil der Infizierten/Erkrankten an der Gesamtbevölkerung
- absolute Prävalenz: Anzahl der Infizierten/Erkrankten
- relative Inzidenz: Anteil der Neuinfizierten/Neuerkrankten an der Gesamtbevölkerung in einem bestimmten Zeitraum
- absolute Inzidenz: Anzahl der Neuinfizierten/Neuerkrankten an der Gesamtbevölkerung in einem bestimmten Zeitraum
- kumulative Inzidenz: Gesamtzahl der Neuinfizierten/Neuerkrankten bis zu einem bestimmten Zeitpunkt

11.1 Das Epidemiemodell nach Kermack & McKendrick

Es wird eine Bevölkerung mit einer konstanten Größe N zugrunde gelegt. In dieser Bevölkerung seien alle Personen für die modellierte Krankheit gleich anfällig. Die Übertragung der Krankheit findet durch den Kontakt einer infizierten Person I (engl. infectious) mit einer anfälligen Person S (engl. susceptible) statt. Eine Person, die infiziert wurde, gesundet nach einer gewissen Zeit R (engl. removed, recovered). Es wird hierbei nicht zwischen infizierten und erkrankten Personen unterschieden und gesundete Personen sind immun und werden nicht wieder anfällig. Aus den englischen Bezeichnungen leitet sich der Name **SIR-Modell** ab:

- S(t) Anzahl der anfälligen Personen zur Zeit t,
- I(t) Anzahl der infizierten Personen zur Zeit t und

- R(t) Anzahl der gesundeten Personen zur Zeit t

Man nimmt an, dass zu Beginn einer Epidemie eine sehr kleine Anzahl von Personen infiziert ist: $I(0) << N$ und die restlichen Personen anfällig sind $S(0) = N - I(0)$, $R(0) = 0$.

Wird eine Infektion durch den Kontakt eines Anfälligen mit einem Infizierten hervorgerufen, so ist das Infektionsrisiko eines Anfälligen umso größer, je mehr Infizierte in der Bevölkerung sind. Die Infektionsrate wird mit dem Anteil der Infizierten I an der Gesamtbevölkerung N steigen:

$$\text{Infektionsrate} = \beta \cdot \frac{I}{N}$$

Der Parameter β (1/Zeit) gibt die die maximale Infektionsrate an. Sie hängt von der Zahl der Kontakte pro Zeiteinheit k ab, die eine suszeptible Person hat, und der Wahrscheinlichkeit p, dass ein Kontakt zur Infektion führt:

$$\beta = p \cdot k$$

Die Änderung der Zahl der Suszeptiblen hängt von der Zahl der Neuinfektionen ab, die Änderung der Zahl der Infizierten hängt zusätzlich von der Zahl derer ab, die Gesunden. Geht man von einer konstanten Gesundungsrate γ (in 1 pro Zeit) aus, so erhält man das SIR-Modell nach [8]:

$$\dot{S} = -\beta \cdot \frac{I}{N} \cdot S \tag{11.1}$$

$$\dot{I} = \beta \cdot \frac{I}{N} \cdot S - \gamma \cdot I$$

$$\dot{R} = \gamma \cdot I$$

Führt man zusätzlich den Parameter $\rho = \frac{\gamma}{\beta} \cdot N$ ein, so kann man alternativ für die Änderung der Infizierten auch $\dot{I} = \beta \cdot \frac{I}{N}(S - \rho)$ schreiben.

11.1.1 SI-Modell*

Für eine konstante Bevölkerungsgröße gilt zu jeder Zeit $S + I + R = N$. Damit lässt sich das System 11.1 auf die ersten beiden Gleichungen reduzieren, da die Anzahl der immunen Personen R aus der Anzahl der suszeptiblen und der infizierten berechnet werden kann. Bei konstanter Bevölkerungsgröße N reicht es also, das folgende Modell (SI-Modell) zu untersuchen:

$$\dot{S} = -\beta \cdot \frac{I}{N} \cdot S \tag{11.2}$$

$$\dot{I} = \beta \cdot \frac{I}{N} \cdot (S - \rho)$$

Diesem System sieht man den Epidemieverlauf bereits an. Für $S > \rho$ gilt $\dot{I} > 0$, für $S < \rho$ gilt $\dot{I} < 0$. Dass bedeutet, dass die Epidemie ausbrechen kann, wenn die Anzahl der Anfälligen oberhalb des Schwellenwerts ρ liegt. Anderenfalls ebbt sie ab. Das Systemverhalten ist in Abbildung 11.1 dargestellt. Die Fixpunkte des

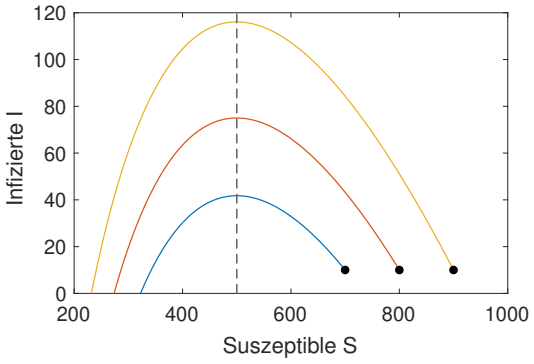


Abbildung 11.1: Lösungen im S-I-Phasenraum des klassischen Epidemiemodells nach Kermack & McKendrick für $\beta = 0.2$ und $N = 1000$ mit Anfangswerten (Punkte) oberhalb des Schwellenwerts $\rho = 500$ (gestrichelt).

SI-Modells sind alle Punkte $(S^*, I^*) = (S, 0), S \geq 0$. Damit besteht die gesamte S-Achse aus Fixpunkten.

Die S-Isokline, also das Teilgleichgewicht, bei dem sich die Zahl der Suszeptiblen nicht mehr ändert, ist dadurch charakterisiert, das entweder keine Infizierten oder keine Suszeptiblen da sind. Es liegt folglich auf den Achsen. Die Lösungskurven verlaufen im S-I-Phasenraum auf den Achsen senkrecht.

$$\left\{\dot{S} = 0\right\} = \{(S, I) \mid I = 0 \text{ oder } S = 0\}$$

Die I-Isokline, also das Teilgleichgewicht, bei dem sich die Zahl der Infizierten nicht mehr ändert, ist dadurch charakterisiert, das entweder keine Suszeptiblen mehr da sind oder die Zahl der Suszeptiblen den Schwellenwert ρ angenommen hat. Es liegt folglich auf der S-Achse und der senkrechten Linie bei $S = \rho$. Die Lösungskurven verlaufen im S-I-Phasenraum waagerecht.

$$\left\{\dot{I} = 0\right\} \;=\; \{(S, I) \,|\, I = 0 \text{ oder } S = \rho\}$$

Da die gesamte S-Achse aus Fixpunkten besteht, kann keine asymptotische Stabilität erwartet werden. Es kann mit den Methoden nach Anhang I gezeigt werden, dass für $S > \rho$ jeder Fixpunkt $(S, 0)$ instabil ist, die Epidemie bricht aus. Für $S < \rho$ ist $(S, 0)$ marginal stabil, die Infizierten verschwinden (I.4.2).

11.1.2 Basisreproduktionszahl*

Die Basisreproduktionszahl R_0 gibt an, wie viele Menschen von einer infektiösen Person durchschnittlich angesteckt werden, wenn die gesamte Population suszeptibel ist. Die Basisreproduktionszahl ist also die durchschnittliche Anzahl infektiöser Kontakte eines Infizierten während seiner infektiösen Periode. Sie ist das Produkt aus der mittleren Anzahl der Kontakte k einer infizierten mit einer suszeptiblen Person, der Wahrscheinlichkeit p, dass dieser Kontakt zur Ansteckung führt und der mittleren Dauer der infektiösen Periode $\frac{1}{\gamma}$ (siehe 11.1.3).

$$R_0 = p \cdot k \cdot \frac{1}{\gamma} = \frac{\beta}{\gamma}$$

Die mittlere Dauer der infektiösen Periode ist der Kehrwert der Genesungsrate. Pro Zeitintervall infiziert eine infektiöse Person also $p \cdot k$ weitere Personen und dies geschieht im Mittel in der Zeit $\frac{1}{\gamma}$. Die Basisreproduktionszahl ist eine dimensionslose Größe.

Eine Epidemie kann beendet werden, wenn die Anzahl fataler Kontakte eines Infizierten $\beta = p \cdot k$ unter den Wert γ gesenkt werden kann, also die Basisreproduk-

tionszahl $R_0 = \frac{p \cdot k}{\gamma} = \frac{\beta}{\gamma} < 1$ wird. Dies kann man verstehen, wenn man

$$\dot{I} = \beta \cdot \frac{I}{N} \cdot S - \gamma \cdot I$$

betrachtet und berücksichtigt, dass zu Beginn einer Epidemie fast alle Personen suszeptibel sind ($S \approx N$), dann gilt näherungsweise:

$$\dot{I} = \beta \cdot I - \gamma \cdot I = (\beta - \gamma) \cdot I$$

Die Epidemie ebbt also für $\beta < \gamma$ oder $R_0 = \frac{\beta}{\gamma} < 1$ ab.

Die Senkung der Basisreproduktionszahl kann durch Verringerung der fatalen Kontakte, Verkürzung der infektiösen Periode (Kehrwert von γ) und durch Impfung erreicht werden.

11.1.3 Mittleren Dauer der infektiösen Periode*

Sei I_0 die Anzahl der infizierten zur Zeit 0. Von diesen sind zum Zeitpunkt t noch

$$I(t) = I_0 \cdot e^{-\gamma \cdot t}$$

infiziert. Bis zum Zeitpunkt t ist von den anfangs I_0 Infizierten der Anteil

$$F(t) = \frac{I_0 - I(t)}{I_0} = 1 - e^{-\gamma \cdot t}$$

nicht mehr infiziert. F(t) ist die Verteilungsfunktion der Zeit bis zur Genesung. Die zugehörige Dichtefunktion lautet:

$$f(t) = F'(t) = \gamma \cdot e^{-\gamma \cdot t}$$

Die mittlere Dauer der infektiösen Periode E(t) (Erwartungswert) beträgt

$$E(t) = \int_0^\infty t \cdot f(t)\,dt = \int_0^\infty t \cdot \gamma \cdot e^{-\gamma \cdot t}\,dt = -te^{-\gamma \cdot t}|_0^\infty + \int_0^\infty e^{-\gamma \cdot t}\,dt = 0 - \frac{1}{\gamma} e^{-\gamma \cdot t}|_0^\infty = \frac{1}{\gamma}$$

11.1.4 Bestimmung der Basisreproduktionszahl aus der finalen Suszeptiblenzahl*

Für das klassische Epidemiemodell gilt

$$\frac{dI}{dS} = \frac{\beta \cdot S \cdot I - \gamma \cdot I}{-\beta \cdot S \cdot I} = -1 + \frac{\gamma}{\beta \cdot S}$$

Daraus folgt durch Integration

$$I(S) = -S + \frac{\gamma}{\beta} \ln S + C$$

Mit $I(S_0) = I_0$ erhält man die Konstante

$$C = I_0 + S_0 - \frac{\gamma}{\beta} \ln S_0$$

Nach Abklingen der Epidemie (I_0) bleibt die Zahl S_∞ an Suszeptiblen übrig, also gilt $I(S_\infty) = 0$:

$$I(S_\infty) = -S_\infty + \frac{\gamma}{\beta} \ln S_\infty + I_0 + S_0 - \frac{\gamma}{\beta} \ln S_0 = 0$$

mit $I_0 + S_0 = N$ gilt

$$\frac{\gamma}{\beta} \ln \frac{S_\infty}{S_0} + N - S_\infty = 0 \qquad \text{also} \qquad \frac{\beta}{\gamma} = \frac{\ln \frac{S_\infty}{S_0}}{S_\infty - N}$$

Daraus folgt für die Basisreproduktionszahl[1]

$$R_0 = \frac{\beta \cdot N}{\gamma} = \frac{\ln \frac{S_\infty}{S_0}}{\frac{S_\infty - N}{N}}$$

Nimmt man an, dass zu Beginn der Epidemie $S_0 \approx N$ gilt folgt

$$R_0 = \frac{\ln \frac{S_\infty}{S_0}}{\frac{S_\infty}{S_0} - 1}$$

[1] $R_0 = \frac{k}{\gamma}$ mit $\beta = p \cdot \frac{k}{N}$ und $p = 1$

Schwellenwertsatz der Epidemiologie*

Ist im SIR-Modell die Anzahl der Anfälligen zu Beginn der Epidemie $S(0) = \rho + \varepsilon$ für ein $\varepsilon > 0$ und die Anzahl der Infizierten sehr viel kleiner als die Anzahl der Anfälligen $I(0) << S(0)$, so werden schließlich ca. $2\,\varepsilon$ Personen erkranken.

Es muss also gezeigt werden, dass nach Abklingen der Epidemie, wenn also $\dot{R} = 0$ ist, $R^* \approx 2\,\varepsilon$ gilt. Aus $\dot{R} = \gamma \cdot I$ folgt $I = \frac{1}{\gamma} \cdot \dot{R}$. Damit gilt

$$\frac{\dot{S}}{S} = -\frac{\beta}{\gamma} \cdot S \cdot \dot{R} = -\frac{1}{\rho} \cdot \dot{R}$$

Eine Integration auf beiden Seiten führt zu

$$\int_0^t \frac{\dot{S}(x)}{S(x)}\,dx = -\frac{1}{\rho}\int_0^t \dot{R}(x)\,dx$$

Mit $R(0) = 0$ gilt

$$\int_{S(0)}^{S(t)} \frac{1}{y}\,dy = -\frac{1}{\rho}R(t)$$

$$S(t) = S(0) \cdot e^{-\frac{1}{\rho}\cdot R(t)}$$

Diese Gleichung kann man nun in die dritte Gleichung einsetzen und erhält

$$\dot{R}(t) = \gamma\, I(t) = \gamma\,(N - R(t) - S(t)) = \gamma\,\left(N - R(t) - S_0 \cdot e^{-\frac{1}{\rho}\cdot R(t)}\right)$$

eine Gleichung, in der nur noch die Zustandsvariable R vorkommt. Diese Gleichung ist zwar nicht explizit lösbar, kann aber durch eine Taylorentwicklung für $f(R) = e^{-\frac{1}{\rho}\cdot R}$ an der Stelle $R = 0$ approximiert werden:

$$f(0+R) \;\approx\; f(0) + f'(0)\cdot R + \frac{1}{2}f''(0)\cdot R^2 = 1 - \frac{1}{\rho}\cdot R + \frac{1}{2\rho^2}\cdot R^2$$

Man erhält mit $N = S_0 + I_0$

$$\dot{R} = \gamma \left(N - R - S_0 + \frac{S_0}{\rho} \cdot R - \frac{S_0}{2\rho^2} \cdot R^2 \right) = \gamma \left(I_0 + \left(\frac{S_0}{\rho} - 1 \right) \cdot R - \frac{S_0}{2\rho^2} \cdot R^2 \right)$$

Für die Anfangswerte $S_0 = \rho + \varepsilon$ mit $\varepsilon << \rho$ und $I_0 << \varepsilon$ gilt

$$\dot{R} \approx \gamma \cdot \left(\left(\frac{\rho + \varepsilon}{\rho} - 1 \right) \cdot R - \frac{\rho + \varepsilon}{2\rho^2} \cdot R^2 \right) = \gamma \cdot R \cdot \left(\frac{\varepsilon}{\rho} - \frac{\rho + \varepsilon}{2\rho^2} \cdot R \right)$$

Es gilt $\dot{R} = 0$ für $R^* = 0$ (vor Beginn der Epidemie) und

$$R^* = \frac{\varepsilon}{\rho} \cdot \frac{2\rho^2}{\rho + \varepsilon} = 2\,\varepsilon \cdot \frac{\rho}{\rho + \varepsilon} \approx 2\,\varepsilon$$

nach Abklingen der Epidemie. Hierbei handelt es sich um eine Approximation. Diese unterschätzt den tatsächlichen Epidemieverlauf etwas.

11.2 Vergleich von Räuber-Beute-Modell und Epidemiemodell

In Abschnitt 5.1 haben wird das Lotka Volterra Modell als einfaches Räuber-Beute-Modell kennen gelernt. Das Modell ist dem Epidemiemodell recht ähnlich, sofern eine konstante Bevölkerungsgröße N angenommen wird und dadurch die Gleichung für R redundant ist:

Epidemiemodell	**Räuber-Beute-Modell**
$\dot{S} = -\frac{\beta}{N} \cdot S \cdot I$	$\dot{B} = r \cdot B - b \cdot B \cdot R$
$\dot{I} = \frac{\beta}{N} \cdot S \cdot I - \gamma \cdot I$	$\dot{R} = b \cdot B \cdot R - s \cdot R$

Bringt man beide Modell in eine ähnliche Notation, sieht man die Übereinstimmung noch besser. Hierbei sei nun x die Zahl der Suszeptiblen resp. der Beute und y die Zahl der Infektiösen, resp. der Räuber. Die Parameter werden nun p_1, p_2 und p_3 genannt, wobei wir im SIR-Modell für eine konstante Populationsgrösse $\frac{\beta}{N}$ zum Parameter p_2 zusammenfassen:

Epidemiemodell	**Räuber-Beute-Modell**
$\dot{x} = \quad - p_2 \cdot x \cdot y$	$\dot{x} = p_1 \cdot x \quad - p_2 \cdot x \cdot y$
$\dot{y} = p_2 \cdot x \cdot y \; - p_3 \cdot y$	$\dot{y} = p_2 \cdot x \cdot y \; - p_3 \cdot y$

Die Ergebnisse der Modelle sind in Abbildung 11.2 dargestellt. Man erkennt, dass beim SI-Modell das Verschwinden der Epidemie eine Folge zu geringer Suszeptiblenzahlen ist. Beim Lotka-Volterra-Modell liefert der zusätzliche Wachstumsterm der Beute den Nachschub an Beute, so dass es zu den typischen geschlossenen Bahnen kommt.

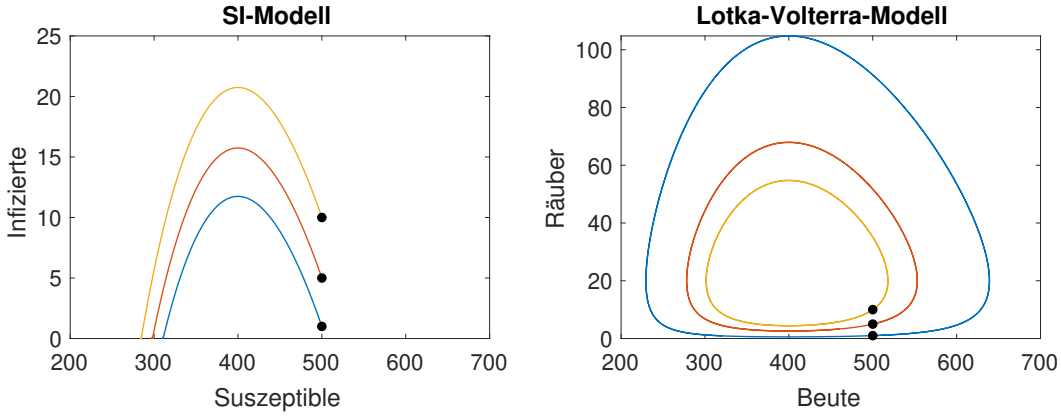


Abbildung 11.2: Vergleich des SI-Modells (links) mit dem Lotka-Volterra-Modell (rechts) im Phasenraum. Es sind jeweils Lösungen für drei verschiedene Anfangswerte (Punkte) dargestellt. Parametrisierung: $p_1 = 0.02$, $p_2 = 0.001$, $p_3 = 0.4$, $x_0 = 500$, $y_0 \in \{1, 5, 10\}$.

11.3 Das SIS-Modell

Eine modifizierte Version des SIR-Modells ist das SIS-Modell, bei dem angenommen wird, dass gesundete Personen direkt wieder anfällig werden:

$$\dot{S} = -\beta \cdot \frac{I}{N} \cdot S + \gamma \cdot I \tag{11.3}$$

$$\dot{I} = \beta \cdot \frac{I}{N} \cdot S - \gamma \cdot I$$

Unter der Annahme einer konstanten Bevölkerungsgröße N gilt S+I=N für alle Zeiten und das System kann auf eine Gleichung reduziert werden:

$$\dot{I} = \beta \cdot \frac{I}{N} \cdot (N - I) - \gamma \cdot I =: f(I) \tag{11.4}$$

Die stationären Zustände sind durch $I_0^* = 0$ und $I^* = N \cdot (1 - \frac{\gamma}{\beta})$ gegeben. Die Epidemie kann innerhalb der Bevölkerung endemisch persistieren, wenn der nichttriviale stationäre Zustand stabil ist. Es gilt

$$\frac{df(I)}{dI} = \beta - 2\frac{\beta}{N} \cdot I - \gamma \quad \text{und damit} \quad \frac{df(I^*)}{dI} = \gamma - \beta$$

Der Zustand I^* ist also für $\gamma - \beta < 0$ stabil oder anders ausgedrückt für die Basisreproduktionszahl $R_0 = \frac{\beta}{\gamma} > 1$.

12 Fraktale*

12.1 Cantor Menge

Betrachten wir folgende Vorschrift: Wir nehmen das Intervall $[0, 1]$ und schneiden im ersten Schritt das mittlere Drittel also das Intervall $[\frac{1}{3}, \frac{2}{3}[$ heraus. Übrig bleiben die Intervalle $[0, \frac{1}{3}[$ und $[\frac{3}{3}, 1]$. Mit diesen Intervallen Verfahren wir genauso. Aus jedem der beiden Intervalle wird jeweils wieder das mittlere Drittel herausgeschnitten usw. (siehe Abbildung 12.1). Die Frage ist, was übrig bleibt, wenn man dieses



Abbildung 12.1: Die Cantor-Menge entsteht indem man in jedem Intervall das mittlere Drittel wegstreicht.

Verfahren unendlich oft anwendet. Das Bild, das dabei entsteht nennt man auch Limesbild (von Limes: Grenzwert). Obwohl jedes einzelne Objekt eine Strecke ist, besteht das Limesbild aus isolierten Punkten. Limesbilder können also ganz andere Eigenschaften haben als die Objekte, die zu ihrer Entstehung führen: Betrachten wir hierzu ein Quadrat der Kantenlänge 1. Wir schneiden nun sukzessive Quadrate heraus, so dass eine Treppe entsteht (Abbildung 12.2): Bestimmt man die Treppenlänge (von der oberen linken zur unteren rechten Ecke) so beträgt die Länge in jedem Schritt 2. Je öfter man das Verfahren wiederholt, umso mehr nähert sich die Treppe der Diagonalen (Limesbild). Die Diagonale hat aber die Länge $\sqrt{2}$. Betrachten wir noch einmal die Cantor-Menge. Jedes Intervall, dass entsteht,

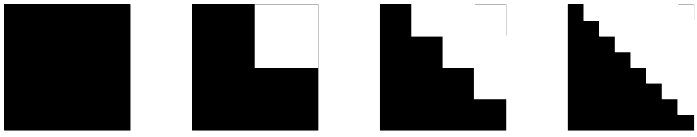


Abbildung 12.2: Die Treppenlänge beträgt für jeden Schritt 2. Die Diagonale als Limesbild hat die Länge.

sieht, bis auf einen Skalierungsfaktor, aus wie das Original. Die Cantor-Menge ist selbstähnlich. Eine Figur wird **selbstähnlich** genannt, wenn Teile der Figur kleine

Kopien der ganzen Figur sind. Ein Matlab-Code zur Erzeugung der Cantor-Menge ist in Listing 12.1 angegeben.

12.2 Kochsche Schneeflockenkurve

Ein weiteres Beispiel für eine selbstähnliche Figur ist die Kochsche Kurve, auch Schneeflockenkurve genannt. Sie entsteht aus einem gleichseitigen Dreieck, bei dem man auf das mittlere Drittel jeder Seite ein weiteres Dreieck aufsetzt und die überschüssigen Linien wegstreicht (siehe 12.3). Betrachtet man eine Seite des Drei-

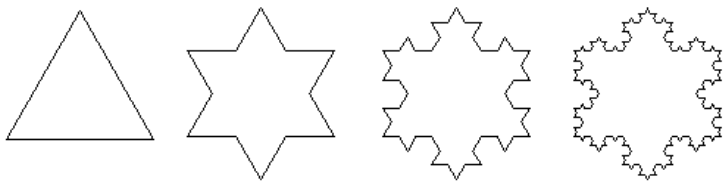


Abbildung 12.3: Die Schneeflockenkurve entsteht indem auf jede Seite eines gleichseitigen Dreiecks in der Mitte ein gleichseitiges Dreieck mit einem Drittel der ursprünglichen Seitenlänge aufgesetzt wird.

ecks und setzt die erste Seitenlänge gleich eins, so verlängert sich die Seitenlänge in jedem Schritt um ein Drittel. Letztlich wird die Seite und damit die gesamte Kurve unendlich lang.

12.3 Sierpinski-Dreieck

Ein weiteres bekanntes Fraktal ist das Sierpinski-Dreieck[1]. Es entsteht aus einem gleichseitigen Dreieck, aus dem man sukzessive Dreiecke entfernt (Abbildung 12.4). Eine weitere Möglichkeit, das Sierpinski-Dreieck zu erzeugen ist in Abschnitt 12.5.2



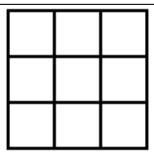
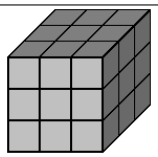
Abbildung 12.4: Sierpinski-Dreieck.

angegeben.

[1] Waclaw Sierpinski (1882-1969)

12.4 Fraktale Dimension

Um dieses etwas besser zu verstehen betrachten wir zunächst die für uns vertrauten Objekte Strecke, Quadrat und Würfel. Bei einer Strecke, die in drei gleiche Teile eingeteilt wird, beträgt die Länge jeder einzelnen Strecke ein Drittel der Ursprungslänge, logisch. Teilt man die Seiten eines Quadrats in drei gleiche Teile, so entstehen insgesamt 9 Quadrate, von denen jedes eine Fläche hat, die einem Neuntel der Ursprungsfläche entspricht. Teilt man die Kanten eines Würfels in drei gleiche Teile, so entstehen insgesamt 27 Würfel, von denen jeder ein Volumen hat, das einem Siebenundzwanzigstel des Ursprungsvolumen entspricht. Wir erhalten folgende Tabelle:

Objekt	Skalierungsfaktor s	Anzahl N	Beziehung
	3	3	$3^1 = 3$
	3	9	$3^2 = 9$
	3	27	$3^3 = 27$

Man erhält die Beziehung

$$s^D = N \text{ , oder } D = \frac{\log N}{\log s}$$

wobei D die Dimension des Objektes ist.

Führt man dasselbe Verfahren für die Cantor-Menge und die Schneeflockenkurve durch, so erhält man:

Objekt	Skalierungsfaktor s	Anzahl N	Beziehung
	3	2	$3^x = 2$
	3	4	$3^x = 4$

Bestimmt man jeweils den unbekannten Exponenten x, so erhält man für die Cantormenge den Wert $x = \frac{\log 2}{\log 3} = 0,631$, für die Schneeflockenkurve $x = \frac{\log 4}{\log 3} =$

1.262. Nach obigen Überlegungen handelt es sich bei diesen Werten um die Dimension der Objekte. Man erhält einen Dimensionsbegriff, bei dem auch nichtganzzahlige Werte zugelassen sind, die fraktale Dimension:

Fraktale Dimension der Cantor-Menge: $D_{Cantor} \approx 0.631$
Fraktale Dimension der Kochschen Schneeflockenkurve: $_{Koch} \approx 1.262$

Die bisherigen Überlegungen passen damit gut zusammen. Die Cantormenge, deren Limesbild aus isolierten Punkten und nicht mehr aus Strecken besteht, hat eine Dimension zwischen Punkt (D=0) und Strecke (D=1), die Schneeflockenkurve, deren Länge unendlich ist, hat eine Dimension zwischen Strecke (D=1) und Fläche (D=2).
Beim Sierpinski-Dreieck wird bei einer Verdopplung der linearen Ausdehnung (der Seitenlänge), also einem Skalierungsfaktor von s=2, eine Verdreifachung des Ausgangsbildes erreicht, also N=3. damit hat das Sierpinski-Dreieck die faktale Dimension $D = \frac{\log 3}{\log 2} \approx 1.585$. Die Dimension liegt also zwischen der einer Strecke und der einer Fläche.

12.4.1 Kästchenzählmethode

Man erhält einen Wert für die fraktale Dimension auch, indem man die sogenannte Kästchenzählmethode anwendet. Hierzu überdeckt man das Fraktal mit einem Gitter der Maschenweite ε überdeckt, und die Anzahl N der Gitterzellen bestimmt, die das Objekt überdeckt. Diese Anzahl wird natürlich von der Maschenweite abhängen. Trägt man das Ergebnis für verschiedene Maschenweiten doppelt logarithmisch auf, so sieht man, dass ein linearer Zusammenhang zwischen $\log N$ und $\log \frac{1}{\varepsilon}$ besteht . Man kann also eine Gerade bestimmen, so dass

$$\log N = D \cdot \log \frac{1}{\varepsilon} + b$$

bzw.

$$N = 10^{D \cdot \log \frac{1}{\varepsilon} + b} = 10^b \cdot \frac{1}{\varepsilon^D}$$

gilt. Die Steigung D wird als fraktale Dimension definiert[2].

12.5 Das Chaos-Spiel

12.5.1 Cantor-Menge

Man kann selbstähnliche Fraktale auch über ein Chaos-Spiel erreichen. Es sei die Strecke $\overline{AB}$ gegeben. Ein Floh hüpft auf dieser Strecke nach folgenden Regeln umher: Er startet bei $\frac{2}{3}$ und wirft eine Münze. Bei Kopf springt er in Richtung A und zwar genau $\frac{2}{3}$ der Entfernung bis A, Bei Zahl springt er in Richtung B und zwar genau $\frac{2}{3}$ der Entfernung bis B. Diese Regel wird beliebig oft wiederholt. Wählt man A=0, B=1 und $x_{alt} = \frac{2}{3}$, erhält man folgendes Schema:

Kopf: $x_{neu} = x_{alt} - \frac{2}{3} \cdot x_{alt} = \frac{1}{3} \cdot x_{alt}$
Zahl: $x_{neu} = x_{alt} + \frac{2}{3} \cdot (1 - x_{alt}) = \frac{2}{3} + \frac{1}{3} \cdot x_{alt}$

Man erhält so die Zahlenfolge

$x_0 = \frac{2}{3}$
$x_1 = \frac{1}{3} \cdot x_0 = \frac{1}{3} \cdot \frac{2}{3} = \frac{2}{9}$
$x_2 = \frac{2}{3} + \frac{1}{3} \cdot x_1 = \frac{2}{3} + \frac{1}{3} \cdot \frac{2}{9} = \frac{20}{27}$
$x_3 = \frac{1}{3} \cdot \frac{20}{27} = \frac{20}{81}$
...

Stellt man diese Folge graphisch dar, so entsteht nach und nach die Cantor-Menge. In Listing 12.1 ist ein pProgramm angegeben, das die Cantor-Menge über diesen Algorithmus erzeugt.

Listing 12.1: Matlab Code zur Erzeugung der Cantor-Menge

```
1 N=100; % Anzahl Punkte
2 % Startpunkt
3 x =2/3; % Startpunkt
4  for j = 1:N
5     p=randi(2)-1; % Zufallszahl  (1 oder 2)
```

[2]Dies ist nur eine Möglichkeit, eine fraktale Dimension zu definieren. Sie wird Kästchenzähldimension (box counting dimension) genannt. Eine weitere Dimension ist die nach Felix Hausdorff (1868 bis 1942) benannte Hausdorff-Dimension, die für die hier betrachteten Fraktale aber dieselben Werte liefert.

```
    if p==1
       x=x/3;
    else
        x=2/3+x/3;
    end
    %  Punkt zeichnen
    plot(x,1,'k.')
    hold all
end
```

Auch interessant: Betrachtet man diese Zahlen im Ternärsystem (Zahldarstellung zur Basis 3), so stellt man fest, dass die Ziffer 1 nicht vorkommt und dass sich von Schritt zu Schritt eine Null (bei Kopf) oder eine Zwei (bei Zahl) hinter dem Komma dazwischenschiebt:

$$x_0 = \frac{2}{3} = 2 \cdot 3^{-1} = 0.2_{\text{TER}}$$
$$x_1 = \frac{2}{9} = 0 \cdot 3^{-1} + 2 \cdot 3^{-2} = 0.02_{\text{TER}}$$
$$x_2 = \frac{20}{27} = 2 \cdot 3^{-1} + 0 \cdot 3^{-2} + 2 \cdot 3^{-3} = 0.202_{\text{TER}}$$
$$x_2 = \frac{20}{81} = 0 \cdot 3^{-1} + 2 \cdot 3^{-2} + 0 \cdot 3^{-3} + 2 \cdot 3^{-4} = 0.0202_{\text{TER}}$$

12.5.2 Sierpinski-Dreieck

Ein Archäologe hat ein dreieckiges Gebiet abgesteckt, in dem er Dino-Knochen vermutet. Da er keine Ahnung hat wo, fängt er an einem beliebigen Ort im Dreieck an zu graben. Den nächsten Ort wählt er aus, indem er zuerst eine Ecke auswählt und dann den Mittelpunkt zwischen dieser Ecke und seiner aktuellen Position als neuen Grabungsort bestimmt. Trägt man die Grabungsorte auf, so entsteht nach und nach das Dreieck nach Sierpinski (1882-1969). Ein Matlab-Code zur Erzeugung des Sierpinski-Dreiecks ist in Listing 12.2 angegeben.

Listing 12.2: Matlab Code zur Erzeugung des Sierpinski-Dreiecks

```
N=10000; %Anzahl der Schritte
vx=zeros(1,N);% Vektoren fuer die Punkte initialisieren
vy=zeros(1,N);
px(1)=0;% Eckpunkte
py(1)=0;
px(2)=100;
py(2)=0;
px(3)=50;
```

```
9  py(3)=87;
10
11 x =50; % Startpunkt
12 y =50;
13 for j = 1:N
14     p=randi(3); % Zufallszahl erzeugen (1,2 oder 3)
15     x=(x+px(p))/2;
16     y=(y+py(p))/2;
17     vx=[vx x]; % Punkt in Vektoren merken
18     vy=[vy y];
19 end
20 plot(vx,vy,'k.') % alle Punkte schwarz zeichnen
```

12.5.3 Der Barnsley-Farn



Abbildung 12.5: Barnsley-Farn

Zur Erzeugung des Farns nach Barnsley (*1946) wird ausgehend von einem Startpunkt (x_0, y_0) eine von vier affinen Abbildung ausgewählt, die auf den Punkt losgelassen wird[2]. In jedem Schritt wird zufällig eine der vier Abbildungen ausgewählt. Um ein gleichmäßiges Bild zu erhalten, wird eine Abbildung umso häufiger ausge-

wählt, je größer ihr Bild (ihre Determinante) ist, das sie erzeugt.

$$\begin{pmatrix} x_{neu} \\ y_{neu} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.85 & 0.04 \\ -0.04 & 0.85 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_{alt} \\ y_{alt} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1.6 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} x_{neu} \\ y_{neu} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.2 & -0.26 \\ 0.23 & 0.22 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_{alt} \\ y_{alt} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1.6 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} x_{neu} \\ y_{neu} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.15 & 0.28 \\ 0.26 & 0.24 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_{alt} \\ y_{alt} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0.44 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} x_{neu} \\ y_{neu} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0.16 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_{alt} \\ y_{alt} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Dieses Verfahren zur Erzeugung selbstähnlicher Abbildungen nennt man iteriertes Funktionensystem (IFS). Ein Matlab-Programm zur Erzeugung des Farns mittels des IFS ist in Listing 12.3 angegeben.

Listing 12.3: Matlab Code zur Erzeugung des Farns

```
xalt = 1;% Startpunkt
yalt = 0;
N=10000; % Anzahl Punkte
vx=zeros(1,N);% Vektoren fuer die Punkte initialisieren
vy=zeros(1,N);
w1=0.79; % Wahrscheinlichkeiten (Summe=1)
w2=0.1;
w3=0.1;
w4=0.01;
for i = 1 : N
    q = rand; % Zufallszahl zwischen 0 und 1
    if q<w1
         x = .85*xalt + .04*yalt;
         y = -.04*xalt + .85*yalt + 1.6;
    else
        if q<w1+w2
          x = .2*xalt - .26*yalt;
          y = .23*xalt +.22*yalt + 1.6;
        else
            if q<w1+w2+w3
          x = -.15*xalt + .28*yalt;
          y = .26*xalt +.24*yalt + .44;
            else
           x=0;
```

```
            y=0.16*yalt;
             end
         end
    end
    vx=[vx x]; % Punkt in Vektoren merken
    vy=[vy y];
    xalt=x; % neuer Punkt ist naechster Startwert
    yalt=y;
end
plot(vx,vy,'k.') % alle Punkte schwarz zeichnen
```

12.6 Mandelbrot-Menge

Die Mandelbrot-Menge [10] ist nach Benoit B. Mandelbrot (*1924) benannt und wird manchmal auch als Apfelmännchen bezeichnet. Sie ist eine Teilmenge der komplexen Ebene $\mathbb{C}$. Die komplexe Ebene besteht aus komplexen Zahlen z, die sich aus einem Realteil a und einem Imaginärteil b zusammensetzen:

$$z = a + i \cdot b \qquad \text{mit} \qquad i = \sqrt{-1}$$

Der Betrag einer komplexen Zahl beträgt $|z| = \sqrt{a^2 + b^2}$

Die Mandelbrot-Menge ist wie folgt definiert:

$$M = \{c \in \mathbb{C} \mid (z_n) \text{ bleibt beschränkt}, \quad z_{n+1} = z_n^2 + c, z_0 = c\}$$

Praktisch kann man die Beschränktheit bestimmen, indem man für jeden Punkt der Ebene nachschaut, ob die Werte der Iteration den Kreis um Null mit dem Radius 2 nach einer bestimmten Zeit verlassen. Hierzu bestimmt man den Abstand der komplexen Zahl vom Ursprung und überprüft, ob dieser kleiner als zwei ist: $|z_n - 0| < 2$. Nach einer bestimmten Zeit bedeutet hierbei, dass man eine Anzahl an Iterationsschritten vorgibt. Bleiben alle Werte der Iteration innerhalb des Kreises, so zählt man den Ausgangspunkt zur Menge. Je größer man die Anzahl wählt, desto genauer kann man die Menge bestimmen. Ein Bild der Mandelbrot-Menge ist in Abbildung 12.6 gegeben, ein einfaches Matlab-Programm zur Erzeugung der Mandelbrotmenge in Listing 12.4.

Listing 12.4: Matlab Code zur Erzeugung der Mandelbrot-Menge

```
minr=-2; % Grenzen festlegen
```

```
maxr=0.5;
mini=-1.2;
maxi=1.2;
delt=0.005; % Aufloesung
vr=[];% Vektoren fuer die Punkte initialisieren
vi=[];
for ci=mini:delt:maxi % Imaginaerteile
   for cr=minr:delt:maxr   %Realteile
       zr=cr; % Realteil Iterationsstartwert
       zi=ci; % Imaginaerteil Iterationsstartwert
       count=0;
       while zr*zr+zi*zi<4 & count<50 % schauen ob es konvergiert
          temp=zr*zr-zi*zi+cr; % neuen Realteil zunaechst merken
          zi=2*zr*zi+ci; % Imaginaerteilteil des Iterationsschritts
          zr=temp; % Realteil des Iterationsschritts
          count=count+1;
       end
       if count>=50 % Punkt der Mandelbrotmenge
            vr=[vr cr];
            vi=[vi ci];
       end
   end
end
plot(vr,vi,'k.') % alle Punkte der Mandelbrotmenge zeichenen
axis equal
```

Die Farben in Abbildung 12.6, ergeben sich, wenn man die Punkte, für die die Iteration nicht beschränkt ist, je nach Divergenzgeschwindigkeit unterschiedlich einfärbt. Die Menge der Punkte, für die die Iteration konvergiert (schwarz), heißt Mandelbrot-Menge.

12.6.1 Julia-Mengen

Eng verwandt mit der Mandelbrot-Menge sind die Julia-Mengen (Abbildung 12.7). Die Julia-Mengen sind nach Gaston M. Julia (1893-1978) benannt. Die Julia-Menge zu einem Punkt c ist eine Teilmenge der komplexen Ebene, die durch

$$J_c = \{z \in \mathbb{C} \mid (z_n) \text{ bleibt beschränkt}, \quad z_{n+1} = z_n^2 + c, z_0 = z\}$$

definiert ist. Der Unterschied zur Mandelbrot-Menge besteht darin, dass ein Punkt c vorgegeben wird und für jeden Punkt z der Ebene nachgeschaut wird, ob die

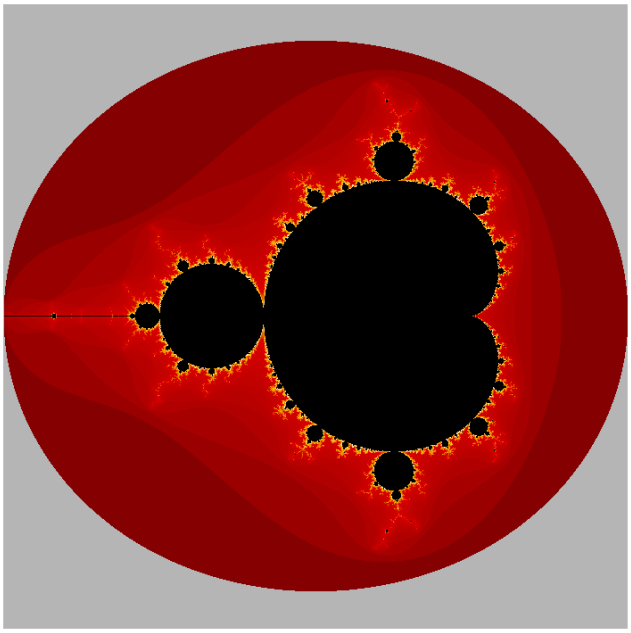


Abbildung 12.6: Mandelbrot-Menge (schwarz).
Die gesamte Grafik stellt den Bereich [-2,1] x [-1.5i,1.5i] dar.

Iterationsfolge beschränkt bleibt. Man erhält also für jedes c eine Julia-Menge. Interessanterweise sind die Julia-Mengen, deren c-Werte der Mandelbrot-Menge angehören, zusammenhängende Mengen. Die Julia-Mengen, deren c-Werte außerhalb der Mandelbrot-Menge liegen, bestehen aus isolierten Punkten. Unter diesem Aspekt kann man die Mandelbrot-Menge als Inhaltsverzeichnis der Julia-Mengen auffassen.

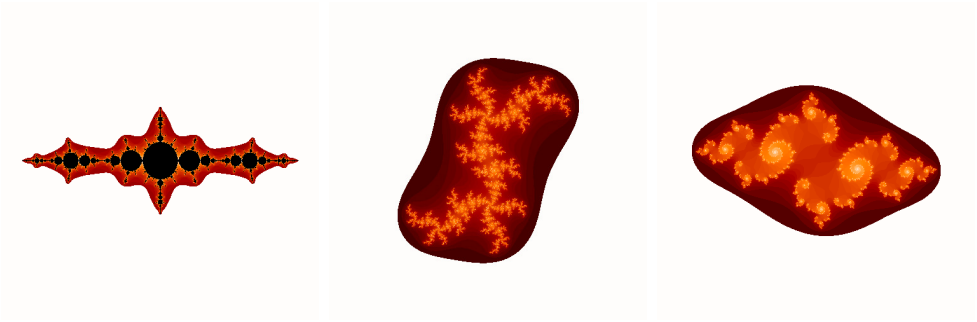


Abbildung 12.7: Julia-Mengen zu den Punkten c=1.28 (links) c= 0.334 - 0.528 i (Mitte) und c= -0.776 + 0.216 i (rechts).

12.7 Anwendungen

Auf den ersten Blick erscheinen Fraktale als ganz hübsch, aber nicht sonderlich nützlich. In den letzten Jahren hat es aber eine ganze Reihe von praktischen Anwendungen gegeben:

- Die Küstenlänge von England hat die Dimension $D \approx 1.23$.
- Misst man den Stoffwechsel (metabolische Rate) S von Lebewesen und trägt diesen doppelt-logarithmisch über der Körpermasse M auf, so ergibt sich der lineare Zusammenhang $\log S = a \cdot \log M + b$ mit einer Steigung von $a \approx 0.75$. Daraus kann man die Dimension schließen, wenn man annimmt, dass die Masse proportional zum Volumen ist und das Volumen proportional zur dritten Potenz der linearen Ausdehnung r. Es gilt $S \sim M^a$, also $S \sim r^{3a}$. Man erhält die Dimension $D \approx 3 \cdot 0.75 = 2.25$.
- Die Dimension der Hirnhaut, d.h. der Hirnoberfläche ist $D \approx 2.79$ [10].
- Die Verästelungen der Bronchien sind nahezu selbstähnlich. Es ergibt sich eine Dimension von $D \approx 2.8$. Bei der Dosierung von Medikamenten muss dies berücksichtigt werden [18].

Teil II

Weitere Modellbeispiele*

13 Die Atlantische Umwälzzirkulation (AMOC)

Die atlantische meridionale Umwälzzirkulation (engl. Atlantic Meridional Overturning Circulation, kurz AMOC) transportiert warmes, salzreiches Wasser in den oberen Schichten des Atlantiks nach Norden und führt kaltes Tiefenwasser zurück nach Süden (Abbildung 13.1). Die Zirkulation ist u.a. für den Austausch von Wärme und Salz zwischen den Ozeanen und der Atmosphäre entscheidend und stellt einen Schlüsselprozess im globalen Klimasystem dar. Der Golfstrom ist ein Teil der AMOC. Durch den Klimawandel ändern sich viele Faktoren des Klimasystems. Im

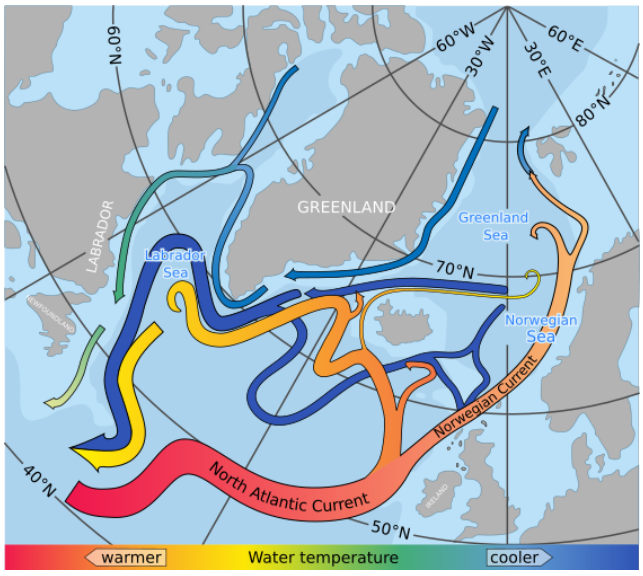


Abbildung 13.1: Meeresströme im Nordatlantik

Quelle: Von Goddard Space Flight Center Bearbeitung MagentaGreen (SVG Version) - über https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=59157541

Nordatlantik, insbesondere in der Labradorsee und der Grönlandsee, kühlt sich das warme Oberflächenwasser durch den Kontakt mit kalter Luft ab und wird dadurch dichter und sinkt ab. Wenn große Teile des grönländischen Eisschilds abschmelzen, nimmt der Salzgehalt im Oberflächenwasser ab, das Wasser ist dann weniger dicht. Dies führt dazu, dass weniger Wasser in die Tiefe sinkt und die thermohaline Zirkulation (THC) im Nordatlantik schwächer wird. Das hat zur Folge, dass weniger salzhaltiges Wasser aus dem Süden in den Nordatlantik gelangt und die Strömung dadurch weiter abgeschwächt wird. Aktuelle Forschungsergebnisse geben Hinweise, dass sich die Zirkulation bereits abgeschwächt hat [12].

Ein sehr einfaches Modell hierzu wurde bereits in den 1960er Jahren von [16]

beschrieben und von [11] und [12] auf die AMOC übertragen.

13.1 Das Modell nach Stommel

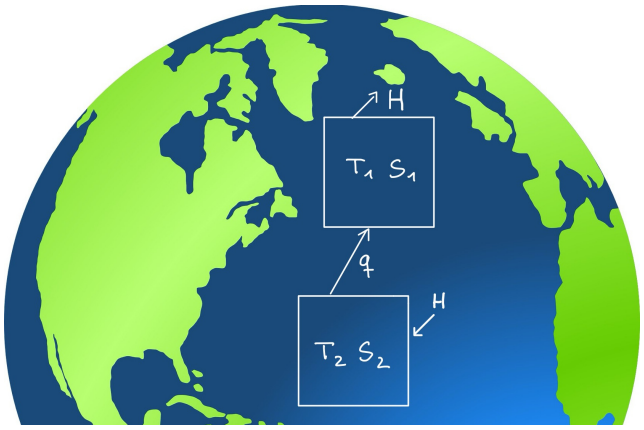


Abbildung 13.2: Schema des Modells nach [16] . Das Modell besteht aus zwei durchmischten Boxen (1: hohe Breiten, Arktis; 2: niedrige Breiten, äquatornah) gleichen Volumens mit unterschiedlicher Temperatur und Salzgehalt. Der Salzverlust resp. Salzeintrag betrage H.

Das Modell besteht aus zwei durchmischten Boxen gleichen Volumens mit unterschiedlicher Temperatur und Salzgehalt. Die erste Box beschreibt die hohen Breiten in der Arktis, die zweite die äquatornahen niedrigen Breiten. (Abbildung 13.2). Die Temperaturdifferenz ΔT der Boxen sei konstant. Der Süßwassereintrag in die nördliche Box durch Schmelzwasser des Grönland-Gletschers führt dazu, dass der Salzgehalt sinkt („Salzverlust“). Der Süßwasserverlust in der äquatornahen Box durch Verdunstung führt dazu, dass der Salzgehalt steigt („Salzeintrag“). Damit keine Salzquelle oder -senke im Modell ist, wird angenommen, dass Salzverlust und Salzeintrag H betragsmäßig gleich groß sind[1]. Den Salzverlust H in den nördlichen Breiten kann man auch als einen Süßwassereintrag in das Oberflächenwasser interpretieren.

13.1.1 Dichte des Meerwassers

Die Dichte des Meerwassers (ϱ) ist entscheidend für die Stärke q der AMOC und wird durch Temperatur (T) und Salzgehalt (S) beeinflusst:

- **Niedrige Temperatur und hoher Salzgehalt** führen zu **hoher Dichte**.

[1] Quellen oder Senken würden das Ergebnis schlechter interpretierbar machen, da ein Modellergebnis auch daraus resultieren könnte.

- **Hohe Temperatur und niedriger Salzgehalt** führen zu **niedriger Dichte**.

Vereinfachend wird angenommen, dass die Dichte ϱ linear von Temperatur T und Salzgehalt S abgehängt:

$$\varrho = \varrho_0 - a(T - T_0) + b(S - S_0) \tag{13.1}$$

wobei ϱ_0 die Referenzdichte, a der thermische Expansionskoeffizient, b der haline Expansionskoeffizient, und T_0 und S_0 die Referenzwerte für Temperatur und Salzgehalt sind.

13.1.2 Strömungsstärke

Die Strömungsstärke q innerhalb einer Meeresströmung hängt unter anderem vom Dichteunterschied ab. Die Strömungsstärke q der AMOC sei linear mit dem Dichteunterschied $\varrho_1 - \varrho_2$ in den Boxen verknüpft:

$$q = k \cdot (\varrho_1 - \varrho_2)$$

Durch Einsetzen von Gleichung 13.1 für ϱ_1 und ϱ_2 und Zusammenfassen ergibt sich:

$$q = k \cdot (a\Delta T - b\Delta S) \tag{13.2}$$

Hierbei ist k eine hydraulische Konstante, und $\Delta T = T_2 - T_1$ und $\Delta S = S_2 - S_1$ die Unterschiede in Temperatur und Salzgehalt zwischen Box 1 und Box 2.

Für $q > 0$ dominiert der thermale Unterschied, und die Oberflächenströmung ist nordwärts gerichtet. Für $q < 0$: dominiert der haline Unterschied und die Oberflächenströmung ist südwärts gerichtet.

13.1.3 Modellgleichungen

Die Dynamik der Strömung kann durch Differentialgleichungen für die Salzgehalte in den Boxen modelliert werden:

$$\dot{S}_1 = \quad |q|\Delta S - H \tag{13.3}$$

$$\dot{S}_2 = -|q|\Delta S + H$$

Durch Differenzbildung erhält man eine Differentialgleichung für die Salzgehaltsdifferenz $\dot{\Delta S}$:

$$\dot{\Delta S} = -2|q|\Delta S + 2H \tag{13.4}$$

13.1.4 Differentialgleichung für Stromstärke q

Mit

$$q = k \cdot (a\Delta T - b\Delta S) \tag{13.5}$$

erhält man für konstantes ΔT durch Ableiten

$$\dot{q} = -kb\dot{\Delta S} \tag{13.6}$$

Einsetzen von Gleichung 13.4 in Gleichung 13.6 ergibt

$$\dot{q} = -kb \cdot (-2|q|\Delta S + 2H) \tag{13.7}$$

Durch Umstellen erhält man aus Gleichung 13.5

$$\Delta S = \frac{1}{b} \cdot \left(a\Delta T - \frac{q}{k}\right) \tag{13.8}$$

und mit Einsetzen von Gleichung 13.8 in Gleichung 13.7 erhält man eine Differentialgleichung für die Strömungsstärke, die bei konstanter Temperaturdifferenz und

gegebenen Parametern a,b und k nur noch vom Süßwassereintrag H abhängt:

$$\dot{q} = -kb \cdot \left(-2|q| \cdot \frac{1}{b} \cdot \left(a\Delta T - \frac{q}{k} \right) + 2H \right) = 2ak\Delta T|q| - 2|q|q - 2kbH \quad (13.9)$$

13.1.5 Fixpunkte der Strömungsstärke

Zur Bestimmung der Fixpunkte von Gleichung 13.9 wird diese gleich Null gesetzt. Es existieren unterschiedliche Lösungen für $\dot{q} = 0$, je nach Vorzeichen von q:

Für $q > 0$:

$$\dot{q} = 2ak\Delta Tq - 2q^2 - 2kbH = 0$$

Für $q < 0$:

$$\dot{q} = -2ak\Delta Tq + 2q^2 - 2kbH = 0$$

Es handelt sich jeweils um quadratische Gleichungen, die z.B. mit Hilfe der pq-Formel gelöst werden können. Für $q > 0$ gibt es zwei Lösungen, für $q < 0$ nur eine. Man erhält also jeweils Funktionsgleichungen in Abhängigkeit vom Süßwassereintrag H. Unterschiedliche Werte von H ändern die Anzahl und die Stabilität der Fixpunkte.

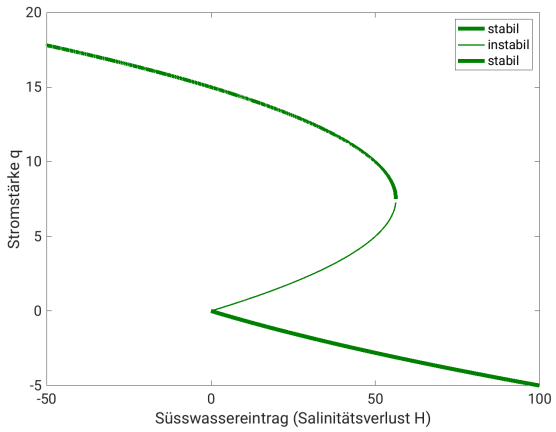


Abbildung 13.3: Fixpunkte der Strömungsstärke (AMOC) und deren Stabilität des Stommel-Modells in Abhängigkeit des Süßwassereintrags H. Die dicken Linien kennzeichnen die stabilen Bereiche, die dünnen Linien die instabilen Bereiche. Parameter: k=1, a=10, b=1, ΔT=1.5.

In Abbildung 13.3 sind die Gleichgewichtswerte (Fixpunkte) die Stromstärke q in

Abhängigkeit vom Süßwassereintrag H aufgetragen. In der Realität werden diese Gleichgewichtswerte zwar nicht in adäquater Zeit angenommen, das System wird sich aber bei ansonsten gleich bleibenden Bedingungen darauf zu bewegen. Nimmt der Süßwassereintrag soweit zu, dass der kritische Wert überschritten wird, wird das System auf den einzig verbliebenen Fixpunkt zustreben. Zunächst wird sich also die Oberflächenströmung verlangsamen und rein theoretisch letztlich umkehren. Letzteres passiert, wenn überhaupt, wohl eher auf Zeitskalen in denen sich alle anderen Bedingungen soweit ändern, dass das Modell neu kalibriert werden muss. Dennoch wird eine Reduktion des Süßwassereintrags durch klimaschützende Maßnahmen nicht den gewünschten Effekt haben, da sich das System erst dann erholt, wenn der Süßwassereintrag soweit reduziert[2] wird, bis sich das System wieder dem „oberen“ stabilen Ast nähern kann. Dies nennt man einen Hysterese-Effekt.

Das Modell ist natürlich viel zu einfach, um die komplexen Zusammenhänge, die die AMOC beeinflussen, zu beschreiben. Das Verständnis dieser Modellgleichungen und der Stabilität der Fixpunkte ist dennoch die Basis für jedes komplexe Klimamodell.

[2] Bei der hier gewählten Parametrisierung muss es sogar zu einem Salzeintrag kommen.

14 NPZ-Modell

Nährstoff-Phytoplankton-Zooplankton-Modell

14.1 Modellbeschreibung

In Abschnitt 5.4 haben wir ein aquatisches Räuber-Beute-Modell mit den Zustandsvariablen Phytoplankton und Zooplankton erstellt. Hierbei sind wir davon ausgegangen, dass das Wachstum des Phytoplanktons nur Licht-limitiert ist. In der Realität hängt das Wachstum des Phytoplanktons aber auch von der Nährstoffverfügbarkeit ab. Zur Beschreibung eines aquatischen Systems ist das Modell also zu erweitern. Wir führen einen Nährstoff (z.B. Phosphat) als weiter Zustandsvariable ein. Ein solches Modelle mit den Zustandsvariablen

- N Nährstoffkonzentration im Wasser, z.B. anorganisches Phosphat
- P Phytoplanktonkonzentration
- Z Zooplanktonkonzentration

heißt auch NPZ-Modell. Dieses Modell soll z.B. den Jahresgang der 3 Größen Nährstoff, Phytoplankton und Zooplankton simulieren und die Messergebnisse in Abbildung 14.1 reproduzieren. Zuerst muss man sich überlegen, in welchen Einhei-

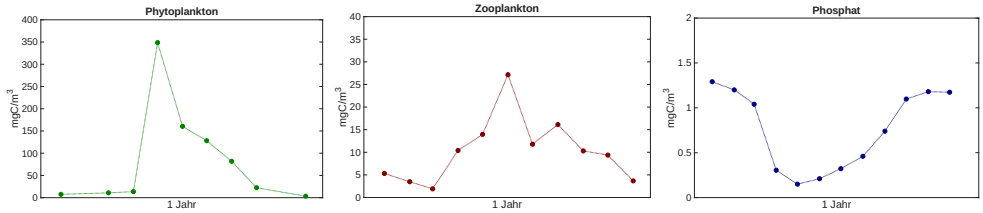


Abbildung 14.1: Messdaten der südlichen Nordsee für Phytoplankton, Zooplankton und Phosphat. Es handelt sich um Monatsmittelwerte.

ten die Zustandsgrößen angegeben werden. Wenn man Felddaten zur Verfügung hat, liegt es natürlich Nahe, dieselben Einheiten auch im Modell zu verwenden. Dies verkompliziert das Modell aber häufig. Im NPZ-Modell ist es die einfachste Möglichkeit alle Zustandsgrößen in derselben Einheit zu wählen, z.B. $\mathrm{mmol\,P\,m^{-3}}$ falls Phosphat der betrachtete Nährstoff ist. Das bedeutet aber, dass auch die Phytoplankton und Zooplanktonkonzentration in Phosphateinheiten gegeben werden.

Zum Vergleich mit etwaigen Zellzahlen oder Trockenmassen, oder Kohlenstoffkonzentration muss dann eine Umrechnung erfolgen.

Wir wählen als Beispiel den Nährstoff Phosphat in $\mathrm{mmol\,P\,m^{-3}}$. Für Phyto- und Zooplankton wählen wird $\mathrm{mg\,C\,m^{-3}}$. Geht man nun stark vereinfachend davon aus, dass das q=P:C-Verhältnis eine Konstante ist (Redfield-Verhältnis: C:N:P=106:16:1 als molares Verhältnis), so kann man für Phytoplankton leicht umrechnen:

$$\text{Phosphatkonzentration} = \mathrm{q} \cdot \text{Kohlenstoffkonzentration}$$

wobei

$$\mathrm{q} = \frac{1\,\mathrm{mmol\,P}}{106\,\mathrm{mmol\,C}} \cdot \frac{12\,\mathrm{mg}}{\mathrm{mmol\,C}} = \frac{1}{106 \cdot 12} \frac{\mathrm{mmol\,P}}{\mathrm{mmol\,C}} \tag{14.1}$$

ist.

14.1.1 Prozessbeschreibungen

Wir betrachten also ein Modell mit den drei Zustandsgrößen N,P und Z. Die Prozesse zwischen den Zustandsgrößen sind in Abbildung 14.2 dargestellt und werden im folgenden noch einmal beschrieben. **Assimilation:** Phytoplankton assimiliert

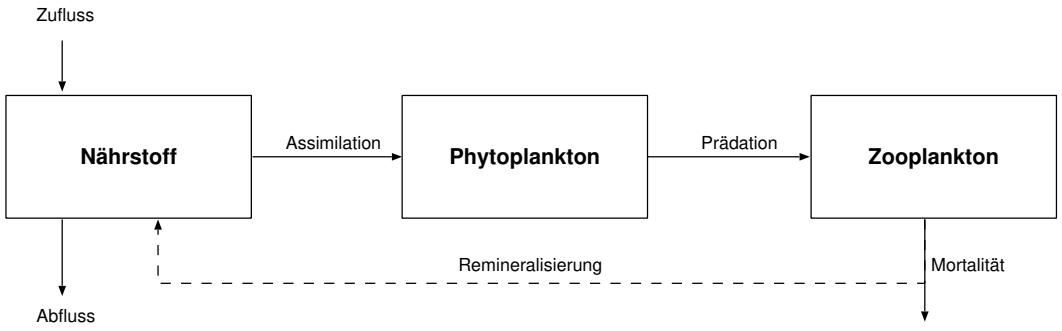


Abbildung 14.2: Schematische Darstellung des NPZ-Modells

unter Nutzung der Lichtenergie Kohlenstoff. Wir nehmen an, dass entsprechend des Redfield-Verhältnisses auch Phosphat aus dem Wasser aufgenommen wird. Die Assimilation sei daher auch abhängig von der Phosphatkonzentration im Wasser. Dies ist eine Vereinfachung. In der Realität sind Kohlenstoff- und Nährstoffaufnahme mehr oder weniger entkoppelt.

Prädation: Ein Teil des Phytoplanktons wird vom Zooplankton gefressen und führt zum Aufbau der Zooplanktonbiomasse.
Mortalität: Ein Teil des Zooplanktons stirbt
Remineralisierung: Der Phosphatanteil der toten Zooplanktonbiomasse wird zu anorganischem Phosphat remineralisiert. Diesen Prozess vernachlässigen wir hier zunächst.
Zu- und Abfluss: Wir nehmen an, dass das betrachtete aquatische System einen Zu- und Abfluss hat. Der Zufluss habe eine feste Phosphatkonzentration.
Die Gleichungen lauten dann:

$$\begin{aligned}
\dot{N} &= \text{Remineralisierung} - \text{Assimilation} + \text{Zufluss} - \text{Abfluss} \\
\dot{P} &= \text{Assimilation} - \text{Prädation} \\
\dot{Z} &= \text{Prädation} - \text{Mortalität}
\end{aligned} \tag{14.2}$$

Die meisten der Prozesse haben wir schon in Abschnitt 5.4 beschrieben. Es müssen nun die Prozesse zur Beschreibung der Nährstoffdynamik modelliert werden. Ausserdem muss die Assimilation nun abhängig von der Nährstoffverfügbarkeit werden.

Präzisierung der Gleichungen

Assimilation: Kohlenstoff wird mit einer maximalen Rate r_a (in d^{-1}) assimiliert. Die tatsächliche aktuelle Assimilationsrate hänge von der Einstrahlung und der Nährstoffkonzentration im Wasser ab. Wir beschreiben daher die Assimilation als Produkt aus der maximalen Assimilationsrate r_a , dem dimensionslosen Faktor e_L (5.6) und einem Sättigungsterm für die Aufnahme des Nährstoffs aus dem Wasser mit der Halbsättigungskonstanten N_h. Das Wachstum des Phytoplankton sei außerdem weiterhin durch die Kapazität K begrenzt (logistisches Wachstum):

$$\text{Assimilation} = r_a \cdot e_L \cdot \frac{N}{N + N_h} \cdot \left(1 - \frac{P}{K}\right) \cdot P$$

Der diesem Kohlenstofffluss entsprechende Nährsstofffluss muss in der Gleichung, die die Änderung des Nährstoffs beschreibt, berücksichtigt werden. Hierzu wird der der Kohlenstofffluss mit dem Faktor q (Gleichung 14.1) multipliziert.

Prädation: Phytoplankton wird durch Zooplankton unter Berücksichtigung einer Sättigung (mit der Halbsättigungskonstanten P_h) mit der maximalen Rate r_p (in d^{-1}) gefressen:

$$\text{Prädation} = r_p \cdot \frac{P}{P + P_h} \cdot Z \qquad \text{in } mg\,C\,m^{-3}\,d^{-1}$$

Wir nehmen an, dass nur der Anteil n ($0 < n < 1$) tatsächlich zu Zooplanktonbiomasse wird.

Mortalität: Ein Teil des Zooplanktons stirbt durch hier nicht-modellierte Einflüsse

$$\text{Mortaliät} = r_m \cdot Z \qquad \text{in } mg\,C\,m^{-3}\,d^{-1}$$

Zu- und Abfluss: Wir nehmen an, dass das zufließende Flusswasser eine Nährstoffkonzentration N_{zu} (in $mmol\,m^{-3}$) hat. Die Zuflußrate r_{zu} (in $)\,d^{-1}$ Menge sei als Anteil des Gesamtvolumens gegeben. Das Gesamtvolumen sei konstant. Damit erhält man die Gleichungen:

$$\text{Zufluss} = r_{zu} \cdot N_{zu} \qquad \text{in } mmol\,m^{-3}\,d^{-1}$$

$$\text{Abfluss} = r_{zu} \cdot N \qquad \text{in } mmol\,m^{-3}\,d^{-1}$$

14.2 Gleichungen

$$\dot{N} = -r_a \cdot e_L \cdot \frac{N}{N + N_h} \cdot \left(1 - \frac{P}{K}\right) \cdot P \cdot q \; + \; r_{zu} \cdot N_{zu} - r_{zu} \cdot N$$

$$\dot{P} = \; r_a \cdot e_L \cdot \frac{N}{N + N_h} \cdot \left(1 - \frac{P}{K}\right) \cdot P \; - \; r_p \cdot \frac{P}{P + P_h} \cdot Z$$

$$\dot{Z} = n \cdot r_p \cdot \frac{P}{P + P_h} \cdot Z \; - \; r_m \cdot Z$$

14.3 Parameter

Name	Bedeutung	Wert und Einheit
r_a	maximale Assimilationsrate	$0.4\,\mathrm{d}^{-1}$
r_p	maximale Prädationsrate	$0.5\,\mathrm{d}^{-1}$
r_m	Sterberate des Zooplanktons	$0.05\,\mathrm{d}^{-1}$
K	Kapazität des Phytoplanktons	$400 \quad \mathrm{mg\,C\,m}^{-3}$
P_h	Halbsättigungskonstante der Prädation	$200 \quad \mathrm{mg\,C\,m}^{-3}$
n	Effizienz	0.3
N_k	Halbsättigungskonstante Phosphataufnahme	$0.5 \quad \mathrm{mmol\,m}^{-3}$
N_{zu}	Phosphatkonzentration des Zuflusses	$1.5 \quad \mathrm{mmol\,m}^{-3}$
r_{zu}	Zuflußrate	$0.01\,\mathrm{d}^{-1}$
L_{max}	Lichtintensität, bei der $e_L = 1$	$250\,\mathrm{W\,m}^{-2}$

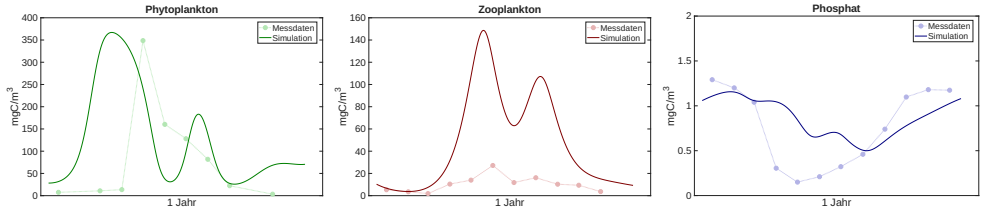


Abbildung 14.3: Simulationsergebnisse und Messdaten der südlichen Nordsee für Phytoplankton, Zooplankton und Phosphat.

14.4 Simulationsergebnisse

Die Simulationsergebnisse in Abbildung 14.3 geben die Größenordnungen der gemessenen Daten wieder. Die Ergebnisse lassen eine typischen Jahresgang erkennen. Das Phytoplankton wächst zu früh im Jahr, außerdem sind die Winterwerte des Phytoplanktons zu hoch. Das Zooplankton ist im Sommer zu hoch, der Phosphatabfall im Frühjahr zu niedrig. Die Nährstoffdynamik und die damit verbundene Dynamik des Phytoplanktons kann mit diesem einfachen Modell nicht gut reproduziert werden. Es fehlt die entkoppelte Aufnahme von Kohlenstoff und Nährstoffen sowie die Betrachtung weiterer Nährstoffe wie Stickstoff und Silikat (bei Diatomeen) und Mikronährstoffe wie z.B. Eisen. In der vereinfachten Durchflussrate für Nährstoffe steckt letztlich die gesamte Hydrodynamik inklusive der Einträge durch Flüsse. An dieser Stelle würde man in einem realistischen Modell viele weitere Aspekte, wie Tide und jahreszeitliche Schwankungen berücksichtigen.

15 Ausbreitung von Borkenkäfern

Natürlicherweise stirbt regelmäßig ein Teil eines Waldes, das ist Teil seiner regulären Erneuerung. Ursachen hierfür sind Waldbrände, Sturmschäden, Trockenheit und Schädlingsbefall. Jeder Teil des natürlichen Waldes erneuert sich etwa alle 30 bis 200 Jahre. Alternder Wald wird gegen die oben genannten Gefahren immer anfälliger, irgendwann setzt dann das von außen induzierte Sterben ein, für jeden Standort je nach Anfälligkeit zu einem anderen Zeitpunkt, aber infolge der oft weiten räumlichen Ausdehnung der Ursachen (z.B. ein besonders trockener Sommer in Mitteleuropa) an vielen Orten gleichzeitig.

In diesem Kapitel wird ein einfaches Modell einer Walderneuerung konstruiert. Im ersten Abschnitt wird die Entwicklung der Borkenkäferpopulation isoliert betrachtet. Hierzu wird zunächst die Borkenkäferpopulation in einen Wald mit konstanter Altersstruktur gesetzt. In einem zweiten Schritt wird die Wirkung einer hohen Borkenkäferdichte auf den Wald als „Verjüngung“ beschrieben. Die Annahme dabei ist, dass die alten Bäume sterben und Platz für Sämlinge machen. Das Modell hat zwei Zustandsvariable, die Borkenkäferdichte und das Alter des Waldes. Zuletzt wird das Modell als räumliches Modell auf einer Automatenstruktur betrachtet.

15.1 Borkenkäfer-Dynamik

Borkenkäfer vermehren sich und werden von Vögeln gefressen oder sterben an eigenen Krankheiten.

Als erste (und in diesem Abschnitt einzige) Zustandsvariable wird die Borkenkäferdichte B betrachtet. Als Maßeinheit für B wird „Zahl der Käfer pro Ar“ verwendet. Das Modell wird aber nicht an die Wirklichkeit heranreichen, in der diese Zahl wohl um viele Größenordnungen schwankt. Die Prozesse, die die Änderung der Borkenkäferdichte B beschreiben, sind Wachstum und Mortalität. Beide Prozesse sind dichteabhängig, und außerdem noch abhängig vom Alter A des Waldes. Das Modell besteht in dieser Entwicklungsstufe aus Gleichung (15.1).

$$\dot{B} = \text{Wachstum}(B, A) - \text{Mortalität}(B, A) \tag{15.1}$$

Für das Wachstum bietet sich als fast einfachste Möglichkeit eine Art logistischer Ansatz an, wobei die maximale Wachstumsrate r vom Alter A des Waldes abhängt.

Alte Bäume sind anfälliger, deshalb wird r(A) in Ansatz (15.2) mit dem Alter A steigen.

$$\text{Wachstum} = r(A) \cdot B \cdot \left(1 - \frac{B}{K}\right) \tag{15.2}$$

Hier ist K die Kapazität der Käfer, eine Wachstumsgrenze, die nie erreicht wird, da eine zusätzliche Mortalität (15.3) durch in (15.1) vorgesehen ist. Dieser Term beschreibt die Dezimierung der Borkenkäfer durch Vogelfrass.

$$\text{Mortalität} = s \cdot \frac{B^2}{B^2 + M^2} \tag{15.3}$$

Der Ansatz (15.3) ist eine sigmoide Kurve. Ohne die Quadrate wäre (15.3) es ein Monod-Ansatz, also ein Prädationsterm mit Sättigung. Der Sättigungswert s gibt an, wie viele Borkenkäfer pro Tag und Ar maximal von Vögeln gefressen werden. Die Konstante M gibt an, bei welcher Borkenkäferdichte diese mit der Hälfte der maximalen Intensität gefressen werden.

Die quadratische Abweichung bewirkt, dass bei sehr niedrigen Dichten die Mortalität der Borkenkäfer sehr klein ist. Die Schädlinge können so von den Vögeln nicht ausgerottet werden. Man kann vermuten, dass die Käfer umso besser versteckt sind, je weniger von ihnen da sind. Außerdem konzentrieren Räuber ihre Wahrnehmung auf den häufigsten Beutetyp und neigen dazu „seltene“ Beute zu ignorieren.

Das Alter des Waldes A wird später die zweite Zustandsvariable. Hier ist A zunächst ein konstanter Parameter. Das Alter des Waldes wird auf den Bereich von 0 bis 1 normiert. Damit ist A eine dimensionslose Größe. Man kann sich etwa vorstellen, dass mit $A = 1$ ein Wald aus hundertjährigen oder älteren Bäumen beschrieben wird. Da das Modell so einfach wie möglich sein soll, wird die Wachstumsrate der Borkenkäfer proportional zu A angesetzt, (15.4).

$$r(A) = r \cdot A \tag{15.4}$$

Die Doppelfunktion des Buchstaben r als Wachstumsfunktion r(A) und als Ratenkonstante r wird keine Schwierigkeiten machen, da im folgenden nur noch letztere auftritt. Wird (15.2) bis (15.4) in die Systemgleichung (15.1) eingesetzt, ergibt

sich Gleichung (15.5).

$$\dot{B} = r \cdot A \cdot B \cdot \left(1 - \frac{B}{K}\right) - s \cdot \frac{B^2}{B^2 + M^2} \tag{15.5}$$

Die Fixpunkte des Systems erhält man als Schnittpunkte des Wachstumsterms und des Mortalitätsterms (Abbildung 15.1). Je nach Alter des Waldes gibt es zwei, drei oder vier Schnittpunkte. Die erste ist die triviale Lösung $B_1^* = 0$, die anderen sind die Lösung einer kubische Gleichung. Da der Zusammenhang $B^*(A)$ nur schwer

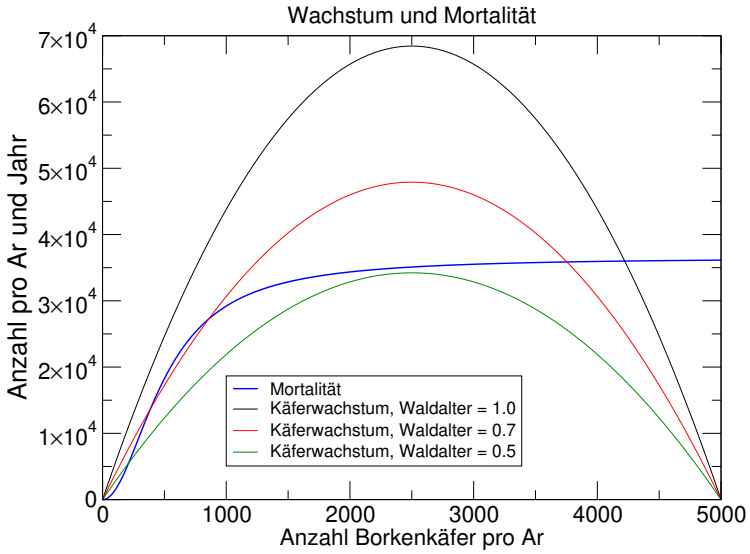


Abbildung 15.1: Vergleich von Wachstum und Mortalität für verschiedene Alter A des Waldes. Bei A = 0.7 haben die Graphen von Mortalität (blau) und Wachstum vier Schnittpunkte, in den anderen Fällen zwei, jeweils einschließlich des Nullpunktes. Die Schnittpunkte entsprechen den stationären Zuständen, sie sind abwechselnd stabil und instabil , wobei der Nullpunkt in jedem Falle instabiler stationärer Zustand ist.

analytisch berechenbar ist (wer löst schon gern kubische Gleichungen), betrachtet man die Umkehrfunktion $A(B^*)$ und plotten die Kurve mit vertauschten Achsen:

$$A(B^*) = \frac{s \cdot B^*}{r \cdot \left(1 - \frac{B^*}{K}\right) \cdot \left(B^{*2} + M^2\right)} \qquad B^* > 0 \tag{15.6}$$

In Abbildung 15.2 ist die Lösung für K = 5000 Käfer pro Ar, M = 500 Käfer pro Ar, r = 0.15 pro Tag und s = 100 pro Ar und Tag dargestellt. Es gibt ein breites Intervall auf der A-Achse, in dem zu jedem Alter drei positive stationäre Zustände $B^*(A)$ koexistieren. (Für größere M verkleinert sich das Intervall, für kleinere M dehnt es sich bis über A = 1 aus). Das Modell kann zu einer sogenannten Hysterese führen. Um die Hysterese zu verstehen, drehen wir im Gedanken am Parameter A.

Bei $A = 0.4$ existiert (neben $B^* = 0$) zunächst nur einen Gleichgewichtswert mit sehr kleiner Borkenkäferdichte B^*. Bei Erhöhung von A steigt B^* nur langsam an und erreicht bei $A \approx 0.75$ etwa den Wert $B^* = 550$. Bei noch höherem A hört dieser Ast von $B^*(A)$ auf zu existieren. Das System muss sich einen anderen stabilen stationären Zustand suchen. Faktisch bedeutet das, die Borkenkäferdichte explodiert und pendelt sich auf dem hohen Wert $B^* \approx 4200$ ein. Eine nachfolgende Erniedrigung von A muss bis unter den Wert von etwa 0.5 führen, ehe die hohe Dichte zusammenbricht.

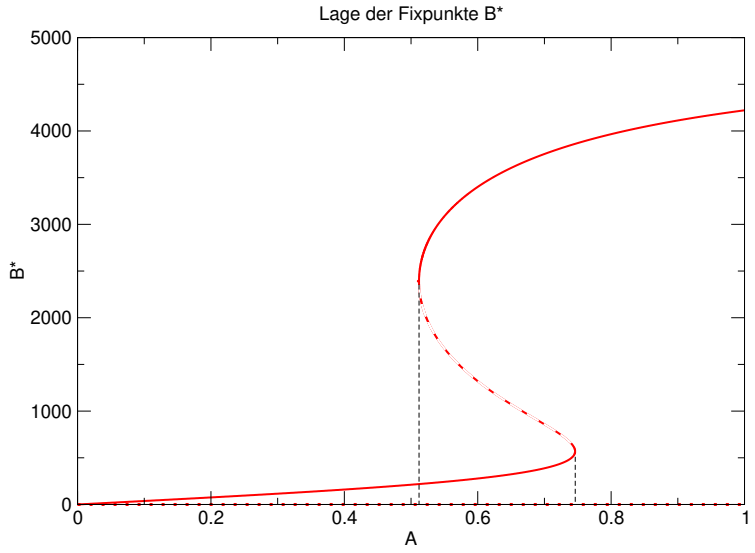


Abbildung 15.2: Stationäre Borkenkäferdichten B^* als Funktion des Alters A des Waldes. Im Bereich $0.55 < A < 0.75$ koexistieren vier stationäre Zustände (einschließlich des trivialen Falles $B^* = 0$). Die Zustände sind abwechselnd instabil (gepunktet) und stabil, beginnend mit $B^* = 0$ instabil.

15.2 Wald-Dynamik

Im diesem Abschnitt wird das Alter A des Waldes dynamisch modelliert. Die Hysterese nach Abbildung 15.2 legt nahe, dass man mit Borkenkäferausbrüchen rechnen kann, wenn die Parameter entsprechend gewählt werden. Neben Gleichung (15.1) bzw. (15.5) benötigt man eine weitere Systemgleichung, mit der das „Alter des Waldes“ A durch die Prozesse Altern und Verjüngung verändert wird. Das Alter eines Baumes ist eine einfache Sache, aber nicht das Alter des Waldes. Wir wollen als Systemvariable A ein irgendwie gemitteltes Alter der Bäume verstehen, wobei uns klar ist, dass es nicht dasselbe ist, ob der Wald aus gleich alten 50-jährigen oder zur halben Fläche aus 10- und 90-jährigen Bäumen besteht. A ist eine inte-

grierte Waldeigenschaft, die wegen ihrer Globalität nicht leicht messbar ist, aber ein intuitives Verständnis ermöglicht. Die Normierung von A auf das Intervall 0 bis 1 soll beibehalten werden. Das Waldsystem mit B und A wird nun durch (15.7) beschrieben:

$$\dot{B} = \text{Wachstum}(B, A) - \text{Mortalität}(B) \tag{15.7}$$

$$\dot{A} = \text{Altern}(A) - \text{Verjüngung}(B, A)$$

Die Spezifizierung der Prozesse Altern und Verjüngung erfordert wie immer das Erfinden von Formeln. Die Alterungsrate wird als linear angenommen. Je Älter der Wald desto geringer die Alterungsrate:

$$\text{Altern}(A) = a \cdot (1 - A) \tag{15.8}$$

Der Wachstumsparameter a wird etwa bei 0.01 pro Jahr liegen, so dass ein Baum nach ca. hundert Jahren seine volle Größe erreicht hat. Anders als das Altern ist die Verjüngung biologisch ein schwieriger Prozess. Zuerst sterben die alten Bäume durch Borkenkäferbefall. Im Modell werden Stürme, Trockenheit, Luftverschmutzung und andere Krankheiten nicht berücksichtigt. Danach wird das Totholz zersetzt und die entstehenden Lücken im Wald werden durch Sämlinge neu besiedelt. Die Prozessbeschreibung der Verjüngung muss eine extreme Zusammenfassung all diese Teilprozesse sein. Die Tatsache, dass A eine integrierte, qualitative Waldeigenschaft ist, erfordert auch für diesen Prozess eine integrierte Betrachtung. Wir können annehmen, dass der Prozess der Verjüngung im Modell nur bei hohen Borkenkäferdichten stattfindet, aber dann sehr schnell erfolgt:

$$\text{Verjüngung}(B, A) = b \cdot A \cdot \left(\frac{B}{K}\right)^3 \tag{15.9}$$

Durch den Exponent 3 in (15.9) findet bei geringen Borkenkäferdichten B kaum eine Verjüngung statt.

Die Modellgleichungen sind in (15.10) zusammengefasst.

$$\dot{B} = r \cdot A \cdot B \cdot \left(1 - \frac{B}{K}\right) - s \cdot \frac{B^2}{B^2 + M^2} \tag{15.10}$$

$$\dot{A} = a \cdot (1 - A) - b \cdot A \cdot \left(\frac{B}{K}\right)^3$$

Mit diesen Gleichungen ist es möglich, periodische Ausbrüche von Borkenkäferplagen zu simulieren (Abbildung 15.3). Ganz befriedigend ist das in Abbildung 15.3

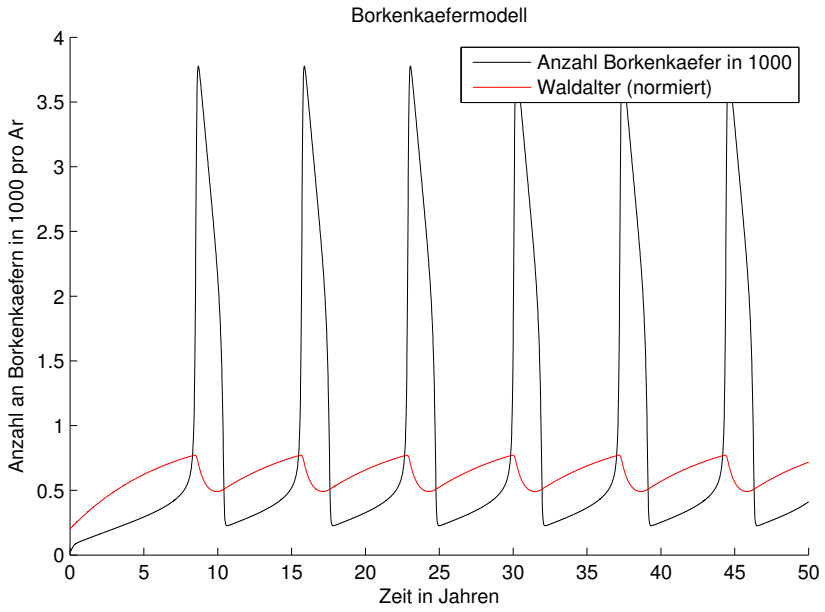


Abbildung 15.3: Simulation von Borkenkäferausbrüchen. Parameter: r = 0.15*365.0 (1/y), K = 5000 (Anzahl/Ar), s = 100*365.0 (Anzahl/(Ar*y)) M = 500 (Anzahl/Ar), a = 0.15 (1/y), b=1.7 (1/y).

dargestellte Simulationsergebnis noch nicht. Die Dauer der Borkenkäferausbrüche ist recht groß gegenüber den „normalen“ Intervallen. Es wäre realistischer, wenn die Ausbrüche schneller wieder vorüber wären. Ob das mit diesem einfachen Modell überhaupt möglich ist, kann nur mit einer Sensitivitätsanalyse herausgefunden werden.

15.3 Räumliche Ausdehnung des Modells

Mit Hilfe der Struktur der zellulären Automaten kann das Modell erweitert werden. Hierzu wird der Wald in Quadrate der Größe 10 m x 10 m (1 Ar^2) eingeteilt. Wir

nehmen an, dass jeweils ein Teil der Käfer innerhalb einer Zelle in die benachbarten Zellen (4 Nachbarn) fliegt. Zusätzlich kann man annehmen, dass die Flugbewegung durch eine vorgegebene Windrichtung nicht symmetrisch ist. In jeder Zelle wird zusätzlich das Modell für die Borkenkäfer und das Alter des Waldes simuliert.

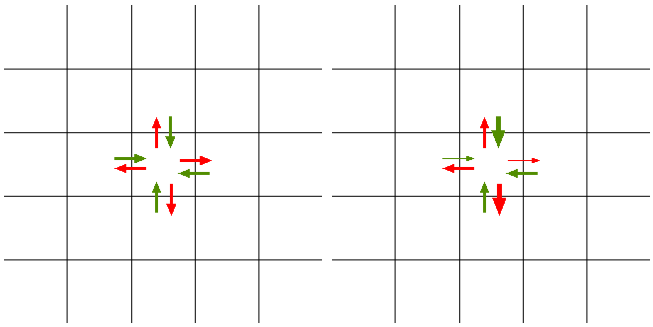


Abbildung 15.4: Räumliche Struktur des Modells mit symmetrischer (rechts) und unsymmetrischer Käferbewegung

15.3.1 Bekämpfung

Die Bekämpfung der Käfer erfolgt durch das Schlagen von Schneisen. Im Modell kann man dies simulieren, indem man das Waldalter in einigen benachbarten Spalten zu Beginn jeden Zeitschritts herabsetzt und so das Schlagen alter Bäume simuliert. Die Startwerte wählt man so, dass der Wald nur auf einer Seite der Schneise von Käfern befallen ist. Man darf bei Betrachtung dieser Modellergebnisse natürlich keinen Moment vergessen, dass sie mit einem sehr einfachen Modell erzielt wurden, das nur einige prinzipielle Mechanismen erklären und nicht die Realität quantitativ widerspiegeln soll. Seine Parameter sind nicht an die Realität angepasst und vielleicht nicht einmal anpassbar, da wesentliche Komponenten des natürlichen Systems im Modell nicht erfasst wurden.

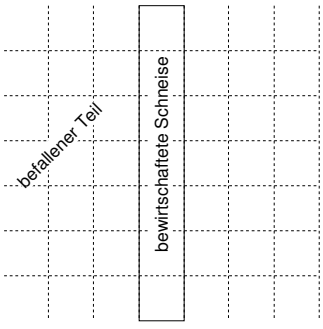


Abbildung 15.5: Bewirtschaftete Schneise zur Bekämpfung der Käferplage

16 Der Wasserstand eines Sees

Angenommen, du sitzt nach deinem Abschluss in einem Umweltplanungsbüro und erhältst an deinem ersten Tag einen Anruf eines Gemeindebürgermeisters aus den Voralpen. Er berichtet, dass es aufgrund des Klimawandels immer mal wieder zur Wasserknappheit im örtlichen See kommt. Er erzählt außerdem, dass zukünftig eine Industrieanlage geplant ist und er Sorge hat, dass diese Schadstoffe in den See einleiten könnte. Der See ist für die Trinkwasserversorgung von großer Bedeutung und er möchte wissen, ob du helfen kannst. Nun erwartet er vermutlich kein Modell, sondern Vorhersagen und bestenfalls Handlungsanweisungen. Da du nicht weißt, was seitens eures Büros so üblich ist und du dem Bürgermeister einen Rückruf eures Chefs angekündigt habt, macht du dir also den Rest des Tages Gedanken, wie du helfen kannst. Viel hast du bisher noch nicht erfahren, aber du findest per KI ein paar Eckdaten zu diesem See heraus. Viel wichtiger ist aber zunächst eine Zielfrage. Vor der Vorhersage und darauf aufbauenden Handlungsanweisungen, muss zunächst der Status Quo stehen. Was du brauchst ist der Wasserstand des Sees im Jahresverlauf. Hier reicht es aber nicht, dass du dazu Messdaten vom örtlichen Wasserwerk bekommst. Dur musst die Ursache für die Wasserstandsschwankungen richtig beschreiben. Die Wasserstandsänderungen sollen von Tag zu Tag

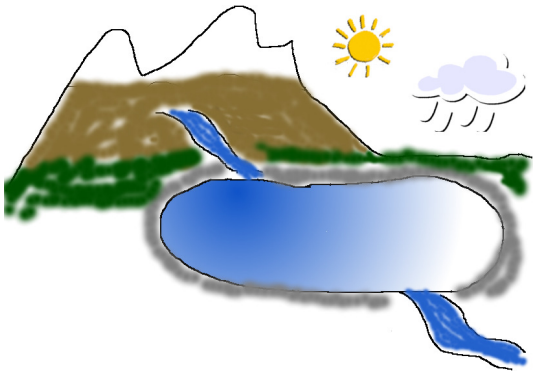


Abbildung 16.1: Der Modellsee

berechnet werden. Die Oberfläche des (kreisförmigen) Sees betrage bei mittlerem Wasserstand 2 km^2. Seine normale Tiefe beträgt 6 m. Der See hat einen Zufluss und einen Abfluss. Der Zufluss ist in der kälteren, regenreichen Zeit hoch, insbesondere gibt es ein Frühjahrshochwasser (nach der Schneeschmelze). Im Sommer kann es eine Periode ohne Zufluss geben. Der Abfluss hängt vom Wasserstand ab. Sinkt dieser unter eine Schwelle, versiegt er ganz. Durch die temperaturabhängige Oberflächenverdunstung treten im Sommer Wasserverluste auf.

16.1 Verbale Beschreibung und Ziel des Modells

Eine verbale Beschreibung des Modells ist dann unerlässlich, wenn man nicht allein am Modell arbeitet, oder wenn der Modellierer einen Auftraggeber hat. Gegebenenfalls müssen Schnittstellen zu anderen Modellen definiert werden. Die verbale Beschreibung ist eine Vorstufe des mathematischen Modells: ein konzeptionelles Modell. Insbesondere ist es wichtig, die Ziele und die Fragen, die mit dem Modell beantwortet werden sollen, gut zu formulieren. Man modelliert ja nicht einfach „ein System“, sondern modelliert es für einen *Zweck*, der die Art und den Gültigkeitsbereich des Modells bestimmt.

16.2 Festlegung der Zustandsvariablen und Schematisierung des Modellsystems

Dynamische Systeme haben einen zeitabhängigen „Zustand“. Der Zustandsraum ist die Menge aller möglichen Zustände, die das Modellsystem im Prinzip annehmen kann. Der aktuelle Zustand des Systems zu einem ausgewählten Zeitpunkt t ist ein Punkt im Zustandsraum. Die Zustandsvariablen (auch Systemvariablen oder prognostische Variablen) beschreiben also die zeitliche Entwicklung des Systems. Man kann sie meistens nicht direkt angeben, sondern stellt Gleichungen auf, die die Änderung des Zustands angeben. Hierzu werden die Prozesse bestimmt, die die Zustandsvariablen ändern.

Im Falle des Sees bietet sich auf den ersten Blick als einzige Zustandsvariable der Wasserstand an. Später kann als zweite Zustandsvariable die Schadstoffkonzentration hinzukommen. Als Pegel oder Wasserstand W bezeichnen wir die aktuellen Tiefe des Sees[1]. Es könnte aber auch ein Pegel sein, der sich durch eine Nullpunktverschiebung von der aktuellen Tiefe des Sees unterscheidet. Unser Ziel ist es, den jahreszeitlichen Verlauf des Wasserstands zu ermitteln - wir suchen W(t).

[1] Der Name W für die Zustandsvariable ist willkürlich (W wie Wasserstand). T für Tiefe geht nicht, weil T meistens für die Temperatur benutzt wird, und P für Pegel kollidiert mit dem in aquatischen Ökosystemmodellen üblichen P für Phytoplankton. Derartige Entscheidungen haben oft langanhaltende Auswirkungen.

16.3 Festlegung des Modellsystems - Topographie des Sees

Wir nehmen vereinfachend an, dass der See einen parabelförmigen vertikalen Querschnitt hat, der See sei also ein Paraboloid. Pegelnull wird hier vereinfachend als 0 angenommen, der Pegel steht sozusagen im Scheitelpunkt des Sees. Im allgemeinen ist "absolut" Null nicht dasselbe wie Pegelnull. Mit dem Wasserstand verknüpft

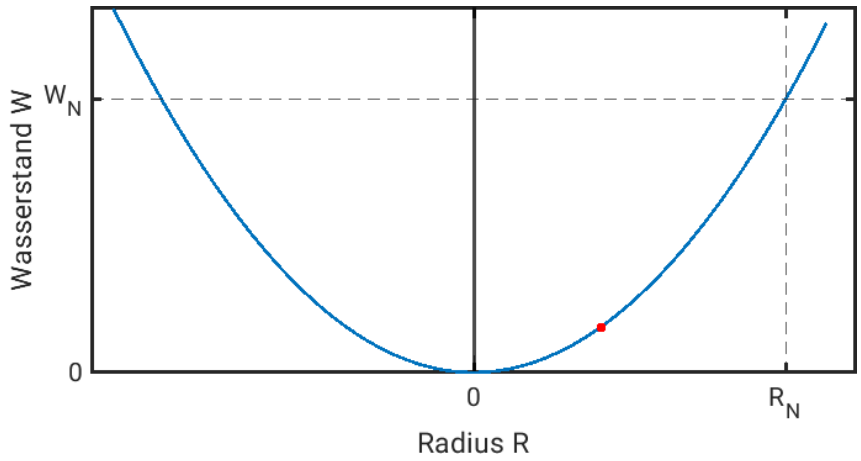


Abbildung 16.2: Schematische Darstellung des Modellsees mit parabelförmigen Querschnitt. W_N gibt den Normwasserstand an. Bei diesem Wasserstand hat der See den Radius R_N also die Fläche $F_N = \pi R_N^2$. Der rote Punkt markiert die Höhe des Abflusses.

ist die Seeoberfläche F, die zur Bestimmung der Verdunstung benötigt wird. Wir brauchen also die Seeoberfläche F als Funktion des Wasserstandes W. Zuerst betrachten wir die Fläche als Funktion des Radius:

$$F(R) = \pi R^2 \tag{16.1}$$

Wir nehmen an, dass ein Referenz-Wasserstand W_N und F_N die zugehörige Fläche (z.B. aus Satellitendaten) bekannt sind

$$W(F_N) = W_N \text{ und } F_N = \pi R_N^2 \tag{16.2}$$

Man kann nun den Wasserstand W als Funktion des Radius R mit dem Ansatz

$$W(R) = a \cdot R^2$$

beschreiben. Die Konstante a ergibt sich aus der Referenzbeziehung 16.2:

$$W(R_N) = a \cdot R_N^2 = W_N \quad \Rightarrow \quad a = \frac{W_N}{R_N^2} = \pi \frac{W_N}{F_N},$$

so dass

$$W(R) = \frac{W_N}{R_N^2} \cdot R^2 = \frac{W_N}{F_N} \cdot F = W(F)$$

Man erhält die Fläche in Abhängigkeit des Wasserstands durch Auflösen nach F:

$$F(W) = F_N \cdot \frac{W}{W_N} \tag{16.3}$$

Die Fläche F ist also proportional zur Tiefe W.

16.4 Festlegung der Prozesse

Die Prozesse sind die Vorgänge, die die Zustandsvariablen ändern. Der Wasserstand W wird durch die Prozesse Zufluss, Abfluss und Verdunstung geändert: Alle drei

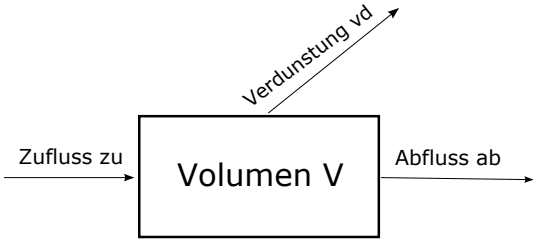


Abbildung 16.3: Schematische Darstellung des Modellsees. Die Pfeile stellen hier materielle Flüsse dar (Wassermengen pro Zeit).

Größen haben die Dimension Volumen pro Zeiteinheit, also z.B. die Einheit $m^3 d^{-1}$ (Kubikmeter pro Tag). Es ist wichtig, sich immer über Dimension und Einheiten aller auftretender Größen im Klaren zu sein und bei jedem Term, bei jeder Gleichung sofort die Einheiten auf Konsistenz zu überprüfen! Das ist ein wichtiges Hilfsmittel, um Fehler beim Aufstellen der Gleichungen frühzeitig aufzuspüren.

Die Modellgleichungen verbinden die Zustandsvariablen mit den Prozessen in Form von „dynamischen“ Gleichungen, das sind Gleichungen, die die Änderungen der Zustandsvariablen beschreiben. In der Regel sind das Differentialgleichungen oder Differenzengleichungen. Die Prozesse ändern den Wasserstand, indem sie das Vo-

lumen ändern:

Volumenänderung = Zufluss - Abfluss - Verdunstung

In unserem Modell soll die Zeit in Tagesschritten Δt fortschreiten (Differenzengleichungsmodell):

$$\Delta V = (zu - ab - vd) \cdot \Delta t \tag{16.4}$$

Die Multiplikation mit Δt auf der rechten Seite ist wichtig: Zum einen werden die Prozesse mit Dimension Volumen pro Zeit durch die Multiplikation mit einer Zeit in Volumen verwandelt, wie es die linke Seite erfordert. Zum anderen erkennt man eine „Linearität“: Die Volumenänderung ist proportional zur Länge des Zeitschrittes. Genau hierin besteht die Approximation der Differenzengleichung, denn offensichtlich ist diese Linearität nur für kleine Zeitschritte Δt akzeptabel, nämlich solange sich zu, ab und vd in Δt nur unwesentlich ändern. In Abbildung 16.3 ist die dynamische Gleichung in Form eines Diagramms dargestellt.

Sprachlich unscharf und sogar falsch wäre die Ausdrucksweise: „Das Volumen hängt von Zufluss, Abfluss und Verdunstung ab“. Richtig ist aber: „Das Volumen wird durch Zufluss, Abfluss und Verdunstung geändert“. Das Volumen V ist keinesfalls eine „Funktion“ von zu, ab und vd. Dann müsste sich nämlich aus den augenblicklichen Werten von zu, ab und vd auf das augenblickliche Volumen schließen lassen, was nicht der Fall ist. Man sieht es schon daran, dass das Volumen unterschiedlich sein kann, wenn z.B. alle drei Flüsse verschwinden. Nicht V selbst sondern die zeitliche Änderung des Volumens ist eine „Funktion“ der Prozesse!

Als Zustandsvariable hatten wir aber den Wasserstand W und nicht das Volumen gewählt! Der Zusammenhang zwischen V und W über die Oberfläche F ist

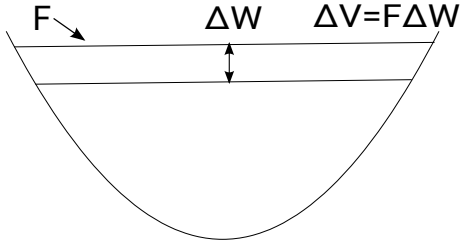


Abbildung 16.4: Im Zeitintervall Δt, z.B. in einem Tag, ändert sich das Volumen um $\Delta V = (zu - ab - vd) \cdot \Delta t$. Bei gegebener Oberfläche F des Sees sind Volumenänderung und Wasserstandsänderung durch $\Delta V = F \cdot \Delta W$ verknüpft. Damit ergibt sich Gleichung 16.5.

annähernd (diskret) durch

$$\Delta V = F \cdot \Delta W$$

gegeben. Damit lässt sich Gleichung 16.4 entsprechend umschreiben:

$$\Delta W = \frac{1}{F(W)}(zu - ab - vd) \cdot \Delta t \tag{16.5}$$

Dies ist die gesuchte Modellgleichung. Die Prozesse zu, ab und vd müssen jetzt noch präzisiert werden.

Bemerkung: Der integrale Zusammenhang zwischen V und W über die Oberfläche F ist durch $V(W) = \int_0^W F(w)\, dw$ gegeben. Er hat die differentielle Form $\dot{V} = \frac{dV}{dW} \cdot \frac{dW}{dt} = F \cdot \dot{W}$.

16.5 Festlegung der Randbedingungen und Antriebe (Forcing)

Bei einem „System“ muss man immer klar trennen, was dazu gehört und was als extern anzusehen ist. Die Umgebung beeinflusst die Entwicklung des Modellsystems, aber – und das ist eine Folge der (künstlichen) Modellabgrenzung – das Modellsystem kann das „Externe“ nicht ändern, auch wenn es „in Wirklichkeit“ eine Rückwirkung über die Systemgrenzen hinaus gibt. Soll diese modelliert werden, sind die Systemgrenzen weiter zu fassen. Die externen Bedingungen, die für den Fortgang der internen Entwicklung wesentlich sind, werden „Antriebskräfte“ genannt („driving forces“). Bei Ökosystemen sind wichtige Antriebskräfte Licht, Temperatur und Niederschlag. Sie ändern sich mit der Jahreszeit und der Tageszeit. Aber auch andere „Randbedingungen“ gehören zu den Antriebskräften. Das sind z.B. Konzentrationen von Stoffen außerhalb der räumlichen Systemgrenzen, wenn sie diese durch Transportprozesse überschreiten und dadurch im System die Zustandsvariablen ändern.

Als Forcing werden also alle Größen bezeichnet, die das System von „außen“ beeinflussen. Im Falle des Sees sind das die Niederschläge, die den Zufluss bestimmen, und die Temperatur, die die Verdunstung reguliert. Beide ändern sich mit der Jahreszeit. Der Abfluss hängt im Gegensatz zum Zufluss vom Systemzustand (Wasserstand) selbst ab. Die Verdunstung ist neben der Temperatur-Abhängigkeit proportional zur Oberfläche. In der Realität wirkt ein großer See durch Verdunstung

auf das Regionalklima und somit auf Wolken, Niederschlag, Zufluss, Luftfeuchtigkeit und Verdunstung zurück. Durch Festlegung der Systemgrenzen wird diese Rückwirkung im Modell aber gerade ausgeschlossen.

16.5.1 Niederschlag und Zufluss

Der Niederschlag bestimmt letztlich den Zufluss. Will man aus Niederschlagswerten, die meistens in $\mathrm{mm\,d^{-1}}$ angegeben werden, den Zufluss bestimmen, muss man das Einzugsgebiet des Sees kennen und die Zeitverzögerung, mit der der Niederschlag tatsächlich im See ankommt. Statt des Niederschlags geben wir daher vereinfachend den Zufluss selbst als Antrieb vor. Der Zufluss ändert sich natürlich von Tag zu Tag, häufig bekommt man als Daten aber nur monatliche Mittelwerte. Diese müssen dann in Tageswerte umgerechnet werden. Um ein Modell zu testen, nimmt man auch sogenannte klimatologische Daten (Mittel über 30 Jahre). Diese Daten werden dann bei der Simulation von Jahr zu Jahr wiederholt. Später kann man diese Daten dann durch die aktuellen Werte ersetzen. Die Dimension der Zu-

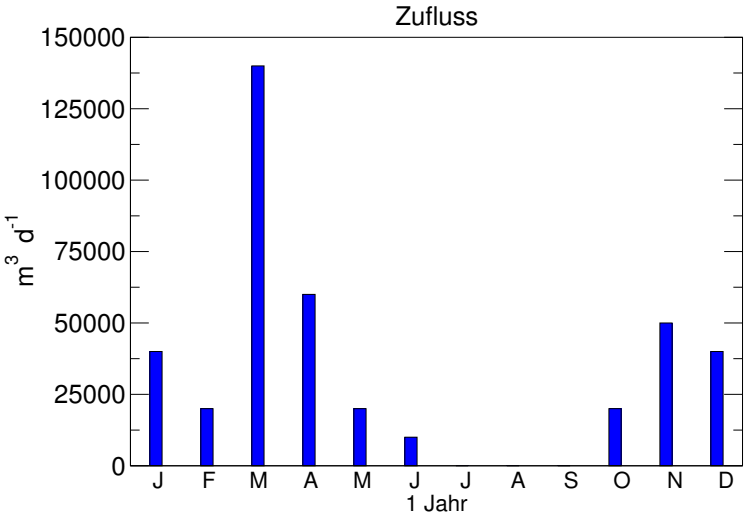


Abbildung 16.5: Monatsmittelwerte des Zuflusses.

flussdaten v_{zu} ist Volumen pro Zeit. In Abb. fig-see:2 sind die Daten in der Einheit $\mathrm{m^3\,d^{-1}}$ angegeben.

16.5.2 Temperatur

Für die Temperatur geben wir die mittlere, jährliche Temperatur T_m, die Amplitude der Temperaturschwankung T_a und den kältesten Tag t_k im Jahr vor und

bestimmen die Temperaturkurve wie in Abschnitt 2.1. Später kann man auch diese Daten durch reale Daten ersetzen.

$$T(t) = T_m - T_a \cdot \cos\left(2\pi \frac{t - t_k}{360\,d}\right) \tag{16.6}$$

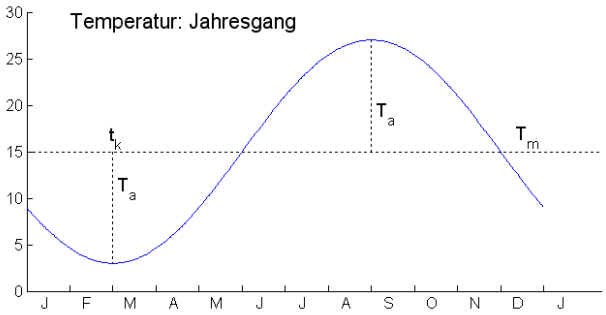


Abbildung 16.6: Temperaturverlauf im Jahresgang in °C . Kältester Tag: 1. März.

16.6 Prozessbeschreibungen

16.6.1 Zufluss

Der Zufluss ist direkt durch die Daten gegeben (Abbildung 16.5). Modelltechnisch muss man sicherstellen, dass der Zufluss am Ende eines Monats auf den Wert des Folgemonats springt. Man muss also zu einem gegebenen Tag t den Monat m ausrechnen. Da wir von einer Monatslänge von 30 Tagen ausgehen, ist dies recht einfach. Bei realistischer Betrachtung müsste man die unterschiedlichen Monatslängen sowie Schaltjahre berücksichtigen. Hier kann man es einfach durch die Modulo-Funktion lösen[2]:

$$m = \left[\frac{1}{30}\left((t-1) \mod 360\right) + 1\right]$$

Der Zufluss beträgt somit einfach

$$zu = v_{zu}(m) \tag{16.7}$$

[2]Hier ist $((t-1) \mod 360)$ der Rest bei der Division der Zeit t-1 (in Tagen) durch 360, und [..] symbolisiert das Abrunden auf die nächste ganze Zahl (Gauß-Klammer). Der Tag $t = 400$ liegt also im Februar des zweiten Jahres.

wobei v_{zu} der mittlere monatliche Zufluss ist. Der Zufluss hängt nicht von der Zustandsvariablen W ab.

16.6.2 Abfluss

Wenn der Wasserstand unter die Abflusshöhe sinkt, versiegt der Abfluss. Je höher der Wasserstand ist, desto schneller fließt das Wasser ab. Nach dem Gesetz von Toricelli ist die Abflussgeschwindigkeit proportional zur Wurzel aus der Höhe der Wassersäule über dem Abfluss. Man kann folgenden einfachen Ansatz wählen:

$$ab(W) = F_{ab} \cdot \sqrt{\max(0, 2g \cdot (W - W_A))} \cdot sec_{day} \tag{16.8}$$

wobei $g \approx 9.81 m\,s^{-2}$ die Gravitationskonstante, F_{ab} (in m^2) eine Proportionalitätskonstante, die von der Querschnittsfläche des Abflusses abhängt, ist und $sec_{day} = 86400$ (in $s\,d^{-1}$) die Anzahl Sekunden in einem Tag angibt. Letztere Größe stellt sicher, dass der Abfluss die Einheit $m^3\,d^{-1}$ hat.

In der Realität spielen viele weitere Faktoren, wie die Beschaffenheit des Abflusses, die Viskosität des Wasser, Turbulenzen etc., eine Rolle. Die Messung von Abfluss- bzw. Durchflussraten ist messtechnisch nicht einfach, daher wird man nur selten hochaufgelöste Daten für einen gewünschten Zeitraum finden.

16.6.3 Verdunstung

Die Verdunstung vd ist proportional zur aktuellen Oberfläche F des Sees und hängt somit vom aktuellem Wasserstand W ab. Sie steigt mit der Temperatur an und hängt in der Realität außerdem vom Wind und von der Luftfeuchtigkeit ab. Wir ignorieren diese zusätzlichen Abhängigkeiten.

Wir nehmen an, dass die Abnahme des Wasserstands durch Verdunstung bei 20°C bekannt ist. Diese Verdunstungskonstante vd_{20} hat die Dimension Länge pro Zeit. Verdunstung wird meistens in mm angeben, so dass vd_{20} die Einheit $mm\,d^{-1}$ hat. Um nun von der Verdunstungskonstante auf das Verdunstungsvolumen zu kommen, muss diese mit der aktuellen Seeoberfläche multipliziert werden. Damit ist $vdmm_{20} \cdot F$ das Volumen, das bei 20°C pro Tag verdunstet. Diese Größe hat bisher allerdings die Einheit $mm\,m^2\,d^{-1}$ und muss daher noch durch 1000 geteilt werden.

Um nun die Temperaturabhängigkeit zu berücksichtigen, benötigen wir eine (dimensionslose) Funktion der Temperatur, die gerade bei 20°C den Wert 1 annimmt und die Verdunstung physikalisch beschreibt. Durch Multiplikation mit dieser Funktion, nennen wir sie e_T, erhalten wir die gesuchte Prozessbeschreibung für die Verdunstung

$$vd(t, W) = vd_{20} \cdot F(W) \cdot e_T \cdot 10^{-3} \tag{16.9}$$

Man beachte, dass e_T von der Temperatur abhängt und diese wiederum von der Zeit. Es fehlt nun noch die Präzisierung von e_T. Dies ist nicht einfach, da die Verdunstung von vielen Faktoren, wie z.B. der Temperatur der Luft, der Luftfeuchtigkeit, Wind- und Wellengang abhängt. Es fehlt nun noch die Präzisierung von e_T. Dies ist nicht einfach, da die Verdunstung von vielen Faktoren, wie zB. dem Dampfdruck abhängt. Vereinfachend gehen wir von einem exponentiellen Zusammenhang aus, indem wir annehmen, dass sich die Verdunstung bei einer Temperaturerhöhung um T_{vd} gerade verdoppelt:

$$e_T = 2^{\frac{T - 20°C}{T_{vd}}} \tag{16.10}$$

So ist e_T dimensionslos und nimmt bei 20°C den Wert 1 an. Hinter diesem Ansatz steckt ein wichtiges Prinzip, das man beim Aufstellen mathematischer Modelle beachten sollte: Die Formeln werden so strukturiert, dass dimensionsbehaftete Größen durch dimensionslose Faktoren modifiziert werden. So kann man die Modifikation ggf. anpassen, wenn man neue Erkenntnisse gewonnen hat, ohne dass man sich ein weiteres Mal Gedanken um die Einheiten machen muss.

16.7 Bestimmung der Parameterwerte

Den Modellparametern, müssen Werte zugeordnet werden. Viele Werte kann man aus der Literatur, oder annähernd aus Lehrbüchern und durch Expertenbefragung gewinnen. Einige Parameterwerte muss man schätzen, da sie nicht bekannt sind. Diesen „Schätzen“ von Parameterwerten, nennt man „educated guessing“. Es handelt sich nicht um ein blindes Herumraten, sondern um die Umsetzung des Systemverständnisses, das sich auf den bisherigen Schritten und durch Literaturstudium eingestellt hat. Regelmäßig ist ein Teil der Parameter in den Modellgleichungen erst durch Aufstellung der Gleichungen definiert worden. Für diese Parameter können

vorab keine Werte durch Messungen bestimmt worden sein! Durch die Modellierung liegt nun eine theoretische Vorstellung des Systems vor, die es erlaubt, Experimente zu planen, mit denen diese neuen Parameter gemessen werden könnten. Zunächst aber muss man diese Werte schätzen. In Tabelle 16.1 sind alle Größen, die den See beschreiben, Parameter und Antriebe mit Werten, Einheiten und Bedeutung zusammengefasst.

Symbole	Einheiten	Werte	Erklärung
Konstanten			
g	$mm \cdot m\,s^{-2}$	9.81	Gravitationskonstante
sec_{day}	$s\,d^{-1}$	86400	Sekunden eines Tages
Seegeometrie			
W_N	m	6	Normpegel
F_N	m^2	$2{\cdot}10^6$	Seeoberfläche bei Normpegel
W_A	m	2	Lage des Abfluss
Dynamische Parameter			
F_{ab}	m^2	0.04	„Abflussquerschnitt“
vd_{20}	$mm \cdot d^{-1}$	15.0	Verdunstung bei 20°C
T_{vd}	°C	5.0	Verdopplung der Verdunstung
Antriebskräfte			
v_{zu}	$10^3\,m^3 \cdot d^{-1}$	40 20 140 60 20 10 0 0 0 20 50 40	Monatsmittel des Zuflusses (Jan - Dez)
T_m	°C	15	Mittlere Jahrestemperatur
T_a	°C	12	Temperaturamplitude
t_k	d	60	Kältester Tag (1.3.)

Tabelle 16.1: Zusammenfassung der Seegrößen, Parameter und Antriebe mit Einheiten, Werten und Bedeutung

16.8 Prüfung des Modells auf Konsistenz

Der See hat bei dem Wasserstand $W_N = 6\,m$ eine Oberfläche von $F_N = 2\,km^2$. Bei kreisrunder Seefläche und parabelförmigen Tiefenprofil ergibt das einNormseevolumen[3] von $6 \cdot 10^6\,m^3$. Der Zufluss ist durch die Monatsdaten vorgegeben. Der jährliche Zufluss beträgt danach $30 \cdot \sum_{m=1}^{12} v_{zu}(m) = 12 \cdot 10^6\ m^3$. Dies bedeutet, dass der Zufluss das Zweifache des Normseevolumens beträgt.

Bei Normpegel beträgt der Abfluss nach Gleichung 16.8 in etwa $3 \cdot 10^4\,m^3\,d^{-1}$. Dies ergibt ein geschätztes jährliches Abflussvolumen von $11 \cdot 10^6\,m^3$ was in etwa dem Zufluss entspricht.

Die Verdunstung konzentriert sich auf die vier Sommermonate, in denen die Temperaturen um 25°C erreicht werden. In diesen vier Monaten (120 d) ergibt sich nach Gleichung 16.9 bei halber Normfläche eine jährliche Verdunstung von in etwa $3.6 \cdot 10^6\,m^3$. Die Verdunstung ist also geringer als Zu- und Abfluss.

Zufluss, Abfluss und Verdunstung werden sich über das Jahr betrachtet nicht ganz ausgleichen. Die Größenordnungen aller drei Flüsse erscheinen aber einigermaßen plausibel. Damit sind die gewählten Parameter eine vernünftige Basis für erste Simulationen.

16.9 Programmierung, Simulation, Sensitivitätsuntersuchung

Nachdem die drei Prozesse durch Gleichungen präzisiert wurden, lässt sich das Modell als Ganzes durch Zusammenfassung der Gleichungen darstellen. Dies ist die mathematische Formulierung des Modells, das „Entwicklungsgesetz“, da es den Zustand zur Zeit $t + \Delta t$ aus dem Zustand zur Zeit t zu berechnen erlaubt. Aus gegebenen “alten“ Werten werden „neue“ berechnet, und das wird iterativ wiederholt. Schematisch sieht das wie folgt aus (Pseudocode):

```
1 W(1) =5.0 Wasserstand zur Zeit 0
2 dt =1.0   Modellzeitschritt
3
4 Schleife ueber die Zeitschritte i
5       t = i*dt
```

[3] Integral von Pegelnull bis Normpegel über die Fläche.

```
      F =...
      T =...
      ...
      zu = ...
      ab =...
      vd =...
      Delta_W = (zu-ab-vd)/F
      W(i+1) = W(i)+Delta_W*dt
Ende der Schleife
```

Bei einer Iteration muss also ein „Iterationsanfang“ vorgegeben werden. Zu Beginn muss für einen Anfangszeitpunkt t_0 der zugehörige Wasserstand W_0 vorgegeben werden. Dann beginnt die Iteration (Schleife): Für gegebene Werte t und W(t) werden zuerst die Hilfsgrößen Fläche F und Temperatur T und Monat m berechnet. Diese Hilfsgrößen werden für die Berechnung der Prozesse zu, ab und vd benötigt. Zum Schluss wird mit ihnen die Änderung des Wasserstandes ΔW und der neue Wasserstand $W(t + \Delta t) = W + \Delta W$ bestimmt. Die Zeit schreitet um Δt fort. Nach dem Durchlaufen kann diese Abfolge mit den „neuen“ Werten t und W erneut gestartet und immer wiederholt werden, bis ein Endzeitpunkt erreicht ist. Der Iterationsanfang bei t_0 mit dem Startwert $W(t_0) = W_0$ legt so die Iteration fest.

Man kann davon ausgehen, dass die Modellresultate der ersten Versuche nicht das gewünschte Ergebnis zeigen. Nun kommt es darauf an, herauszufinden, woran das liegt. Ist es ein Programmierfehler, ein Fehler in den Parameterabschätzungen oder ein Denkfehler beim Aufstellen der Modellgleichungen? Wenn es sich um Programmierfehler handelt, so erfordert es Geduld, Übersicht und detektivische Kleinarbeit, sie in einem längeren Code aufzuspüren. Fehlersuche ist anspruchsvoll und wird durch Erfahrung erleichtert.

In Abbildung 16.7 sind die Simulationsergebnisse für verschiedene Startwerte (t_0, H_0) (Zeit und Wasserstand) dargestellt.

Man gewinnt aus Abbildung 16.7 eine wesentliche Erkenntnis: Das System „vergisst“ den Anfangswert nach einiger Zeit, hier bald nach dem ersten Hochwasser. Solche Systeme nennt man „dissipativ“. Nach einiger Zeit stellt sich in jedem Fall die gleiche periodische Lösung ein, da die Antriebe (Temperatur und Zufluss) von Jahr zu Jahr wiederholt werden (klimatologische Mittelwerte). Es gibt offenbar eine ausgezeichnete periodische Lösung, die zum Anfangswert $W_0 \approx 2.9\,\text{m}$ gehört,

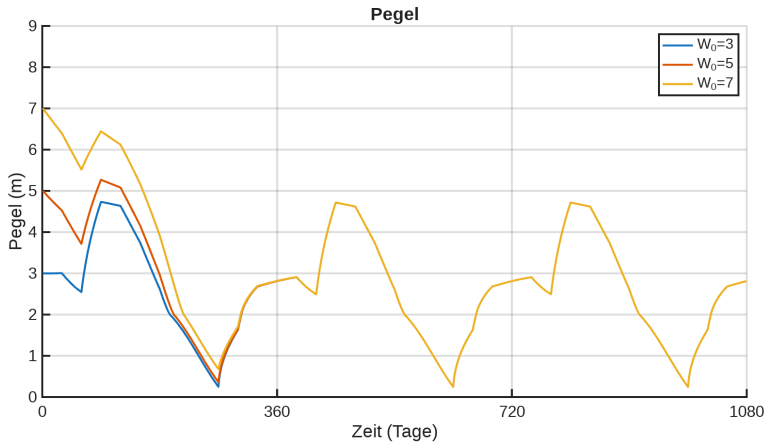


Abbildung 16.7: Wasserstand des Sees im Jahresgang. Unterschiedliche Anfangspegel „vergisst" das System nach wenigen Monaten. Es stellt sich bei periodischen Antrieben (klimatologisches Jahr) nach einiger Zeit eine periodische Lösung ein.

und zu der alle anderen Lösungen hinstreben.

In Abbildung 16.8 sind die Simulationsergebnisse für das dritte Simulationsjahr und die zugehörigen Flüsse dargestellt. Man erkennt sofort den Einfluss des Zufluss auf den Wasserstand. Im August und September sind Zufluss und Abfluss auf Null. Die Verdunstung spielt kaum eine Rolle.

Wenn das Modell befriedigend läuft, kann man durch Parametervariation untersuchen, wie sensitiv das Modell reagiert. Durch Sensitivitätsanalysen sind die Parameter zu identifizieren, die das Simulationsergebnis empfindlich beeinflussen. Dazu verändert man einzelne Parameter geringfügig nach oben und unten und vergleicht die zugehörigen Simulationen miteinander. Gerade bei geschätzten Parametern ist dies wichtig, um ein Gefühl dafür zu bekommen, wie "wichtig" ein unsicherer Parameter ist. Insbesondere möchte man wissen, in welchem Bereich sich die Parameterwerte bewegen, die zu sinnvollen Ergebnissen führen. Ein Verständnis in die Plausibilität des Modells erhält man auch dadurch, dass man die Grenzen des Modells auslotet.

16.10 Modellverbesserung

Spätestens an dieser Stelle erweist sich der Modellierungsprozess als Iterationsschleife. Man muss wieder und wieder die Modellgleichungen in Frage stellen (nicht nur den Code oder die Parameterwerte) und die Implementierung überprüfen. Even-

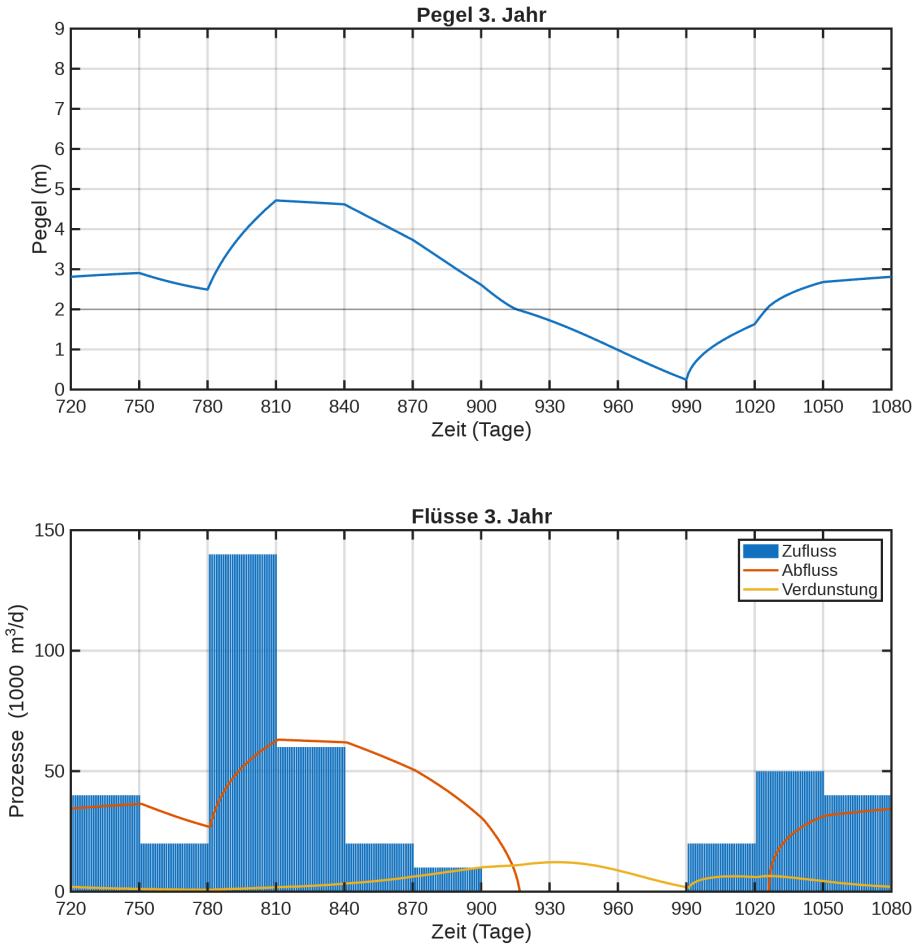


Abbildung 16.8: Oben: Wasserstand des Sees des 3. Jahres. Die schwarze Linie markiert die Höhe der Abflussschwelle. Unten: Zufluss, Abfluss und Verdunstung des 3. Jahres.

tuell müssen sogar die Ziele des Modells und dessen Gültigkeitsbereich hinterfragt werden. Der Vergleich zwischen Simulation und Messdaten wird zur Verbesserung des Modells herangezogen.

16.11 Anwendungen des Modells, Dokumentation der Ergebnisse

Wenn das Modell vertrauenswürdig „läuft“, kann man es in verschiedenen Anwendungen nutzen, um weitere Einsichten in das System zu erhalten. Man kann Szenarien aller Art berechnen, und insbesondere das Modell unter Bedingungen

laufen lassen, die man dem realen System nicht zumuten darf. Die Dokumentation des Modells und die Publikation der Ergebnisse sind unabdingbar.

16.12 Schadstoffeinleitung

Es wird angenommen, dass ein Schadstoff in den See eingeleitet wird. Schadstoffe werden im allgemeinen in Konzentrationen (Masse pro Volumen) angegeben. Daher ist es nun sinnvoll, statt des Wasserstandes das Volumen des Sees als Zustandsvariable zu betrachten. Der Wasserstand kann dann nach Gleichung 16.5 ableitet werden:

$$\Delta W = \frac{1}{F(W)}(zu - ab - vd) \cdot \Delta t$$

geht unter Berücksichtigung der Beziehung $\Delta V = F \cdot \Delta W$ über in

$$\Delta V = (zu - ab - vd) \cdot \Delta t$$

Weiterhin werden wir das Modell als DGL-Modell betrachten, um im folgenden Instabilitäten durch zu schnelle Änderungen zu vermeiden:

$$\dot{V} = zu - ab - vd \tag{16.11}$$

Das Modell wird nun um eine Zustandsvariable erweitert. Neben dem Wasservolumen V wird die Konzentration C oder die Menge M eines Schadstoffs im See berücksichtigt. Man kann C oder M als zweite Zustandsvariable wählen. Da im allgemeinen die Menge des eingeleiteten Schadstoffs eher messbar ist und das Volumen über die Zeit veränderlich ist, ist es sinnvoll die Masse als Zustandsvariable zu wählen und die aktuelle Konzentration aus aktueller Masse und aktuellem Volumen abzuleiten ($C = \frac{M}{V}$). Für die Schadstoffmenge M muss also eine Modellgleichung aufgestellt werden. Die Schadstoffmenge ändert sich durch die Prozesse Einleitung ein und Ausstrom aus. Die Einleitung soll vom Seeufer erfolgen und unabhängig vom Wasserzufluss in den See sein (z.B. ein Industrieabwasser als eingeleitete Menge pro Tag). Die Einleitung sei also eine Funktion der Zeit. Der Schadstoffausstrom hängt vom Wasserabfluss und der aktuellen Schadstoffkonzentration C ab:

$$aus = ab \cdot C$$

Wir nehmen weiter an, dass der Zufluss in den See schadstofffrei ist und auch keine Schadstoffverdunstung oder Ausfällung stattfindet. Die Modellgleichungen sind dann durch Gleichung 16.12 gegeben.

$$\dot{V} = zu - ab - vd \tag{16.12}$$

$$\dot{M} = ein - aus$$

Wenn die Konzentration C statt der Menge M verwendet werden soll, so ergibt sich wegen $M = V \cdot C$ und $\dot{M} = \dot{V} \cdot C + V \cdot \dot{C}$ das zu 16.12 äquivalente System 16.13.

$$\dot{V} = zu - ab - vd \tag{16.13}$$

$$\dot{C} = \frac{1}{V}(ein - C \cdot zu + C \cdot vd)$$

Die Gleichungen zeigen, dass die Menge des Schadstoffs durch den Abfluss abnimmt, dass aber der Abfluss die Konzentration nicht beeinflusst. Umgekehrt wird die Menge durch Zufluss und Verdunstung nicht geändert, während die Konzentration durch Zufluss abnimmt (Verdünnung) und durch Verdunstung zunimmt (Eindickung). Wenn bei Trockenfall des Sees das Volumen V verschwindet, steigt die Konzentration C über alle Grenzen (nicht aber die Menge M). Unter der Annahme, dass zu Simulationsbeginn der See nicht verschmutzt ist und pro Tag 10 g des Schadstoffs eingeleitet werden, ergibt sich der in Abbildung 16.9 dargestellte Verlauf.

16.12.1 Vermeidung hoher Schadstoffkonzentrationen

Die Einleitung des Schadstoffs kann als Antrieb betrachtet werden, solange sie nicht direkt vom Wasserstand W oder von der Konzentration C im See abhängt. Die Einleitung kann optimiert werden, wenn wir unser Wissen über das System nutzen. Es könnte sinnvoll sein, die Einleitung auf die niederschlagsreichen Monate

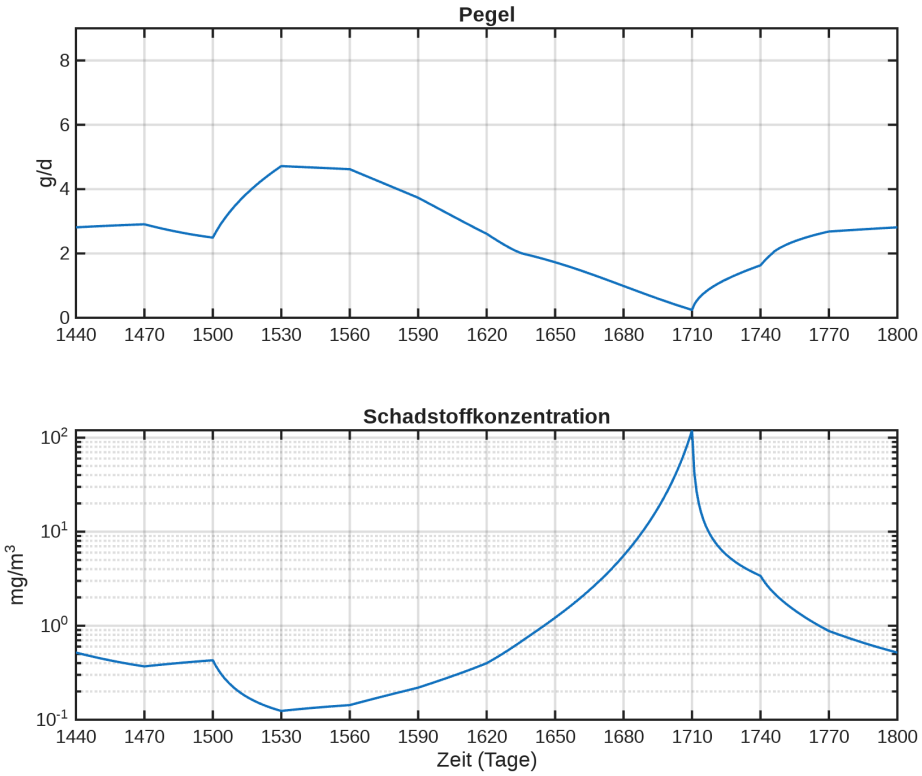


Abbildung 16.9: Schadstoffeinleitung in einen See. Simulation über 5 Jahre. Dargestellt ist der Pegelstand (oben) und die Schadstoffkonzentration (unten) für das 5. Jahr bei einer Einleitung von 10 g pro Tag. Zu Beginn der Simulation war der See schadstofffrei.

November bis April zu beschränken und dafür zu verdoppeln oder auf einen kurzen Zeitraum vor dem Hochwasser zu konzentrieren. In der Simulation werden drei Szenarien verglichen.

1. konstante Einleitung von 10 g pro Tag
2. Einleitung von 20 g pro Tag von November bis April
3. Einleitung von 30 g pro Tag von Dezember bis März

Die Gesamtmenge der Einleitung bleibt so erhalten.

Das Ergebnis der Simulationen ist in Abbildung 16.10 dargestellt, wobei für alle drei Szenarien der See anfangs nicht verunreinigt ist. Es zeigt sich, dass man die Konzentrationsspitzen im Sommer deutlich vermindern kann, wenn die Einleitung auf die Wintermonate konzentriert wird. Der starke Konzentrationsanstieg erfolgt im Sommer immer, auch wenn in dieser Zeit gar keine Einleitung stattfindet. Das

ist die Folge der Verdunstung des Wassers, bei der der Schadstoff zurückbleibt. Im Winter nimmt die Konzentration ab, auch wenn eingeleitet wird, weil sich das Volumen durch Wasserzufluss schnell vergrößert.

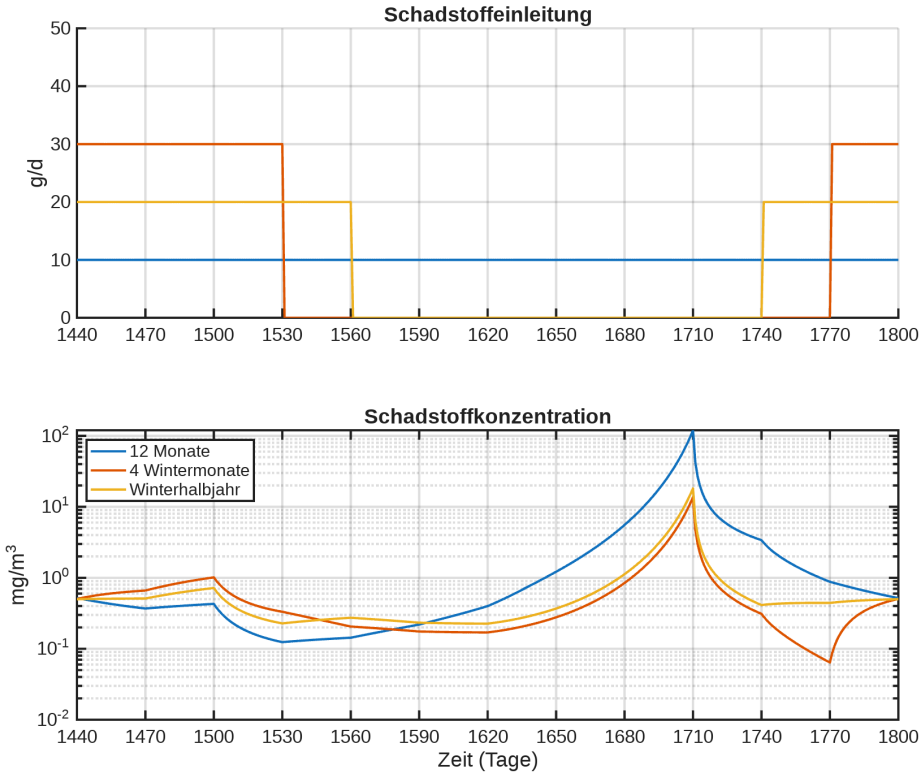


Abbildung 16.10: Simulation der Schadstoffeinleitung in den See über 5 Jahre. Die gleiche Menge eines Schadstoffs wird auf 12 Monate verteilt (blau), oder auf 6 (gelb) bzw. 4 (rot) Wintermonate konzentriert. Die mittlere Einleitung beträgt jeweils 10 g pro Tag. Dargestellt ist jeweils das 5. Jahr. Zu Beginn der Simulation war der See schadstofffrei.

16.12.2 Bakterieller Abbau

Findet im See ein bakterieller Abbau des Schadstoffs statt, so verringert dieser die Schadstoffmenge:

$$\dot{V} = zu - ab - vd \tag{16.14}$$

$$\dot{M} = ein - aus - abbau$$

Wir nehmen an, dass der Abbau temperaturabhängig und proportional zur aktuellen Schadstoffmenge ist. Ist r die bakterielle Abbaurate (in d^{-1}) bei 10°C und e_T der Temperaturfaktor nach Gleichung 16.10 so kann man denn Abbau durch

$$\text{abbau} = r \cdot e_T \cdot M$$

beschreiben. Damit ist die Temperaturabhängigkeit des bakteriellen Abbaus entsprechend der van't Hoffschen Regel [15] berücksichtigt. Die Ergebnisse der Si-

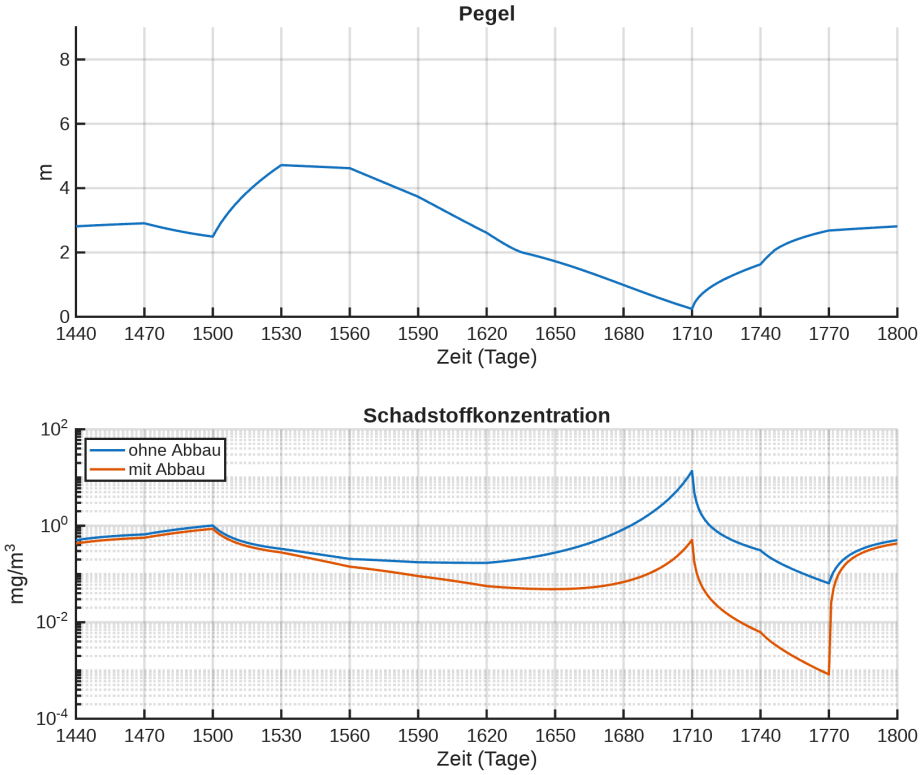


Abbildung 16.11: Simulation der Schadstoffeinleitung in den See über 5 Jahre bei einer kontinuierlichen Schadstoffeinleitung von 10g pro Tag. Dargestellt ist die Entwicklung der Konzentration im See ohne (blau) und mit (rot) bakteriellem Abbau von 1% der aktuellen Schadstoffmenge im See pro Tag. Zu Beginn der Simulation war der See schadstofffrei.

mulation sind in Abbildung 16.11 dargestellt. Man sieht deutlich die Wirkung des bakteriellen Abbaus. Der Spitzenwert von über $100\,\text{mg}\,\text{m}^{-3}$ wird durch den bakteriellen Abbau von 1% pro Tag auf unter $1\,\text{mg}\,\text{m}^{-3}$ reduziert.

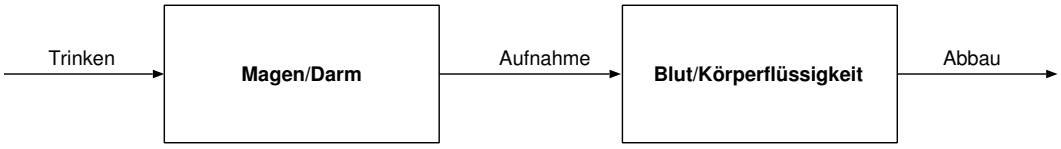
Wenn es sich bei dem betrachteten Schadstoff um einen Nährstoff handelt, wird die Bakterienzahl mit zunehmender Nährstoffverfügbarkeit zunehmen. Dies wird hier nur implizit berücksichtigt, da der bakterielle Abbau als proportional zur Schad-

stoffmenge angenommen wird. Genauer wäre es, die Bakterien als weitere dynamische Größe (Zustandsvariable) zu betrachten und ihr Wachstum von weiteren Faktoren wie der Verfügbarkeit organischen Materials abhängig machen.

17 Modell zum Alkoholabbau

Nach einer Idee von Wolfgang Ebenhöh

Ein Mensch (Versuchsperson, 70 kg Körpergewicht) trinkt in zwei Stunden eine Flasche Wein (Literflasche) und geht danach schlafen. Wir konstruieren ein einfaches Modell mit zwei hintereinandergeschalteten Teilsystemen mit jeweils Zufluss und Abfluss: Der Alkohol gelangt zunächst in den Magen-Darm-Trakt, von dort



wird er resorbiert und im Blut und der gesamten Körperflüssigkeit verteilt. Die Leber baut ihn langsam ab. Das Modellsystem hat zwei Zustandsvariable (beide in g Alkohol):

M Menge Alkohol im Magen-Darm-Trakt

B Menge Alkohol im Blut und in der Körperflüssigkeit

Die Zeitentwicklung dieser Zustandsvariablen wird durch Differentialgleichungen (den Modellgleichungen, top level) beschrieben:

$$\dot{M} = \text{Trinken - Aufnahme}$$
$$\dot{B} = \text{Aufnahme -Abbau}$$

Die drei Prozesse werden einzeln diskutiert. Die drei Flüsse haben die Einheiten Gramm pro Stunde (g/h) .

Trinken:

Wein enthält etwa 10% Alkohol, was 100 g Alkohol entspricht (Dies gilt für 10 Grammprozent, meistens ist jedoch auf den Flaschen Volumenprozent angege-

ben!!). Die Versuchsperson nimmt also 100 g Alkohol in 2 Stunden (T = 2h) auf und trinkt danach nichts mehr. Der Prozess Trinken ist also zeitabhängig, aber in diesem Rahmen nicht zustandsabhängig:

$$\text{Trinken}(t) = \lambda \cdot \delta(t) \qquad \text{mit} \qquad \delta(t) := \begin{cases} 1 & 0 \leq t \leq T \\ 0 & t > T \end{cases}$$

Die Funktion $\delta(t)$ ist dimensionslos[1].

Werden in 2 Stunden 100 g Alkohol aufgenommen, so beträgt die Aufnahmerate $\lambda = 50\text{g/h}$.

Aufnahme:

Der Alkohol geht relativ schnell in Blut und Körperflüssigkeit über. Nach einer halben Stunde sei die Hälfte des Alkohols im Blut (Halbwertszeit $T_H = 0.5\,\text{h}$). Wir nehmen an, dass die Resorption ein Einbahnstraßenprozess ist. Dann hängt der Fluss von M nach B nur von der Menge M ab:

$$\text{Aufnahme}(M) = r \cdot M$$

Die Aufnahmerate r beträgt dann $r = \frac{\ln 2}{T_H}$.

Abbau:

Der Abbau des Alkohols durch die Leber ist ein komplexer Prozess. Wir machen den Ansatz, dass die Abbaurate über eine Monod-Funktion von der Alkohol- Konzentration C (in ‰) im Blut abhängt. Die Michaeliskonstante K ist niedrig, das bedeutet, dass auch bei kleinen Konzentrationen die Leber nahezu auf Volllast arbeitet.

$$\text{Abbau}(C) = \mu \frac{C}{C + K}$$

Die Konzentration C gewinnen wir aus der Menge B im Körper, indem wir sie durch die Menge Körperflüssigkeit teilen. Diese beträgt in etwa 2/3 des Körpergewichts

[1] In MatLab Kann man $\delta(t)$ durch die logische Variable ($t \leq T$) beschreiben, ihr Wert ist 1, wenn die Bedingung erfüllt ist und 0 sonst.

G (in kg). Genauer gilt: der Anteil q der Körperflüssigkeit ist bei Männern ca. 70% , bei Frauen 60 %.

Der Quotient

$$C = \frac{B}{qG}$$

hat somit die Einheit g/kg=1/1000, was Promille entspricht.

Es müssen noch die Parameter μ (maximale Abbaurate in g/h) und K (Michaeliskonstante in ‰) geschätzt werden. Wenn es etwa 10 h dauert, bis die Versuchsperson wieder vollkommen nüchtern ist, muss die Leber 10 g Alkohol pro Stunde abbauen. Eine merkliche Verlangsamung dieser Rate soll erst bei sehr niedrigen Blutalkoholwerten eintreten, also wird K kaum über 0.1‰ liegen. Wir nehmen also an, dass $\mu = 10$g/h und $K = 0.1‰$ gilt.

Man erhält also folgendes System:

$$\begin{aligned} \dot{M} &= \lambda \cdot \delta(t) - r \cdot M \\ \dot{B} &= r \cdot M - \mu \frac{\frac{B}{qG}}{\frac{B}{qG} + K} \end{aligned}$$

$T = 2h$	$T_H = 0.5h$	$\mu = 10g/h$	
$K = 0.1‰$	$r = {}^{\ln 2}/_{t_h}$	$G = 70\,kg$	$q \approx 0.6\,(w)$ resp. $0.7\,(m)$

Die beiden Gleichungen sind in dem Sinne entkoppelt, dass die erste von beiden allein gelöst und das Ergebnis für die Lösung der zweiten Gleichung verwendet werden kann. Streng genommen handel es sich bei der ersten nicht um eine Differentialgleichung, da der erste Term einen Knick verursacht und somit die Differenzierbarkeit an dieser Stelle nicht gegeben ist. Die meisten Lösungsverfahren verschmerzen dies. Man kann das System aber auch gleich als Differenzengleichungssystem behandeln, muss dann aber einen Zeitschritt von ca. 0.1 h zugrunde legen.

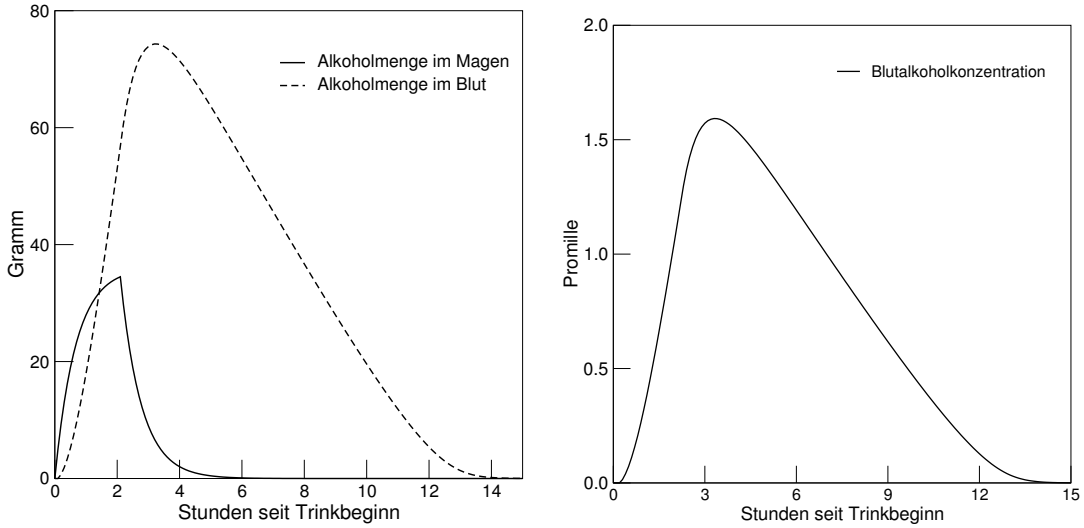


Abbildung 17.1: Zeitliche Entwicklung der Alkoholmengen in Magen-Darm-Trakt und in der Körperflüssigkeit (links) und der Entwicklung des Promillegehalts im Blut (rechts) nach einer Zufuhr von 100 g Alkohol über einen Zeitraum von zwei Stunden.

18 Masern-Modell

Masern sind hochansteckende fieberhafte, exanthemische Viruserkrankungen, die nur beim Menschen vorkommen. Schwere Krankheitsverläufe mit Komplikationen in Form von Pneumonien, Mittelohrentzündungen, Bronchitiden sowie der lebensbedrohenden akuten postinfektiösen Enzephalitis (0,1 % aller Erkrankungsfälle) sind möglich. Darüber hinaus kommt es bei etwa 4-11 pro 100.000 Erkrankungen zum Auftreten der sog. subakuten sklerosierenden Panenzephalitis (SSPE), die nach 7-10 Jahren nach der Erkrankung auftritt und in der Regel zum Tod führt ([13]). Masernerkrankungen können durch eine Impfung effektiv verhindert werden. Die Eliminierung der Masern bis zum Jahr 2010 war ein erklärtes Gesundheitsziel der WHO. Um dies zu erreichen, sollten 95 % der Bevölkerung durch Impfung bereits im Kindesalter geschützt sein (s. a. RKI, Epid. Bull. 10/2004). Dieses Ziel wurde bisher nicht erreicht. Im September 2010 haben sich die Mitgliedstaaten in der Europäischen Region der WHO durch eine Resolution des Regionalkomitees für die Eliminierung der Masern und Röteln das neue Zieldatum 2015 gesetzt. Masern sind weltweit verbreitet. Aufgrund der hohen Infektiosität treten Masern meist als Kinderkrankheit auf und hinterlassen eine lebenslange Immunität. Masern werden durch Tröpfcheninfektion übertragen, also z.B. durch Husten, Niesen oder Sprechen. Die Inkubationszeit beträgt zwischen ca. 9 und 14 Tagen. Weltweit sind die Masern mit jährlich 31 Millionen Erkrankungen und 614.000 Todesfällen (2002) weiterhin eine Hauptursache für Todesfälle im Kindesalter, die durch Impfung vermeidbar wären (Quelle: RKI).

Epidemiologisch gesehen ist die Bevölkerungsdichte ein wesentlicher Parameter für den Verlauf der Epidemie (siehe Spektrum der Wissenschaft, 1984. Insuläre Epidemien). Die Ansteckungsrate variiert im Laufe des Jahres, sie ist z.B. während der Schulferien geringer. Um die Auswirkung der Bevölkerungsdichte zu berücksichtigen, muss im klassischen Epidemiemodell die Ansteckungsrate B modifiziert werden. Des weiteren wird eine Zu- und Abwanderung von Teilen der Bevölkerung berücksichtigt.

Das Modell

Es wird angenommen, dass die Bevölkerungsgröße N konstant ist. Es findet eine Migration statt, wobei pro Tag $\mu \cdot$ N gesunde Personen pro Quadratkilometer

einwandern und dieselbe Personenzahl das Gebiet verlässt. Die auswandernden Personen setzen sich anteilig aus Gesunden, infizierten und immunen zusammen. Es wird im Modell nicht zwischen infizierten und erkrankten Personen unterschieden. Erkrankte Personen werden mit einer Gesundungsrate γ immun.

$$\begin{aligned}\dot{S} &= \mu \cdot N - B \cdot S - \mu \cdot S \\ \dot{I} &= B \cdot S - \gamma \cdot I - \mu \cdot I \\ \dot{R} &= \gamma \cdot I - \mu \cdot R\end{aligned}$$

Zustandsvariablen:

S: Dichte der Suszeptiblen in Einwohner/km^2
I: Dichte der Infizierten in Einwohner/km^2
R: Dichte der Immunen in Einwohner/km^2

Parameter:

N: Bevölkerungsdichte in Einwohner/km^2
μ: Zuwanderungsrate in in 1/Tag
B: Infektionsrate in 1/Tag
γ: Gesundungssrate von infiziert nach immun in 1/Tag

Geht man wie im klassischen Epidemiemodell von einer konstanten Populationsgröße N aus, so beträgt die Infektionsrate B:

$$B = p \cdot k \cdot \frac{I}{N}$$

Hierbei ist p das Ansteckungsrisiko bei einem fatalen Kontakt und k die Anzahl der Kontakte einer anfälligen Person in einem Zeitintervall. Bei hoher Bevölkerungsdichte (z.B. in Großstädten) ist die Zahl der Kontakte pro Zeiteinheit größer als bei niedriger Bevölkerungsdichte (z.B. auf dem Land). Da Masern über Tröpfcheninfektion übertragen werden, kann man sich vor einer Infektion nicht wirklich schützen, so dass die Infektionsrate bei hoher Dichte zunehmen wird. Die Kontaktzahl k soll also abhängig von der Bevölkerungsdichte N sein. Ist k_0 die Anzahl der

Kontakte bei einer Bevölkerungsdichte N_0, so ist folgende Annahme sinnvoll:

$$k(N) = \frac{k_0 \cdot N}{N_0}$$

Dann erhält man die Infektionsrate B:

$$B = p \cdot \frac{k_0 \cdot N}{N_0} \cdot \frac{I}{N} = p \cdot \frac{k_0}{N_0} \cdot I$$

Die Infektionsrate ist also letztlich nicht mehr abhängig von der Bevölkerungsdichte. Diese geht im Modell aber dadurch ein, dass bei hoher Dichte pro Zeiteinheit mehr Suszeptible einwandern.

Die Anzahl der Kontakte hängt auch von der Jahreszeit ab. Während der Sommermonate, wenn Schulferien sind, ist die Zahl der Kontakte geringer. Hierzu modifiziert man k_0 so, dass es im Sommer niedriger als im Winter ist. Dies kann z.B. vereinfacht durch eine Kosinuskurve geschehen:

$$k_0(t) = k_0 \cdot e_k(t)$$

mit

$$e_k(t) = \frac{1+c}{2} + \frac{1-c}{2} \cdot \cos\left(\frac{2\pi\, t}{365}\right)$$

Der Parameter $c \in [0, 1]$ gibt an, auf wie viel Prozent des ursprünglichen Wert k_0 im Sommer absinkt.

Simulationsergebnis

Die Simulationsverläufe in Abbildung 18.1 wurden mit folgender Parametrisierung berechnet:

$N = 200, 500, 900$	Bevölkerungsdichte in Einwohner/km^2
$\mu = 0.001$	Migrationsrate in 1/Tag
$p = 0.05$	Ansteckungsrate in 1/Tag
$\gamma = 0.1$	Gesundungsrate in 1/Tag
$k_0 = 5$	Kontaktzahl bei der Bevölkerungsdichte N_0
$N_0 = 200$	Referenzbevölkerungsdichte in Einwohner/km^2
$I(0) = 1.0$	anfängliche Infiziertendichte in Einwohner/km^2
$R(0) = 0.8 \cdot N$	anfängliche Immunendichte in Einwohner/km^2
$S(0) = N - R(0) - I(0)$	anfängliche Suszeptiblendichte in Einwohner/km^2

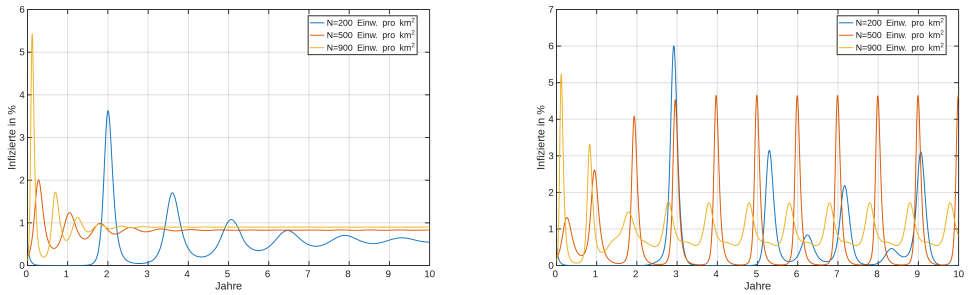


Abbildung 18.1: Simulationsergebnisse für die Masernepidemie mit konstanter Kontaktzahl (links) und sinusförmiger Kontaktzahl mit einem Minimum im Sommer (c=0.7, rechts).

Das Model beschreibt ausschließlich die Abhängigkeit der Infiziertenzahlen von der Kontaktzahl. In einem realistischeren Modell muss zusätzlich der Impfstatus der Bevölkerung berücksichtigt werden.

19 Covid-19 Ausbreitung in Deutschland

Stand 14.10.2020

In diesem Kapitel wird ein erweitertes SIR-Modell (vgl. Kapitel 11), das eine Modifikation und Erweiterung des SIR-Modells von [8] darstellt, vorgestellt, das die Fallzahlen von Covid-19 in Deutschland reproduzieren soll. Dieses Modell ist in der Lockdown-Phase im März-Juni 2020 entstanden, als erst langsam Erkenntnisse zu dieser neuen Virusinfektion bekannt wurden. Covid-19 ist eine durch das Corona-Virus SARS-CoV-2 hervorgerufene Infektionskrankheit, die bis Stand Oktober 2020 nicht heilbar ist und gegen die es auch keinen Impfstoff gibt. Die Erkrankung verläuft in vielen Fällen harmlos bis symptomfrei, in einigen endet sie auch tödlich. Insbesondere ältere Menschen mit Vorerkrankungen sind gefährdet. Im vorliegenden Modell soll nun versucht werden mit einfachsten Mitteln die Fallzahlen zu reproduzieren. Daher werden weder eine Altersstruktur noch geographische Besonderheiten berücksichtigt. Die Bevölkerungszahl wird zudem als konstant angenommen (N).

Um dieses Ziel zu erreichen, muss man berücksichtigen, dass die gemeldeten Infiziertenzahlen nur einen (unbekannten) Bruchteil der tatsächlichen Fallzahlen darstellen. Deshalb wird eine zusätzlich Zustandsvariable, die Anzahl der nicht gemeldeten Infizierten U eingeführt. Im Gegensatz dazu ist nun I die Anzahl der gemeldeten Fälle.

Das Modell beschreibt die zeitliche Entwicklung der Anzahl der anfälligen Personen (S, susceptible), der Infizierten, aber nicht infektiösen Personen (E, exposed) und der Anzahl der gemeldeten und nicht gemeldeten Infizierten (I, reported infectious) (U, unreported infectious). Darüber hinaus werden Personen im Krankenhaus (H, hospitalized) berücksichtigt, die das Virus nicht weitergeben. Es werden keine Personen modelliert, die gesundet sind, da bisher die Fallzahlen so gering sind (Stand Juli 2020), dass keine Herdenimmunität und Sättigungseffekte auftreten.

Die Unterteilung in Infizierte (E) und Infektiöse (I und U) ist notwendig, um die zeitliche Verzögerung zwischen Infektion und Infektiosität zu berücksichtigen. Die Unterscheidung zwischen gemeldeten (I) und unentdeckten (U) Infizierten ist notwendig, um den tatsächlichen Epidemieverlauf abzubilden. Es wird davon ausgegangen, dass erkannte Infizierte nicht mehr zur Epidemie beitragen. Die Zahl der Neuinfektionen ist daher proportional zur Zahl der unentdeckten Infizierten und es

gilt

$$\dot{S} = -b \cdot S \cdot U/N$$

Es wird davon ausgegangen, dass Personen, deren Infektion nicht erkannt wurde (U) nach einer Dauer D_r Tagen komplikationslos gesunden bzw. in Quarantäne gehen. Epidemiologisch kommt es hier nicht darauf an, dass die Personen gesunden (recover), sondern dass sie nicht mehr zum weiteren Infektionsgeschehen beitragen. Dasselbe gilt für dokumentierte Fälle (I). Vereinfachend wird davon ausgegangen, dass sie im Mittel nach D_r Tagen gesunden oder in Quarantäne gehen. Zusätzlich wird ein Teil der Fälle aufgrund der Schwere des Krankheitsverlaufs ins Krankenhaus eingewiesen. Es wird von einer Hospitalisierungsrate h (in 1/Tag) ausgegangen. Die Dauer der Hospitalisierung hängt vom Verlauf und der Schwere der Erkrankung ab und soll im Mittel ca. D_h Tage betragen. Hospitalisierte streben mit einer Mortalitätsrate m. Die Mortalitätsrate bezieht sich hier also auf hospitalisierte Personen und nicht auf die Gesamtbevölkerung. Das Modell ist in Abbildung 19.1 dargestellt. Interessanterweise werden in Epidemiemodellen häufig

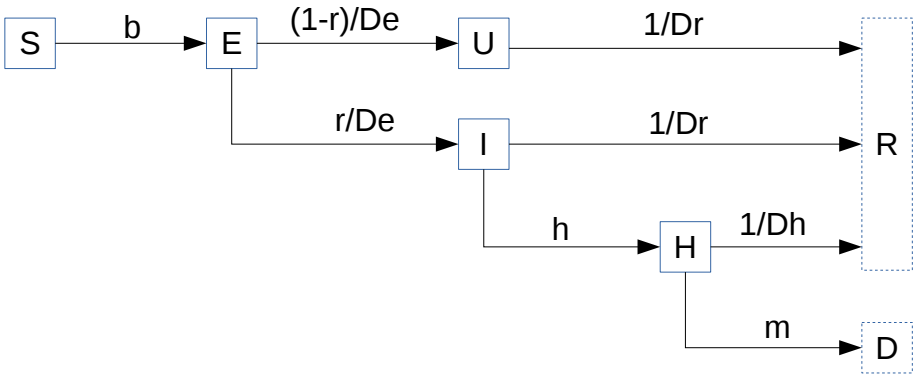


Abbildung 19.1: Diagramm. Anfällige (S) werden mit der Übertragungsrate b (1/Tag) latent infiziert (E). Nach der Latenzzeit von im Mittel D_e Tagen, werden Personen infektiös. Der Teil r wird gemeldet (I), der Rest bleibt unerkannt (U) und erholt sich nach im Mittel D_r Tagen. Die Hospitalisierungsrate beträgt h (1/Tag). Die mittlere Aufenthaltsdauer beträgt D_h Tage. Hospitalisierte sterben mit einer Mortalitätsrate m (1/Tag). Die Kompartimente R(recovered) und D (death) werden nicht explizit modelliert.

keine Erkrankten modelliert. Dies liegt daran, dass eine Erkrankung an sich im allgemeinen kein Problem darstellt. Wichtig ist vielmehr die Infektiosität, die das Epidemiegeschehen maßgeblich beeinflusst. Bei Covid-19 werden alle erkannten In-

fizierten unter Quarantäne gestellt, so dass auch nur die unerkannten Fälle zum Infektionsgeschehen beitragen. Bei einer hohen Anzahl Infizierter kommt es dann letztlich auf die Zahl der verbleibenden Suszeptiblen an. Das ist hier noch nicht relevant.

$$\begin{aligned}
\dot{S} &= -b \cdot S \cdot U/N && \text{susceptible} \\
\dot{E} &= b \cdot S \cdot U/N - E/D_e && \text{exposed} \\
\dot{I} &= r \cdot E/D_e - I/D_r - h \cdot I && \text{reported infectious} \\
\dot{U} &= (1-r) \cdot E/D_e - U/D_r && \text{unreported infectious} \\
\dot{H} &= h \cdot I - H/D_h - m \cdot H && \text{hospitalized}
\end{aligned} \tag{19.1}$$

Der Unterschied zum bekannten SIR-Modell besteht darin, dass durch die Berücksichtigung einer Latenzzeit die nicht-infektiösen Infizierten berücksichtigt werden. Dies ist strukturell im Modell wirksam, da es eine Verzögerung des Epidemieverlaufs nach sich zieht. Die Unterteilung in gemeldete und nicht gemeldete Fälle ist von Bedeutung, wenn die Modellergebnisse mit realen Fallzahlen verglichen werden sollen, um z.B. eine Vorhersage für die kommenden Monate zu erstellen. Für das Modell an sich ist dies unerheblich und könnte auch mit einer verringerten Transmissionsrate und einer auf die Gesamtinfiziertenzahl bezogenen Hospitalisierungsrate erreicht werden.

Zusätzlich wird berücksichtigt, dass vom 22. März 2020 bis 11. Mai 2020 strenge Maßnahmen wie z.B. eine Kontaktsperre verhängt wurden. In diesem Zeitraum wird die Transmissionsrate b mit dem Faktor $f_m < 1$ multipliziert. Anschließend wird ein linearer Anstieg bis zum f_a-fachen von b innerhalb von d Tagen angenommen.

Die Parametrisierung des Modells wurden teilweise grob aus den Angaben von [1] geschätzt und teilweise automatisch angepasst (hier nicht weiter erläutert). Alle Parameterwerte sind in Tabelle 19.1 angegeben.

Die Simulationsergebnisse sind zusammen mit den Daten der Johns Hopkins Universität ([3]) in Abbildung 19.2 aufgetragen. Man sieht, dass die Fallzahlen anfänglich exponentiell ansteigen. Das Abflachen der realen Zahlen vor Beginn der Maßnahmen am 22. März beruht vermutlich auf einer bereits einsetzenden Ver-

Name	Wert	Einheit	Bedeutung
N	83 Mio.		Populationsgröße Deutschland
I_0	16		Anzahl gemeldeter Fälle am 24.02.2020
u_0	10.0		Vielfaches von I_0 nicht gemeldet
r	0.1		Anteil gemeldet
h	0.01	1/d	Hospitalisierungsrate in 1/d
b	1.0	1/d	Transmissionsrate in 1/d
f_m	0.025		Reduktionsfaktor von b ab dem 22.3.2020
f_a	0.07		Reduktionsfaktor von b nach den Massnahmen
d	120	d	Tage nach dem 11.5.2020 bis f_a erreicht
D_e	5.5	d	mittlere Dauer der Latenzzeit
D_r	23.0	d	Zeit bis zur Gesundung
D_h	10	d	mittlere Verweildauer in der Klinik
m	0.045	1/d	Mortalitätsrate

Tabelle 19.1: Parameter und Anfangswerte des Covid-19-Modells

ringerung der Transmissionsrate. Die Bevölkerung hat bereits vor den gesetzlichen vorgeschriebenen Maßnahmen ihre Kontakte und die Ansteckungswahrscheinlichkeit durch Hygienemaßnahmen verringert. So verkleinert sich die Transmissionsrate, was hier im Modell nicht abgebildet ist. Die Zahl der Todesfälle schwankt in der Realität recht stark (Abbildung 19.2, rechts). Dies ist u.a. eine Folge der Meldeverzögerung. Krankenhäuser, Pflegeeinrichtungen und Gesundheitsämter melden in der Regel nicht am Wochenende, so dass die Daten meistens einen 7-Tage-Zyklus aufweisen, den das Modell nicht abbilden kann. Man vergleicht daher auch besser die sogenannten **laufenden Mittelwerte (running mean, moving mean)** der Daten und der Simulationsergebnisse, um die Kurven zu glätten. Hierbei werden zu jedem Tag die Daten der letzten 7 Tage gemittelt und als Wert des aktuellen Tages aufgetragen. Dies ist in Abbildung 19.3. dargestellt. Das Modell kann den generellen Verlauf der sogenannten ersten Welle und den Beginn der zweiten Welle abbilden. Die Todesfallzahlen der ersten Welle werden unterschätzt, später überschätzt. Dies liegt vermutlich daran, dass das Modell die Optimierung der Behandlung nicht und die Altersverteilung der Erkrankten nicht abbildet. Die Unterschätzung der zweiten Welle kann noch nicht abschließend diskutiert werden.

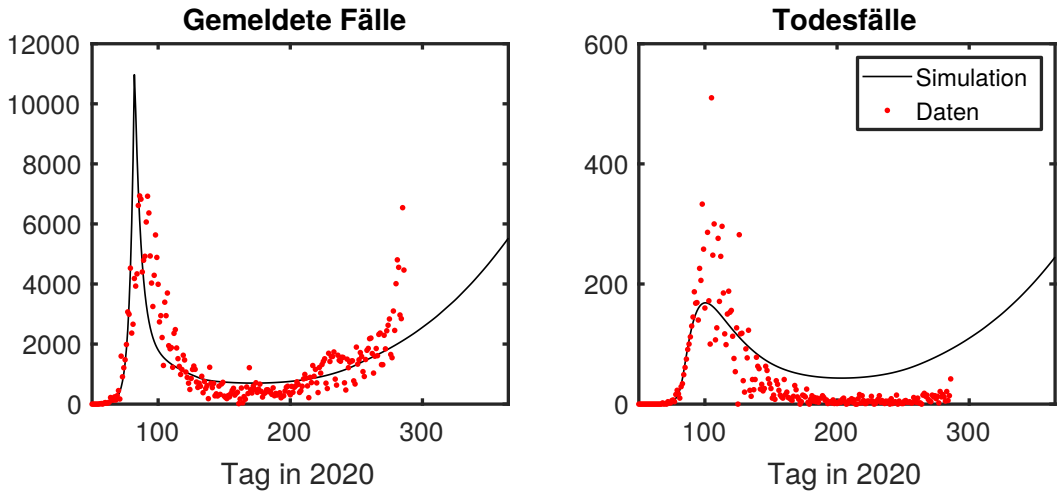


Abbildung 19.2: Simulationsergebnisse (schwarz) verglichen mit Daten (rot) von [3] bis zum 14. Oktober 2020. Gemeldete Covid-19 Fälle (links) und Todesfälle (rechts) für Deutschland.

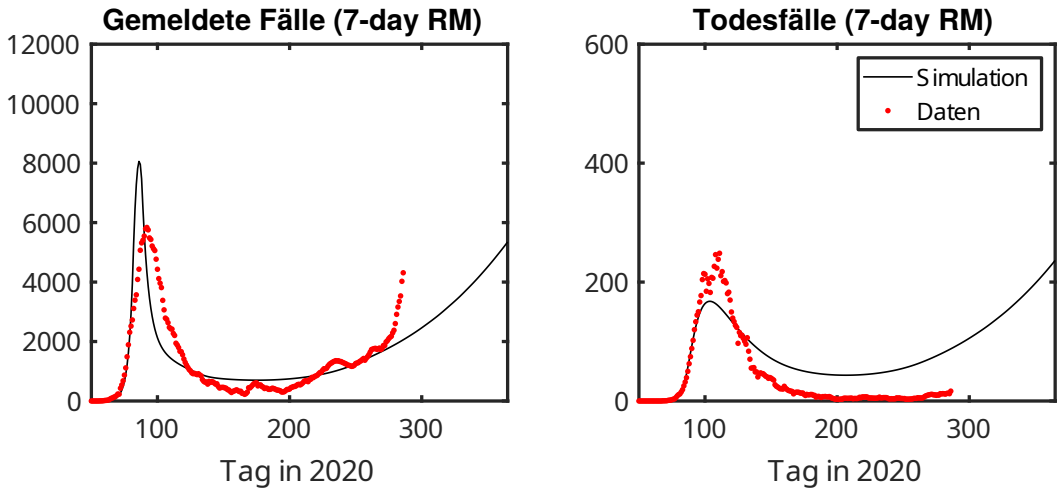


Abbildung 19.3: Darstellung als 7-Tage laufende Mittelwerte. Simulationsergebnisse (schwarz) verglichen mit Daten (rot) von [3] bis zum 14. Oktober 2020. Gemeldete Covid-19 Fälle (links) und Todesfälle (rechts) für Deutschland.

20 HIV-Modell

Bei der Krankeit AIDS (aquired immunodeficiency syndrome) handelt es sich um eine Virusinfektion mit dem Lentivirus HIV. Die Zielzellen des HIV-Virus sind die T-Helferzellen des Immunsystems, die die Abläufe der Immunantwort steuern. Bricht AIDS aus, so ist die gesamte Immunantwort auf jedwede Erreger gestört, der Patient erkrankt auch an sonst harmlosen Erregern (sogenannte opportunistische Infektionen). Letztlich führt der Zusammenbruch des Immunsystems und die damit verbundenen Erkrankungen inklusive Krebs zum Tod. AIDS ist bisher nicht heilbar. Es gibt bisher auch keinen Impfstoff, da der Erreger sehr wandlungsfähig ist. Behandlungsmöglichkeiten bestehen mit Kombinationstherapien, die die Ausbreitung von HIV im Körper verlangsamen. Die Krankheit wird ausschließlich durch den Austausch von Körperflüssigkeiten übertragen. Die häufigsten Übertragungswege sind ungeschützter Geschlechtsverkehr und die Nutzung kontaminierter Spritzen bei Drogenabhängigen. AIDS ist durch eine sehr lange und variable Inkubationszeit gekennzeichnet.

Die epidemiologisch wichtigen Kennzeichen der HIV-Infektion sind

- lange Inkubationszeit mit großer Varianz
- hohe Mortalität (ohne Behandlung)
- relativ hohe Krankheitspenetranz
- Übertragung durch Blutkontakt

Aufgrund der langen Inkubationszeit ist eine Übertragung des klassischen Epidemiemodells nur eingeschränkt möglich, das dort zwischen Infizierten und erkrankten nicht unterschieden wird. Des weiteren geht das klassische Modell davon aus, dass die Kontakte in der Bevölkerung, die zur Infektion führen, homogen verteilt sind. Dies ist bei einer Infektion durch Blutkontakt sicher nicht der Fall. Insbesondere kann sich jede Person aktiv vor einer Infektion schützen.

Beim klassischen Epidemiemodell

$$\begin{aligned} \dot{S} &= -B \cdot S \\ \dot{I} &= B \cdot S - \gamma \cdot I \\ \dot{R} &= \gamma \cdot I \end{aligned}$$

ist die Ansteckungsrate B durch

$$B = p \cdot k \cdot \frac{I}{N}$$

gegeben, wobei p das Infektionsrisiko, k die Anzahl der Kontakte pro Zeiteinheit und $\frac{I}{N}$ der Anteil der Infizierten an der Gesamtbevölkerung darstellt.

Bei AIDS muss nun R als die Anzahl der erkrankten Personen interpretiert werden, da es zu keiner Gesundung oder Immunität kommt. Man kann vereinfachend davon ausgehen, dass Erkrankte keinerlei Kontakte pflegen, die zur Infektion führen können. Damit gilt bei AIDS

$$B = p \cdot k \cdot \frac{I}{I + S} \tag{20.1}$$

Die Lösungskurven für dieses modifizierte Modell sind in Abbildung 20.1 gegeben. Man sieht, dass letztlich die Bevölkerung ausstirbt, was nach heutigem Kenntnisstand unrealistisch ist. Die Ursache hierfür liegt darin, dass seitens der Bevölkerung

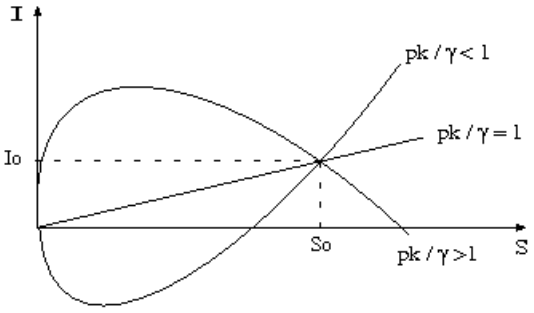


Abbildung 20.1: Die Modifikation des klassischen Modells nach Gleichung 20.1 führt zum Aussterben der Population.

keine Reaktion auf die bisherigen Fallzahlen stattfindet und dass keine Sättigungseffekte auftreten, da die Bevölkerung bezogen auf ihr Kontaktverhalten als homogen angenommen wird. Da man sich vor einer Infektion aktiv schützen kann, wird bei zunehmender Krankenzahl die Bevölkerung reagieren. Dies kann auf verschiedene weisen passieren. Es kann einerseits die Zahl der Kontakte reduziert werden oder auch das Ansteckungsrisiko bei einem Kontakt verringert werden. Zu letzterem zählt die Verwendung von Kondomen und Verwendung steriler Spritzen durch IV-Drogenabhängige.

Um diesen Aspekten Rechnung zu tragen wird der Ansatz der homogen agierenden Bevölkerung aufgegeben und die Reaktion der Bevölkerung auf die Fallzahlen berücksichtigt.

Die Bevölkerungsstruktur

Im Modell werden die Personen einer fiktiven Bevölkerung betrachtet, die zwischen ca. 15-65 Jahre alt sind. Diese Personen werden in n Gruppen eingeteilt, die durch die mittlere Anzahl potentiell gefährlicher Kontakte pro Jahr gekennzeichnet ist. Hierbei wird angenommen, dass die Personen der i-ten Gruppe ($i = 1 \dots n$) im Mittel $2^{i-1}-$ Kontakte pro Jahr haben. Somit hat die erste Gruppe keine potentiell gefährlichen Kontakte.

Des weiteren wird eine feste „Geburtenrate„ und „Sterberate“ angenommen. Es wird angenommen, dass es sich bei den „Geburten“ um nichtinfizierte Personen handelt. Die Bevölkerungsgröße bleibt so über die Zeit konstant (wenn man die Todesfälle durch AIDS weiterhin als Krankheitsfälle zählt).

Es wird angenommen, dass pro Zeiteinheit ein Teil der Bevölkerung das Verhalten ändert und in eine benachbarte Gruppe „wandert“ Dies Wanderung is so angelegt, dass ohne HIV-infizierte die Gruppengrößen konstant bleiben (Fließgleichgewicht). Als Anfangsverteilung wird eine Binominalverteilung angenommen.

Die Neuinfektionen

Die Anzahl der Neuinfektionen hängt von der aktuellen Nichtinfiziertenzahl S, Infiziertenzahl I (ohne Erkrankte), der Kontaktzahl k und dem Ansteckungsrisiko p ab.

Für die Ansteckungsrate B_i in der i-ten Gruppe gilt:

$$B_i = p \cdot k_i \frac{\sum_{j=1}^{n} I_j}{\sum_{j=1}^{n} I_j + S_j} \tag{20.2}$$

Der Bruch gibt die Anzahl aller fatalen Kontakte bezogen auf die Anzahl sämtlicher Kontakte an. Die Zahl der Neuinfizierten $I_{neu,i}$ in der i-ten Gruppe ergibt sich aus der Anzahl der Nichtinfizierten in der i-ten Gruppe und der Ansteckungsrate:

$$I_{neu,i} = B_i \cdot S_i \tag{20.3}$$

Die Neuerkrankungen

Aufgrund der langen Inkubationszeit bei AIDS kann nicht von einer konstanten Konvertierungsrate von infiziert nach krank ausgegangen werden. Es kommt zu einem sogenannten transienten Effekt. Man kann davon ausgehen, dass die Inkubationszeit in etwa Gauß-verteilt ist. Zu Beginn der Epidemie erkranken daher zuerst die Personen mit unterdurchschnittlich langer Inkubationszeit. Erst im Laufe der Zeit normalisiert sich die mittlere Inkubationszeit hin zum Erwartungswert der Verteilung. Dadurch bedingt erkranken anfangs überdurchschnittlich viele Personen. Die folgende Abnahme der Erkrankungszahlen geht aber nicht auf ein Abklingen der Epidemie zurück, sondern ist eine logische Folge des transienten Effekts (Abbildung 20.2). Um diesem Verlauf seit Beginn der Epidemie gerecht zu werden,

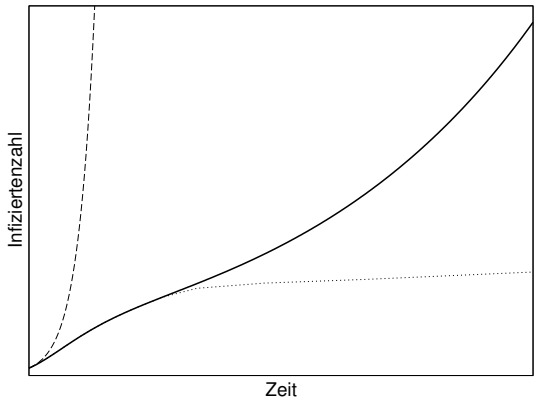


Abbildung 20.2: Qualitativer Verlauf der Infiziertenzahlen (schwarz). Aufgrund des transienten Effekts wird die Epidemie anfangs überschätzt (gestrichelt). Die tatsächliche Verringerung der Neuerkrankungen wird fälschlicherweise als Abklingen der Epidemie interpretiert (gepunktet).

wird die Dauer der Infektion berücksichtigt. Ist v die Wahrscheinlichkeitsdichte für die Inkubationszeit, so erhält man die Zahl der Neuerkrankten der i-ten Gruppe $R_{neu,i}$ durch (muss für das Modell noch diskretisiert werden):

$$R_{neu,i}(t) = \int_0^t I_{neu,i}(s) \cdot v(t-s)\, ds \tag{20.4}$$

Reaktion der Bevölkerung

Die Modellbevölkerung reagiert auf zwei verschiedene Weisen auf den Verlauf der Epidemie:

1. Veränderung der Kontaktzahl
2. Veränderung der Ansteckungswahrscheinlichkeit

Im ersten Fall wird angenommen, dass bei zunehmendem Bewusstsein für die Gefahr ein Teil der Bevölkerung die Anzahl ungeschützter Kontakte verringert. Es findet eine „Wanderung“ in eine Gruppe mit geringerer Kontaktzahl statt. Im zweiten Fall wird angenommen, dass das Ansteckungsrisiko pro Kontakt verringert wird.

Die Reaktion erfolgt jeweils aufgrund der aktuellen Neuerkrankungszahlen und dem bisherigen Gesamtverlauf der Epidemie.

Simulationsergebnisse

Die Simulationsergebnisse Abbildung 20.3 zeigen, dass die Berücksichtigung der Reaktion auf die Fallzahlen zu wesentlich realistischeren Ergebnissen führt. An den

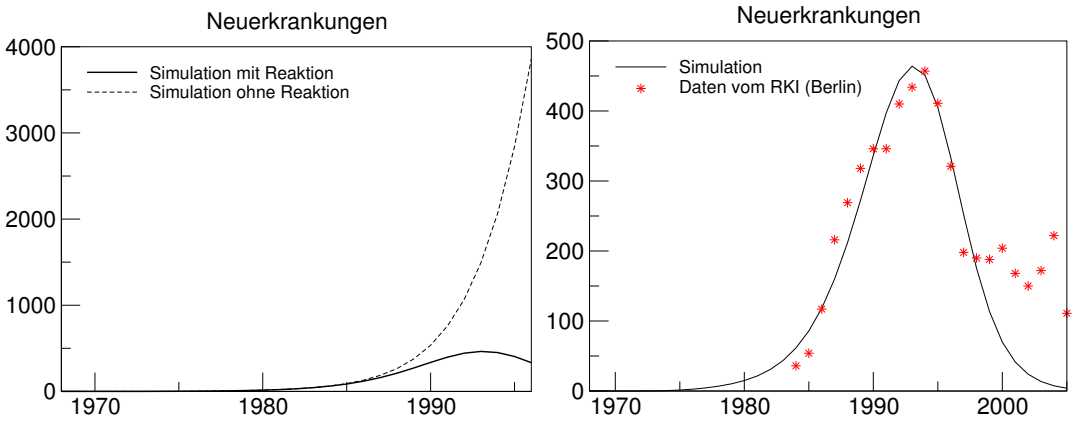


Abbildung 20.3: Modellergebnisse mit dem AIDS-Modell AiMo. Dargestellt sind jeweils die Zahl der Neuerkrankungen in den Jahren bis 1995 mit Berücksichtigung der Reaktion der Bevölkerung auf die Fallzahlen der vergangenen Jahre (rechts, solide) und ohne Reaktion der Bevölkerung (rechts, gestrichelt) für eine Bevölkerungsgröße, die der von Berlin entspricht. Der Vergleich mit den Fallzahlen für Berlin (Quelle:RKI) bis zum Jahr 2004 (rechts) zeigt eine gute Übereinstimmung bis Ende der neunziger Jahre.

Simulationsergebnissen ab Ende der Neunzigerjahre erkennt man, dass es weitere Faktoren geben muss, die den Epidemieverlauf maßgeblich beeinflussen. Aufgrund der langen Inkubationszeit muss die Ursache für den veränderten Epidemieverlauf viele Jahre zurückliegen. Betrachtet man speziell die Fallzahlen von Berlin, so könnte der veränderte Epidemieverlauf mit dem Mauerfall zusammenhängen. Demoskopische Daten zeigen, dass die Fallzahlen im Osten zu dieser Zeit vermutlich deutlich unter denen des Westens lagen. Dies lässt vermuten, dass AIDS in den Ost-Medien weniger stark thematisiert wurde. Des weiteren könnte es sein, dass aufgrund der einschneidenden politischen Ereignisse das Bewusstsein für die

Gefahr einer HIV-Infektion in den Hintergrund getreten ist. Nimmt man dies an und geht davon aus, dass Anfang der neunziger Jahre sich das Bewusstsein für die Epidemie erst wieder neu aufbauen musste, so erhält man deutlich bessere Ergebnisse (Abbildung 20.4). Man darf natürlich nicht den Fehler machen, aufgrund der

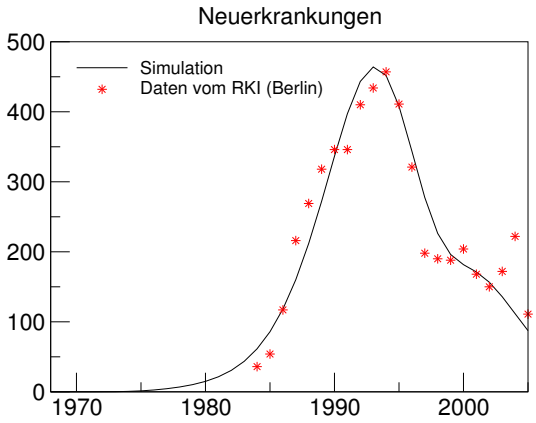


Abbildung 20.4: Modellergebnisse mit dem AIDS-Modell AIMo. Modellergebnis für die Anzahl der Neuerkrankungen (schwarz) in Berlin unter der Annahme, dass zur Zeit des Mauerfalls das Bewusstsein für die Gefahr eine HIV-Infektion herabgesetzt ist, verglichen mit den Fallzahlen für Berlin (rot, Quelle:RKI).

Übereinstimmung von Daten und Simulation zu schließen, dass ein verändertes Bevölkerungsbewusstsein tatsächlich die Ursache für den veränderten Epidemieverlauf ist. Das Ergebnis darf man allerhöchstens als Hinweis werten, dass die Untersuchung der demoskopischen Daten auf Hinweise, die für eine verändertes Verhalten sprechen, sinnvoll ist.

21 Kinetik chemischer Reaktionen

Reaktion 1. Ordnung

Die einfachste Form einer chemischen Reaktion ist durch den Zerfall eines Moleküls (z.B. radiokativer Zerfall) gegeben.

$$X \xrightarrow{k} Y + Z + ... \tag{21.1}$$

Hierbei gibt k die Reaktionsgeschwindigkeit an, die in der Realität u.a. von der Temperatur abhängt. Die stöchiometrische Gleichung 21.1 soll nun in ein mathematisches Modell umgesetzt werden. Hierbei interessiert uns der zeitliche Verlauf der Konzentration der Substanz X. Es ist daher sinnvoll anstelle von Molekülen die Konzentration der Substanz zu betrachten. Die Konzentration d.h. Stoffmenge pro Volumen, wird mit [X] bezeichnet und hat die Einheit mol/l.

Die Änderung der Konzentration von X ist proportional zur vorhandenen Stoffmenge. Die Proportionalitätskonstante ist gerade k und beschreibt die Zerfallsrate in 1/s. Man erhält die DGL

$$\frac{d}{dt}[X] = -k[X] \tag{21.2}$$

welche die Lösung

$$[X](t) = [X]_0 \cdot e^{-k \cdot t} \tag{21.3}$$

besitzt, wobei $[X]_0$ die anfängliche Konzentration ist. Es handelt sich also tatsächlich um einen Zerfallsprozess. Die zeitliche Änderung der Konzentrationen der Reaktionsprodukte ist genauso groß, aber natürlich positiv. Sie nehmen exponentiell zu:

$$\frac{d}{dt}[Y] = +k[X], \qquad \frac{d}{dt}[Z] = +k[X] \qquad ...$$

Reaktion 2. Ordnung

Bei der Mehrheit chemischer Reaktionen reagieren zwei Moleküle X und Y miteinander:

$$X + Y \xrightarrow{k} Z + ... \tag{21.4}$$

Man nimmt an, dass die Reaktionsgeschwindigkeit proportional zur Wahrscheinlichkeit ist, dass ein Molekül vom Typ X auf ein Typ Y trifft. Damit erhält man die DGL

$$\frac{d}{dt}[X] = -k[X][Y]\,, \tag{21.5}$$

die die Änderung der Konzentration der Substanz X beschreibt. Hier muss man berücksichtigen, dass der Parameter k, die Reaktionskonstante, nun die Einheit l/(mol s) hat.

Für die weiteren Reaktionspartner ergibt sich:

$$\frac{d}{dt}[Y] = -k[X][Y]\,, \qquad \frac{d}{dt}[Z] = +k[X][Y] \qquad ... \tag{21.6}$$

Reaktion 2. Ordnung mit einem Ausgangsstoff
Die Reaktion

$$2X \xrightarrow{k} Z + ... \tag{21.7}$$

führt zu folgender DGL

$$\frac{d}{dt}[X] = -2k[X]^2\,, \tag{21.8}$$

Gleichgewichtsreaktionen

Reaktionen, die in beide Richtungen ablaufen können, heißen Gleichgewichtsreaktionen. Die Gleichgewichtsreaktion

$$X \underset{k_2}{\overset{k_1}{\rightleftharpoons}} Y + Z \tag{21.9}$$

mit den Reaktionskonstanten k_1 für die Hinreaktion und k_2 für die Rückreaktion wird durch das DGL-System

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}[X] &= -k_1[X] + k_2[Y][Z] \\ \frac{d}{dt}[Y] &= \ \ k_1[X] - k_2[Y][Z] \\ \frac{d}{dt}[Z] &= -k_1[X] - k_2[Y][Z]\end{aligned} \tag{21.10}$$

beschrieben.

Kombinierte Reaktionen mit zweiatomigen Molekülen

Folgende Reaktionen laufen gemeinsam ab:

$$\begin{aligned}X_2 + Y_2 &\underset{k_2}{\overset{k_1}{\rightleftharpoons}} XY_2 + X \\ X + Y_2 &\xrightarrow{k_3} XY_2 + X \\ 2X &\xrightarrow{k_4} X_2\end{aligned} \tag{21.11}$$

mit den Reaktionskonstanten k_1, k_2, k_3 und k_4. Das zugehörige DGL-System lautet:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}[X_2] &= -k_1[X_2][Y_2] + k_2[XY_2][X] + k_4[X]^2 \\ \frac{d}{dt}[Y_2] &= -k_1[X_2][Y_2] + k_2[XY_2][X] - k_3[X][Y_2] \\ \frac{d}{dt}[XY_2] &= k_1[X_2][Y_2] - k_2[XY_2][X] + k_3[X][Y_2] \\ \frac{d}{dt}[X] &= k_1[X_2][Y_2] - k_2[XY_2][X] - k_3[X][Y_2] - 2k_4[X]^2\end{aligned} \tag{21.12}$$

22 Das Karbonatsystem des Ozeans

Die hier dargestellten Betrachtungsweise ist stark vereinfacht und dient als Einstieg in das Thema.

Die Bedeutung des Karbonatsystems im Ozean wird deutlich, wenn man sich vergegenwärtigt, dass mehr als 98% des Kohlenstoffs des Atmosphäre-Ozeansystems im Ozean in Form von gelösten anorganischen Kohlenstoff vorliegen [21]. Ozean und Atmosphäre stehen in einem kontinuierlichen Austausch im Bestreben, ein Gleichgewicht zu erreichen. Dieser Prozess wird durch den jeweiligen CO_2-Partialdruck angetrieben. Der prä-industrielle atmosphärische Partialdruck betrug 280 ppm, u.a. durch die Verbrennung fossiler Brennstoffe beträgt der heutige Wert 410 pmm [6]. Wenn insgesamt 98% im Meer gespeichert werden, stellt sich die Frage, wie viel vom anthropogenen Eintrag im Meer gelöst sind und welche Auswirkung dies auf den Ozean hat. Es ist so gut wie sicher, dass die vom Menschen verursachten CO_2-Emissionen der Hauptgrund für die derzeitige globale Versauerung der offenen Ozeane sind [6]. Die Versauerung führt u.a. dazu, dass Organismen, die Kalkschalen bilden, aussterben könnten. Um das Zusammenspiel zwischen atmosphärischen CO_2 und Ozeanversauerung zu verstehen, muss man sich den Karbonatkreislauf in (Meer)-Wasser anschauen, da das Karbonatsystem als Puffersystem fungiert, das Schwankungen im pH-Wert abfängt.

Meerwasser besteht aus vielen Komponenten, die einen Einfluss auf den pH-Wert haben. Wir werden im folgenden nur die wesentlichen Komponenten betrachten:

CO_2 freies Kohlenstoffdioxid im Wasser
HCO_3^- Hydrogenkarbonat
CO_3^{2-} Karbonat

Da der Anteil an Kohlensäure H_2CO_3 im Wasser sehr gering ist, wird diese zusammen mit CO_2 betrachtet. Die Gesamtmenge an gelöstem anorganischen Kohlenstoff (DIC, Gesamtkarbonat, dissolved inorganic carbon) im Meerwasser beträgt also

$$\mathrm{DIC} = [HCO_3^-] + [CO_3^{2-}] + [CO_2] \tag{22.1}$$

Die Komponenten des Karbonatsystems werden meistens in Mol pro Kilogramm

Seewasser angegeben. Dies verwundert, da man eher eine Angabe pro Liter erwarten würde. Dies ist aber wegen der variablen Dichte von Meerwasser schlechter zu handhaben. Die Einheit mol/kg ist Temperatur- und Druck-unabhängig und wird auch Molalität genannt. Des weiteren wird davon ausgegangen, dass sich alles „ideal“ verhält und ein Salzgehalt von 35 (35 g Salz pro kg) vorliegt.

Die Gleichgewichtsreaktionen[1] im Meerwasser sind vereinfacht wie folgt gegeben

$$CO_2 + H_2O \overset{K1}{\rightleftharpoons} HCO_3^- + H^+ \overset{K2}{\rightleftharpoons} CO_3^{2-} + 2H^+ \tag{22.2}$$

Die einzelnen Gleichgewichtsreaktionen sind durch Gleichgewichtskonstanten gekoppelt und nach dem Massenwirkungsgesetz gelten folgende Beziehungen

$$K_1 = \frac{[HCO_3^-][H^+]}{[CO_2]} \tag{22.3}$$

$$K_2 = \frac{[CO_3^{2-}][H^+]}{[HCO_3^-]} \tag{22.4}$$

Die Konzentrationen der Größen sind dabei in eckigen Klammern angegeben. Die temperaturabhängigen Gleichgewichtskonstanten K_1 und K_2 sind in Anlehnung an [21] gewählt[2]. Bei den Gleichgewichtskonstanten handelt es sich um empirisch ermittelte Größen, für die es in der Literatur auch viele andere Werte gibt. Meistens werden die Werte ähnlich wie beim pH-Wert in der Form

$$pK = -\log_{10}(K) \tag{22.5}$$

angegeben.

Man halt also die unbekannten Größen $[HCO_3^-]$, $[CO_3^{2-}]$, $[CO_2]$ und $[H^+]$. Somit haben wir 2 Gleichungen (Gleichungen 22.3 und 22.4) und vier Unbekannte. Um dies zu lösen, müssen also zwei Werte vorgegeben werden. Gibt man den pH-Wert vor, so kann man die Wasserstoffionenkonzentration über

$$pH = -\log_{10}(H_3O^+) \tag{22.6}$$

[1] Diese Gleichgewichtskette stellt keine stöchiometrisch korrekten Reaktionsgleichungen dar!

[2] Hier wurde auf die Unterscheidung zwischen Dissoziationskonstanten und stöchiometrischen Gleichgewichtskonstanten verzichtet. Der Übersichtlichkeit halber werden hier die K^* als K geschrieben.

erhalten, wobei hier H+ mit H_3O^+ identifiziert wird (vergleiche Anhang A.4.1). Zusätzlich geben wird die Gesamtmenge an anorganischen Kohlenstoff DIC (Gleichung 22.1) vor. Damit verbleiben 2 Gleichungen und zwei Unbekannte. Dies zu lösen, ist etwas mühsam, lässt sich aber noch von Hand machen. In Abbildung 22.1 ist das Ergebnis für pH-Werte von 1 bis 13 dargestellt. Bei einem pH-Wert von 8.1, der typisch für Oberflächenwasser im Meer ist[3], sind liegen ca. 83 % in Form von Hydrogenkarbonat und 16 % in Form von Karbonat vor. Freies CO_2 macht weniger als 1 % aus.

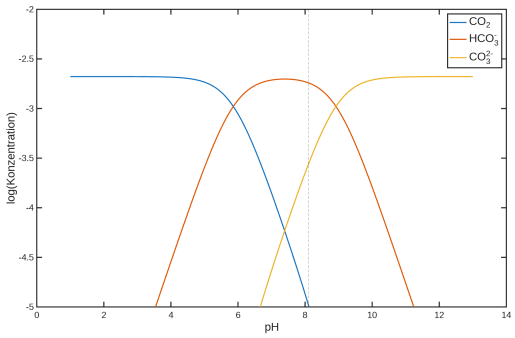


Abbildung 22.1: Vereinfachte Bjerrum-Grafik für die Komponenten des Karbonatsystems im Meerwasser. DIC = 2.1mmol/kg, S=35, T=25 °C , pK_1 = 5.86 und pK_2 = 8.92. Die zugehörigen K-Werte haben die Einheit mol/kg. Die gestrichelte senkrechte Linie gibt einen pH-Wert von 8.1 an.

Die Betrachtungsweise in Abbildung 22.1 soll nicht implizieren, dass der pH-Wert die steuernde Größe ist. Im Meerwasser bestimmt das Verhältnis der Kohlenstoffkomponenten den pH-Wert.

22.1 Atmosphäre-Ozean-Gleichgewicht

Wir sind daran interessiert, wie sich der CO_2-Partialdruck in der Atmosphäre auf den pH-Wert auswirkt. Daher können wir nicht mehr den pH-Wert vorgeben, sondern wir müssen den Eintrag von Kohlenstoff aus der Atmosphäre berücksichtigen.

Die Meeresoberfläche steht in direktem Austausch mit der Atmosphäre. Nach dem Gesetz von Henry hängt die CO_2-Konzentration im Meerwasser vom CO_2-Partialdruck in der Atmosphäre ab[4]. Vereinfachend rechnen wir hier mit dem CO_2-Partialdruck in ppm (parts per million), welches eine übliche Angabe in den Klimawissenschaften ist. Dies stimmt nicht so ganz, weil der Partialdruck eigentlich

[3] Stand 2001, mittlerweile ist der pH-Wert niedriger.

[4] Dies ist etwas ungenau. Den Partialdruck kann man eigentlich nur für ideale Gase heranziehen, so dass eigentlich die Fugazität und nicht der Partialdruck betrachtet werden müsste. Beide sind für unsere Zwecke aber zahlenmäßig nahezu gleich.

in μatm angegeben wird und die zahlenmäßige Gleichheit nur unter bestimmten Bedingungen bei 1 atm Druck gilt.

Im Gleichgewicht ist der Netto-Austausch von CO_2 in der Luft und im Wasser gleich null und es gilt

$$[CO_2] = K_0 \cdot pCO_2 \qquad \text{Gesetz von Henry} \tag{22.7}$$

wobei die Löslichkeit K_0 sehr stark von der Temperatur abhängt (vgl. [21] Figure 1.5.20).

Mit dem Gesetz von Henry kann also die CO_2-Konzentration im Wasser vorgegeben werden. Die Vorgabe einer weiteren Kohlenstoffkomponente ist nicht möglich, da wir ja gerade das Verhältnis aller Komponenten zueinander und den pH-Wert in Abhängigkeit vom CO_2-Partialdruck herausbekommen möchten.

Es gibt aber noch eine weitere Größe, die vorgegeben werden kann. Angenommen, es handelt sich nicht um Meerwasser sondern um destilliertes Wasser, in das wir CO_2 geben. Dann sind die darin enthaltenen Ionen HCO_3^-, CO_3^{2-}, H^+ und OH^-. Da wir über den CO_2-Partialdruck neutrales CO_2 hinzugegeben haben, müsste die Lösung also neutral bleiben. Es muss also gelten

$$[HCO_3^-] + 2\,[CO_3^{2-}] + [H^+] + [OH^-] = 0 \quad \text{in destilliertem Wasser} \tag{22.8}$$

Der Faktor kommt daher, dass CO_3^{2-} zweifach negativ geladen ist.

Dies ist also eine weitere Gleichung für die dritte fehlende Unbekannte. Dummerweise ist so aber die Unbekannte OH^- hinzugekommen. Dies ist aber unkritisch, da für die Dissoziation von Wasser

$$K_W = \frac{[CO_3^{2-}][H^+]}{[OH^-]} \tag{22.9}$$

mit der Gleichgewichtskonstanten K_W gilt, und somit

$$[OH^-] = \frac{K_W}{[H^+]} \tag{22.10}$$

gilt.

Im Meerwasser gibt es aber viele weitere Ionen, so dass die Summe in 22.8 der

hier angegeben sich nicht zu null addiert. Außerdem gibt es weitere Ionen, die von Bedeutung sind, da sie auch eine gewisse Pufferkapazität besitzen. Die Konzentrationen all dieser Ionen summiert man auf. Dieser Wert heißt dann Alkalinität. Ein typischer Wert für Meerwasser liegt bei Alk=2.2 mmol/kg. Für die Pufferkapazität im Meerwasser sind hauptsächlich schwache Säuren verantwortlich, so dass man zusätzlich zu den schon benannten Ionen das Borat-Ion für eine praktikable Definition hinzufügen muss. Da dies einen Anteil von weniger als 5% an der Gesamtalkalinität bei einem pH-Wert um 8 hat (vergleiche [21] Abbildung 1.2.10), wird in dieser konzeptionellen Überlegung darauf verzichtet[5]. Wir arbeiten stattdessen mit einer vereinfachten Definition der Alkalinität:

$$\mathrm{Alk} = [\mathrm{HCO_3^-}] + 2\,[\mathrm{CO_3^{2-}}] + [\mathrm{H^+}] + [\mathrm{OH^-}] \quad \text{Arbeitsdefinition} \tag{22.12}$$

Damit ergibt sich folgendes Gleichungssystem

$$\begin{aligned}
[\mathrm{CO_2}] &= \mathrm{K_0} \cdot \mathrm{pCO_2} \\
\mathrm{K_1} &= \frac{[\mathrm{HCO_3^-}][\mathrm{H^+}]}{[\mathrm{CO_2}]} \\
\mathrm{K_2} &= \frac{[\mathrm{CO_3^{2-}}][\mathrm{H^+}]}{[\mathrm{HCO_3^-}]} \\
\mathrm{K_W} &= [\mathrm{H^+}][\mathrm{OH^-}] \\
\mathrm{Alk} &= [\mathrm{HCO_3^-}] + 2\,[\mathrm{CO_3^{2-}}] + [\mathrm{H^+}] + [\mathrm{OH^-}]
\end{aligned} \tag{22.13}$$

mit den Unbekannten $\mathrm{CO_2}$, $\mathrm{HCO_3^-}$, $\mathrm{CO_3^{2-}}$, $\mathrm{H^+}$ und $\mathrm{OH^-}$ und den Vorgaben $\mathrm{pCO_2}$ und Alk. Ein Lösungsansatz für das Gleichungssystem ist im grauen Kasten angegeben, kann aber beim Lesen auch übersprungen werden.

[5] Die Alkalinitätsdefinition (practical alkalinity), wie sie in [21] verwendet wird lautet:

$$\mathrm{PA} = [\mathrm{HCO_3^-}] + 2\,[\mathrm{CO_3^{2-}}] + [\mathrm{B(OH)4^-}] + [\mathrm{H^+}] + [\mathrm{OH^-}] \tag{22.11}$$

Lösungsansatz für das Gleichungssystem 22.13

Um die Sache übersichtlicher zu gestalten, werden folgende Abkürzungen verwendet: c0 = $[CO_2]$, c1 = $[HCO_3^-]$, c2 = $[CO_3^{2-}]$, h = $[H^+]$, oh = $[OH^-]$,
alle andern Größen werden klein geschrieben:

(1) $c0 = k0 \cdot pco2$

(2) $k1 = c1 \cdot h/c0$

(3) $k2 = c2 \cdot h/c1$

(4) $kw = h \cdot oh$

(5) $alk = c1 + 2c2 + h + oh$

Gleichung (2) nach c1 auflösen und (1) einsetzen

(2a) $c1 = k1 \cdot c0/h = k1 \cdot k0 \cdot pco2/h$

Gleichung (3) nach c2 auflösen und (2a) einsetzen

(3a) $c2 = k2 \cdot c1/h = k2 \cdot k1 \cdot k0 \cdot pco2/h^2$

Gleichung (4) nach oh=kw/h auflösen und mit (1), (2a) und (3a) in (5) einsetzen

(5a) $alk = k1 \cdot k0 \cdot pco2/h + 2\,k2 \cdot k1 \cdot k0 \cdot pco2/h^2 - h + kw/h$

Die Gleichung (5a) muss nun nach der gesuchten Größe h aufgelöst werden, dann kann man sukzessive c0, c1 und c2 bestimmen und damit auch die Gesamtmenge DIC. Die Gleichung (5a) ist eine Gleichung 3. Grades in h. Diese lässt sich schlecht analytisch lösen, ist aber mit der Symbolic Toolbox von Matlab (solve) möglich. Alternativ kann man die Gleichung numerisch mit dem Newton-Verfahren (siehe Anhang A.13) lösen.

Mit der Lösung des Gleichungssystems hat man dann das Karbonatsystem im Gleichgewicht zu der vorgegebenen Alkalinität und dem vorgegebenen CO_2-Partialdruck bestimmt. Ein typischer Wert für die Alkalinität von Meerwasser liegt bei Alk=2.2 mmol/kg. Die verwendeten Gleichgewichtskonstanten sind in Tabelle 22.1 angege-

ben

Parameter	Wert
pK_0	7.3577
pK_1	6.0014
pK_2	9.1900
pK_W	13.8406

Tabelle 22.1: Die Parameter wurden mit den Formeln aus [21] Anhang A) für S=35 und T=10 °C berechnet. Beachte, dass die Sterne weggelassen wurden. Es gilt $K = 10^{-pK}$. Die pK-Werte sind dimensionslos, die zugehörigen K-Werte haben die Einheit mol/kg/ppm (K_0), mol/kg (K_1, K_2) und $(mol/kg)^2$ (K_W).

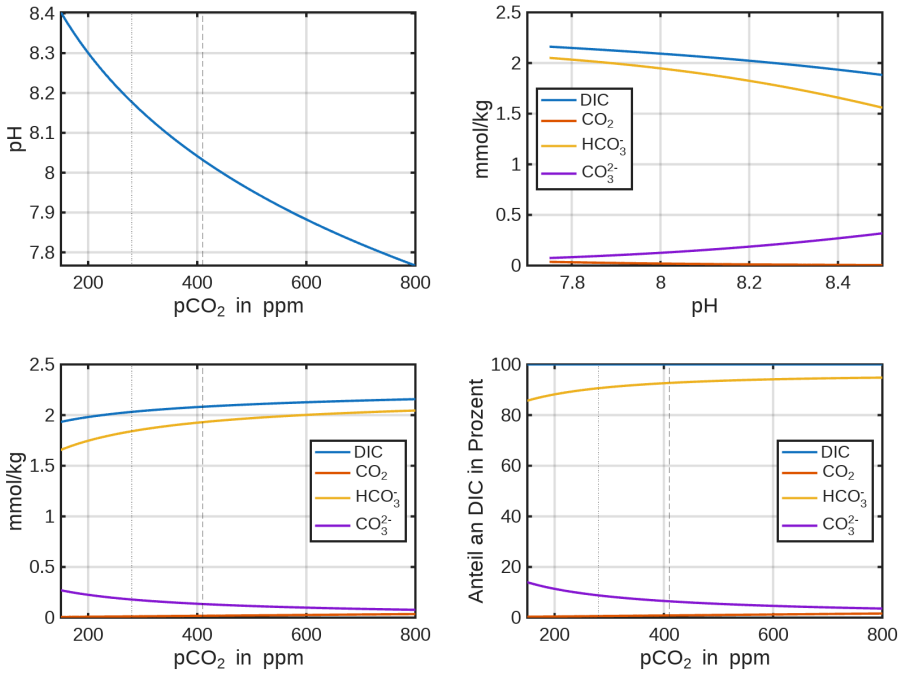


Abbildung 22.2: Veränderung des pH-Werts bei Zunahme des CO_2-Partialdrucks in der Atmosphäre (links oben) und die Zunahme der Gesamtkarbonatkonzentration inkl. der Verteilung auf die einzelnen Komponenten bei Zunahme des pH-Werts (rechts oben). Unten links ist die Veränderung der Verteilung bei Änderung des CO_2-Partialdrucks dargestellt, unteren rechts die prozentuale Verteilung. Die gepunktete Linie kennzeichnet den prä-industriellen Wert ($pCO_2 = 280$ ppm), die gestrichelte Linie den Wert von 2021 ($pCO_2 = 410$ ppm). Die Alkalinität ist auf 2.2mmol/kg, die Temperatur auf 10 °C und der Salzgehalt auf 35 festgelegt. Die verwendeten Gleichgewichtskonstanten sind in Tabelle 22.1 angegeben.

In Abbildung 22.2 sind die Ergebnisse dargestellt. Der Anteil an CO_3^{2-} und gelöstem CO_2 ist bei den in der Atmosphäre vorkommenden CO_2-Partialdruckwerten gering. Der größte Anteil liegt in Form von HCO_3^- vor (Abbildung 22.2 unten rechts). Mit steigendem CO_2-Partialdruck nimmt der Anteil an HCO_3^- weiter zu. Von der präindustriellen Zeit bis heute ist der Wert von 90.6 auf 92.7 gestiegen.

Das Gesamtkarbonat DIC steigt mit zunehmenden CO_2-Partialdruck in der Atmosphäre nicht linear an, sondern steigt langsamer (Abbildung 22.2 unten). Bezogen

auf den prä-industriellen Wert ist der DIC-Gehalt im Wasser um 2.5 % gestiegen. Selbst bei einem CO_2-Partialdruck von 800 ppm, was fast einer Verdopplung des heutigen Werts entspricht[6], steigt der DIC-Gehalt nur um weitere 3.6 %. Das bedeutet, dass der Ozean den steigenden CO_2-Partialdruck in der Atmosphäre nur teilweise kompensieren kann.

Zu einer genaueren quantitativen Analyse ist allerdings mindestens die Berücksichtigung von Borsäure und dem Borat-Ion notwendig, die auch als pH-Puffer fungieren. Dies wurde hier der Übersichtlichkeit halber weggelassen.

In den Berechnungen wurde die Erwärmung von Atmosphäre und Ozean nicht berücksichtigt. Geht man vereinfachend davon aus, dass die Wassertemperatur linear mit dem CO_2-Partialdruck gestiegen ist, so kann man mit dem Modell die Auswirkung der Temperaturerhöhung auf den Gesamtkohlenstoffgehalt ermitteln. Dazu wird angenommen, dass sich die Temperatur beginnend bei 280 ppm linear erhöht, so dass sie bei Verdopplung des CO_2-Partialdruck (560 pmm) um 2 °C gestiegen ist. Dann ergibt sich eine um 12.6 % geringere Erhöhung des Gesamtkohlenstoffgehalts im Wasser gegenüber dem Szenario ohne Temperaturerhöhung. Dieses Ergebnis ist in derselben Größenordnung wie in [5], wo von einer 10% geringen Aufnahme ausgegangen wird. Und genauso wie dort beschrieben, zeigt auch dieses konzeptionelle Modell keine pH-Wert-Änderung. Dies bedeutet, dass ein wärmerer Ozean schlechter in der Lage ist, CO_2 aus der Atmosphäre aufzunehmen, ohne dabei weniger zu versauern. Die liegt daran, dass in wärmeren Wasser mehr HCO_3^- zu CO_3^{2-} umgewandelt wird und dabei H^+ freigesetzt wird.

[6] Bei einer Erderwärmung um 4 °C verglichen mit dem prä-industriellen Wert ist ein Wert von 800 ppm im Jahre 2100 wahrscheinlich [5].

Teil III

Anhang

A Basics aus der Mathematik

A.1 Funktionen

Eine Funktion f ist eine Vorschrift, die jedem Element einer Menge D genau ein Element der Menge W zuordnet. Die Menge D heißt Definitionsbereich, die Menge W Wertebereich:

$$\begin{aligned} f : D &\longrightarrow W \\ x &\mapsto f(x) \end{aligned} \tag{A.1}$$

x heißt unabhängige Variable oder Argument. Eine Funktion wird auch Abbildung genannt. Die Menge aller Punkte $G := \{(x, f(x)) | x \in D\}$ der Funktion (A.1) heißt Graph der Funktion. Ein Beispiel für eine Funktion ist

$$\begin{aligned} f : [0,5] &\longrightarrow \mathbb{R} \\ x &\to x^2 \end{aligned} \tag{A.2}$$

Das Argument x ist anschaulich gesehen ein Platzhalter und ist beliebig durch einen anderen Buchstaben austauschbar. Durch

$$\begin{aligned} f : [0,5] &\longrightarrow \mathbb{R} \\ t &\to t^2 \end{aligned}$$

ist dieselbe Funktion wie in (A.2) definiert.

In der Schule schreibt man statt f(x) häufig einfach y. Wenn klar ist, welches in der Vorschrift die unabhängige Variable ist, so ist das ok:

$$y = x^2 \tag{A.3}$$

Aber was ist, wenn die Vorschrift $y = a \cdot b^2$ geben ist. Man kann so nicht erkennen, ob a, b oder sogar beide als Argumente dienen sollen. Möglicherweise ist a ein

Parameter, der einen festen Wert hat, und b das Argument oder umgekehrt. Daher wird das Argument in der Vorschrift mit angegeben:

$$f(b) = a \cdot b^2 \quad \text{oder auch} \quad y(b) = a \cdot b^2$$

Ist nun $a = 1$, so haben wie dieselbe Vorschrift wie in (A.3).

Nun gibt es einige Konventionen, die aber nicht strikt eingehalten werden. So weiß man im Allgemeinen, dass bei $y = mx + b$ eine Geradengleichung gemeint ist, mit dem Argument x, der Steigung m und dem Abzissenwert b. Meistens ist, wenn nicht anders angegeben x die unabhängige Variable. In der Physik gibt es häufig Funktionen, in denen t als Argument auftritt. In den meisten Fällen ist damit die Zeit gemeint. Bildet man die Ableitung einer Funktion, so ist mit der Schreibweise y' die Ableitung nach dem (einzigen) Argument gemeint, dies ist meistens x. Insbesondere beschreibt $f'(x)$ die Ableitung der Funktion f nach x. Will man dies besonders hervorheben so schreibt man $\frac{d}{dx}f(x)$. In der Physik wird häufig die Ableitung nach der Zeit, die sogenannte Zeitableitung, mit einem Punkt dargestellt:

$$\dot{f}(t) := \frac{d}{dt}f(t)$$

A.1.1 Folgen

Ist der Definitionsbereich einer Abbildung $\mathbb{N}$, so nennt man die Abbildung eine Folge und schreibt

$$\begin{aligned} a : \mathbb{N} &\longrightarrow W \\ n &\mapsto a_n \end{aligned}$$

oder kurz $(a_n)_{n\in\mathbb{N}}$. In der Modellierung werden für diskrete Modell häufig Folgen mit (x_n) oder (y_n) bezeichnet. Der Index n bezeichnet dann einen Zeitschritt. Man bestimmt dann den Wert zu einem Zeitpunkt n+1 aus dem Wert zum Zeitpunkt n mit einer Funktion f:

$$x_{n+1} = f(x_n)$$

Hierbei wird dann der Anfangswert x_0 vorgegeben. Das Modell kann man genauso durch

$$x_n = f(x_{n-1})$$

beschreiben. Auch hier wird der nachfolgende Wert aus dem vorhergehenden mittels f bestimmt.

A.2 Potenzfunktion

Funktionen der Form

$$y(x) = c \cdot x^n \tag{A.4}$$

heißen Potenzfunktionen, wobei hier im Gegensatz zu Polynomen auch negative und reelle Exponenten zugelassen sind. Kann man natürliche Systeme mit einer Funktion entsprechend Gleichung A.4 beschreiben, so sagt man, dass sie dem Potenzgesetz (Englisch: power law) folgen. In doppelt logarithmischer Darstellung (siehe Abschnitt A.4.4) werden Potenzgesetze durch eine Gerade dargestellt. Es

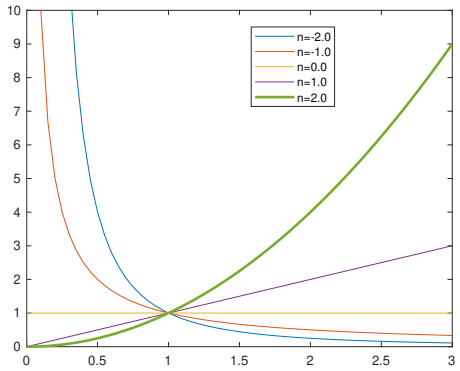


Abbildung A.1: Graphen der Potenzfunktion $y = x^n$ für positive Argumente für verschiedene Werte von n. Die Normalparabel (n=2) ist fett dargestellt.

fällt auf, dass nur positive Argumente x dargestellt sind. Das kommt daher, dass allgemeine reelle Potenzen nur für positive Basen im Reellen existieren, z.B. ist

$$x^{\frac{1}{2}} = \sqrt{x}$$

nur für nicht negative x im Reellen definiert.

A.3 Polynome

Abbildungen der Form $p(x) = a_m \cdot x^m + \cdots + a_1 \cdot x + a_0$, $m \in \mathbb{N}$ heißen Polynome. Berühmtestes Beispiel ist die Normalparabel $p(x) = x^2$ mit $m = 2$, $a_2 = 1$ und $a_1 = a_0 = 0$.

A.3.1 Quadratische Gleichungen

Eine Gleichung der Form

$$x^2 + px + q = 0 \tag{A.5}$$

nennt man quadratische Gleichung. Es wird der Wert x gesucht, für den das Polynom den Wert Null annimmt. Die quadratische Gleichung hat die Lösungen

$$x_{1,2} = -\frac{p}{2} \pm \sqrt{\frac{p^2}{4} - q} \tag{A.6}$$

Diese Lösungen müssen im Reellen nicht existieren, sie können komplex sein (Abschnitt A.8).

Eine quadratische Gleichung kann auch mal anders aussehen, z.B.

$$ax^2 + bx + c = 0 \qquad \text{oder auch} \qquad x^2 - 3x = 5$$

dann wird sie in die Form nach A.5 umgeformt[1].

A.4 Exponentialfunktion und Logarithmus

Die Exponentialfunktion begegnet uns nahezu überall. Meistens tritt sie in der mathematischen Modellierung als Funktion der Zeit bei der Beschreibung von Wachstums- ($a > 0$) und Zerfallsprozessen ($a < 0$) auf:

$$y(t) = y_0 \cdot e^{a \cdot t} \tag{A.8}$$

[1] Man kann natürlich auch die Lösung zu $ax^2 + bx + c = 0$, $a \neq 0$ bestimmen, sie lautet:

$$x_{1,2} = -\frac{b}{2a} \pm \frac{\sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \tag{A.7}$$

Die Lösungsformeln ergeben sich durch quadratische Ergänzung.

Die Exponentialfunktion wird entweder als Potenz von e (Eulerzahl) geschrieben oder mit exp bezeichnet:

$$y(x) = e^x \equiv \exp(x)$$

Sie ist die einzige Funktion, die mit ihrer Ableitung übereinstimmt: $\frac{d}{dx}e^x = e^x$. Sie erfüllt als einzige das Additionstheorem $e^{a+b} = e^a \cdot e^b$. Die Exponentialfunktion im reellen ist monoton steigend, erst flach, dann immer steiler. Eine wachsende Exponentialfunktion wächst letztlich stets schneller als jede Potenzfunktion x^n. Das ist schwer zu glauben, wenn man etwa 1.1^x und x^{10} für kleine und mittlere Werte x vergleicht. Und doch überholt der erste Ausdruck den zweiten irgendwann!

Die Umkehrfunktion der Exponentialfunktion ist der **natürliche Logarithmus**, der Logarithmus zur Basis e. Der natürliche Logarithmus wird mit log oder ln bezeichnet: $\log \equiv \ln \equiv \log_e$. Es ist manchmal etwas verwirrend, da sich die Notationen von Lehrbuch zu Lehrbuch unterscheiden. In einigen Büchern ist mit log der dekadische Logarithmus und mit ln der natürliche gemeint. In anderen wird der natürliche mit log und der dekadische mit $\log_{10}$ bezeichnet. Das ist aber meistens vorher definiert worden. In vielen Programmiersprachen berechnet log den natürlichen Logarithmus und log10 den dekadischen. Im folgenden wird der natürliche Logarithmus mit ln bezeichnet, der dekadische mit $\log_{10}$ und ein Logarithmus zu einer beliebigen Basis mit log.

$$\ln(\exp(x)) = x \quad \text{und} \quad \exp(\ln(y)) = y \quad \text{für} \quad y > 0$$

Der Logarithmus ist nur für positive Zahlen definiert. Logarithmen zu verschiedenen Basen b unterscheiden sich nur durch einen Faktor:

$$\log_b y = \frac{\log y}{\log b} \quad \text{für alle positiven y}$$

Manchmal wird statt $\log_b y$ auch ${}^b\log y$ geschrieben.

Der dekadische Logarithmus $\log_{10}$, also der Logarithmus zur Basis 10, ist um den Faktor $\ln 10 = 2.3026\cdots$ kleiner als der natürliche Logarithmus.

Einige Rechenregeln

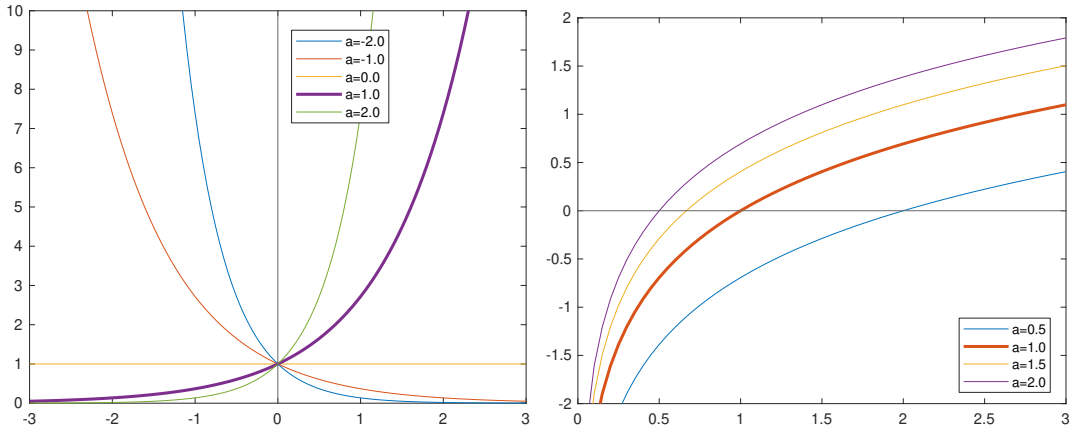


Abbildung A.2: Exponentialfunktion $f(x) = e^{a \cdot x}$ (links) und Logarithmusfunktion $f(x) = \log_{10}(a \cdot x)$ (rechts, nur positive Argumente) für verschiedene Werte von a.

$$e^0 = 1 \qquad \log 1 = 0$$

$$e^{a+b} = e^a \cdot e^b \qquad \log(a \cdot b) = \log a + \log b$$

$$e^{a-b} = \frac{e^a}{e^b} \qquad \log \frac{a}{b} = \log a - \log b$$

$$e^{-b} = \frac{1}{e^b} \qquad \log b^{-1} = -\log b$$

$$e^{a \cdot b} = (e^a)^b \qquad \log(a^n) = n \cdot \log a$$

Überraschend ist die Behauptung: „Alle Exponentialfunktionen sehen gleich aus“. Wenn man bei einer Exponentialfunktion die Basis ändert, oder einen Vorfaktor anbringt oder einen Faktor in den Exponenten schreibt, oder alles zugleich tut, so ändert das nichts Wesentliches am Graphen der Funktion. Alle diese Modifikationen kann man durch Skalierung der Achsen auffangen (A.9).

$$y = a \cdot b^{c \cdot x} \quad \Leftrightarrow \quad Y = e^X \text{ mit } Y = \frac{y}{a}, \quad X = (c \cdot \ln b) \cdot x \tag{A.9}$$

Die Faktoren dürfen nicht 0 sein und die Basis muss positiv sein. Bei $a < 0$ wird vertikal gespiegelt, bei $c < 0$ oder $0 < b < 1$ wird horizontal gespiegelt. Sogar eine Verschiebung entlang der x-Achse ist nichts als eine vertikale Stauchung bzw. Streckung:

$$e^{a \cdot (x-c)} = e^{-a \cdot c} \cdot e^{a \cdot x}$$

Gleichung A.9 zeigt, dass man mit einer anderen Basis keine anderen Graphen erzeugen kann. Deshalb wählt man die bequemste Basis, und das ist meistens e

wegen $\frac{d}{dx}e^x = e^x$. Bei anderen Basen entsteht beim Differenzieren ein Faktor $\neq 1$. Ein Basiswechsel ist sehr einfach:

$$2^{bt} = e^{at} = 10^{ct} \text{ für alle t, wenn } b \cdot \ln 2 = a = c \cdot \ln 10 \tag{A.10}$$

A.4.1 Beispiel pH-Wert

Der pH-Wert ist ein Maß für den sauren oder basischen Charakter einer wässrigen Lösung. Er ist definiert als negativer dekadischer Logarithmus der Wasserstoffionen-Aktivität. Bei verdünnten Lösungen ist der pH-Wert in etwa der negative dekadische Logarithmus des Zahlenwertes der Stoffmengenkonzentration c der H_3O^+-Ionen in Mol pro Liter

$$pH = -\log_{10}\left(c(H_3O^+)/c^o\right) \qquad c^o = 1\text{Mol pro Liter}$$

Die Division durch c^o ist formal notwendig, da das Argument des Logarithmus dimensionslos sein muss. Auch der pH-Wert ist eine dimensionslose Größe.

A.4.2 Beispiel Radiokarbonmethode

Die Radiokarbonmethode oder auch Radiokarbondatierung oder kurz ^{14}C-Methode ist ein Verfahren zur Bestimmung des Alters von totem organischen Material. Das Kohlenstoffisotop ^{14}C wird in der oberen Atmosphäre (ATM) ständig neu gebildet und in organisches Material (OM) eingebunden. Es zerfällt mit Halbwertszeit von ca. $T_H = 5730$ Jahren zu ^{14}N. Das Verhältnis V_{OM} von ^{14}C zu ^{12}C in totem organischen Material nimmt also mit der Zeit ab. Für das Verhältnis gilt

$$V_{OM}(t) = V_{ATM} \cdot e^{-\lambda \cdot t}$$

wobei λ die Zerfallsrate in 1/Jahr (oder kurz 1 per annum, 1/a) ist, V_{ATM} das Verhältnis in der Atmosphäre und t die verstrichene Zeit seit "Einbau" des Kohlenstoffs in das organische Material. Die Zerfallsrate kann aus der Halbwertszeit berechnet werden. Setzt man für das atmosphärische Verhältnis 1 an, so muss nach der Halbwertszeit per Definition der Wert auf 1/2 gesunken sein:

$$\frac{1}{2} = e^{-\lambda \cdot T_H} \quad \Leftrightarrow \quad \ln 1 - \ln 2 = -\lambda \cdot T_H$$

Für die Zerfallsrate gilt also

$$\lambda = \frac{\ln 2}{T_H} \approx \frac{0.69}{5730} = 1.21 \cdot 10^{-4} \frac{1}{a}$$

A.4.3 Einfach-logarithmische Darstellung

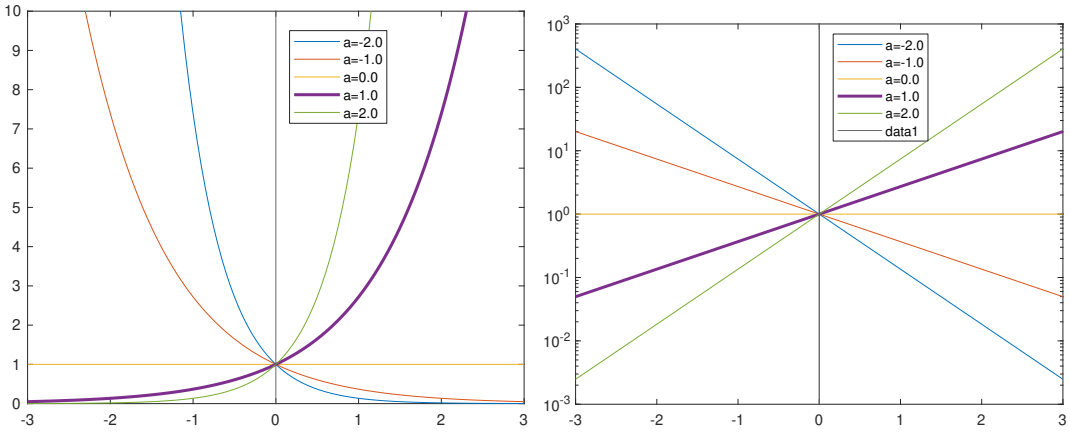


Abbildung A.3: Exponentialfunktion $f(x) = e^{a \cdot x}$ in „normaler" Darstellung (links, siehe auch A.2) und in einfach logarithmischer Darstellung (rechts) für verschiedene Werte von a.

Das "Problem", dass Exponentialfunktionen schnell viele Größenordnungen überspannen und sich „linear" nicht gut darstellen lassen, kann man durch logarithmische Darstellung überwinden. Logarithmiert wird nur der Funktionswert und nicht das Argument, weshalb man von „einfach-logarithmischer" Darstellung spricht. Durch diese Koordinatentransformation entsteht aus Gleichung A.8 eine Geradengleichung A.11

$$\begin{aligned} y = b \cdot e^{a \cdot t} \quad &\Rightarrow \quad \ln y = \ln b + a \cdot t \\ &\Rightarrow \quad Y = B + a \cdot t \end{aligned} \tag{A.11}$$

In der zweiten Gleichung sind die Logarithmen durch Großbuchstaben ersetzt, um die Form der Geradengleichung hervorzuheben. Die Steigung der Geraden ist der Faktor a, der y-Achsenabschnitt ist B. Zum Vergleich sollte man noch einmal die doppelt logarithmische Darstellung der Potenzfunktionen in (A.12) ansehen.

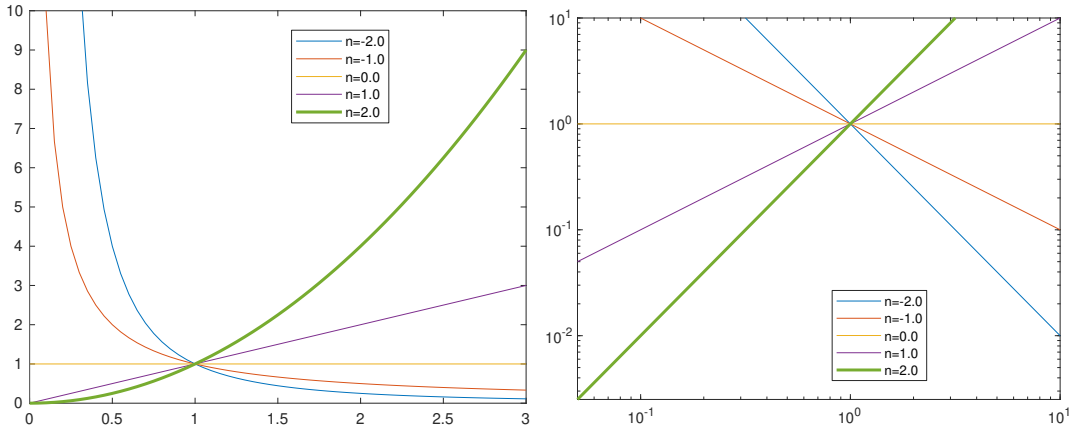


Abbildung A.4: Potenzfunktionen $f(x) = x^n$ für positive Argumente in „normaler“ Darstellung (links, siehe auch A.1) und in doppelt logarithmischer Darstellung (rechts) für verschiedene Werte von n. Die Normalparabel (n=2) ist fett dargestellt.

A.4.4 Doppelt-logarithmische Darstellung

In der „doppelt-logarithmischen“ Darstellung erscheinen alle Potenzfunktionen als Gerade mit der Steigung n:

$$\begin{aligned} y = c \cdot x^n \quad &\Rightarrow \quad \log y = n \cdot \log x + \log c \\ &\Rightarrow \quad Y = n \cdot X + C \end{aligned} \tag{A.12}$$

Hier stehen in der zweiten Zeile von (A.12) die Großbuchstaben für die Logarithmen. So erkennt man die Geradengleichung mit der Steigung n und dem y-Achsenabschnitt C. Zum Vergleich siehe noch einmal die einfach logarithmische Darstellung in (A.11).

A.5 Einheiten sicher umrechnen

Der korrekte Umgang mit Einheiten ist unbedingt erforderlich, wenn nicht nur qualitative Aussagen sondern auch quantitative Angaben benötigt werden. Dies erscheint zunächst einfacher als es in Wirklichkeit ist:

- Die NASA-Sonde Mars Climate Orbiter (MCO) ging 1999 aufgrund eines Einheitenfehlers im Navigationssystem verloren. "Während die NASA den Impuls p im Internationalen Einheitensystem (SI) mit der metrischen Einheit Ns berechnet hatte, wurde die Navigationssoftware des MCO vom Hersteller Lockheed Martin im imperialen System mit der Impulseinheit lbfs ausgelegt, die um den Faktor 4.45 geringere Werte liefert. "[2]
- Beim Bau der Hochrheinbrücke zwischen Deutschland und der Schweiz (2003-2004) wurde der unterschiedliche Höhenbezug von 27 cm zwar berücksichtigt (Deutschland: Meter über NN, Schweiz: Meter über RPN), durch einen Vorzeichenfehler wurde allerdings ein Höhenunterschied von 54 cm gebaut. [3]

Neben der korrekten Wahl der Einheit ist auch die korrekte Umrechnung entscheidend. Um Einheiten sicher umzurechnen und die Rechnung rückverfolgbar zu machen, sollte folgendes befolgt werden:

- IMMER schriftlich arbeiten
- viele Zwischenschritte aufschreiben
- alte Einheit in der Formel durch neue ersetzen, z.B. 1 g C durch $\frac{1}{12}$ mol C
- geschickt mit 1 multiplizieren, z.B. mit $\frac{1\,\mathrm{h}}{3600\,\mathrm{s}}$
- Exponentialschreibweise für Zehnerpotenzen verwenden, z.B. $1\,\mathrm{mg} = 10^{-3}\,\mathrm{g}$
- Einheiten und Zehnerpotenzen kürzen
- Zahlenwerte erst ganz zum Schluss verrechnen und runden

A.5.1 Ein nicht ganz ernst gemeintes Beispiel

Wie schnell ist ein Auto, das 60 km/h fährt, in Ångström pro Tag?

[2] Quelle: https://de.wikipedia.org/wiki/Mars_Climate_Orbiter
[3] Quelle: https://de.wikipedia.org/wiki/Hochrheinbrücke

Ångström ist eine nicht mehr zulässige, aber immer noch gebräuchliche Längeneinheit: 1 Å=10^{-10}m.

$$60\,\frac{\text{km}}{\text{h}} = 60\,\frac{10^3\text{m}}{\text{h}} = 60\,\frac{10^3\cdot 10^{10}\text{Å}}{\text{h}} = 60\cdot 10^{13}\,\frac{\text{Å}}{\frac{1}{24}\text{d}}$$

$$= 24\cdot 60\cdot 10^{13}\,\frac{\text{Å}}{\text{d}} = 24\cdot 6\cdot 10^{14}\,\frac{\text{Å}}{\text{d}} = 144\cdot 10^{14}\,\frac{\text{Å}}{\text{d}}$$

A.5.2 Ein Beispiel aus dem Alltag der Umweltwissenschaften

Wie viel Gramm CO_2 sind in einem Kubikmeter Luft mit einem CO_2-Gehalt von 400 ppm?

Hierzu muss zunächst die Einheit ppm (parts per million) geklärt werden. Da es sich um den CO_2 Gehalt in Luft handelt, bezieht sich ppm auf ein Gas. Wenn nichts weiter angeben ist, nehmen wir Normalbedingungen an, so dass 1 Mol Luft ein Volumen von $22.4\text{L} = 22.4\cdot 10^{-3}\text{m}^3$ annimmt. Der Wert 400 ppm bedeuten hier also 400 Mol CO_2 auf 10^6 Mol Luft. Die Umrechnung von Mol CO_2 auf Gramm CO_2 ergibt sich aus dem Molekulargewicht von CO_2:

$$1\,\text{Mol}\,CO_2 = 12\,\text{g}\,C + 2\cdot 16\,\text{g}\,O_2 = 44\text{g}\,CO_2$$

Durch erweitern mit $44\text{g}\,CO_2/\text{Mol}CO_2$ erhält man

$$400\,\text{ppm}\,CO_2 = \frac{400\,\text{Mol}\,CO_2}{10^6\,\text{Mol Luft}} = \frac{400\,\text{Mol}\,CO_2}{10^6\,\text{Mol Luft}}\cdot\frac{44\,\text{g}\,CO_2}{\text{Mol}\,CO_2}$$

Kürzen von Mol CO_2 ergibt

$$= \frac{400\cdot 44\text{g}\,CO_2}{10^6\text{Mol Luft}}$$

Umrechnung von Mol Luft in m^3 ergibt

$$= \frac{400\cdot 44\text{g}\,CO_2}{10^6\cdot 22.4\cdot 10^{-3}\text{m}^3}$$

Sortieren und Kürzen ergibt

$$= \frac{400\cdot 44}{22.4\cdot 10^3}\,\frac{\text{g}\,CO_2}{\text{m}^3}$$

Hat man nun keinen Taschenrechner zur Hand geht es überschlägig weiter, falls

dies ausreicht

$$\approx \frac{400 \cdot 44}{22 \cdot 10^3} \frac{\mathrm{g\,CO_2}}{\mathrm{m^3}} = \frac{400 \cdot 2}{10^3} \frac{\mathrm{g\,CO_2}}{\mathrm{m^3}} = 0.8 \frac{\mathrm{g\,CO_2}}{\mathrm{m^3}}$$

Somit enthält ein Kubikmeter Luft mit einem CO_2-Gehalt von 400 ppm in etwa $0.8\,\mathrm{g\,CO_2}$.

A.6 Periodische Funktionen – Winkelfunktionen

Eine Funktion heißt periodisch mit der Periodenlänge p, wenn für alle x $\in$ D f(x+p) = f(x) gilt. Beispiele für periodische Funktionen sind die Winkelfunktionen (trigonometrische Funktionen) Sinus und Kosinus.

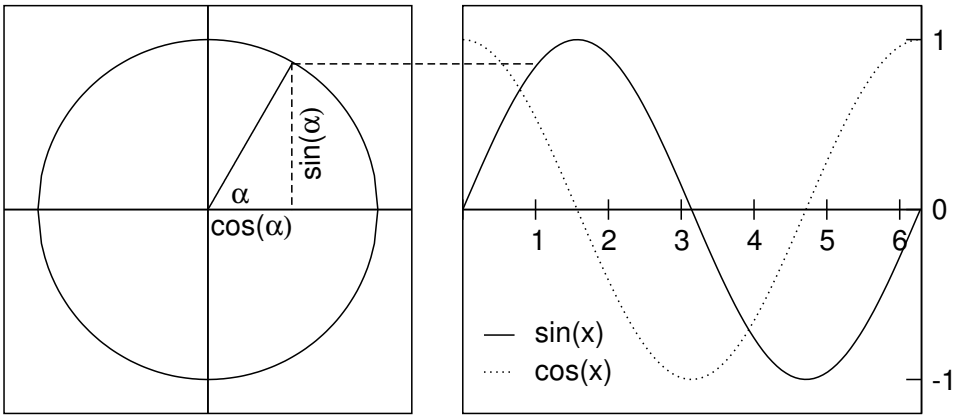


Abbildung A.5: Der Einheitskreis und die Winkelfunktionen

Betrachtet man im Einheitskreis das in Abbildung A.5 dargestellte Dreieck, so ist die Länge der Hypotenuse 1. Der resultierende Abschnitt auf der x-Achse ist also der Kosinus des Winkels α, der Abschnitt auf der y-Achse ist der Sinus.

Die Steigung der Geraden beträgt $\frac{\sin(\alpha)}{\cos(\alpha)} = \tan(\alpha)$.

Das Argument der Winkelfunktionen kann sowohl in Grad als auch in Bogenmaß (Radiant) angegeben werden. Ein Vollkreis von 360 ° entspricht dabei $2\,\pi$ rad.

Wichtige Werte der Sinus- und Kosinusfunktion:

Grad	0	30	45	60	90	180	270	360
Bogenmaß	0	$\pi/6$	$\pi/4$	$\pi/3$	$\pi/2$	π	$3\pi/2$	2π
Sinus	0	1/2	$\sqrt{2}/2$	$\sqrt{3}/2$	1	0	-1	0
Kosinus	1	$\sqrt{3}/2$	$\sqrt{2}/2$	1/2	0	-1	0	1

Eigenschaften der Sinus- und Kosinusfunktion:

Periodenlänge 2π	$\sin(x) = \sin(x + 2\pi)$ $\cos(x) = \cos(x + 2\pi)$
Sinus ist symmetrisch zum Ursprung	$\sin(-x) = -\sin(x)$
Kosinus ist symmetrisch zur y-Achse	$\cos(x) = \cos(-x)$
sind gegeneinander um $\pi/2$ verschoben	$\cos(x) = \sin(x + \pi/2)$
Schnittpunkte bei $x = \pi/4 + n \cdot \pi, n \in \mathbb{Z}$	$\sin(\pi/4) = \cos(\pi/4)$

Bemerkung: Berechnet man Sinus und Kosinus mit dem Taschenrechner, so muss man aufpassen, dass die Einstellung stimmt. Ist der Taschenrechner auf Gradmaß (DEG) eingestellt, muss man den Winkel in Grad eingeben, steht er auf Bogenmaß (RAD) so muss er in Bogenmaß angegeben werden.

A.6.1 Additionstheoreme

Für Sinus und Kosinus gelten folgende Additionstheoreme

$$\sin(x \pm y) = \sin x \cdot \cos y \pm \cos x \cdot \sin y$$

$$\cos(x \pm y) = \cos x \cdot \cos y \mp \sin x \cdot \sin y$$

A.7 Monod-Funktion

Wir betrachten die Funktion

$$f(B) = b \cdot \frac{B}{B + M} \tag{A.13}$$

Diese Funktion wird auch **Monod-Funktion**, **Michaelis-Menten-Kinetik** oder

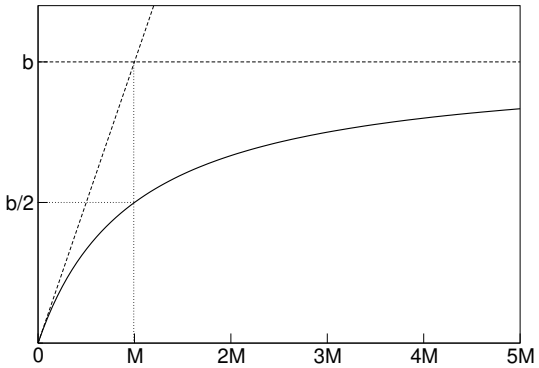


Abbildung A.6: Graph der Monod-Funktion mit der Halbsättigungskonstanten M und dem Grenzwert b.

in der Ökologie auch **Holling Typ II** genannt und in vielen Modellen verwendet,

z.B.

- Algenwachstum als Funktion der Nährstoffkonzentration (Monod-Modell)
- Alkoholabbau als Funktion der Blutalkoholkonzentration
- Aktenbearbeitung als Funktion der Aktenmenge

Eigenschaften der Monod-Funktion:

- f geht für B $\rightarrow \infty$ gegen b
- nimmt bei M die Hälfte des Maximalwerts an (f(M)=b/2). M heißt deshalb auch Halbsättigungskonstante
- die Tangente im Ursprung schneidet den Grenzwert b bei M
- die Annäherung an den Grenzwert ist sehr langsam

A.8 Komplexe Zahlen *

Die Gleichung

$$x^2 = -1 \tag{A.14}$$

hat im reellen Zahlenraum keine Lösung. Mit

$$i = \sqrt{-1} \tag{A.15}$$

wird eine "imaginäre Zahl" Zahl definiert, für die $i^2 = -1$ gilt. Eine komplexe Zahl ist durch

$$z = a + ib \tag{A.16}$$

gegeben, wobei a und b reelle Zahlen sind. a heißt Realteil und b Imaginärteil von z. Es gelten die üblichen Rechenregeln. Seien $z = a + ib$ und $y = c + id$, dann ist

$$z + y = a + c + i(b + d) \tag{A.17}$$

$$z \cdot y = (a + ib) \cdot (c + id) = ac + aid + ibc + iibd = ac - bd + i(ad + bc) \tag{A.18}$$

$$e^z = e^{a+ib} = e^a \cdot e^{ib} \tag{A.19}$$

A.8.1 Komplexe Exponentialfunktion

Lässt man bei der Exponentialfunktion komplexe Zahlen als Argumente zu, so wird sie noch interessanter. Entlang der imaginären Achse ist die Exponentialfunktion periodisch und erzeugt die Sinus- und Cosinus-Funktion (A.20).

$$\exp(ix) = \cos(x) + i \cdot \sin(x) \quad \textbf{Eulersche Formel} \tag{A.20}$$

Setzt man in der Eulerschen Formel $x = \pi$, so ergibt sich eine erstaunliche Beziehung, in der die wichtigsten mathematischen Zahlen 1, e, π und die imaginäre Einheit i verknüpft sind: $e^{i\,\pi} = -1$.

A.9 Modulo-Funktion *

Modulo bestimmt zu dem natürlichen Zahlenpaar (a,n) den Rest der ganzzahligen Division a durch n:

$$a \mod n = a - \left[\frac{a}{n}\right] \cdot n \tag{A.21}$$

Hierbei ist $[\cdot]$ die sogenannte **Gauß-Klammer**, sie bestimmt den ganzzahligen Anteil der Division $\frac{a}{n}$.

Es gibt Erweiterungen der Modulo-Funktion auf negative Zahlen. Die Implementierung ist in verschiedenen Programmiersprachen nicht einheitlich!

A.10 Differentialrechnung (Ableitungen)

Es sei eine Funktion f(x) gegeben. Die Ableitung der Funktion f an einer beliebigen Stelle gibt die Steigung der Funktion an dieser Stelle an. Die Ableitung wird mit f' bezeichnet, wenn klar ist, wonach abgeleitet wird (hier nach x). Wird nach der Zeit abgeleitet, wird anstelle f' auch häufig $\dot{f}$ geschrieben. Will man deutlich machen, wonach abgeleitet wird, schreibt man anstelle von f'(x)

$$f'(x) \equiv \frac{d}{dx}f(x) \equiv \frac{df(x)}{dx} \qquad \text{sprich: df(x) nach dx}$$

Hängt eine Funktion von mehreren Variablen ab, z.B. $f(x, y)$, und leitet man nur nach einer ab, z.B. y, so handelt es sich um eine partielle Ableitung

$$\frac{\partial f(x, y)}{\partial y} \qquad \text{sprich: df(x,y) nach dy}$$

Achtung: es handelt sich hier um "runde" d's!

Zu den Voraussetzungen für die Differenzierbarkeit sei auf die einschlägige Literatur verwiesen.

Es gelten folgende Regeln:
Seien f, g in t_0 differenzierbar, dann gilt:

1. Die Summe $f + g\colon t \mapsto f(t) + g(t)$ ist in t_0 differenzierbar:
   $[f + g]'(t_0) = f'(t_0) + g'(t_0)$
2. Für $c \in \mathbb{R}$ ist $cf\colon t \mapsto cf(t)$ in t_0 differenzierbar:
   $[cf]'(t_0) = cf'(t_0)$
3. Das Produkt $f \cdot g\colon t \mapsto f(t) \cdot g(t)$ ist in t_0 differenzierbar:
   $[f \cdot g]'(t_0) = f'(t_0) \cdot g(t_0) + f(t_0) \cdot g'(t_0)$ **Produktregel**
4. Der Quotient $\frac{f}{g}\colon t \mapsto \frac{f(t)}{g(t)}$ ist in t_0 mit $g(t_0) \neq 0$ differenzierbar:
   $\left[\frac{f}{g}\right]'(t_0) = \frac{f'(t_0) \cdot g(t_0) - f(t_0) \cdot g'(t_0)}{g(t_0)^2}$ **Quotientenregel**

Ableitungen einiger wichtiger Funktionen:

$$
\begin{aligned}
f(t) &= c, \quad c \in \mathbb{R} & f'(t) &= 0 \\
f(t) &= t^n, \quad n \in \mathbb{Z} & f'(t) &= n \cdot t^{n-1} \\
f(t) &= \cos(t) & f'(t) &= -\sin(t) \\
f(t) &= \sin(t) & f'(t) &= \cos(t) \\
f(t) &= \exp(t) & f'(t) &= \exp(t) \\
f(t) &= \ln(t) & f'(t) &= \frac{1}{t}
\end{aligned}
\tag{A.22}
$$

A.10.1 Kettenregel

Aus der Schule ist bekannt

$$f(g(x))' = f'(g(x)) \cdot g'(x)$$

Was bedeutet dies nun? f und g sind Funktionen, wobei f(g(x)) die Hintereinanderausführung der Funktionen f und g bedeutet. Die Funktion f wird hierbei auch äußere Funktion und g innere Funktion genannt.

$$f \circ g(x) = f(g(x))$$

Das heißt, dass die unabhängige Variable x zuerst mittels der Funktion g abgebildet wird und das Ergebnis dann mittels f abgebildet wird. Die Kettenregel gibt nun an, wie die Ableitung der verketteten Funktion $f \circ g$ zu bilden ist:

$$\frac{df(g(x))}{dx} = \frac{df(g(x))}{dg(x)} \cdot \frac{dg(x)}{dx}$$

Der erste Term auf der rechten Seite heißt äußere Ableitung, der zweite Term auf der rechten Seite innere Ableitung. Setzt man nun y=g(x), so sieht das Ganze schon einfacher aus:

$$\frac{df(g(x))}{dx} = \frac{df(y)}{dy} \cdot \frac{dg(x)}{dx} \quad \text{oder kurz} \quad \frac{df}{dx} = \frac{df}{dy} \cdot \frac{dy}{dx}$$

In der Modellierung ist wird die unabhängige Variable häufig mit t für die Zeit und die innere Funktion mit x bezeichnet:

$$f \circ x(t) = f(x(t))$$

Für die Ableitung gilt dann

$$\frac{df}{dt} = \frac{df}{dx} \cdot \frac{dx}{dt}$$

A.11 Integralrechnung

Mit der Integralrechnung ist es u.a. möglich, Flächeninhalte krummlinig begrenzter Flächenstücke zu bestimmen. (Abbildung A.7). Es sei f eine stetige Funktion, die

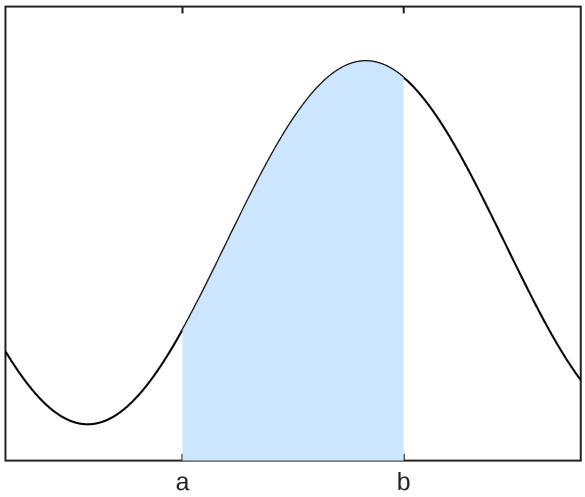


Abbildung A.7: Fläche unter einem Kurvenstück.

vorerst einmal überall größer null ist. Um den Flächeninhalt der Fläche unterhalb der Funktion auf dem Intervall [a,b] zu bestimmen, wird eine Funktion F bestimmt, deren Ableitung gerade f ist: $F' = f$. Die Funktion F heißt dann **Stammfunktion** von f und der Flächeninhalt ist durch

$$F(b) - F(a)$$

gegeben. Hierbei fällt auf, dass sich der Flächeninhalt nur aus dem Anfangs- und Endwert von F auf dem Intervall [a, b] ergibt. Man schreibt:

$$F(b) - F(a) = \int_a^b f(x)\,dx = F(x)\Big|_a^b \tag{A.23}$$

Der **Hauptsatz der Differential- und Integralrechnung** besagt also unter anderem: Ist f eine auf dem Intervall [a, b] stetige Funktion und ist F eine Stammfunktion von f (d.h. $F' = f$), so gilt

$$\int_a^b f(x)\,dx = F(x)\Big|_a^b = F(b) - F(a). \tag{A.24}$$

$\int_a^b f(x)\,dx$ ist das bestimmte Integral von f auf dem Intervall [a, b]. Das **bestimmte Integral** ist also eine Zahl. Im zweidimensionalen Koordinatensystem gibt diese Zahl eben die Fläche an, die zwischen dem Graphen der Funktion, der x-Achse und den begrenzenden Parallelen zur y-Achse liegt (das Intervall [a,b]). Ist die Funktion nun nicht mehr überall positiv, so zählen Flächenstücke unterhalb der x-Achse negativ. Ist f eine Funktion, so heißt eine Funktion F eine Stammfunktion von f, wenn die Ableitung von F gleich f ist: $F' = f$. Die Integration ist also in gewisser Weise die Umkehrung der Differentiation. Die Stammfunktion ist nicht eindeutig:

Ist F eine Stammfunktion von f, so gilt dies auch für $F + C$, $C \in \mathbb{R}$, d.h. es gibt eine ganze Schar von Stammfunktionen,die sich nur durch eine Konstante, die beim Ableiten wegfällt, unterscheiden.

Das **unbestimmte Integral** einer Funktion ordnet dieser Funktion eine Menge von Funktionen zu, die sogenannten **Stammfunktionen**. Diese zeichnen sich dadurch aus, dass ihre ersten Ableitungen mit der Funktion f, die integriert wurde, übereinstimmen. Das unbestimmte Integral wird $\int f(x)\,dx$ geschrieben, und es gilt

$$\int f(x)\,dx = F(x) + C, \quad C \in \mathbb{R}. \tag{A.25}$$

Es ist nicht unbedingt möglich, eine Stammfunktion explizit anzugeben. Für viele

Funktionen gibt es aber Tabellen bzw. ist die Berechnung mit z.B. Maple möglich.

A.11.1 Integrale (Stammfunktionen) einiger wichtiger Funktionen

$$
\begin{aligned}
f(t) &= 0, \quad c \in \mathbb{R} & F(t) &= C, C \in \mathbb{R} \\
f(t) &= t^n, \quad n \in \mathbb{Z} \setminus \{-1\} & F(t) &= \frac{1}{n+1} \cdot t^{n+1} \\
f(t) &= \cos(t) & F(t) &= \sin(t) \\
f(t) &= \sin(t) & F(t) &= -\cos(t) \\
f(t) &= \exp(t) & F(t) &= \exp(t) \\
f(t) &= \frac{1}{t} & F(t) &= \ln|t|
\end{aligned}
\tag{A.26}
$$

A.11.2 Rechenregeln

Seien f, g auf $[a, b]$ integrierbare Funktionen und $c \in \mathbb{R}$, so gilt

1. $\int_a^b f(x) + g(x)\,dx = \int_a^b f(x)\,dx + \int_a^b g(x)\,dx$
2. $\int_a^b c \cdot f(x)\,dx = c \cdot \int_a^b f(x)\,dx$
3. $\int_a^b f(x)\,dx = -\int_b^a f(x)\,dx$

A.11.3 Beispiel: Flächeninhalt unter der Normalparabel

Bestimmung des Flächeninhalts unter der Normalparabel $f(x) = x^2$ auf dem Intervall **[-2,2]**. Da die Normalparabel überall nicht-negative Werte hat, ergibt sich der Flächeninhalt durch

$$
\int_{-2}^{2} x^2\,dx = \frac{1}{3}x^3\Big|_{-2}^{2} = .\frac{1}{3}2^3 - \frac{1}{3}(-2)^3 = \frac{8}{3} - \frac{-8}{3} = \frac{16}{3} \tag{A.27}
$$

A.11.4 Beispiel: Flächeninhalts „unter“ dem Sinus

Bestimmung des Flächeninhalts „unter“ dem Sinus auf dem Intervall $[0, 2\pi]$.
Der zu bestimmende Flächeninhalt sei die graue Fläche in Abbildung A.8. Hier

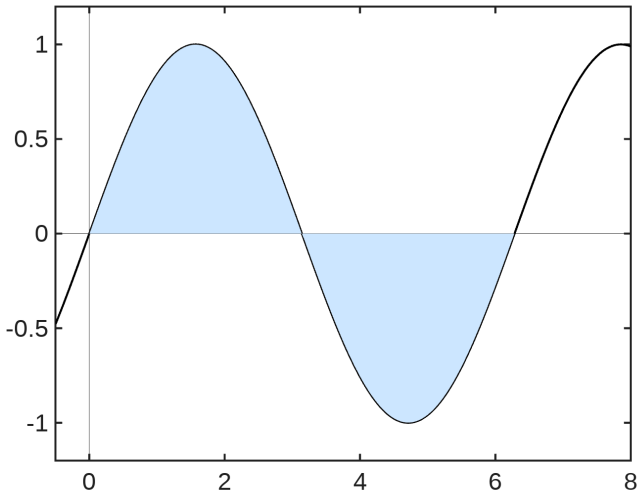


Abbildung A.8: Fläche „unter“ dem Sinus.

muss nun berücksichtigt werden, dass der Sinus auch negative Werte annimmt. Bestimmt man zuerst naiv einfach das bestimmte Integral so erhält man folgendes Ergebnis:

$$\int_0^{2\pi} \sin(x)\,dx = -\cos(x)\Big|_0^{2\pi} = -\cos(2\pi) - (-\cos(0)) = (-1) - (-1) = 0 \quad \text{(A.28)}$$

Berücksichtigt man, dass beim Integrieren Flächen unterhalb der x-Achse negativ gezählt werden, so ergibt sich die Fläche zu:

$$\int_0^{\pi} \sin(x)\,dx - \int_{\pi}^{2\pi} \sin(x)\,dx$$
$$= (-\cos(x)\Big|_0^{\pi}) - (-\cos(x)\Big|_{\pi}^{2\pi})$$
$$= (-\cos(\pi) - (-\cos(0)) - (-\cos(2\pi) - (-\cos(\pi))$$
$$= (1 - (-1)) - (-1 - 1) = 4$$

A.11.5 Herleitung der Flächenberechnung *

Die Approximation des Flächeninhalts unter einer Funktion f ist in Abbildung A.9 dargestellt. Es werden Stützstellen verwendet und die entstehenden einzelnen Rechtecke addiert. Nimmt man vereinfachend an, dass alle Streifen gleich breit sind, so

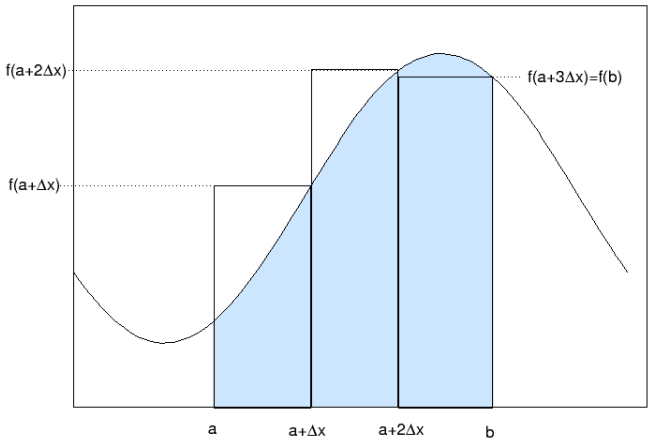


Abbildung A.9: Approximation der Fläche durch 3 Rechtecke.

gilt für die Streifenbreite

$$\Delta x = \frac{b - a}{n} , \tag{A.29}$$

wobei n die Anzahl der Streifen ist. Wird die Streifenbreite immer weiter reduziert, nähert sich der berechnete Wert immer mehr der tatsächlichen Fläche. Die approximierte Fläche beträgt bei n Streifen der Breite $\Delta x = \frac{b-a}{n}$

$$F_n = \sum_{k=1}^{n} f(a + k \cdot \Delta x) \cdot \Delta x \tag{A.30}$$

Nun sieht man auch, woher die Schreibweise $\int$ kommt. Sie leitet sich von $\sum$ ab. Das Δx geht beim Grenzübergang $n \to \infty$ in dx über.

$$\sum_{k=1}^{n} f(a + k \cdot \Delta x) \cdot \Delta x \to \int_{a}^{b} f(x)\, dx \tag{A.31}$$

Dass diese Überlegung mit der Berechnung des Integrals über ihre Stammfunktion konsistent ist, können wir hier nicht allgemein zeigen, sondern nur an einem Beispiel verifizieren. Wir wissen bereits, dass

$$\int_0^b x^2\,dx = \frac{1}{3}x^3\Big|_0^b = \frac{1}{3}b^3 \tag{A.32}$$

ist. Nun wollen wir dieses Ergebnis durch die Streifenmethode approximieren. Die Fläche bei n Streifen ist durch

$$F_n = \sum_{k=1}^{n}(0 + k\cdot\Delta x)^2\cdot\Delta x = \Delta x^3\sum_{k=1}^{n}k^2 \tag{A.33}$$

wobei $\Delta x = \frac{b-0}{n} = \frac{b}{n}$ gilt. Für die Summe auf der rechten Seite gibt es einen geschlossenen Ausdruck nämlich $\sum_{k=1}^{n} k^2 = \frac{1}{6}\cdot n\cdot(n+1)\cdot(2n+1)$. Damit ist

$$\begin{aligned}
F_n &= \Delta x^3\cdot\frac{1}{6}n\cdot(n+1)\cdot(2n+1) = \frac{b^3}{n^3}\cdot\frac{1}{6}\cdot n\cdot(n+1)\cdot(2n+1)\\
&= \frac{b^3}{6}\cdot\frac{(n+1)\cdot(2n+1)}{n^2}\\
&= \frac{b^3}{6}\cdot\left(\frac{2n^2+3n+1}{n^2}\right) = \frac{b^3}{6}\cdot\left(\frac{2n^2}{n^2}+\frac{3n}{n^2}+\frac{1}{n^2}\right) = \frac{b^3}{6}\cdot\left(2+\frac{3}{n}+\frac{1}{n^2}\right)\\
&\longrightarrow \frac{b^3}{3}
\end{aligned}$$

Somit liefert diese Überlegung dasselbe Ergebnis.

A.11.6 Substitutionsregel

Aus der Schule ist bekannt

$$\int_a^b f(\varphi(x))\cdot\varphi'(x)\,dx = \int_{\varphi(a)}^{\varphi(b)} f(y)\,dy$$

Was bedeutet dies nun? Die Substitutionsregel ist ein Hilfsmittel um komplizierte Funktionen in einfachere zu überführen, die sich dann leichter integrieren lassen. Diese Überführung heißt auch Substitution. Im obigen Beispiel wird $\varphi(x)$ durch y substituiert, also $y = \varphi(x)$ gesetzt. Letztlich ist die Substitutionsregel nichts anderes als die Kettenregel: Ist F eine Stammfunktion von f, so gilt

$$F(\varphi(b)) - F(\varphi(a)) = \int_{\varphi(a)}^{\varphi(b)} f(y)\,dy$$

Es gilt aber für die Verknüpfung der Funktionen $F \circ \varphi$ auch

$$F(\varphi(b)) - F(\varphi(a)) = \int_{a}^{b} [F(\varphi(x))]'\,dx$$

Die Ableitung von $F(\varphi(x))$ ist nach der Kettenregel

$$[dF(\varphi(x))]' = f(\varphi(x)) \cdot \varphi'(x)$$

somit gilt

$$\int_{a}^{b} f(\varphi(x)) \cdot \varphi'(x)\,dx = \int_{\varphi(a)}^{\varphi(b)} f(y)\,dy$$

Häufig findet man auch andere Notationen, z.B.

$$\int_{0}^{t} f(N)\,\dot{N}\,dt = \int_{N(0)}^{N(t)} f(N)\,dN$$

Streng genommen darf das so nicht, da Integrationsgrenze und unabhängige Variable verschiedene Bezeichner brauchen (hier heißen beide t), aber in der Praxis kommt es öfter mal vor.

A.11.7 Einfaches Beispiel zur Substitution

$$\int_a^b e^{x^2} \cdot 2x\,dx \quad \text{mit} \quad f(y) = e^y \quad \text{und} \quad \varphi(x) = x^2$$

$$\int_a^b e^{x^2} \cdot 2x\,dx = \int_{a^2}^{b^2} e^y\,dy = e^y\Big|_{a^2}^{b^2} = e^{b^2} - e^{a^2}$$

A.11.8 Beispiel zur Substitution, bei dem die Ableitung $\varphi'(x)$ nicht erkennbar ist

Meistens ist ein Problem nicht so schön, dass die Ableitung $\varphi'(x)$ explizit vorliegt. Dann muss man ein wenig tricksen:

$$\int_0^2 (3x+1)^2\,dx \quad \text{mit} \quad f(y) = y^2 \quad \text{und} \quad \varphi(x) = 3x+1$$

Es gilt $\frac{d\varphi(x)}{dx} = 3$ also $dx = \frac{1}{3}d\varphi(x)$. Einsetzen ergibt

$$\int_0^2 (3x+1)^2\,dx = \int_{\varphi(0)}^{\varphi(2)} \varphi(x)^2\,\frac{1}{3}d\varphi(x) = \int_{3\cdot 0+1}^{3\cdot 2+1} \frac{1}{3}y^2\,dy$$

$$= \frac{1}{3}\cdot\frac{1}{3}x^3\Big|_1^7 = \frac{1}{9}\cdot(7^3 - 1^3) = \frac{1}{9}\cdot(343-1) = 38$$

Man rechne das Ergebnis durch ausmultiplizieren des Integranden nach!

A.11.9 Partielle Integration

Die partielle Integration ergibt sich direkt aus der Produktregel für Ableitungen. Aus der Schule ist bekannt

$$[f(x)\cdot g(x)]' = f'(x)\cdot g(x) + f(x)\cdot g'(x)$$

Integration auf beiden Seiten ergibt

$$\int [f(x) \cdot g(x)]' \, dx = \int f'(x) \cdot g(x) \, dx + \int f(x) \cdot g'(x) \, dx$$

damit gilt

$$[f(x) \cdot g(x)] = \int f'(x) \cdot g(x) \, dx + \int f(x) \cdot g'(x) \, dx$$

durch Umstellen ergibt sich die Regel zur partiellen Integration

$$\int f(x) \cdot g'(x) \, dx = [f(x) \cdot g(x)] - \int f'(x) \cdot g(x) \, dx$$

Für das bestimmte Integral gilt dasselbe. Die Grenzen bleiben erhalten.

A.11.10 Beispiel zur partiellen Integration

$$\begin{aligned}
\int_1^2 \ln(x) \cdot x \, dx &= \left[\ln(x) \cdot \frac{1}{2} x^2 \right]_1^2 - \int_1^2 \frac{1}{x} \cdot \frac{1}{2} x^2 \, dx \\
&= \left[\ln(x) \cdot \frac{1}{2} x^2 \right]_1^2 - \left[\frac{1}{4} \cdot x^2 \right]_1^2 \\
&= 2 \cdot \ln(2) - \frac{1}{2} \ln(1) - \left[1 - \frac{1}{4} \right]
\end{aligned}$$

A.12 Taylorpolynom*

Mithilfe der sogenannten Taylorpolynome p_n kann man Funktionen unter bestimmten Voraussetzungen[4] in der Umgebung einer Stelle t approximieren. Sei y eine reellwertige Funktion von t, die mindestens $(n + 1)$-mal stetig differenzierbar ist, dann heißt

$$\begin{aligned}
y(t + \Delta t) = y(t) + y'(t) \cdot \Delta t + \frac{1}{2} \cdot y''(t) \cdot \Delta t^2 \\
+ \frac{1}{2 \cdot 3} \cdot y'''(t) \cdot \Delta t^3 + \cdots + \frac{1}{2 \cdot 3 \cdot \cdots \cdot n} \cdot y^{(n)}(t) \cdot \Delta t^n + R_{n+1}(t)
\end{aligned} \tag{A.34}$$

[4] Die Funktion muss oft genug stetig differenzierbar sein.

Taylorpolynom von y. Man sagt, man hat die Funktion y an der Stelle t bis zum n-ten Glied entwickelt ($y^{(n)}$ stehe hier für die n-te Ableitung) entwickelt. $R_{n+1}(t)$ ist das Restglied, dass heißt der Fehler, den man macht, wenn man nach n Schritten abbricht. Sind alle höheren Ableitungen null (alle höher als n), so ist der Fehler natürlich auch null. Ansonsten ist der Fehler proportional zu Δt^{n+1}. Das bedeutet, je höher man entwickelt, desto kleiner wird der Fehler. Und je weniger man sich von Entwicklungspunkt t entfernt, umso kleiner bleibt der Fehler. Das Restglied (nach Lagrange) hat die Form

$$R_{n+1}(t) = \frac{1}{(n+1)!} \cdot y^{(n+1)}(\xi) \cdot \Delta t^{n+1} \quad \xi \in [t, t+\Delta t] \tag{A.35}$$

Kompakter ausgedrückt lautet das Taylorpolynom

$$y(t+\Delta t) = p_n(t) + R_{n+1}(t) = \sum_{k=0}^{n} \frac{1}{k!} y^{(k)}(t) \cdot \Delta t^k + R_{n+1}(t)$$

wobei $y^{(k)}$ die k-te Ableitung bezeichnet und k! die Fakultät: $k! = 1 \cdot 2 \cdot \ldots \cdot k$. Wird anstelle der exakten Lösung y(t) das Taylorpolynom n-ten Grades p_n betrachtet, so ist der Abbruchfehler in jedem Schritt proportional zu Δt^{n+1}. R_n heißt Restglied. Die Approximation bis zum ersten Glied ist dann wieder die lineare Approximation, wie sie uns schon beim Euler-Verfahren begegnet ist:

$$y(t+\Delta t) \approx y(t) + y'(t) \cdot \Delta t$$

A.12.1 Beispiel: Taylorentwicklung von $y(t) = e^{r \cdot t}$

$$y(t+\Delta t) = e^{r \cdot t} + r \cdot e^{r \cdot t} \cdot \Delta t + \frac{1}{2} \cdot r^2 \cdot e^{r \cdot t} \cdot \Delta t^2 + \frac{1}{6} \cdot r^3 \cdot e^{r \cdot t} \cdot \Delta t^3 + \ldots$$

Die Entwicklung an $t = 0$ ergibt

$$y(\Delta t) = 1 + r \cdot \Delta t + \frac{1}{2} \cdot r^2 \cdot \Delta t^2 + \frac{1}{6} \cdot r^3 \cdot \Delta t^3 + \ldots = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(r \cdot \Delta t)^k}{k!}$$

A.13 Nullstellenbestimmung mit dem Newton-Verfahren

Die näherungsweise Bestimmung der Nullstelle einer Funktion geht mit dem Newton-Verfahren. Die grundlegende Idee dieses Verfahrens ist, die Funktion an einem Startwert durch ihre Tangente zu ersetzen und deren Nullstelle zu bestimmen. Die so ermittelte Nullstelle (der Tangente) dient als neuer Startwert usw. Diese Iteration erfolgt, bis eine gewünschte Genauigkeit erreicht ist. Man gibt also einen Startstelle x_0 und eine Genauigkeit $G > 0$ vor und berechnet

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \qquad n = 0, ...$$

bis $|x_n| < G$ gilt.

B Freier Fall und Wurfparabel*

B.1 Der freie Fall

Will man beschreiben, in welcher Höhe H sich eine fallende Kugel zur Zeit T befindet, wenn sie zur Zeit $t_0 = 0$ in der Höhe H_0 losgelassen wird, so wird dies durch das Fallgesetz beschrieben:

Die Geschwindigkeit v eines fallenden Körpers ist proportional zur Fallzeit t mit der Proportionalitätskonstanten g (bei Vernachlässigung der Reibung).

Wenn wir davon ausgehen, dass die Höhe über dem Erdboden positiv angegeben wird und die Geschwindigkeit nach unten wirkt, erhält man den funktionalen Zusammenhang

$$v(t) = -g \cdot t$$

mit der Gravitationskonstanten $g \approx 9.81\,m/s^2$.

Die Momentangeschwindigkeit v ist die zeitliche Ableitung des Weges s, also

$$v(t) = \frac{ds(t)}{dt}$$

Daraus ergibt sich für den Weg

$$s(t) = s(t_0) + \int_{t_0=0}^{t} v(x)\,dx = s_0 - \int_0^t g \cdot x\,dx = s_0 - \frac{1}{2}g \cdot x^2|_0^t = s_0 - \frac{1}{2}g \cdot t^2$$

B.2 Die Wurfparabel

Ein Fußball werde vom Boden aus mit einer vorgegebenen Anfangsgeschwindigkeit unter einem vorgegebenen Winkel geschossen. Wie weit fliegt der Ball, bis er zum erstem Mal wieder auf dem Boden aufkommt und wie hoch kommt er, wenn wir die Reibung vernachlässigen?

Gegeben sei also der Winkel α, unter dem der Ball abgeschossen wird, und die Geschwindigkeit v zur Zeit $t_0 := 0$. Zunächst muss die Anfangsgeschwindigkeit v

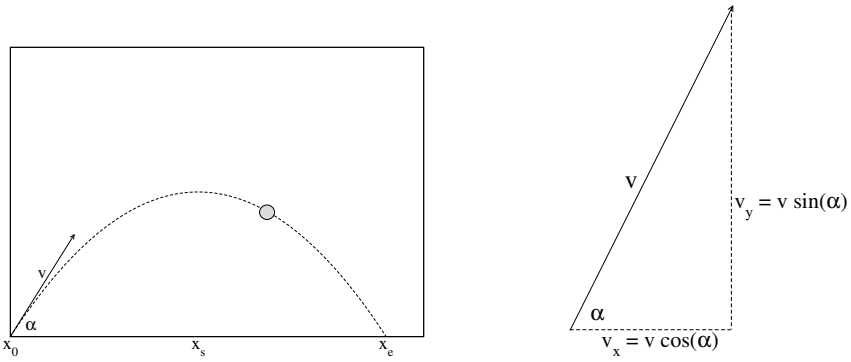


Abbildung B.1: Die Wurfparabel und die Zerlegung der Geschwindigkeit v in die Komponenten v_x und v_y

in ihre Komponenten zerlegt werden: Die zur Zeit t in x-Richtung zurückgelegte Strecke beträgt

$$x(t) = v_x \cdot t = v \cdot \cos\alpha \cdot t\,.$$

Die zur Zeit t in y-Richtung zurückgelegte Strecke (ohne Berücksichtigung der Schwerkraft) beträgt

$$y(t) = v_y \cdot t = v \cdot \sin\alpha \cdot t\,.$$

In y-Richtung wirkt zusätzlich die Schwerebeschleunigung g. Somit beträgt die Momentangeschwindigkeit zur Zeit t $v_g(t) = g \cdot t$. Die aufgrund der Schwerkraft zurückgelegte Strecke in y-Richtung beträgt also

$$\int_0^t v_g(s)\,ds = \int_0^t g \cdot s\,ds = \frac{1}{2}gs^2|_0^t = \frac{1}{2}gt^2$$

Die gesamte zur Zeit t in y-Richtung zurückgelegte Strecke beträgt also

$$y(t) = v_y \cdot t - \frac{g}{2} \cdot t^2 = v \cdot \sin\alpha \cdot t - \frac{g}{2} \cdot t^2\,.$$

Das Minuszeichen rührt daher, dass die Erdbeschleunigung nach unten wirkt.

Um nun zu bestimmen, wie weit der Ball fliegt, müssen wir herausfinden, bei welchem x-Wert y gerade null wird. Bisher haben wir aber nur Informationen darüber zu welcher Zeit, welcher x- bzw- y-Wert angenommen wird. Daher lösen wird die

Gleichung für x nach t auf und setzen das Ergebnis in die Gleichung für y ein.

Nehmen wir mal an, dass wir denn Ball nicht senkrecht in die Höhe schießen, also $\alpha \neq 90\,^\circ$ ist, und $\alpha \in [0, 90[$ (damit gilt $\cos\alpha \neq 0$), so dürfen wir $x = v \cdot \cos\alpha \cdot t$ zu

$$t = \frac{x}{v \cdot \cos\alpha}$$

umstellen. Einsetzen ergibt

$$y(x) = \frac{\sin\alpha}{\cos\alpha} \cdot x - \frac{g}{2v^2 \cdot \cos^2\alpha} \cdot x^2 . \tag{B.1}$$

Man erhält also tatsächlich eine nach unten geöffnete Parabel. Die Schnittpunkte mit der x-Achse erhält man, indem man nun $y = 0$ setzt und nach x auflöst.

Man erhält die Lösungen x_0=0, den Abschusspunkt und

$$x_e = \frac{2v^2}{g} \cdot \sin\alpha \cdot \cos\alpha \qquad \text{, den Auftreffpunkt.} \tag{B.2}$$

Um nun die maximale Flughöhe zu ermitteln, müssen wir den y-Wert an der Scheitelstelle x_s der Parabel ermitteln. Aus Symmetriegründen gilt $x_s = x_e/2$ und die maximale Flughöhe y_s beträgt:

$$y_s = \frac{\sin\alpha}{\cos\alpha} \cdot x_s - \frac{g}{2v^2 \cdot \cos^2\alpha} \cdot x_s^2 . \tag{B.3}$$

Zahlenbeispiel: Der Abschusswinkel sei $\alpha = 40\,^\circ$, die Anfangsgeschwindigkeit $v = 50\,\text{km/h}$. Die Fallbeschleunigung beträgt auf der Erde $g = 9.81\,\text{m/s}^2$.
Zuerst muss die Geschwindigkeit in die richtigen Einheiten umgerechnet werden:

$$50\,\frac{\text{km}}{\text{h}} = 50 \cdot \frac{1000\,\text{m}}{3600\,\text{s}} = \approx 13.89\,\frac{\text{m}}{\text{s}}$$

Einsetzen ergibt (Achtung: Winkel in Grad und nicht in Bogenmaß):

$x_e \approx 19.36\,\text{m} \qquad y_s \approx 4.06\,\text{m}$

Der Fußball fliegt 19.36 m weit und erreicht eine maximale Flughöhe von 4.06 m.

Betrachten wir nun den Fall, dass der Abschusspunkt nicht auf dem Boden, sondern in Höhe H vom Boden entfernt ist (Abbildung B.2).

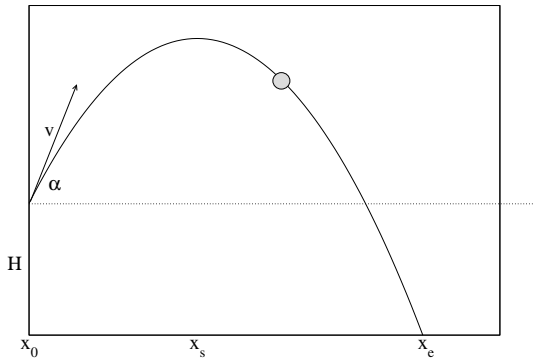


Abbildung B.2: Die Wurfparabel bei Abwurf vom erhöhten Standpunkt aus.

Dann ist die Höhe des Balles durch

$$y(x) = H + \frac{\sin\alpha}{\cos\alpha} \cdot x - \frac{g}{2v^2 \cdot \cos^2\alpha} \cdot x^2 \,. \tag{B.4}$$

gegeben (vergleiche Gleichung B.1).

Man erhält die Flugweite, indem $y(x) = 0$ gesetzt wird und die Gleichung nach x aufgelöst wird. Es existieren zwei Lösungen, die man durch Lösen der quadratischen Gleichung erhält:

$$x_{1,2} = \frac{v^2}{g} \cos\alpha \left(\sin\alpha \pm \sqrt{\sin^2\alpha + \frac{2gH}{v^2}} \right) \,, \tag{B.5}$$

von denen die positive die gesuchte Flugweite x_e ist.

Für $H = 0$ erhält man wiederum das Ergebnis aus B.2.

Der Scheitelpunkt der Parabel liegt bei $\frac{x_1+x_2}{2}$. Er ist unabhängig von H:

$$x_s = \frac{v^2}{g} \cdot \sin\alpha \cdot \cos\alpha \tag{B.6}$$

Einsetzen von x_s in Gleichung B.4 ergibt die maximale Flughöhe (vom Boden aus gemessen):

$$y_s = H + \frac{\sin\alpha}{\cos\alpha} \cdot x_s - \frac{g}{2v^2 \cdot \cos^2\alpha} \cdot x_s^2 \,. \tag{B.7}$$

B.2.1 Skalierung

Betrachten wir noch einmal den Wurf unter einem Winkel α vom Erdboden aus. Die Bahngleichung ist nach B.1 durch

$$y(x) = \frac{\sin\alpha}{\cos\alpha} \cdot x - \frac{g}{2v^2 \cdot \cos^2\alpha} \cdot x^2 . \tag{B.8}$$

gegeben. Durch Skalierung (siehe auch Anhang H) kann man die festen Parameter g und v eliminieren. Mit

$$X = \frac{g}{2v^2} \cdot x \quad \text{und} \quad Y = \frac{g}{2v^2} \cdot y$$

gilt

$$Y(x) = \frac{g}{2v^2} \left(\frac{\sin\alpha}{\cos\alpha} \cdot x - \frac{g}{2v^2 \cdot \cos^2\alpha} \cdot x^2 \right)$$

und damit

$$Y(X) = \tan\alpha \cdot X - \frac{1}{\cos^2\alpha} \cdot X^2$$

Durch die Skalierung sind die dimensionsbehafteten Größen x und y (mit der Einheit Meter) dimensionslos geworden.

B.2.2 Die Einhüllende

Schaut man sich die Graphen der Wurfbahnen zu verschiedenen Winkeln an, so erkennt man, dass die Graphen eine Einhüllende besitzen (gestrichelte Linie in Abbildung B.3). Man erhält die Funktionsvorschrift der Einhüllenden, indem man die Schnittpunkte der Graphen zu den Winkeln α und $\alpha + \Delta\alpha$ betrachtet :

$$Y(X, \alpha) = Y(X; \alpha + \Delta\alpha)$$

also

$$\frac{Y(X; \alpha + \Delta\alpha) - Y(X, \alpha)}{\Delta\alpha} = 0$$

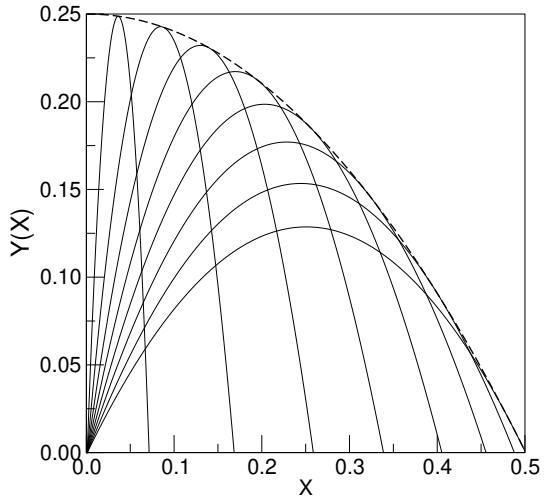


Abbildung B.3: Wurfparabel zu verschiedenen Winkeln und deren Einhüllende (gestrichelt).

Für $\Delta\alpha$ gegen null ergibt sich

$$\frac{\partial Y(X;\alpha)}{\partial\alpha} = 0$$

Aus

$$Y(X,\alpha) = \tan\alpha \cdot X - \frac{1}{\cos^2\alpha} \cdot X^2 \tag{B.9}$$

ergibt sich

$$\frac{\partial Y(X;\alpha)}{\partial\alpha} = \frac{1}{\cos^2\alpha} \cdot X - 2 \cdot \frac{\sin\alpha}{\cos^3\alpha} \cdot X^2$$

Dieses wird null für $X = 0$ (uninteressant) und für

$$1 - 2 \cdot \frac{\sin\alpha_E}{\cos\alpha_E} \cdot X = 1 - 2\tan\alpha_E \cdot X = 0$$

also

$$\tan\alpha_E = \frac{1}{2X}$$

Mit $\cos^2\alpha = \frac{1}{1+\tan^2\alpha}$ ergibt sich durch Einsetzen in Gleichung B.9 die Einhüllende:

$$Y_E(X) = \frac{1}{2X} \cdot X - \left(1 + \frac{1}{4X^2}\right) \cdot X^2 = \frac{1}{4} - X^2$$

C Differentialgleichungen

In einer Differentialgleichung (Differentialgleichung) wird eine (unbekannte) Funktion mit ihren Ableitungen verknüpft, z.B.

$$\frac{dy(x)}{dx} = y(x) \tag{C.1}$$

C.1 Gewöhnliche Differentialgleichungen 1. Ordnung

Eine Gleichung der Form

$$\frac{dy(x)}{dx} = f(x, y(x)) \tag{C.2}$$

heißt gewöhnliche Differentialgleichung 1. Ordnung. Eine Differentialgleichung (DGL) ist eine Vorschrift, die die Änderung einer Zustandsvariablen y bezüglich x angibt.

1.Ordnung: es tauchen keine höheren Ableitungen nach x auf

gewöhnlich: es gibt nur die Ableitung nach der unabhängigen Variablen x

Eine Funktion, die die Differentialgleichung erfüllt, heißt Lösung der Differentialgleichung. Eine Differentialgleichung zu lösen bedeutet, Funktionen y zu finden, die der Vorschrift $\frac{dy(x)}{dx} = f(x, y(x))$ genügen.

Ist die unabhängige Variable die Zeit, schreibt man anstelle von x gerne t:

$$\frac{dy(t)}{dt} = f(t, y(t)) \quad \text{oder kürzer} \quad \frac{dy}{dt} = f(t, y) \quad \text{oder auch} \quad \dot{y} = f(t, y) \tag{C.3}$$

Eine Differentialgleichung heißt **autonom**, wenn f nicht explizit von der unabhängigen Variable x (bzw. t) abhängt:

$$\frac{dy}{dx} = f(y) \qquad \text{z.B.} \quad \frac{dy}{dx} = a \cdot y \tag{C.4}$$

sonst heißt sie nicht-autonom, z.B.

$$\frac{dy(x)}{dx} = f(x, y(x)) \qquad \text{z.B.} \quad \frac{dy}{dx} = -x \cdot y \tag{C.5}$$

C.1.1 Richtungsfeld

Was kann man einer Differentialgleichung ansehen? Betrachten wir zum Beispiel die Differentialgleichung $\dot{y} = a \cdot y$. Die Steigung (Ableitung) der Funktion y an der Stelle t ist proportional zum Funktionswert an der Stelle t.

Um dies zu visualisieren betrachtet man ein t, y-Koordinatensystem. Zu beliebig vielen Paaren (t, y)-Paaren zeichnet man nun die Steigung an diesem Punkt ein, indem man an (t, y) ein Linienelement mit der Steigung $y' = f(t, y)$ einzeichnet (siehe Abbildung 4.4). Ohne die Lösungen der Differentialgleichung zu kennen, weiß man, dass eine Lösung, die durch einen Punkt (t, y) geht, das Linienelement als Tangente haben muss. Zeichnet man viele Linienelemente, so kann man am Richtungsfeld den Verlauf der Lösungen „sehen“.

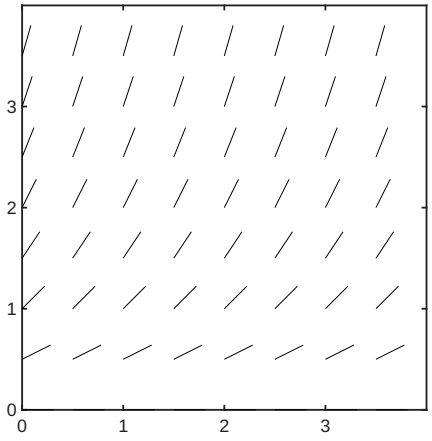


Abbildung C.1: Richtungsfeld von $\dot{y} = y$. Das Richtungsfeld ist t-translationsinvariant.

Wie sieht eine Funktion aus, die in dieses Richtungsfeld passt?
Es gibt viele Funktionen, die „passen“. Die Lösungen stimmen entweder überein oder berühren sich nicht. Zu jedem Anfangswert $y(t_0) = y_0$ gibt es genau eine Lösung[1].Ist die Differentialgleichung autonom, d.h. das die rechte Seite nicht explizit von der Zeit abhängt, ist das Richtungsfeld **t-translationsinvariant**. Dies bedeutet, dass sich die Steigungen in t-Richtung nicht verändern.

[1]Dies gilt nicht für alle Differentialgleichungen. Weiter hilft hier der **Satz von Picard-Lindelöf**: f muss Lipschitzbedingung für y erfüllen.

C.1.2 Anfangswertproblem (AWP)

Gesucht ist eine Funktion y, die $\frac{dy(t)}{dt} = f(t, y(t))$, $y(t_0) = y_0$ genügt.
Das AWP zu lösen bedeutet, eine Lösung der Differentialgleichung zu finden, die von (t_0, y_0) ausgehend in ihrem gesamten Verlauf auf das Richtungsfeld „passt“.

C.1.3 Beispiel: Lösung eines Anfangswertproblems

Gesucht ist die Lösung zu

$$\dot{y} = 0.5 \cdot y, \qquad y(2) = 3 \tag{C.6}$$

Die allgemeine Lösung zu $\dot{y} = 0.5 \cdot y$ lautet

$$y(t) = C \cdot e^{0.5 \cdot t} \tag{C.7}$$

wobei C eine freie Konstante ist.

$$y'(t) = C \cdot 0.5 \cdot e^{0.5 \cdot t} = 0.5 \cdot y(t) \tag{C.8}$$

Nun muss noch C angepasst werden

$$3 \stackrel{!}{=} y(2) = C \cdot e^{0.5 \cdot 2} = C \cdot e \tag{C.9}$$

also ist

$$y(t) = \frac{3}{e} \cdot e^{0.5 \cdot t} \approx 1.1 \cdot e^{0.5 \cdot t} \tag{C.10}$$

die gesuchte Lösung zum Anfangswertproblem.

Beispiel für eine Differentialgleichung, deren Anfangswertproblem keine eindeutige Lösung hat*

$$\dot{y} = 3 \sqrt[3]{y}^{\,2} = 3\, y^{2/3} \quad , \qquad y(0) = 0$$

$y_1(t) = 0$ ist Lösung

$y_2(t) = t^3$ ist Lösung, denn $\dot{y}_2(t) = 3t^2$ und $3 \cdot \left(\sqrt[3]{t^3}\right)^2 = 3t^2$

Analytische Lösung des AWP $\dot{y} = \alpha \cdot y$, $y(t_0) = y_0$*

Bisher haben wir die Lösung der Differentialgleichung erraten und überprüft, ob die Lösung stimmt. Für einige einfache Differentialgleichung kann man die Lösung auch analytisch bestimmen. Für $\dot{y} = \alpha \cdot y$ ist die besonders einfach. Man führt zunächst eine **Separation der Variablen** durch:

$$\frac{\dot{y}}{y} = \alpha$$

und integriert dann beide Seiten:

$$\int_{t_0}^{t} \frac{\dot{y}(s)}{y}\, ds = \int_{t_0}^{t} \alpha\, ds$$

Eine Substitution auf der linken Seite mit $x = y(s)$ ergibt dann

$$\begin{aligned}
\int_{y(t_0)}^{y(t)} \frac{1}{x} dx &= \alpha(t - t_0) \\
[\ln|x|]_{y(t_0)}^{y(t)} &= \alpha(t - t_0) \\
\ln|y(t)| - \ln|y(t_0)| &= \alpha(t - t_0) \\
\ln\left|\frac{y(t)}{y(t_0)}\right| &= \alpha(t - t_0) \\
\left|\frac{y(t)}{y(t_0)}\right| &= e^{\alpha(t-t_0)} > 0\,,
\end{aligned}$$

also gilt $\left|\frac{y(t)}{y(t_0)} e^{-\alpha(t-t_0)}\right| = 1$.

Da der Betrag eine stetige Abbildung ist und der Ausdruck in den Betragsstrichen nur -1 oder 1 sein kann, muss für $y(t_0) > 0$ auch $y(t) > 0$ f.a t gelten.

Damit ist

$y(t) = y(t_0)e^{\alpha(t-t_0)}$

die Lösung des Anfangswertproblems. Die allgemeine Lösung der Differentialgleichung lautet

$y(t) = C\ e^{\alpha(t-t_0)}$,

wobei C eine freie Konstante ist. C ergibt sich für eine spezielle Lösung aus dem Anfangswert (siehe oben) Man kann zeigen, dass alle Lösungen der Differentialgleichung diese Form besitzen.

Eine Lösung einer Differentialgleichung mit einer freien Konstanten heißt allgemeine Lösung, wenn sich jede Lösung der Differentialgleichung in dieser Form schreiben lässt.

Lineare Differentialgleichungen*

$\dot{y} + a(t)y = 0$ heißt **homogene**, lineare Differentialgleichung (in y)
$\dot{y} + a(t)y = b(t)$ heißt **inhomogene**, lineare Differentialgleichung (in y)

Die inhomogene Gleichung ist streng genommen affin. Den Term b(t) nennt man auch **Störung**.

Beispiele:
$\dot{y} = \alpha y$ ist linear
$\dot{y} = \alpha y^2$ ist nicht linear

Grundprinzipien bei linearen Differentialgleichungen*

1. Überlagerungsprinzip (Superpositionsprinzip) bei homogenen linearen Differentialgleichung:
   Sind y_1, y_2 Lösungen der homogenen Differentialgleichung, so ist auch
   $y_3 = \alpha y_1 + \beta y_2, \alpha, \beta \in \mathbb{R}$ Lösung.
   Die Lösungsmenge ist ein Vektorraum !!

2. Ist y Lösung der inhomogenen Differentialgleichung,
   z eine beliebige Lösung der zugehörigen homogenen Differentialgleichung,
   dann ist y+z Lösung der inhomogenen Differentialgleichung.

3. Sind y und w Lösungen der inhomogenen Differentialgleichung, dann ist y-w Lösung der zugehörigen homogenen Differentialgleichung.

D Numerisches Lösen von Differentialgleichungen

Die wenigsten Differentialgleichung-Systeme, die man in der Modellierung aufstellt, lassen sich analytisch lösen. Man löst die Gleichungen daher numerisch. Dies bedeutet, das man die Lösung Stück für Stück bestimmt. Um das Grundprinzip einfach darzustellen wird nur das Lösen einer einzelnen Differentialgleichung beschrieben. Das Lösen von Differentialgleichung-Systemen geht aber genauso. Zugrunde gelegt wird jeweils ein Anfangswertproblem:

$$y' = f(t, y(t)), \quad y(t_0) = y_0$$

D.1 Euler Verfahren

Zuerst wird an der Stelle (t_0, y_0) die Steigung bestimmt. Es wird nun angenommen, dass sich die Steigung in einem kleinen Schritt Δt (Schrittweite) nicht ändert. Die Lösung wird also in dem Intervall $[t, t + \Delta t]$ durch eine Gerade approximiert. Man erhält den approximativen Wert y_1 zur Zeit t_1. Nun wird die Steigung an dieser Stelle bestimmt und so weiter:

$$y(t_0 + \Delta t) = y(t) + f(t_0, y(t_0)) \cdot \Delta t$$

Allgemein wird also zu einer beliebigen Zeit t der neue Wert zur Zeit $t + \Delta t$ durch

$$y(t + \Delta t) = y(t) + f(t, y(t)) \cdot \Delta t$$

bestimmt. Ausgedrückt in Zeitschritten bedeutet dies:

$$y_{k+1} = y_k + f(t_k, y_k) \cdot \Delta t \qquad k = 0, 1, ..$$

Dieses Verfahren ist recht ungenau.

D.1.1 Beispiel $y' = y$, $y(0) = 1$

Gegeben ist das Anfangswertproblem $y' = y$, $y(0) = 1$, dessen explizite Lösung $y(t) = e^t$ bekannt ist. Bestimmt man die Lösung zur Zeit T=10 mit dem Euler-

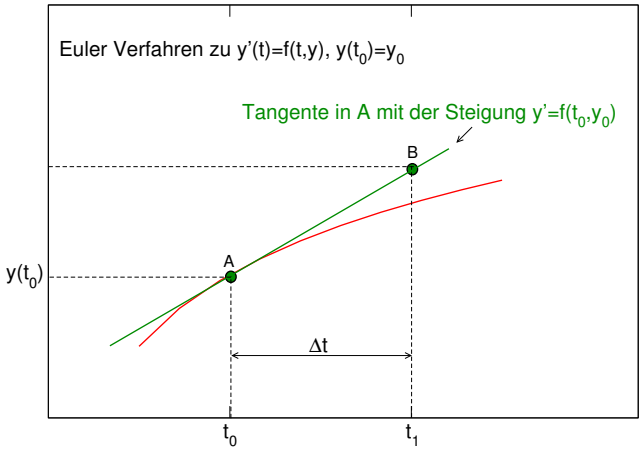


Abbildung D.1: Euler-Verfahren zu $\dot{y} = f(t, y)$, $y(t_0) = y_0$.

Verfahren und einer Schrittweite von $\Delta t = 1$, so erhält man als approximative Lösung 1024. Der exakte Wert beträgt (auf 2 Nachkommastellen gerundet) 22026.47.

D.1.2 Implementierung in des Euler-Verfahrens in Matlab*

Eine Matlab-Programm zur Lösung des Anfangswertproblems $\dot{y} = f(t, y)$, $y(t_0) = y_0$ mit dem Euler-Verfahren ist in Listing D.1 angegeben.

Listing D.1: Matlab-Code zur Lösung einer Differentialgleichung mit dem Euler-Verfahren.

```
% exponential growth
t(1)=0;      % start time
x(1)=1;      % initial value
dt=0.1;      % step size
tend=10;     % end time
r=1;         % parameter
kend=tend/dt; % number of steps
% loop until tend
for k=1:kend
   t(k+1)=k*dt;
   x(k+1)=x(k)+r*x(k)*dt;
end
plot(t,x)% plotting values
```

Bemerkung: Die Implementierung geht in MatLab auch eleganter

Ein Verfahren, das bessere Ergebnisse liefert, ist das **Runge-Kutta-Verfahren** in Anhang D.3.

D.2 Runge-Kutta-Verfahren 2. Ordnung* (Verbessertes Euler-Verfahren, Heun-Verfahren)

Beim Runge-Kutta-Verfahren 2. Ordnung werden die Steigungen in (t, y) und $(t + \Delta t, y + f(t, y) \cdot \Delta t)$ gemittelt, statt nur die Steigung in (t, y) zu berücksichtigen. Dies bedeutet, dass man mit dem Funktionswert an der Stelle $t + \Delta t$, der sich nach einem Euler-Schritt ergibt, die Steigung an $t + \Delta t$ noch einmal neu berechnet. Das Mittel der beiden Steigungen wird dann als endgültige Steigung für den Zeitschritt angenommen:

$$y(t + \Delta t) = y(t) + \frac{f(t, y(t)) + f(t + \Delta t, \overbrace{y(t) + f(t, y(t)) \cdot \Delta t}^{\text{Funktionswert nach einem Euler-Schritt}})}{2} \cdot \Delta t$$

Ausgedrückt in Zeitschritten

$$y_{k+1} = y_k + \frac{f(t_k, y_k) + f(t_{k+1}, y_k + f(t_k, y_k) \cdot \Delta t)}{2} \cdot \Delta t \qquad k = 0, 1, \ldots$$

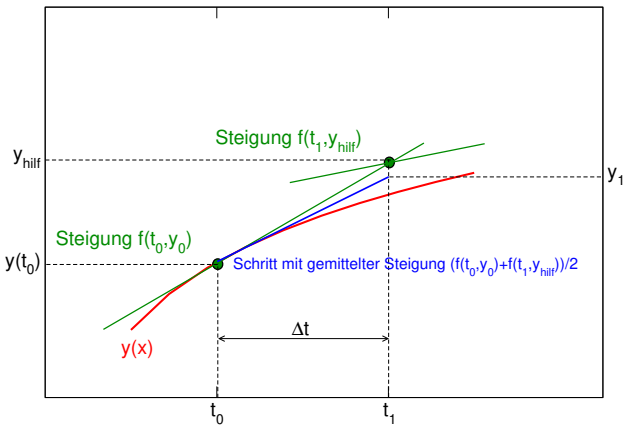


Abbildung D.2: Verbessertes Euler-Verfahren zu $\dot{y} = f(t, y)$, $y(t_0) = y_0$.

D.3 Runge-Kutta-Verfahren 4. Ordnung*

Das bekannteste Verfahren approximiert die Lösung bis zur 4. Ordnung (Abbildung D.3). Hierbei wird an einer weiteren Stützstelle bei $t + \frac{\Delta t}{2}$ die Steigung berechnet. Auch dies geschieht wieder mit dem verbesserten Verfahren. Die endgültige Stei-

gung für den Zeitschritt wird aus 4 Einzelsteigungen gewichtet gemittelt, wobei die Steigungen in der Mitte bei $t + \frac{\Delta t}{2}$ ein höheres Gewicht bekommen. Es wird wie folgt berechnet:

$$y(t + \Delta t) = y(t) + \frac{s_1 + 2s_2 + 2s_3 + s_4}{6} \cdot \Delta t$$

$$s_1 = f(t, y(t)) \qquad s_2 = f(t + \frac{\Delta t}{2}, y(t) + s_1 \cdot \frac{\Delta t}{2})$$

$$s_3 = f(t + \frac{\Delta t}{2}, y(t) + s_2 \cdot \frac{\Delta t}{2}) \qquad s_4 = f(t + \Delta t, y(t) + s_3 \cdot \Delta t)$$

Ausgedrückt in Zeitschritten

$$y_{k+1} = y_k + \frac{s_1 + 2s_2 + 2s_3 + s_4}{6} \cdot \Delta t \qquad k = 0, 1, ...$$

$$s_1 = f(t_k, y_k) \qquad s_2 = f(t_k + \frac{\Delta t}{2}, y_k + s_1 \cdot \frac{\Delta t}{2})$$

$$s_3 = f(t_k + \frac{\Delta t}{2}, y_k + s_2 \cdot \frac{\Delta t}{2}) \qquad s_4 = f(t_k + \Delta t, y_k + s_3 \cdot \Delta t)$$

Dieses Verfahren ist in vielen Programmen implementiert. Häufig wird es einfach nur Runge-Kutta-Verfahren genannt. Noch bessere Verfahren sind implizite Verfahren, Verfahren mit einer automatischen Zeitschrittanpassung resp. Prediktor-Korrektor-Verfahren. Das Runge-Kutta-Verfahren 4. Ordnung ist in vielen Programmiersprachen implementiert. Eine Matlab-Programm zur Lösung des Anfangswertproblems $\dot{y} = f(t, y)$, $y(t_0) = y_0$ mit dem Runge-Kutta-Verfahren ist in Listing D.2 angegeben.

Listing D.2: Matlab-Code zur Lösung einer Differntialgleichung mit dem Runge-Kutta-Verfahren.

```
function myode
t0=0;    % start time
y0=1;       % initial value
tend=10; % end time
r=1;     % parameter
% call of ode solver
[t,y]=ode45(@f,[t0 tend],y0,[],r);
plot(t,y) %plotting values

```

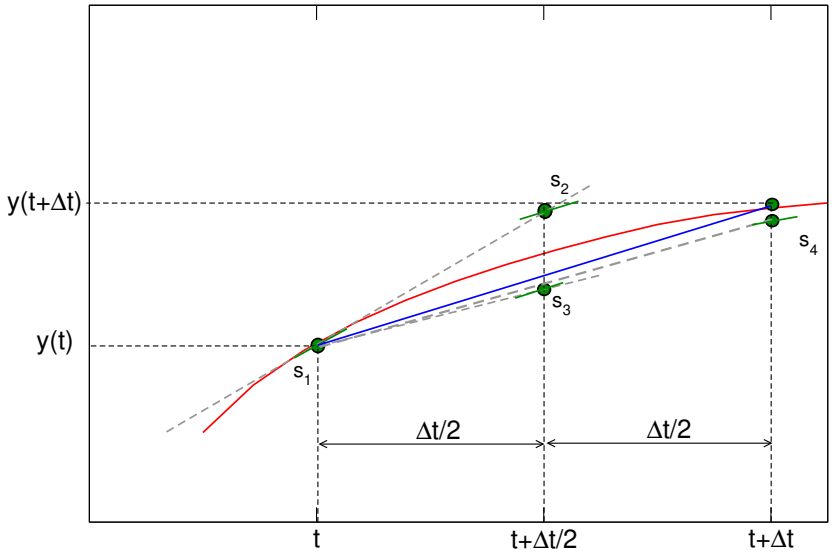


Abbildung D.3: Runge-Kutta-Verfahren 4. Ordnung zu $\dot{y} = f(t, y)$, $y(t_0) = y_0$.

```
%ODE function
function dydt=f(t,y,r)
dydt=r*y;
```

D.4 Fehlerabschätzung*

Wie groß ist der Fehler, den man beim numerischen Lösen macht? Hierzu betrachtet man das Taylorpolynom von y (siehe A.12):

$$\begin{aligned} y(t+\Delta t) &= \sum_{k=0}^{n} \frac{1}{k!} y^{(k)}(t) \cdot \Delta t^k + \frac{1}{(n+1)!} \cdot y^{(n+1)}(\xi) \cdot \Delta t^{n+1} \quad \xi \in [t, t+\Delta t] \\ &= p_n(t) + R_n(t) \end{aligned}$$

Wird anstelle der exakten Lösung $y(t)$ das Taylorpolynom n-ten Grades betrachtet, so ist der Abbruchfehler in jedem Schritt proportional zu Δt^{n+1}. Im Falle des Euler-Verfahrens wird das Taylorpolynom 1. Grades betrachtet:

$$y(t+\Delta t) = y(t) + y'(t) \cdot \Delta t$$

Der Abbruchfehler ist also in jedem Schritt proportional zu Δt^2. Je kleiner der Zeitschritt ist, desto kleiner ist der Fehler. Man kann den Zeitschritt aber nicht

beliebig klein machen, da dann nicht nur die Rechenzeit stark anwächst. Bei sehr kleinem Zeitschritt kommt auch zum Tragen, dass die Zahldarstellung einer Programmiersprache begrenzt ist. In der Regel beträgt bei einfacher Genauigkeit(single precision) die Anzahl signifikanter Stellen 8, bei doppelter Genauigkeit (double precision) 16.

E Vektoren und Matritzen

E.1 Vektoren

In der Ebene oder im Raum kann man Vektoren als Pfeile mit einem Anfangs- und einem Endpunkt (Pfeilspitze) darstellen. Sie werden meist mit kleinen Buchstaben bezeichnet, die fettgedruckt (u) sind, oder wie in der Physik üblich einen kleinen Pfeil ($\vec{u}$) haben. Manchmal wird dies aber alles weggelassen, so dass man aus dem Kontext heraus erkennen muss, ob es sich um einen Vektor handelt, oder nicht.

Alle Vektoren, die dieselbe Länge und dieselbe Richtung haben, sind äquivalent.

E.1.1 Vektoren im Koordinatensystem

Wir legen das übliche kartesisches Koordinatensystem zugrunde und betrachten nur den zwei- oder dreidimensionalen Fall, also die Ebene oder den Raum. Die mathematische Realität ist natürlich viel komplizierter und kann hier nicht behandelt werden. Daher ist es wichtig, mal ein Buch oder eine Vorlesung über lineare Algebra zu lesen bzw. zu besuchen.

Sei v ein Vektor in der Ebene, dessen Anfangspunkt im Koordinatenursprung liegt. Die Koordinaten (v_1, v_2) seines Endpunkts sind dann die Komponenten von v:

$v = (v_1\ v_2)$

Hierbei sind v_1 und v_2 reelle Zahlen.

Besondere Vektoren

Nullvektor
(0 0) 2-dimensional
(0 0 0) 3-dimensional.
Der Nullvektor wird häufig auch einfach als 0 geschrieben.

Einheitsvektor
$e_1 = (1\ 0)$ und $e_2 = (0\ 1)$ 2-dimensional
$e_1 = (1\ 0\ 0)$, $e_2 = (0\ 1\ 0)$ und $e_3 = (0\ 0\ 1)$ 3-dimensional.

E.1.2 Rechenregeln für Vektoren

Seien u, v, w Vektoren desselben Raumes, also hier entweder 2-dimensional oder dreidimensional), so gilt: **Addition**

$$u + v = v + u \tag{E.1}$$
$$u + 0 = u$$
$$u + (v + w) = (u + v) + w$$

Multiplikation mit einem Skalar Seien u, v Vektoren desselben Raumes, also hier entweder 2-dimensional oder dreidimensional und λ und μ reelle Zahlen (Skalare), so gilt:

$$1 \cdot u = u \tag{E.2}$$
$$(\lambda \cdot \mu) \cdot u = \lambda \cdot (\mu \cdot u)$$
$$(\lambda + \mu) \cdot u = \lambda \cdot u + \mu \cdot u$$
$$\lambda \cdot (u + v) = \lambda u + \lambda v$$

Rechenregeln für die Koordinatendarstellung

Seien $u = (u_1, u_2)$ und $v = (v_1, v_2)$ zwei Vektoren und λ und μ reelle Zahlen, so gilt:

$$u + v = (u_1 + v_1, u_2 + v_2) \tag{E.3}$$
$$\lambda \cdot u = (\lambda \cdot u_1, \lambda \cdot u_2)$$

Norm eines Vektors

Die Länge (Norm) eines Vektors wird mit $|u|$ oder$\|u\|$ bezeichnet und ergibt sich nach dem Satz des Pythagoras. Für den Vektor $u = (u_1, u_2)$ gilt:

$$\|u\| = \sqrt{u_1^2 + u_2^2}$$

und für $u = (u_1, u_2, u_3)$

$$\|u\| = \sqrt{u_1^2 + u_2^2 + u_3^2}$$

E.1.3 Zeilen- und Spaltenvektoren

Vektoren kommen als Zeilen oder Spaltenvektoren vor:

Zeilenvektoren: $\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}$ oder $\begin{pmatrix} -5 & 3 \end{pmatrix}$

Spaltenvektoren: $\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix}$ oder $\begin{pmatrix} -5 \\ 3 \end{pmatrix}$

Die Rechenregeln für die Koordinatendarstellung der Zeilenvektoren gilt analog für die Spaltenvektoren. Die Addition von Zeilen mit Spaltenvektoren und umgekehrt ist streng mathematisch gesehen nicht erlaubt.

E.1.4 Multiplikation von Zeilen- mit Spaltenvektor

Die Multiplikation von einem Zeilenvektor mit einem Spaltenvektor derselben Länge ergibt eine Zahl

$$\begin{pmatrix} u_1 & u_2 & u_3 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{pmatrix} = u_1 \cdot v_1 + u_2 \cdot v_2 + u_3 \cdot v_3$$

E.1.5 Inneres Produkt oder auch Skalarprodukt

Das innere Produkt oder Skalarprodukt zweier Vektoren u und v , die den Winkel θ einschließen, ist definiert als

$$< u, v >= \|u\|\|v\| \cos\theta \tag{E.4}$$

Ist einer der beiden Vektoren der Nullvektor, so ist $< u, v >= 0$, auch wenn man keinen Winkel zwischen den Vektoren angeben kann. Wenn das innere Produkt Null ist und es sich nicht um Nullvektoren handelt, so stehen die Vektoren senkrecht aufeinander ($\cos 90^\circ = 0$). Zwischen Norm und innerem Produkt besteht folgender Zusammenhang:

$$\|u\| = \sqrt{< u, u >}$$

Rechenregeln für die Koordinatendarstellung

Das innere Produkt oder Skalarprodukt zweier Vektoren $u = (u_1\ u_2)$ und $v = (v_1\ v_2)$, berechnet sich wie folgt

$$< u, v >= u_1 v_1 + u_2 v_2 \tag{E.5}$$

E.2 Matrizen

Unter einer Matrix (Plural: Matrizen) versteht man ein rechteckiges Zahlenschema.

Bei der Matrix

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & -5 & 1 \end{pmatrix}$$

handelt es sich um eine 2×3-Matrix, da sie zwei Zeilen und drei Spalten hat. Allgemein wird eine $n \times m$-Matrix wie folgt geschrieben

$$\begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nm} \end{pmatrix}$$

wobei i der Zeilenindex und j der Spaltenindex ist.

E.2.1 Rechenregeln für Matrizen

Es sei A und B n × m-Matrizen und λ eine Zahl, dann gilt

$$A + B = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nm} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b_{11} & \cdots & b_{1m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{n1} & \cdots & b_{nm} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} + b_{11} & \cdots & a_{1m} + b_{1m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} + b_{n1} & \cdots & a_{nm} + b_{nm} \end{pmatrix}$$

$$\lambda \cdot A = \lambda \cdot \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nm} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda \cdot a_{11} & \cdots & \lambda \cdot a_{1m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \lambda \cdot a_{n1} & \cdots & \lambda \cdot a_{nm} \end{pmatrix}$$

Die Multiplikation zweier Matrizen ist etwas komplizierter, da man genau auf die Dimension achten muss. Eine Matrix A kann nur dann mit einer Matrix B multipliziert werden, wenn die Zahl der Spalten von A mit der Zahl der Zeilen von B übereinstimmt.

Sei also A eine n × m-Matrix und B eine m × r-Matrix, dann gilt

$$A{\cdot}B = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nm} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} b_{11} & \cdots & b_{1r} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{m1} & \cdots & b_{mr} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{m} a_{1i} \cdot b_{i1} & \cdots & \sum_{i=1}^{m} a_{1i} \cdot b_{ir} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{i=1}^{m} a_{ni} \cdot b_{i1} & \cdots & \sum_{i=1}^{m} a_{ni} \cdot b_{mr} \end{pmatrix}$$

Das Ergebnis ist eine n × r-Matrix.

Für den Fall r = 1 kann man die Matrix B als Spaltenvektor auffassen(m × 1-Matrix). Damit ergibt sich die Multiplikation einer n × m Matrix mit einem m-dimensionalen Spaltenvektor zu

$$A \cdot b = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nm} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{m} a_{1i} \cdot b_i \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^{m} a_{ni} \cdot b_i \end{pmatrix}$$

Das Ergebnis ist ein n-dimensionaler Spaltenvektor.

Analog gilt für die Multiplikation eines n-dimensionalen Zeilenvektors a mit einer

$n \times m$-Matrix B

$$a \cdot B = \begin{pmatrix} a_1 & \cdots & a_n \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} b_{11} & \cdots & b_{1m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{n1} & \cdots & b_{nm} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{n} a_i \cdot b_{i1}, & \cdots & , \sum_{i=1}^{n} a_i \cdot b_{im} \end{pmatrix}$$

Das Ergebnis ist ein m-dimensionaler Zeilenvektor. Die Multiplikation eines n-dimensionalen Zeilenvektors a mit einem n-dimensionalen Spaltenvektor b ergibt

$$a \cdot b = \begin{pmatrix} a_1 & \cdots & a_n \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^{n} a_i \cdot b_i$$

Das Ergebnis ist eine Zahl.

Man erkennt, dass es jeweils auf die richtigen Dimensionen ankommt. Man kann eine $n \times m$-Matrix nicht mit einem n-dimensionalen Vektor multiplizieren usw.

E.2.2 Quadratische Matrizen

Ist die Zahl der Zeilen und Spalten gleich, handelt es sich um eine **quadratische Matrix**.

$$\begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

Die Elemente, bei denen dann $i = j$ ist, heißen Hauptdiagonalelemente bzw. alle zusammen heißen Hauptdiagonale. Quadratische Matrizen derselben Dimension können beliebig miteinander multipliziert werden.

Einheitsmatrizen

Matrizen, die auf der Hauptdiagonalen nur Einsen haben und sonst nur Nullen heißen Einheitsmatrizen oder Identitäten:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \dots$$

Einheitsmatrizen werden häufig mit I bezeichnet. Die Dimension muss sich dann aus dem Kontext ergeben.

Inverse

Sei A eine quadratische Matrix. Gibt es eine Matrix B mit$AB = BA = I$, so heißt A invertierbar und B heißt **Inverse** von A, in Zeichen

$$B = A^{-1}$$

Transponierte

Sei A eine quadratische Matrix. Die Matrix, bei der die Elemente an der Hauptdiagonalen gespiegelt sind, heißt **Transponierte** von A, in Zeichen A^T.

$$\text{Sei } A = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \quad \text{dann ist} \quad A^T = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{n1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{1n} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

Spur und Determinante

Sei $A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ eine 2×2-Matrix. Die Summe der Elemente auf der Hauptdiagonalen heißt Spur von A, in Zeichen sp oder tr

$$\text{sp } A = a + d$$

Die Determinante der Matrix ist

$$\det A = ad - bc$$

Für höhere Dimensionen sei auf die Literatur zur linearen Algebra verwiesen.

E.2.3 Gleichungssysteme

Matrizen kommen in vielen Zusammenhängen vor, z.B. beim Lösen linearer Gleichungssysteme. So kann man das Gleichungssystem einfacher mit Hilfe von Matrizen und Vektoren schreiben: Das Gleichungssystem

$$\begin{array}{ccccc} a_{11} \cdot x_1 & + \cdots + & a_{1m} \cdot x_m & = b_1 \\ \vdots & & \vdots & \vdots \\ a_{n1} \cdot x_1 & + \cdots + & a_{nm} \cdot x_m & = b_n \end{array}$$

kann mit

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nm} \end{pmatrix} \quad \vec{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \vec{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_m \end{pmatrix}$$

einfach als

$$A \cdot \vec{x} = \vec{b}$$

geschrieben werden.

F Zweidimensionale lineare Abbildungen

Eine 2×2-Matrix A kann man auch als Abbildung auffassen. Wird ein 2-dimensionaler Vektor mit der Matrix multipliziert, so ist das Ergebnis wieder ein 2-dimensionaler Vektor. Man sagt: Die quadratische Matrix A bildet den $\mathbb{R}^2$ in sich selbst ab.

Betrachten wir die Abbildung

$$\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = A \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

Hierbei ist der Vektor $\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$ das Argument, A die Abbildung und $\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$ der Funktionswert.

Eine solche Abbildung A setzt sich aus Drehungen, Scherungen, Streckungen, Projektionen und Spiegelungen zusammen:

Drehung $$\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi \\ \sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

Scherung $$\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & b \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

Streckung $$\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & d \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

Projektion $$\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

Spiegelung $$\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

Der Absolutbetrag der Determinante $|\det A| = |ad - bc|$ der Matrix A gibt an, um welchen Faktor die Fläche des Einheitsquadrats bei Abbildung vergrößert bzw. verkleinert wird. Enthält die Abbildung eine Spiegelung, wechselt das Vorzeichen. Enthält die Matrix eine Projektion, verschwindet die Determinante.

Betrachtet man die Bilder verschiedener Vektoren unter einer Matrix, so stellt man

fest, dass sie i.a. um verschiedene Winkel gedreht und um verschiedene Faktoren gestreckt werden. Die Frage ist, inwieweit es Vektoren gibt, die nur gestreckt, aber nicht gedreht werden. Wird ein Vektor nicht gedreht, so wird jeder Vektor, der in dieselbe Richtung (oder in die entgegengesetzte Richtung) zeigt, ebenfalls nicht gedreht. Diese Vektoren laufen entlang der sogenannten **Eigenrichtung** der Matrix. Jeder Vektor, der dies erfüllt (außer der Nullvektor) heißt **Eigenvektor**.

Für jeden Vektor $\overrightarrow{v}$ in Eigenrichtung kann die Matrix A also durch einen Faktor λ ersetzt werden, der den jeweiligen Streckungsfaktor angibt. Dieser Faktor heißt **Eigenwert** zu dieser Eigenrichtung.

Für einen Eigenvektor $\overrightarrow{v}$ zum Eigenwert λ gilt

$$A \cdot \overrightarrow{v} = \lambda \cdot \overrightarrow{v}$$

oder anders mit der Einheitsmatrix I geschrieben:

$$(A - \lambda I) \cdot \overrightarrow{v} = \overrightarrow{0}$$

Diese Gleichung ist auch der Schlüssel, um die Eigenwerte zu finden, sie heißt **Eigenwertgleichung**.

Aus der Algebra ist bekannt: Ein lineares, homogenes Gleichungssystem mit einer quadratischen Matrix B hat genau dann eine nicht-triviale Lösung (eine Lösung ungleich Null), wenn det B=0 gilt, also hat die Eigenwertgleichung nur dann nicht-triviale Lösungen, wenn

$$p(\lambda) := \det(A - \lambda I) = 0$$

gilt. $p(\lambda)$ heißt auch charakteristisches Polynom der Matrix A. Man findet die Eigenwerte, indem man die Nullstellen des charakteristischen Polynoms bestimmt. Im zweidimensionalen Fall gibt es höchstens zwei verschiedene Eigenwerte und man kann sie einfach bestimmen:

$$p(\lambda) = \det \begin{pmatrix} a - \lambda & b \\ c & d - \lambda \end{pmatrix} = (a-\lambda)(d-\lambda) - bc = \lambda^2 - (a+d)\lambda + ad - bc = 0$$

Mit $\det A = ad - bc$ und $\text{spur } A = a + d$ erhält man die Lösungen

$$\lambda_{1,2} = \frac{\text{spur } A}{2} \pm \sqrt{\frac{(\text{spur } A)^2}{4} - \det A}$$

Die Eigenvektoren erhält man, indem man für ein fest vorgegebenen Eigenwert die Eigenwertgleichung löst:

$$\begin{pmatrix} a - \lambda & b \\ c & d - \lambda \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} = 0$$

Beispiel

$$A = \begin{pmatrix} -1 & 2 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$$

Bestimmung der Eigenwerte:

$$A - \lambda \cdot I = \begin{pmatrix} -1 & 2 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & \lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 - \lambda & 2 \\ 0 & 2 - \lambda \end{pmatrix}$$

$\det(A - \lambda \cdot I) = (-1 - \lambda) \cdot (2 - \lambda) - 2 \cdot 0 =: 0$

Damit gilt $\lambda_1 = -1$ und $\lambda_2 = 2$.

Bestimmung der Eigenvektoren zu $\lambda_1 = -1$:

$(A - \lambda_1 \cdot I) \cdot x =: 0$

$$(A - \lambda_1 \cdot I) = \begin{pmatrix} -1 & 2 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 - (-1) & 2 \\ 0 & 2 - (-1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 0 & 3 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 0 & 3 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Damit gilt $x_2 = 0$ und x_1 beliebig. Die Eigenvektoren zu $\lambda_1 = -1$ haben die Form $c \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, c \in \mathbb{R} \backslash 0$.

Bestimmung der Eigenvektoren zu $\lambda_2 = 2$:

$(A - \lambda_2 \cdot I) \cdot x =: 0$

$$(A - \lambda_2 \cdot I) = \begin{pmatrix} -1 & 2 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1-2 & 2 \\ 0 & 2-2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -3 & 2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} -3 & 2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Die Gleichung, die sich aus der zweiten Zeile ergibt, wird durch beliebige x_1 und x_2 erfüllt. Wir wählen daher $x_1 = c$, $c \in \mathbb{R}\backslash 0$ Aus der ersten Zeile ergibt sich dann $x_2 = \frac{3}{2}c$ Damit gilt $x_2 = 0$ und x_1 beliebig. Die Eigenvektoren zu $\lambda_2 = 2$ haben die Form $c \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{3}{2} \end{pmatrix}, c \in \mathbb{R}\backslash 0$.

Bemerkung

Da die Eigenvektoren bis auf einen Faktor bestimmt werden können, kann man eine Komponente festlegen, und die andere bestimmen. Für $b \neq 0$ kann man $v_1 = b$ setzen und erhält den Eigenvektor $\binom{b}{\lambda - a}$. Für $c \neq 0$ kann man $v_2 = c$ setzen und erhält den Eigenvektor $\binom{\lambda - d}{c}$. Für $b = c = 0$ ist A eine Streckmatrix mit den Eigenwerten a und d. Die zugehörigen Eigenvektoren sind die Einheitsvektoren in x- bzw. y-Richtung. Gilt $a = d$, so ist A Vielfaches der Einheitsmatrix und jeder Vektor (außer dem Nullvektor) ist Eigenvektor.

G Mehrdimensionale Analysis*

Betrachtet man z.B. in einem aquatischen System die Phytoplanktonkonzentration, so wird man feststellen, dass sich die Konzentration über die Zeit ändert. Diese Änderung kann aufgrund von veränderten Wachstumsbedingungen erklärt werden. Zusätzlich ändert sich die Konzentration aber häufig auch dadurch, dass Plankton verdriftet wird (daher ja auch der Name). Das Plankton wird mit der Strömung mitgerissen. Will man dies nun mathematisch beschreiben, so hängt die Phytoplanktonkonzentration also sowohl von der Zeit als auch vom aktuellen Ort ab.

Wir nehmen hier nun vereinfachend an, dass wir nur eine Raumrichtung haben, in die sich das Plankton bewegen kann (Kanal). Dann können wir die Konzentration durch folgende Funktion beschreiben

$$\begin{aligned} f : \mathbb{R}^2 &\longrightarrow \mathbb{R} \\ (t,x) &\mapsto f(t,x) \end{aligned} \tag{G.1}$$

Kennen wir diese Funktion, so ist zu jeder Zeit t und an jedem Ort x ist die Konzentration f bekannt. Es handelt sich bei f um eine sogenannte skalare Funktion, da ihre Funktionswerte Zahlen (nämlich die Konzentration) sind.

G.1 Die Ableitung skalarer 2-dimensionaler Funktionen

Die partielle Ableitung von f nach t wird gebildet, indem man f nach t ableitet und dabei x als Konstante betrachtet (analog für die partielle Ableitung nach x). Die partiellen Ableitungen werden mit

$$\frac{\partial f(t,x)}{\partial t} \quad \text{und} \quad \frac{\partial f(t,x)}{\partial x} \tag{G.2}$$

bezeichnet.

Achtung: Es handelt sich um runde ∂'s, um die partiellen Ableitungen zu kennzeichnen.

Fasst man die partiellen Ableitungen in einem Vektor zusammen, so nennt man

diesen Vektor **Gradient** von f:

$$\nabla f := \begin{pmatrix} \frac{\partial f(t,x)}{\partial t} \\ \frac{\partial f(t,x)}{\partial x} \end{pmatrix} \tag{G.3}$$

Das Zeichen ∇ heißt **Nabla**.

Beispiele:

1. $f(t,x) = t^2 + \sin(x)$: $\quad \frac{\partial f(t,x)}{\partial t} = 2t \quad \frac{\partial f(t,x)}{\partial x} = \cos(x)$
2. $f(t,x) = \sin(t \cdot x)$: $\quad \frac{\partial f(t,x)}{\partial t} = x \cdot \cos(t \cdot x) \quad \frac{\partial f(t,x)}{\partial x} = t \cdot \cos(t \cdot x)$
3. Angenommen wir geben die Höhe eines Berges über dem Erdboden an, dann können wir dies mit der skalaren Funktion $h(t,x)$ beschreiben.

   Wir stehen am Punkt (x_0, y_0) irgendwo auf dem Berg. Um nun herauszufinden, in welche Richtung es am steilsten nach oben geht, bildet man den Gradienten von h in (x_0, y_0):

   $$\begin{pmatrix} \frac{\partial h(x_0,y_0)}{\partial t} \\ \frac{\partial h(x_0,y_0)}{\partial x} \end{pmatrix}$$

   Der Gradient zeigt in die Richtung des stärksten Anstiegs.

G.2 Totales Differential

Bisher habe wird die Änderungen in die einzelnen Richtungen getrennt betrachtet. Nun geht es darum die Gesamtänderung zu bestimmen. Angenommen wir kennen die Konzentration zu einer bestimmten Zeit an einem bestimmten Ort und zusätzlich wissen wir, wie sich die Konzentration in der Zeit ändert und wie sie sich im Raum ändert, d.h wir kennen die partiellen Ableitungen. Die Konzentration sei nun also $f(t,x)$. In einem Zeitschritt Δt wird sich die Konzentration also um

$$\frac{\partial f(t,x)}{\partial t} \cdot \Delta t$$

und wenn man zum Zeitpunkt t schaut, wie hoch die Konzentration im Abstand von Δx von x entfernt ist, so ist dies

$$\frac{\partial f(t,x)}{\partial x} \cdot \Delta x$$

Die Gesamtänderung Δf ergibt sich dann aus der Summe beider Terme

$$\Delta f = \frac{\partial f(t,x)}{\partial t}\Delta t + \frac{\partial f(t,x)}{\partial x}\Delta x$$

Macht man nun Δt und Δx immer kleiner, ($\Delta t \to dt$ und $\Delta x \to dx$), so gilt

$$df = \frac{\partial f(t,x)}{\partial t}dt + \frac{\partial f(t,x)}{\partial x}dx = \nabla f \bullet \begin{pmatrix} dt \\ dx \end{pmatrix} \tag{G.4}$$

Den Ausdruck G.4 nennt man **totales Differential**. Der Punkt $\bullet$ deutet an, dass es sich um das Skalarprodukt handelt. Bezieht man dieses wiederum auf ein infinitesimal kleines Zeitintervall, so erhält man die **totale Ableitung**

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f(t,x)}{\partial t} + \frac{\partial f(t,x)}{\partial x} \cdot \frac{dx}{dt} \tag{G.5}$$

Man beachte, dass der Ausdruck $\frac{dt}{dt}$ im ersten Term gleich 1 ist und die totale Ableitung mit steilen d's geschrieben wird.

Beim totalen Differential handelt es sich um nichts anders als um die Kettenregel. Hängt die Ortskomponente x nämlich selbst von der Zeit ab, so gilt nach der Kettenregel

$$\frac{df(t,x(t))}{dx} = \frac{\partial f(t,x(t))}{\partial t} \cdot \frac{dt}{dt} + \frac{\partial f(t,x(t))}{\partial x} \cdot \frac{dx(t)}{dt}$$

Sämtliche Überlegungen lassen sich natürlich leicht auf mehrere Raumdimensionen erweitern.

G.3 Massenerhaltung

Betrachtet man ein abgeschlossenes System, also ein System, in das nichts hinein oder hinausfließt, so ändert sich die Gesamtmasse nicht. Trotzdem kann sich natürlich die Massenverteilung in Raum und Zeit ändern. Nehmen wir also wieder

als Beispiel die Phytoplanktonkonzentration in einem See, so ist die Gesamtänderung null (sofern der See keine zu oder Abflüsse hat und das Phytoplankton weder wächst noch stirbt). Trotzdem kann sich die lokale Konzentration ändern, wenn das Phytoplankton zB an die Seeoberfläche zum Licht hin wandert oder durch Wind an der Seeoberfläche verdriftet wird. Die Beschreibung durch die skalare Funktion G.1 ist weiterhin sinnvoll (wir nehmen einen eindimensionalen, kanalförmigen See an), wir müssen aber berücksichtigen das sich die Gesamtmasse und damit die mittlere Konzentration im See nicht ändert. Es muss also gelten G.5

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f(t,x)}{\partial t} + \frac{\partial f(t,x)}{\partial x} \cdot \frac{dx}{dt} = 0 \tag{G.6}$$

gelten und somit gilt

$$\frac{\partial f(t,x)}{\partial t} = -\frac{\partial f(t,x)}{\partial x} \cdot \frac{dx}{dt} \tag{G.7}$$

G.4 Reaktionsterme

Es ist natürlich unrealistisch, dass das Phytoplankton nicht wächst. Im allgemeinen hat man also Prozesse wie Wachstum, Fraß und Mortalität. Diese bestimmen die zeitlich Veränderung des Systems. Man bezeichnet die zugehörigen Terme als **Reaktionsterme** bezeichnet. Physikalisch handelt es sich bei diesen Termen dann um **Quellen bzw. Senken**. Man kann also dann keine Massenerhaltung erwarten. Die Beziehung G.7 muss dann nicht mehr gelten, sondern man hat

$$\frac{\partial f(t,x)}{\partial t} = -\frac{\partial f(t,x)}{\partial x}\frac{dx}{dt} + R \tag{G.8}$$

wobei R nun die Reaktionsterme beschreibt.

G.5 Die Ableitung vektorwertiger 2-dimensionaler Funktionen

Gegeben sei eine Funktion, die einen zweidimensionalen Vektor als Argument erhält und einen zweidimensionalen Vektor zurückgibt. Eine solche Funktion ist z.B. beim

Lotka-Volterra-Modell gegeben. Das Modell

$$\begin{aligned}\dot{B} &= r \cdot B - b \cdot B \cdot R \\ \dot{R} &= b \cdot B \cdot R - s \cdot R\end{aligned}$$

kann man auch in der Form

$$\begin{pmatrix}\dot{B} \\ \dot{R}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}f_1(B,R) \\ f_2(B,R)\end{pmatrix}$$

schreiben. Hier ist nun die rechte Seite durch die Funktion $f = (f_1, f_2)$ gegeben, deren Komponentenfunktionen
$f_1(R,B) = r \cdot B - b \cdot B \cdot R$ und $f_2(R,B) = b \cdot B \cdot R - s \cdot R$
jede für sich skalar ist.

Allgemein handelt es sich also bei einer vektorwertigen 2-dimensionalen Funktion um eine Funktion der Form:

$$\begin{aligned}f : \mathbb{R}^2 &\longrightarrow \mathbb{R}^2 \\ (x,y) &\mapsto \begin{pmatrix}f_1(x,y) \\ f_2(x,y)\end{pmatrix}\end{aligned} \tag{G.9}$$

Die Ableitung der Funktion G.9 ist durch die sogenannte **Jacobi-Matrix** gegeben:

$$J(x,y) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1(x,y)}{\partial x} & \frac{\partial f_1(x,y)}{\partial y} \\ \frac{\partial f_2(x,y)}{\partial x} & \frac{\partial f_2(x,y)}{\partial y} \end{pmatrix} \tag{G.10}$$

Beispiel: $f(x,y) = (x^3 \cdot y, y^2 \cdot \sin(x))$

$$J(x,y) = \begin{pmatrix} 3x^2y & x^3 \\ y^2 \cdot \cos(x) & 2y \cdot \sin(x) \end{pmatrix}$$

H Skalierung von Modellen*

In ersten Teil dieses Skripts werden fast immer einheitenbehaftete Modelle untersucht. Wir haben zum Beispiel beim Lotka-Volterra-Modell die Wachstumsrate pro Tag und die Beute- und Räuberbiomasse in kg angegeben. Die ist anschaulich und vereinfacht den Vergleich mit Daten aus der Literatur. Für mathematische Untersuchungen ist es sinnvoll, die Zahl der Parameter möglichst zu reduzieren. ohne das qualitative Modellverhalten zu verändern. Parameter, die nur eine Skalierung der Systemvariablen oder der Zeit bewirken, also die betrachtete Einheit festlegen, aber sonst nichts an der Dynamik ändern, werden „wegskaliert“ („wegnormiert“) . Man erhält damit ein skaliertes Modell oder auch normiertes Modell.

H.1 Skalierung des logistischen Wachstumsmodells

Betrachtet man das Modell des logistischen Wachstums einer Bakterienpopulation mit der Zustandsgröße x in mg, und der Zeiteinheit von 20 min nach 4.4

$$\frac{dx(t)}{dt} = r \cdot \left(1 - \frac{x(t)}{K}\right) \cdot x(t)$$

so hat die Wachstumsrate r die Einheit $\frac{1}{20\text{min}}$ und die Bakterienkapazität K die Einheit mg. Zunächst führen wir eine neue Zustandsvariable $y = \frac{x}{K}$ ein. Wir betrachten also anstelle der einheitenbehafteten Größe x die nun dimensionslose Größe y. Man sagt, man betrachtet die Bakterienbiomasse nun in Einheiten der Kapazität. Die Größe y ist dimensionslos, da wir hier mg durch mg teilen. Für die neue Zustandsvariable gilt

$$\frac{dy(t)}{dt} = \frac{d\left(\frac{x(t)}{K}\right)}{dt} = \frac{1}{K} \cdot \frac{dx(t)}{dt} = \frac{r}{K} \cdot \left(1 - \frac{x(t)}{K}\right) \cdot x(t)$$

da K eine Konstante ist. Jetzt ersetzt man auf der rechten Seite alle x durch $y \cdot K$ und kürzt:

$$\frac{dy(t)}{dt} = \frac{r}{K} \cdot \left(1 - \frac{y(t) \cdot K}{K}\right) \cdot y(t) \cdot K = r \cdot (1 - y(t)) \cdot y(t)$$

Man hat nun also die Zustandsgröße skaliert und hat nun einen Parameter weniger. Die Kapazität des neuen Modells ist nun 1. Genauso verfährt man mit der Zeit.

Man lässt die Zeit nun in Einheiten von r laufen und erhält die neue Zeit s:

$$s(t) = r \cdot t \quad \text{also} \quad \frac{ds}{dt} = r$$

Nach der Kettenregel gilt

$$\frac{dy(t)}{dt} = \frac{dy(s)}{ds} \cdot \frac{ds}{dt} = r \cdot \frac{dy(s)}{ds}$$

Umstellen ergibt

$$\frac{dy(s)}{ds} = \frac{1}{r} \cdot \frac{dy(t)}{dt}$$

Zusammengefasst erhält man das neue skalierte Modell, das nun keine Parameter mehr hat.

$$\frac{dy(s)}{ds} = (1 - y(s)) \cdot y(s) \quad \text{kurz} \quad \dot{y} = (1 - y) \cdot y$$

Bei Modellsystemen kann man maximal einen Parameter durch die Zeitnormierung und jeweils einen Parameter pro Zustandsvariable los werden.

H.2 Skalierung des Lotka-Volterra-Modells

Das Räuber-Beute-Modell (5.1) nach Lotka und Volterra aus Abschnitt 5.1

$$\dot{B} = r \cdot B \; - \; b \cdot B \cdot R$$

$$\dot{R} = b \cdot B \cdot R \; - \; s \cdot R$$

hat den nicht-trivialen Fixpunkt $(\frac{s}{b}, \frac{r}{b})$. Das System wird nun so skaliert, dass dieser Fixpunkt bei $(1, 1)$ liegt. Dazu werden die neuen Zustandsvariablen $x = \frac{B}{B^*} = \frac{b}{s} \cdot B$ und $y = \frac{R}{R^*} = \frac{b}{r} \cdot R$ eingeführt. Diese neuen Zustandsvariablen sind dimensionslos, da sich die Einheit von B und B^* kürzen lässt (analog für R). Für die neuen

Zustandsvariablen gilt nun, da die Faktoren $\frac{b}{s}$ und $\frac{b}{r}$ Konstanten sind,

$$\dot{x} = \frac{b}{s} \cdot \dot{B} = \frac{b}{s} \cdot (r \cdot B - b \cdot B \cdot R)$$

$$\dot{y} = \frac{b}{r} \cdot \dot{R} = \frac{b}{r} \cdot (b \cdot B \cdot R - s \cdot R)$$

Man erhält mit $x = \frac{b}{s} \cdot B$ und $y = \frac{b}{r} \cdot R$ zunächst das System

$$\dot{x} = \frac{b}{s} \cdot \dot{B} = r \cdot x - b \cdot x \cdot R = r \cdot x - r \cdot x \cdot y$$

$$\dot{y} = \frac{b}{r} \cdot \dot{R} = b \cdot B \cdot y - s \cdot y = s \cdot x \cdot y - s \cdot y$$

in dem auch noch die Zeit skaliert werden kann. Dazu wird die neue Zeit $\tau = r \cdot t$ betrachtet[1]. Man lässt die Zeit nun in Einheiten von r „laufen“. Mit

$$\frac{dx(t)}{dt} = \frac{dx(\tau)}{d\tau} \cdot \frac{d\tau}{dt} = r \cdot \frac{dx(\tau)}{d\tau} \quad \text{und} \quad \frac{dy(t)}{dt} = \frac{dy(\tau)}{d\tau} \cdot \frac{d\tau}{dt} = r \cdot \frac{dy(\tau)}{d\tau}$$

gilt

$$\frac{dx(\tau)}{d\tau} = \frac{1}{r} \cdot (r \cdot x - r \cdot x \cdot y) = x - x \cdot y$$
$$\frac{dy(\tau)}{d\tau} = \frac{1}{r} \cdot (s \cdot x \cdot y - s \cdot y) = \frac{s}{r} \cdot (x \cdot y - y)$$

Das skalierte (normierte, dimensionslose) Modell lautet nun mit dem neuen Parameter $a = \frac{s}{r}$, wobei sich die Notation mit dem Punkt nun auf die neue Zeit bezieht:

$$\dot{x} = x - x \cdot y$$

$$\dot{y} = a \cdot (x \cdot y - y)$$

[1] Da mit s bereits die Sterberate benannt ist, wird die neue Zeit τ genannt

H.3 Skalierung des Rosenzweig-MacArthur-Modells

Das allgemeine Räuber-Beute-Modell (5.4) nach Rosenzweig und MacArthur Abschnitt 5.1

$$\dot{B} = r \cdot B \cdot \left(1 - \frac{B}{K}\right) - b \cdot \frac{B}{B+M} \cdot R$$

$$\dot{R} = n \cdot b \cdot \frac{B}{B+M} \cdot R - s \cdot R$$

kann mit $\varepsilon = \frac{1}{K}$ und $\kappa = \frac{1}{M}$ zu

$$\dot{B} = r \cdot B \cdot (1 - \varepsilon \cdot B) - c \cdot \frac{B}{1+\kappa \cdot B} \cdot R$$

$$\dot{R} = \gamma \cdot \frac{B}{1+\kappa \cdot B} \cdot R - \delta \cdot R$$

umformuliert werden, wobei nun $c = \frac{b}{M}$, $\delta = s$ und $\gamma = n \cdot c$ gilt. Die hat den Vorteil, dass das Modell für $\varepsilon = 0$ und $\kappa = 0$ in das Lotka-Volterra-Modell übergeht.

Durch Normierung von B, R und der Zeit t lässt sich die Zahl der freien Parameter auf drei reduzieren. Man kann ganz ähnlich wie beim Lotka-Volterra-Modell in (H.2) verfahren, aber es ist nicht ratsam, den positiven stationären Zustand auf (1, 1) zu fixieren, da seine Existenz von den verbleibenden Parametern abhängt. Mit den neuen Zustandsvariablen $B_N = \frac{s}{n \cdot c}$, $R_N = \frac{r}{c}$ und der neuen Zeit $t_N = \frac{1}{r}$ erhält man eine brauchbare Skalierung des Modells (Achtung, viel Rechenaufwand ;)

$$\dot{B} = \left((1 - \varepsilon\, B) - \frac{R}{1+\kappa B}\right) \cdot B \tag{H.1}$$

$$\dot{R} = \delta \cdot \left(\frac{B}{1+\kappa B} - 1\right) \cdot R$$

Hierbei wurden dann die Ns bereits wieder weggelassen. Das neue Modell hat nur noch drei Parameter.

I Stabilitätsanalyse autonomer Systeme*

In diesem Anhang wird die Stabilitätsanalyse zweidimensionaler Systeme vertieft. Der Anhang beinhaltet eine Weiterführung von Kapitel 5.1 und 11.1.1. Für die Analyse von Systemen mit mehr als zwei gekoppelten Differentialgleichung sei auf die Literatur zu dynamischen Systemen, z.B. [17] oder [7] verwiesen.

I.1 Fixpunkte

Die Fixpunkte autonomer Systeme mit zwei Zustandsvariablen der Form

$$\begin{aligned} \dot{X} &= f(X, Y) \\ \dot{Y} &= g(X, Y) \end{aligned} \tag{I.1}$$

lassen sich bestimmen, indem $f(X, Y) = 0$ und $g(X, Y) = 0$ gesetzt wird, und die Lösungen (X^*, Y^*) dieses Gleichungssystems bestimmt werden.

I.2 Geschlossene Bahnen

Im Gegensatz zu eindimensionalen Systemen können im zweidimensionalen Fall geschlossene Lösungsbahnen auftreten. Im Normalfall ist die geschlossene Bahn das Bild einer periodischen Lösung. Man nennt eine solche periodische Bahn stabil, wenn alle Bahnen, die in ihrer Nähe starten, zu dieser hin laufen. Man nennt solche stabilen Bahnen auch Grenzkreise. Periodische Bahnen können auch instabil sein. Es gilt der

Satz von Poincare

Bei autonomen Systemen mit zwei Zustandsvariablen läuft jede Lösung entweder

- auf einen stationären Zustand zu, oder
- nähert sich einer geschlossenen Kurve (Grenzkreis) an, oder
- läuft nach unendlich

I.2.1 Teilgleichgewichte (Isoklinen)

Für das System I.1 sind die Teilgleichgewichte durch die Mengen aller Punkte, für die $\dot{X} = 0$ bzw. $\dot{Y} = 0$ gilt, gegeben.

Teilgleichgewicht von $X = \{\dot{X} = 0\} = \{(X, Y) | f(X, Y) = 0\}$

Teilgleichgewicht von $Y = \{\dot{Y} = 0\} = \{(X, Y) |\ g(X, Y) = 0\}$

I.3 Stabilität der Fixpunkte

Ein Fixpunkt heißt stabil, wenn er die Lösungen aus seiner Nachbarschaft anzieht. Man nennt ihn aber auch dann noch stabil (marginal stabil), wenn sich die Lösungen zu allen Anfangspunkten in seiner Nachbarschaft nicht entfernen, also in der Nähe bleiben, ohne zu ihm hinzustreben.

Die Stabilität eines Fixpunkts kann wie im eindimensionalen Fall untersucht werden. Man betrachtet hierzu das System als Vektor

$$\begin{pmatrix} \dot{X} \\ \dot{Y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(X, Y) \\ g(X, Y) \end{pmatrix} \tag{I.2}$$

Analog zum eindimensionalen Fall entwickelt man die rechte Seite des Differentialgleichungssystems am Fixpunkt (X^*, Y^*) nach Taylor bis zum ersten Glied und erhält so das linearisierte System (ist für jeden Fixpunkt unterschiedlich!!):

$$\begin{pmatrix} \dot{x} \\ \dot{y} \end{pmatrix} = J(X^*, Y^*) \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \tag{I.3}$$

mit

$$J(X^*, Y^*) = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial f(X^*, Y^*)}{\partial X} & \dfrac{\partial f(X^*, Y^*)}{\partial Y} \\ \dfrac{\partial g(X^*, Y^*)}{\partial X} & \dfrac{\partial g(X^*, Y^*)}{\partial Y} \end{pmatrix} \tag{I.4}$$

Die Matrix $J := J(X^*, Y^*)$ (I.4) ist die Jacobi-Matrix des Systems. Die Komponenten der Jacobi-Matrix sind die partiellen Ableitungen von f und g nach X und Y jeweils an der Stelle(X^*, Y^*).

Das linearisierte System I.3 ersetzt in der Nähe des Fixpunkts (X^*, Y^*) das kompliziertere nichtlineare System I.1. Das linearisierte System ist am Fixpunkt (X^*, Y^*) entwickelt und gibt die Abweichung (Störung) von diesem an. Die Abweichung besteht darin, dass der „Rest", also die Summanden höherer Ordnung in der Taylorreihe, weggelassen wird. Die Idee dabei ist, dass man davon ausgeht, dass sich das Modell in der unmittelbaren Nähe des Fixpunkts nahezu linear verhält. Man untersucht nun also stellvertretend das lineare Modell, das seinen Fixpunkt bei (0,0) hat. Lineare Differentialgleichungssysteme sind analytisch lösbar. Hat die Matrix J zwei verschiedene Eigenwerte λ_1 und λ_2, so kann man eine allgemeine Lösung des linearen Systems I.3 angeben:

$$\vec{z(t)} = C_1 \cdot e^{\lambda_1 t} \cdot \vec{v_1} + C_2 \cdot e^{\lambda_2 t} \cdot \vec{v_2}$$

Hierbei ist $\vec{v_1}$ Eigenvektor zum Eigenwert λ_1 und $\vec{v_2}$ Eigenvektor zum Eigenwert λ_2, C_1 und C_2 sind freie Konstanten.

Um das Lösungsverhalten und damit die Stabilität des Fixpunkts zu bestimmen, reicht es aus, die Eigenwerte λ der Matrix J zu kennen und zu interpretieren. Sind beide Eigenwerte reell, so handelt es sich bei den Summanden entweder um exponentielles Wachstum oder exponentiellen Zerfall. Ist also einer der Eigenwerte größer Null, wächst die Störung, der Fixpunkt ist instabil. Sind beide Eigenwerte negativ, so verschwindet eine anfängliche Störung, der Fixpunkt ist stabil.

Für einen komplexen Eigenwert $\lambda = a + ib$ gilt

$$e^{\lambda t} = e^{(a+ib)t} = e^{at} \cdot e^{ibt} = e^{at} \cdot (\cos bt + i \sin bt)$$

Das System vollzieht also Schwingungen. Ist der Realteil a kleiner Null, so verschwindet die Störung, ist der Realteil a größer Null, so explodieren Störungen. Bei $a = 0$ bleiben Störungen erhalten. Über die Stabilität des Ursprungssystems kann dann nicht entschieden werden.

Bezüglich der Stabilität der Fixpunkte des Systems I.1 gilt der folgende Satz:

Stabilität der Fixpunkte autonomer Systeme

1. Der Fixpunkt (X^*, Y^*) des Systems I.1 ist asymptotisch stabil, falls alle Ei-

genwerte der Jacobi-Matrix I.4 negative Realteile besitzen.

2. Der Fixpunkt (X^*, Y^*) ist instabil, falls mindestens ein Eigenwert der Jacobi-Matrix I.4 einen positiven Realteil besitzt.

3. Sind alle Realteile aller Eigenwerte der Jacobi-Matrix I.4 kleiner oder gleich Null und mindestens ein Realteil gleich Null, so kann nicht über die Stabilität des Fixpunkts (X^*, Y^*) entschieden werden.

Sind beide Eigenwerte des linearisierten Systems reell und verschieden, so gibt es zwei Eigenrichtungen. Diese Richtungen sind selbst Lösungen und können von anderen Lösungen nicht überquert werden. Entlang der Eigenrichtungen bewegen sich die Lösungen in gerader Linie auf den Fixpunkt hin ($\lambda < 0$) oder weg ($\lambda > 0$). Die absolute Größe des Eigenwerts bestimmt dabei die Geschwindigkeit. Für Lösungen, die nicht auf einer Eigenrichtung starten, gibt es Einflugschneisen. Für z.B. $\lambda_1 = -0.1$ und $\lambda_2 = -1$ bewegt sich das System zuerst schnell in Richtung von v_2, und dann langsam in Richtung von v_1.

Sind die Eigenwerte komplex (genauer: nicht reell) gibt es keine reellen Eigenrichtungen. Das System bewegt sich an keiner Stelle radial auf den Fixpunkt zu.

Hat das linearisierte System zwei verschiedene negative, reelle Eigenwerte besitzt, so heißt der Fixpunkt stabiler Knoten, sind die Eigenwerte beide positiv heißt der Fixpunkt instabiler Knoten. Sind die Eigenwerte komplex und haben beide negative Realteile, so heißt der Fixpunkt stabiler Fokus, sind die Realteile beide positiv, so heißt der Fixpunkt instabiler Fokus. Ein Fixpunkt, an dem das linearisierte System einen positiven und einen negativen Eigenwert, bzw. einen positiven und einen negativen Realteil besitzt, heißt Sattel. Die sind die 5 Hauptfälle. Bei zusammenfallenden Eigenwerten und bei Eigenwerten, die Null werden, gibt es weitere Formen des Systemverhaltens (siehe Abb. I.1 und Tab. I.1), auf die hier nicht näher eingegangen wird.

Bemerkung: Die Bezeichnungen der Fixpunkte sind in der Literatur leider nicht eindeutig.

Um das Systemverhalten in der Nähe des betrachteten Fixpunkts zu bestimmen, müssen also nur die Eigenwerte der Matrix J berechnet werden. Die Eigenwerte λ

sind die Lösungen der quadratischen Gleichung $\det(J - \lambda I) = 0$ (siehe Anhang F). Man kann leicht ausrechnen, dass die Lösungen nur von der Spur

$$\tau = \frac{\partial f(X^*, Y^*)}{\partial X} + \frac{\partial g(X^*, Y^*)}{\partial Y} \tag{I.5}$$

und Determinante

$$\Delta = \frac{\partial f(X^*, Y^*)}{\partial X} \cdot \frac{\partial g(X^*, Y^*)}{\partial Y} - \frac{\partial f(X^*, Y^*)}{\partial Y} \cdot \frac{\partial g(X^*, Y^*)}{\partial X} \tag{I.6}$$

der Matrix J abhängen. Die Lösungen (Eigenwerte) lauten:

$$\lambda_{1,2} = \frac{\tau}{2} \pm \sqrt{\frac{\tau^2}{4} - \Delta} \tag{I.7}$$

Aus Spur τ und Determinante Δ kann der Typ des Fixpunkts ermittelt, ohne die Eigenwerte (I.7) zu berechnen. Darauf basiert auch die Darstellung in der τ-Δ-Ebene (Abbildung I.1). Die Darstellungen in Abbildung I.1 gelten nur in der Nähe der Fixpunkte. Weiter weg können sich die Bahnen infolge der Nichtlinearitäten des Systems „irgendwie“ verhalten. Es ist also, als hätte man in Abbildung I.1 eine Lupe benutzt, um die Umgebung des Fixpunkts zu untersuchen. In Tabelle

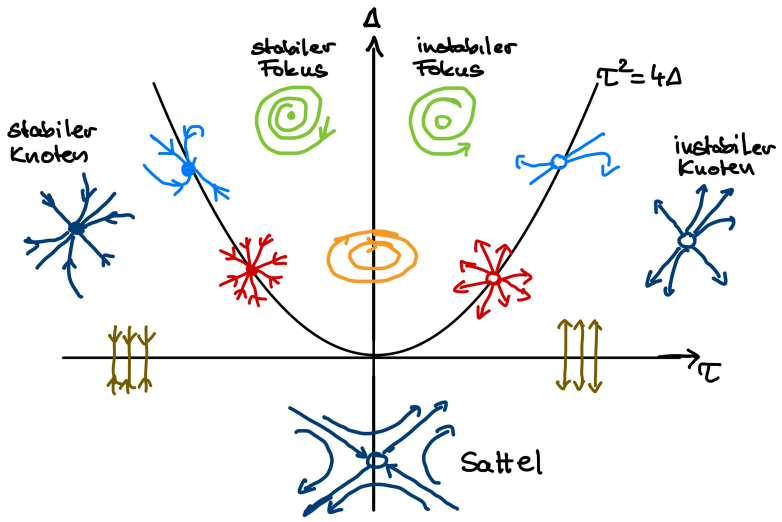


Abbildung I.1: Stabilität der Fixpunkte autonomer Systemen mit zwei Variablen in Abhängigkeit von der Spur τ und der Determinante Δ der Jacobi-Matrix. Benannt sind die 5 Hauptfälle. Die Grenzfälle sind der stabile und der instabile Stern (rot), das Zentrum (orange) , der stabile und instabile degenerierte Knoten (hellblau) und die Grenzfälle, bei denen die Determinante verschwindet (braun).

I.1 sind alle Vorzeichenmöglichkeiten der Eigenwerte aufgelistet. Bei komplexen Eigenwerten unterscheidet man nach dem Vorzeichen des Realteils. Außerdem sind in der Tabelle die Sonderfälle Zentrum, Stern und Grenzfälle berücksichtigt. Man muss unterscheiden, ob die Matrix J ein Vielfaches der Einheitsmatrix I ist oder nicht.

Der jeweils größere von zwei reellen Eigenwerte wird als λ_1 bezeichnet, der kleinere als λ_2 . Es ist immer der größte Eigenwert, bei komplexen der mit dem größtem Realteil, der das Verhalten in der Nähe des stationären Zustandes dominant bestimmt!

Im nicht linearisierten Ausgangssystem (I.1) kann die Stabilität der marginal stabilen Fälle durch die bei der Linearisierung weggelassenen Terme höherer Ordnung beeinflusst werden. Besonders kritisch ist das, wenn die Jacobi-Matrix die Nullmatrix ist. Dann findet im linearisierten System keine Bewegung statt, das Systemverhalten des nichtlinearen Ausgangssystems wird nur durch die Nichtlinearitäten bestimmt.

I.4 Analyse des skalierten Rosenzweig MacArthur-Modell

Als Beispielsystem wählen wir das allgemeine Räuber-Beute-Modell (5.4) nach Rosenzweig und MacArthur aus Abschnitt 5.1 in der skalierten Form (H.1):

$$\dot{B} = (1 - \varepsilon B) \cdot B \; - \; \frac{R}{1 + \kappa B} \cdot B$$

$$\dot{R} = \delta \frac{B}{1 + \kappa B} \cdot R \; - \delta R$$

Das System hat die Parameter ε, κ und δ, für die angenommen wird, dass sie alle größer oder gleich Null sind. Für $\varepsilon = 0$ und $\kappa = 0$ hat man das skalierte Lotka-Volterra-Modell nach Gleichung 5.1. Das System hat 3 Fixpunkte

1. B^*=0 und $R^* = 0$ (trivial)
2. $B^* = \frac{1}{\varepsilon}$ und $R^* = 0$ (Beute ohne Räuber, bei $\varepsilon > 0$)

$A \neq aI$	**Determinante**	**Spur**	**Bezeichnung**	**Stabilität**
$\lambda_{1,2}$ komplex, $\mathrm{Re}(\lambda) < 0$	$\Delta > \frac{\tau^2}{4}$	$\tau < 0$	Fokus	stabil
$\lambda_{1,2}$ imaginär, $\mathrm{Re}(\lambda) = 0$	$\Delta > \frac{\tau^2}{4}$	$\tau = 0$	Zentrum	marginal stabil
$\lambda_{1,2}$ komplex, $\mathrm{Re}(\lambda) > 0$	$\Delta > \frac{\tau^2}{4}$	$\tau > 0$	Fokus	instabil
$\lambda_2 < \lambda_1 < 0$	$0 < \Delta < \frac{\tau^2}{4}$	$\tau < 0$	Knoten	stabil
$\lambda_2 < \lambda_1 = 0$	$\Delta = 0$	$\tau < 0$	Grenzfall Null	marginal stabil
$\lambda_2 < 0 < \lambda_1$	$\Delta < 0$		Sattel	instabil
$0 = \lambda_2 < \lambda_1$	$\Delta = 0$	$\tau > 0$	Grenzfall Null	instabil
$0 < \lambda_2 < \lambda_1$	$0 < \Delta < \frac{\tau^2}{4}$	$\tau > 0$	Knoten	instabil
$\lambda_2 = \lambda_1 < 0$	$\Delta = \frac{\tau^2}{4}$	$\tau < 0$	degenerierter Knoten	stabil
$\lambda_2 = \lambda_1 = 0$	$\Delta = 0$	$\tau = 0$	lineare Bewegung	instabil
$\lambda_2 = \lambda_1 > 0$	$\Delta = \frac{\tau^2}{4}$	$\tau > 0$	degenerierter Knoten	instabil
$A = aI$				
$\lambda_2 = \lambda_1 < 0$	$a < 0$		Stern	stabil
$\lambda_2 = \lambda_1 = 0$	$a = 0$		ohne Bewegung	marginal stabil
$\lambda_2 = \lambda_1 > 0$	$a > 0$		Stern	instabil

Tabelle I.1: Phänomenologie der Fixpunkte autonomer Systemen mit zwei Variablen in Abhängigkeit von den Eigenwerten λ der Jacobi-Matrix J.

3. $B^* = \frac{1}{1-\kappa}$ und $R^* = \frac{1-\kappa-\varepsilon}{(1-\kappa)^2}$ (positiver stationärer Zustand)

Der positive stationäre Zustand existiert im Zustandsraum $(B, R \geq 0)$, wenn $\kappa + \varepsilon < 1$ erfüllt ist. Für $\kappa + \varepsilon = 1$ fällt der Zustand (3) mit Zustand (2) zusammen. Die Jacobi-Matrix des System lautet

$$J(B,R) = \begin{bmatrix} 1 - 2\,\varepsilon\,B - \dfrac{R}{(1+\kappa\,B)^2} & -\dfrac{B}{1+\kappa\,B} \\ \delta\dfrac{R}{(1+\kappa\,B)^2} & \delta\left(\dfrac{B}{1+\kappa\,B} - 1\right) \end{bmatrix} \tag{I.8}$$

Stabilität von $(B_1^*, R_1^*) = (0,0)$

Für $(B_1^*, R_1^*) = (0,0)$ erhält man

$$J(B_1^*, R_1^*) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -\delta \end{bmatrix} \tag{I.9}$$

Damit gilt $\det J < 0$, der Zustand ist instabil.

Stabilität von $(B_2^*, R_2^*) = (\frac{1}{\varepsilon}, 0)$ **(Beute ohne Räuber)**

Für $(B_2^*, R_2^*) = (\frac{1}{\varepsilon}, 0)$ erhält man

$$J(B_2^*, R_2^*) = \begin{bmatrix} -1 & -\dfrac{1}{\kappa+\varepsilon} \\ 0 & \delta\left(\dfrac{1}{\kappa+\varepsilon} - 1\right) \end{bmatrix} \tag{I.10}$$

Es gilt

$$\det J = \delta\left(1 - \frac{1}{\kappa+\varepsilon}\right)$$

1. Fall $\kappa + \varepsilon < 1$, Zustand 3 existiert:
   $\det J < 0$, der Zustand 2 ist instabil.

2. Fall $\kappa + \varepsilon > 1$, Zustand 3 existiert nicht:
   $\det J > 0$ und spur $J = -1 + \delta\left(\frac{1}{\kappa+\varepsilon} - 1\right) < 0$, der Zustand 2 ist stabil.

3. Fall $\kappa + \varepsilon = 1$, Zustand 2 und 3 fallen zusammen:
   $\det J = 0$, es ist keine Entscheidung über die Stabilität des Zustands 2 möglich.

Stabilität von $(B_3^*, R_3^*) = \left(\frac{1}{1-\kappa}, \frac{1-(\kappa+\varepsilon)}{(1-\kappa)^2}\right)$

Der Zustand 3 existiert für $\kappa + \varepsilon < 1$.

$$J(B_3^*, R_3^*) = \begin{bmatrix} -\varepsilon\frac{1+\kappa}{1-\kappa} + \kappa & -1 \\ \delta\left(1-(\kappa+\varepsilon)\right) & 0 \end{bmatrix} \tag{I.11}$$

Für $\kappa + \varepsilon < 1$ gilt $\Delta = \det J = \delta\left(1-(\kappa+\varepsilon)\right) > 0$.
Für $-\varepsilon\frac{1+\kappa}{1-\kappa} + \kappa < 0$ gilt $\tau = \text{spur } J = -\varepsilon\frac{1+\kappa}{1-\kappa} + \kappa < 0$.

Damit ist Zustand 3 für

$$\varepsilon > \kappa\frac{1-\kappa}{1+\kappa}$$

stabil.

Das Verhalten des Systems für $\delta = 1$, $\kappa = 0.5$ und verschiedene ε ist in Abbildung I.2 dargestellt. Die Stabilität des 3. Fixpunkts in Abhängigkeit von ε und κ

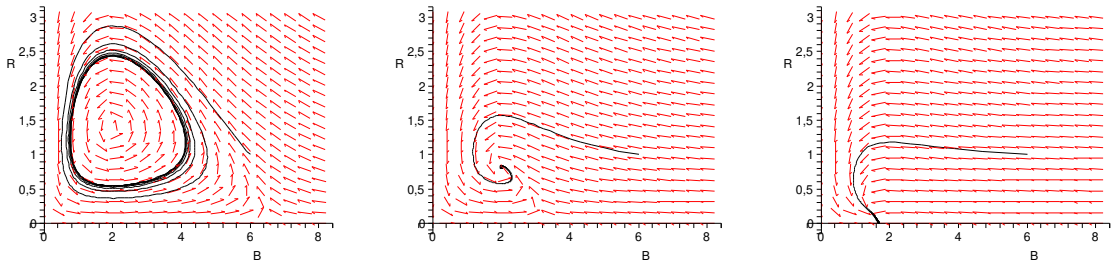


Abbildung I.2: Phasendiagramm für das skalierte allgemeine Räuber-Beute-Modell nach H.1 mit den Parametern $\delta = 1$, $\kappa = 0.5$ und $\varepsilon = 0.15$ (links), $\varepsilon = 0.3$ (Mitte) und $\varepsilon = 0.6$ (rechts) und den Startwerten $B_0 = 6$ und $R_0 = 1$.

ist in Abbildung I.3 für $\delta = 0.2$ dargestellt.

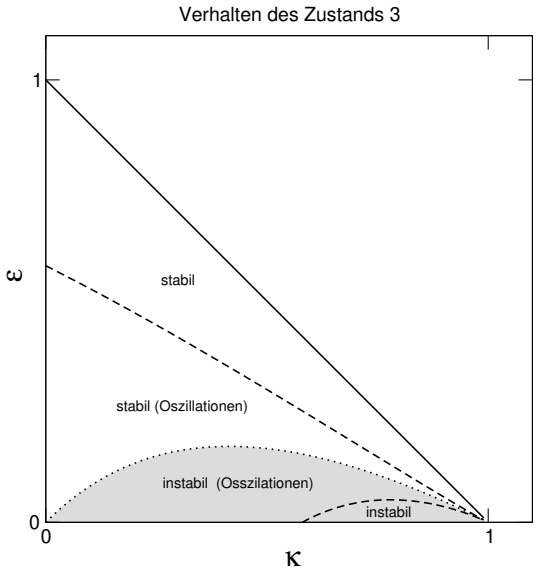


Abbildung I.3: Stabilität des 3. Fixpunkts (Räuber und Beute existieren) des verallgemeinerten skalierten Räuber-Beute-Systems nach Rosenzweig-MacArthur in Abhängigkeit von κ und ε für $\delta = 0.2$.

I.4.1 Teilgleichgewichte (Isoklinen)

DasTeilgleichgewicht von B trennt die Bereiche des Zustandsraums, in denen die Bewegung nach rechts bzw. links erfolgt (senkrechte Linien in Abb. I.4). Das Teilgleichgewicht von R trennt die Bereiche des Zustandsraums, in denen die Bewegung nach oben bzw. unten erfolgt (nach unten geöffnete Parablen in Abb. I.4). Die Schnittpunkte der Teilgleichgewichte sind gerade die Fixpunkte.

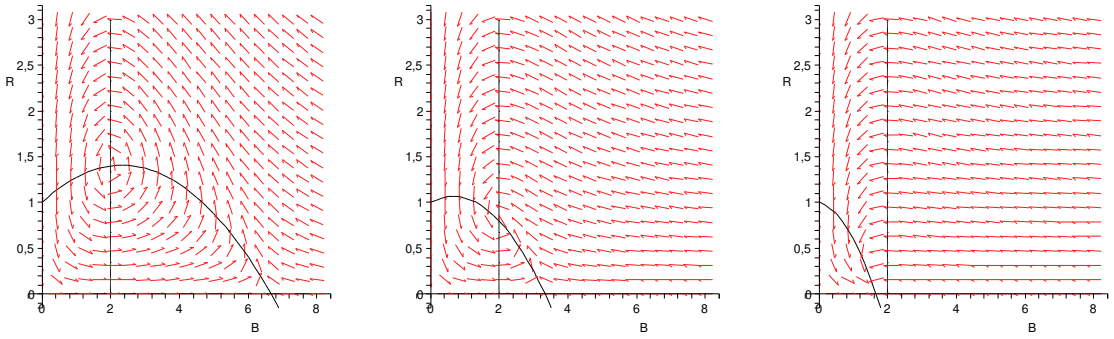


Abbildung I.4: Teilgleichgewichte für das skalierte allgemeine Räuber-Beute-Modell mit den Parametern $\delta = 1$, $\kappa = 0.5$ und $\varepsilon = 0.15$ (links), $\varepsilon = 0.3$ (Mitte) und $\varepsilon = 0.6$ (rechts). Die senkrechte Linie zeigt das Teilgleichgewicht $\{\dot{R} = 0\}$, die Parabel zeigt das Teilgleichgewicht $\{\dot{B} = 0\}$.

I.4.2 Analyse des SIR-Modells

Zur Untersuchung des SIR-Modells (Abschnitt 11.1) wird vereinfachend eine konstante Bevölkerung $N = S + I + R$ angenommen. In diesem Fall kann R aus den Zustandsgrößen S und I bestimmt werden und es reicht, das SI-Modell (11.2) zu untersuchen. Die Fixpunkte des Modells

$$\dot{S} = -\beta \cdot \frac{I}{N} \cdot S$$

$$\dot{I} = \beta \cdot \frac{I}{N} \cdot (S - \rho)$$

sind alle Punkte $(S^*, I^*) = (S, 0), S \geq 0$. Damit besteht die gesamte S-Achse aus Fixpunkten. Es kann somit keine asymptotische Stabilität erwartet werden, da die Fixpunkte dicht nebeneinander liegen. Die Linearisierung des Modells 11.2 ergibt die Jacobimatrix

$$J(S^*, I^*) = \begin{bmatrix} -\beta I^* & -\beta S^* \\ \beta I^* & \beta (S^* - \rho) \end{bmatrix} \tag{I.12}$$

Für $(S^*, I^*) = (S, 0)$ gilt $\tau = \text{spur } J = \beta (S - \rho)$ und $\Delta = \det J = 0$, und man erhält die Eigenwerte

$$\lambda_1 = \beta (S - \rho)$$
$$\lambda_2 = 0$$

Für $S > \rho$ gilt $\lambda_1 > 0$. In diesem Fall ist der Fixpunkt $(S, 0)$ instabil, die Epidemie bricht aus. Da $\lambda_2 = 0$, gibt es keine asymptotisch stabilen Fixpunkte. Für $S < \rho$ ist $(S, 0)$ (marginal) stabil, die Infizierten verschwinden.

J Vergleich der Stabilitätsanalyse diskreter und kontinuierlicher linearer Modelle*

Das DGL-System

$$\dot{x} = A \cdot x \qquad A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \tag{J.1}$$

hat den Fixpunkt $x^* = (0, 0)$.

Hat die Matrix A zwei verschiedene Eigenwerte λ_1^A und λ_2^A, so kann man eine allgemeine Lösung des linearen Systems angeben:

$$x(\vec{t}) = C_1^A \cdot e^{\lambda_1^A \cdot t} \cdot \vec{v}_1^A + C_2^A \cdot e^{\lambda_2^A \cdot t} \cdot \vec{v}_2^A$$

Hierbei ist $\vec{v}_1^A$ Eigenvektor zum Eigenwert λ_1^A und $\vec{v}_2^A$ Eigenvektor zum Eigenwert λ_2^A, C_1^A und C_2^A sind freie Konstanten.

Damit ist der Fixpunkt x^* stabil, wenn $\lambda_{1,2}^A < 0$

Für die Eigenwerte des Systems gilt

$$\lambda_{1,2}^A = \frac{a+d}{2} \pm \sqrt{\frac{(a+d)^2}{4} - (ad - bc)}$$

Das zum DGL System J.1 zugehörige diskrete System lautet

$$x_n = x_{n-1} + A \cdot x_{n-1} = (I + A) \cdot x_{n-1} \tag{J.2}$$

und hat ebenfalls den Fixpunkt $x^* = (0, 0)$.

Hat die Matrix $I + A$ zwei verschiedene Eigenwerte λ_1 und λ_2, so kann man eine allgemeine Lösung des diskreten linearen Systems angeben:

$$x_n = c_1 \cdot \lambda_1^n \cdot \vec{v_1} + c_2 \cdot \lambda_2^n \cdot \vec{v_2}$$

mit den freien Konstante c_1 und c_2. $\vec{v_1}$ ist Eigenvektor zum Eigenwert λ_1 und $\vec{v_2}$ Eigenvektor zum Eigenwert λ_2. Der Fixpunkt $x^* = (0, 0)$ ist stabil, wenn $|\lambda_{1,2}| < 1$

Die Eigenwerte der Matrix $I + A$ lauten:

$$\lambda_{1,2} = \frac{(a+1)+(d+1)}{2} \pm \sqrt{\frac{((a+1)+(d+1))^2}{4} - ((a+1)(d+1) - bc)}$$

$$= 1 + \frac{a+d}{2} \pm \sqrt{\frac{(a+d)^2}{4} - (ad - bc)}$$

$$= 1 + \lambda^A_{1,2}$$

Der Zustand $x^* = (0, 0)$ des diskreten Systems ist also insbesondere stabil, wenn die Eigenwerte des kontinuierlichen Systems reell, negativ und betragsmäßig kleiner 1 sind.

K Griechische Buchstaben

Groß	Klein	Deutscher Name
A	α	Alpha
B	β	Beta
Γ	γ	Gamma
Δ	δ	Delta
E	ε	Epsilon
Z	ζ	Zeta
H	η	Eta
Θ	ϑ	Theta
I	ι	Iota
K	κ	Kappa
Λ	λ	Lambda
M	μ	My
N	ν	Ny
Ξ	ξ	Xi
O	o	Omikron
Π	π	Pi
P	ϱ	Rho
Σ	σ	Sigma
T	τ	Tau
Υ	υ	Ypsilon
Φ	ϕ	Phi
X	χ	Chi
Ψ	ψ	Psi
Ω	ω	Omega

Literaturverzeichnis

[1] M. an der Heiden and U. Buchholz. Modellierung von Beispielszenarien der SARS-CoV-2-Epidemie 2020 in Deutschland. 2020.

[2] M.F. Barnsley and H. Rising. *Fractals Everywhere*. Elsevier Science, 1993.

[3] Center for Systems Science and Engineering. Covid-19 data repository, 2020.

[4] The MathWorks Inc. *MATLAB version: 25.1.0 (R2025a)*. The MathWorks Inc., Natick, Massachusetts, United States, 2025.

[5] IPCC. Klimaänderung 2013: Naturwissenschaftliche Grundlagen. Häufig gestellte Fragen und Antworten, 2017.

[6] IPCC. Summary for policymakers, 2021.

[7] Gottfried Jetschke. *Mathematik der Selbstorganisation*. Vieweg+Teubner Verlag, Wiesbaden, 1989.

[8] W.O. Kermack and A.G. McKendrick. A contribution to the mathematical theory of epidemics. *Proc. Roy. Soc. Lond. A*, 115:700–721, 1927.

[9] A.J. Lotka. *Elements of Physical Biology*. Williams and Wilkins, 1925.

[10] B.B. Mandelbrot. *Die Fraktale Geometrie der Natur*. Birkhäuser Basel, 1987.

[11] Jochem Marotzke. Abrupt climate change and thermohaline circulation: Mechanisms and predictability. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 97(4):1347–1350, February 2000.

[12] Stefan Rahmsdorf. Kipppunkt voraus? *Spektrum der Wissenschaft*, (5.25), 2025.

[13] RKI. Rki ratgeber masern. abgerufen 19.1.2026.

[14] M.L. Rosenzweig and R.H. MacArthur. Graphical representation and stability conditions of predator-prey interactions. *American Naturalist*, 97(895):209–223, 1963.

[15] U. Sommer. *Biologische Meereskunde*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, 2 edition, 2005.

[16] Henry Stommel. Thermohaline Convection with Two Stable Regimes of Flow. *Tellus*, 13(2):224–230, May 1961.

[17] Steven H. Strogatz. *Nonlinear dynamics and chaos: with applications to physics, biology, chemistry, and engineering*. Westview Press, a member of the Perseus Books Group, Boulder, CO, second edition edition, 2015. OCLC: ocn842877119.

[18] Jörn Stypa. Charakterisierung des menschlichen Bronchialbaums als Fraktal. Diplomarbeit, Westfälische Wilhelms-Universität, Münster, 1997.

[19] V. Volterra. Variazioni e fluttuazioni del numero d'individui in specie animali conviventi. *Mem. Acad. Lincei Roma*, 2:31–113, 1926.

[20] S. Wolfram. *A New Kind of Science*. 2002.

[21] R. Zeebe and D. Wolf-Gladrow. *CO2 in Seawater: Equilibrium, Kinetics, Isotopes*. Elsevier Oceanography Series, Amsterdam, 2001.

Index

Abbruchfehler, 229, 247
Ableitung, 20, 48, 51, 60, 94, 96, 99, 203, 206, 218–221, 226, 227, 229, 231, 237, 238, 261–265, 272
Abtasttheorem, 26, 28
Additionstheorem, 206
Advektion, 91, 92, 95, 98, 99
Advektionsgleichung, 91, 92, 94, 95, 98, 99
Agent, 104
AIDS, 107, 184–188
Alkalinität, 197, 198
Altersklassenmodell, 83, 84
AMOC, 131–133, 136
Anfangswertproblem, 43, 44, 80, 239, 240
anorganischer Kohlenstoff, 193, 195, 198–200
Ansteckungsrate, 175, 185, 186
Antrieb (Forcing), 155, 160, 162
Atlantische meridionale Umwälzzirkulation, 131–133, 136
Automaten
  Regelsatz, 89
autonome Differentialgleichung, 71

Basisreproduktionszahl, 111–113, 117
Bevölkerungsstruktur, 12, 186
Borkenkäfer, 143, 144, 146, 149

Cantor-Menge, 118–122
Chaos-Spiel, 122
charakteristisches Polynom, 258
Courant-Friedrichs-Lewy-Kriterium, 98
Courant-Zahl, 94
Covid-19, 8, 179, 180

Determinante, 125, 255–257, 275
Differentialgleichung, 42–45, 48, 51, 52, 94, 134, 173, 237–241, 244, 271
Differentialgleichungsmodell, 42, 58
Diffusion, 91, 92, 95, 98–100
Diffusionskonstante, 95, 96, 100
Dimension, 61, 62, 67, 120–122, 153, 154, 156, 158, 253–256
Dirichlet-Problem, 96, 102
diskretes Modell, 43
Diskretisierung, 92, 94–99
Dämpfung, 66

Eigenvektor, 79–81, 85, 258–260, 273, 282
Eigenwert, 79–81, 85, 86, 258, 259, 273–276, 281–283
Eigenwertgleichung, 258, 259
Einheit, 23, 54, 59, 61, 62, 67, 71, 95, 137, 153, 156, 158–160, 171, 173, 190, 191, 194, 199, 211, 212, 217, 233, 235, 267–269
empirisches Modell, 12
Epidemie, 107, 109–117, 175, 179, 187–189, 281
Epidemiemodelle, 107, 108, 113, 115, 175, 176, 184
  AIDS, 107, 184–188
  Ansteckungsrate, 175, 185, 186
  Basisreproduktionszahl, 111–113, 117
  Covid-19, 8, 179, 180
  Epidemie, 107, 109–117, 175, 179, 187–189, 281
  HIV-Infektion, 184, 189
  Infektionsrisiko, 109, 185
  Inkubationszeit, 107, 175, 184, 187, 188
  Latenzzeit, 22–24, 107, 181
  SARS-CoV-2, 107, 179
  Schwellenwert, 111

susceptible, 108, 177, 179, 181
Euler-Verfahren, 44, 45, 229, 244, 245
Exponentialfunktion, 12, 205–207, 217

Fibonacci-Zahl, 75, 78, 82
Fixpunkt, 37, 49–51, 54–56, 63–65, 86, 110, 111, 135, 136, 145, 268, 271–276, 280–282
Fließgleichgewicht, 86, 186
Fourieranalyse, 25, 26, 29, 103
  Fourierkoeffizient, 26
  Fourierreihe, 26
  Fouriersumme, 26, 27
  Harmonische, 26–28
Fourierkoeffizient, 26
Fourierreihe, 26
Fouriersumme, 26, 27
Fraktal, 118–122, 129
Fraktale
  iteriertes Funktionensystem, 125
  Cantor-Menge, 118–122
  Chaos-Spiel, 122
  Fraktal, 118–122, 129
  Julia-Menge, 127, 128
  Kästchenzählmethode, 121, 122
  Mandelbrot-Menge, 126–128
  Selbstähnlichkeit, 118
  Sierpinski-Dreieck, 119, 121, 123
FTCS (forward in time centered in space), 97

Game of Life, 87, 89
  Gleiter, 89
Gauß-Verteilung, 187
General Circulation Model, 106
Gleichgewichtskonstante, 194, 196, 198
Gleichgewichtsreaktion, 191, 194
Gleichungssystem, 63, 81, 197, 198, 256, 258
Gleiter, 89
goldener Schnitt, 82
Golfstrom, 131
Gradient, 94, 96, 97, 102, 262
Grenzkreis, 69

Halbgleichgewicht, 65
Halbsättigungskonstante, 53, 67, 68, 139, 140
Harmonische, 26–28
Heun-Verfahren, 245
HIV-Infektion, 184, 189
Hysterese, 136, 145, 146

Infektionsrisiko, 109, 185
Inkubationszeit, 107, 175, 184, 187, 188
intraspezifische Konkurrenz, 58
Inverse, 255
Isokline, 65, 110, 111, 272, 280
iteriertes Funktionensystem, 125

Julia-Menge, 127, 128

Kapazität, 35–37, 39, 53, 66, 139, 144, 267
Karbonat, 193, 195, 198
Kettenregel, 219, 226, 263, 268
Klima, 131
komplexe Zahl, 216, 217
Konsistenz, 62, 153, 161
Kontinuitätsgleichung, 95
Kosinus, 73, 214, 215
Kästchenzählmethode, 121, 122

Lagrange-Modell, 106
Latenzzeit, 22–24, 107, 181
laufender Mittelwert, 182
Leslie-Matrix, 84
lineare Regression, 12, 17, 19, 21
Lipschitz-Bedingung, 48
Logarithmus, 23, 78, 205, 206, 208
Lotka-Volterra-Modell, 58, 61, 62, 66, 116, 265, 267, 270, 276
Lösungskurve, 48, 56, 64, 110, 111, 185

Mandelbrot-Menge, 126–128
Massenerhaltung, 100, 263, 264
Massenwirkungsgesetz, 194

Matrix, 77, 79, 80, 83–85, 252–258, 265, 272–276, 278, 281–283
  charakteristisches Polynom, 258
  Determinante, 125, 255–257, 275
  Eigenvektor, 79–81, 85, 258–260, 273, 282
  Eigenwert, 79–81, 85, 86, 258, 259, 273–276, 281–283
  Eigenwertgleichung, 258, 259
  Inverse, 255
  Norm, 250, 252
  Spur, 105, 255, 275
  Transponierte, 255
Mehrdimensionale Analysis, 261
Methode der kleinsten Quadrate, 12, 19, 21, 23, 27
Modell
  diskretes Modell, 43
  empirisches Modell, 12
  prozessorientiertes Modell, 12
  qualitatives Modell, 11
  räumliches Modell, 143
  stochastisches Modell, 13
  Lagrange-Modell, 106
  Lotka-Volterra-Modell, 58, 61, 62, 66, 116, 265, 267, 270, 276
  Rosenzweig-MacArthur-Modell, 65, 69, 71
  Räuber-Beute-Modell, 58, 59, 69, 115, 137, 268, 270, 276
  Schafe, 52, 53, 55, 56
  SI-Modell, 110, 116, 281
  SIR-Modell, 108, 109, 115, 179, 181
  SIS-Modell, 116
  Stommel-Modell, 131–133, 136
  Tracer-Modell, 106
Modellsimulation, 14, 61, 69, 156, 161, 164, 167, 169, 189
Modulo-Funktion, 157, 217
Monod-Funktion, 67, 172, 215, 216
Mortalitätsrate, 180

Nabla, 262
Nachbarschaft, 90, 272
Neumann-Problem, 96, 102
nicht-autonome Differentialgleichung, 238
Norm, 250, 252
numerische Diffusion, 95, 100
Numerische Verfahren
  FTCS (forward in time centered in space), 97
  Euler-Verfahren, 44, 45, 229, 244, 245
numerische Verfahren
  Heun-Verfahren, 245
  Runge-Kutta-Verfahren, 244–246
  Upstream-Schema, 94, 100

Oszillation, 66

Pandemie, 8, 107
partielle Ableitung, 218, 261
per capita growth rate, 62
Periodenlänge, 25, 214
pH-Wert, 193–197, 200, 208
Phasendiagramm, 65
Phasenraum, 64, 65, 79, 110, 111
Picard-Lindelöf, 48, 238
Potenzgesetz, 204
pq-Formel, 135
prozessorientiertes Modell, 12

qualitatives Modell, 11

Radiokarbonmethode, 208
Randbedingung, 91, 96, 102, 103, 155
Regelsatz, 89
Regression
  Methode der kleinsten Quadrate, 12, 19, 21, 23, 27
  lineare Regression, 12, 17, 19, 21
  Regressionskoeffizient, 17, 24, 26
Regressionskoeffizient, 17, 24, 26
Richtungsfeld, 47, 48, 56, 64, 65, 238, 239

Robustheit, 104
Rosenzweig-MacArthur-Modell, 65, 69, 71
Runge-Kutta-Verfahren, 244–246
Räuber-Beute-Modell, 58, 59, 69, 115, 137, 268, 270, 276
räumliches Modell, 143

SARS-CoV-2, 107, 179
Schafe, 52, 53, 55, 56
Schwellenwert, 111
Selbstorganisation, 89, 105
Selbstähnlichkeit, 118
Senke, 132, 264
Sensitivitätsanalyse, 148
SI-Modell, 110, 116, 281
Sierpinski-Dreieck, 119, 121, 123
sigmoide Kurve, 144
Sinus, 25, 26, 214, 215, 217, 223
SIR-Modell, 108, 109, 115, 179, 181
SIS-Modell, 116
skalare Funktion, 261, 264
Skalarprodukt, 251, 252, 263
Skalierung, 10, 147, 207, 235, 267, 268, 270
Spaltenvektor, 251, 253, 254
Spur, 105, 255, 275
Stabilität, 49, 50, 52, 53, 55, 56, 111, 135, 136, 272, 273, 276, 278, 279, 281
Stabilitätsanalyse, 9, 64, 271, 282
stationärer Zustand, 63, 117
stochastisches Modell, 13
Stoffwechselgeschwindigkeit, 67
Stommel-Modell, 131–133, 136
Strömungsfeld, 13, 106
stöchiometrische Gleichung, 190
Superposition, 81
susceptible, 108, 177, 179, 181
Systemverhalten, 14, 80, 104, 110, 274, 276
Sättigung, 67, 140, 144

Taylorpolynom, 99, 228, 229, 247
Teilgleichgewicht, 65, 110, 111, 272, 280
Thermodynamik, 69
thermohaline Zirkulation, 131
Torus, 91
totales Differential, 263
Tracer-Modell, 106
Trajektorie, 64
transienter Effekt, 187
Transmissionsrate, 181, 182
Transponierte, 255
Transportprozesse
  numerische Diffusion, 95, 100
  Advektion, 91, 92, 95, 98, 99
  Diffusion, 91, 92, 95, 98–100
  Diffusionskonstante, 95, 96, 100
  Golfstrom, 131
  Kontinuitätsgleichung, 95
  Senke, 132, 264

Upstream-Schema, 94, 100

Vektor, 48, 78–80, 85, 86, 249–252, 254, 256–258, 260–262, 264, 272

Wachstum, 17–19, 21, 30, 33–40, 42, 43, 45–47, 49, 51, 53, 58, 59, 62, 66, 67, 73, 78, 104, 137, 139, 143, 144, 147, 170, 264, 267, 273
Wahrscheinlichkeitsdichte, 187
Wolfram, 87, 88

Zeilenvektor, 251, 254
zelluläre Automaten
  Game of Life, 87, 89
  Wolfram, 87, 88
Zellulärer Automat, 87, 90, 92, 104, 148
Zerfallsrate, 190, 208, 209
Zustandsraum, 64, 65, 151, 278
Zustandsvariable, 50, 51, 53, 54, 60–62, 69, 71, 76, 114, 137, 143, 144, 151, 153–155, 158, 165, 170, 171, 176, 179, 237, 267–271

Übergangsmatrix, 84