

Cora Kohlmeier

Grundlagen mathematischer Modellierung

Skript zur Vorlesung für Studierende des Masterstudiengangs
Marine Umweltwissenschaften an der Carl von Ossietzky Universität
Oldenburg

Oldenburg, 7. Mai 2025

Cora Kohlmeier
Institut für Chemie und Biologie des Meeres
Carl von Ossietzky Universität Oldenburg
c.kohlmeier@uol.de

Version: 7. Mai 2025

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	11
1.1	Was ist ein Modell ?	11
1.2	Was ist Modellbildung – mathematische Modellierung	12
2	Empirische Modelle	17
2.1	Parameteranpassung	17
2.2	Lineare Regression	19
2.3	Logarithmischer Zusammenhang	24
2.4	Verallgemeinerung der linearen Regression	26
3	Diskrete Modelle (1D)	33
3.1	Beispiel Bohnenwachstum	33
3.2	Beispiel Bakterienwachstum	34
3.3	Logistisches Wachstum	39
3.4	Zusammenfassung der Wachstumstypen	43
4	Differentialgleichungsmodelle (1D)	45
4.1	Exponentielles Wachstum	45
4.2	Implementierung in Matlab *	48
4.3	Logistisches Wachstum	49
4.4	Richtungsfeld	51
4.5	Fixpunkte	52
5	Differentialgleichungsmodelle (2D)	67
5.1	Räuber-Beute-Modell	67
5.2	PZ-Modell	80
6	Diskrete Modelle (2D)	85
6.1	Fibonacci und die Kaninchen	85
6.2	Das Fibonacci-Modell als zweidimensionales Modell	87
6.3	Lösung des Systems	88
6.4	Überlagerung von Lösungen – Anfangswertproblem *	91
6.5	Fibonacci und der goldene Schnitt *	92
7	Altersklassenmodell	93
8	Räumliche Modelle	97
8.1	Zelluläre Automaten	97
8.2	Transportprozesse	102
8.3	Temperaturverteilung im Sediment	114
9	Agentenbasierte Systeme und Tracer-Modelle	117
9.1	Wachstum von Dendriten	117
9.2	Ameisenstraßen	118
9.3	Tracer-Modell zur Larvenansiedlung in aquatischen Systemen	119
10	Epidemiemodelle	121
10.1	Das Epidemiemodell nach Kermack & McKendrick	121
10.2	Vergleich von Räuber-Beute-Modell und Epidemiemodell	126
10.3	Das SIS-Modell	128
11	Fraktale und fraktale Dimension *	129
11.1	Anwendungen	132

11.2 Kästchenzählmethode	133
11.3 Das Chaos-Spiel	134
11.4 Die Mandelbrot-Menge	136

II Weitere Modellbeispiele 139

12 NPZ-Modell	141
12.1 Modellbeschreibung	141
12.2 Gleichungen	145
12.3 Parameter	145
12.4 Simulationsergebnisse	146
13 Ausbreitung von Borkenkäfern	147
13.1 Borkenkäfer-Dynamik	147
13.2 Wald-Dynamik	150
13.3 Räumliche Ausdehnung des Modells	153
14 Der Wasserstand eines Sees	155
14.1 Verbale Beschreibung und Ziel des Modells	156
14.2 Festlegung der Zustandsvariablen	157
14.3 Beschreibung der Topographie des Sees	157
14.4 Festlegung der Prozesse	159
14.5 Festlegung der Randbedingungen und Antriebe (Forcing)	161
14.6 Prozessbeschreibungen	163
14.7 Bestimmung der Parameterwerte	166
14.8 Prüfung des Modells auf Konsistenz	167
14.9 Programmierung, Simulation, Sensitivitätsuntersuchung	168
14.10 Modellverbesserung	171
14.11 Anwendungen des Modells, Dokumentation der Ergebnisse	172
14.12 Erweiterung: Einleitung eines Schadstoffs in den See	173
15 Modell zum Alkoholabbau	179
16 Masern-Modell	183
17 Covid-19 Ausbreitung in Deutschland	189
18 HIV-Modell	195
19 Kinetik chemischer Reaktionen	201
20 Das Karbonatsystem des Ozeans	205
20.1 Atmosphäre-Ozean-Gleichgewicht	207

III Anhang 215

A Basics aus der Mathematik	219
A.1 Funktionen	219
A.2 Potenzfunktion	221
A.3 Polynome	222
A.4 Exponentialfunktion und Logarithmus	224
A.5 Einheiten sicher umrechnen	229
A.6 Periodische Funktionen – Winkelfunktionen	232
A.7 Monod-Funktion	234
A.8 Komplexe Zahlen [*]	235

A.9 Modulo-Funktion *	236
A.10 Differentialrechnung	237
A.11 Integralrechnung	240
A.12 Taylorpolynom *	249
A.13 Newton-Verfahren	250
B Die Wurfparabel *	251
C Differentialgleichungen	255
C.1 Gewöhnliche Differentialgleichungen 1. Ordnung	255
C.2 Numerisches Lösen von Differentialgleichungen	258
D Vektoren und Matrizen	263
D.1 Vektoren	263
D.2 Matrizen	267
E Zweidimensionale lineare Abbildungen	273
F Mehrdimensionale Analysis *	277
F.1 Die Ableitung skalarer 2-dimensionaler Funktionen	277
F.2 Totales Differential	278
F.3 Massenerhaltung	280
F.4 Reaktionsterme	280
F.5 Die Ableitung vektorwertiger 2-dimensionaler Funktionen	281
G Stabilitätsanalyse autonomer Systeme (2D) *	283
H Vergleich der Stabilität diskreter und kontinuierlich *	291
I Pseudo-Code Programme	293
I.1 Cantor-Menge	293
I.2 Sierpinski-Dreieck	294
I.3 Farn	295
I.4 Mandelbrot-Menge	296
Literatur	297

Vorwort

Die Vorlesung ‘Grundlagen mathematischer Modellierung’, richtet sich an Masterstudierende des 1. Fachsemester des Studiengangs “Marine Umweltwissenschaften” am Institut für Chemie und Biologie des Meeres (ICBM) der Carl von Ossietzky Universität Oldenburg, 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 Ebenhöf, meinen Mentor und Doktorvater, für die Überlassung vieler textinhalte und Modellbeispiele.

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 während 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 modeling“). 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. Abschnitte, die mit einem Stern (*) gekennzeichnet sind, dienen der Vertiefung und können auch übersprungen werden.

1 Einführung

1.1 Was ist ein Modell ?

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.



Quelle: Pixabay

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 Skalie-

rung 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 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.

Beispiel:

Ein Klimamodell taugt nicht zur Wettervorhersage, ein Regentropfenmodell auch nicht.

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 Modelle 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 eines 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. 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 verschiedenen Orten des Untersuchungsgebiets berücksichtigen.

Für die Beschreibung von Chemostaten und Planktotonen 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.

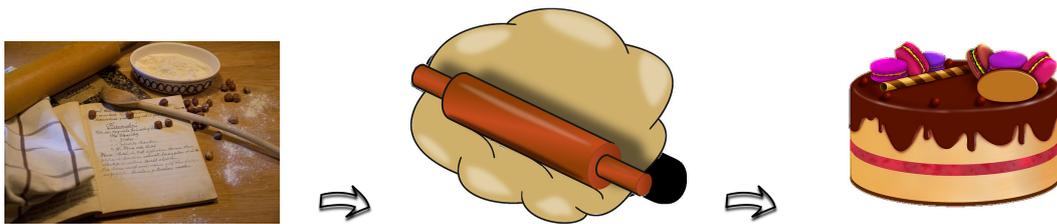
Und dann kann man Modell noch nach ihrem mathematischen "Charakter" unterscheiden. Es gibt z.B.

- Differenzgleichungssysteme - 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,
- ...

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 das 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):

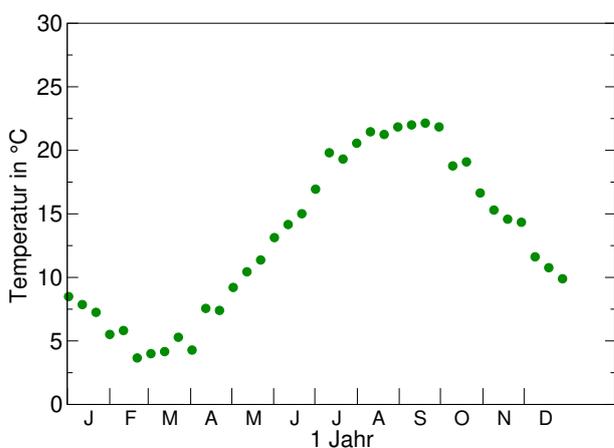
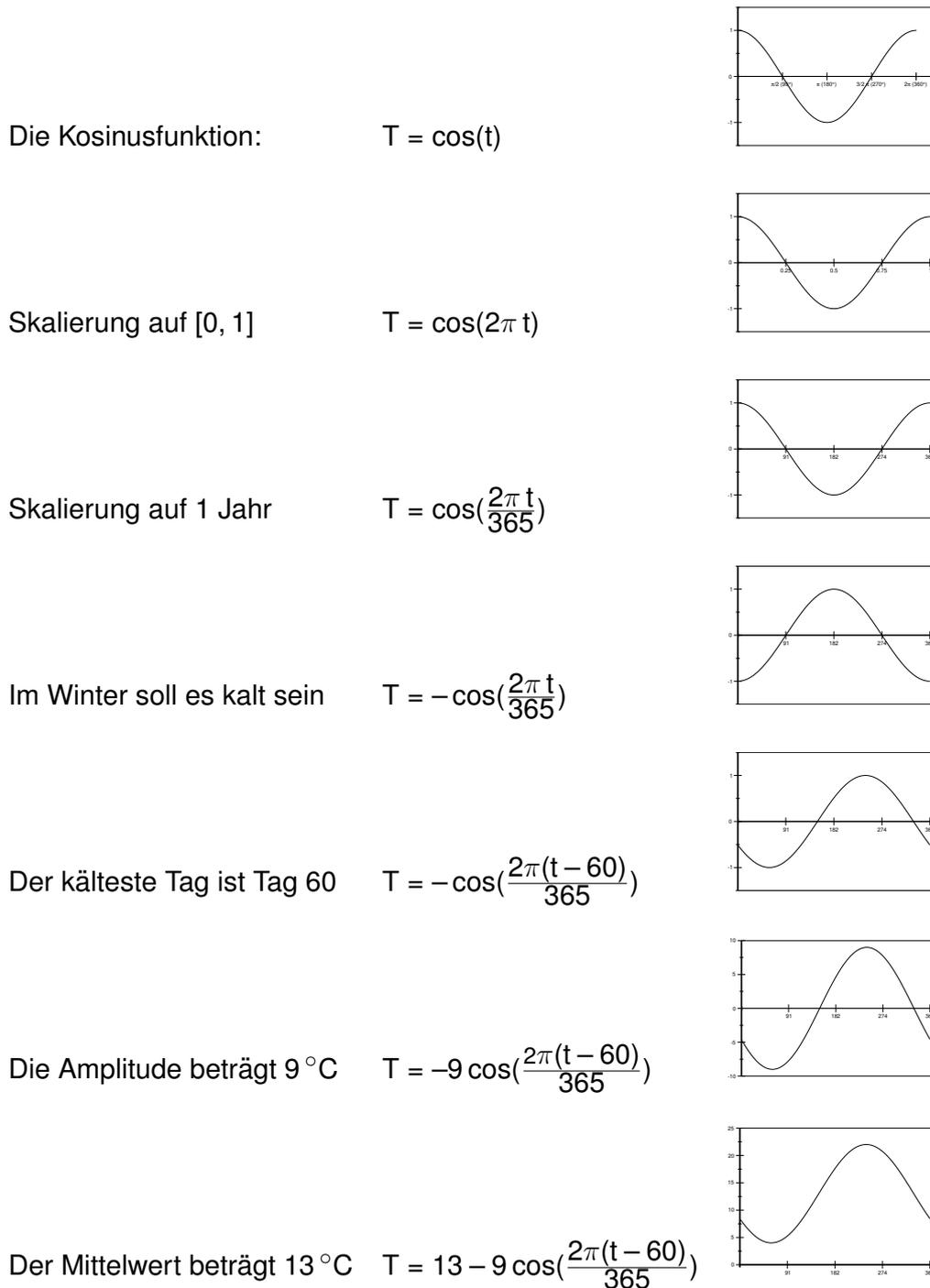


Abbildung 2.1: Beispiel eines Jahresgangs der Wassertemperatur an der Nordseeküste.

Diese Werte 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 somit 18°C , und die mittlere Temperatur ca. 13°C . Die Kosinusfunktion soll nun so verändert werden, dass sie zu den Daten passt:



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.

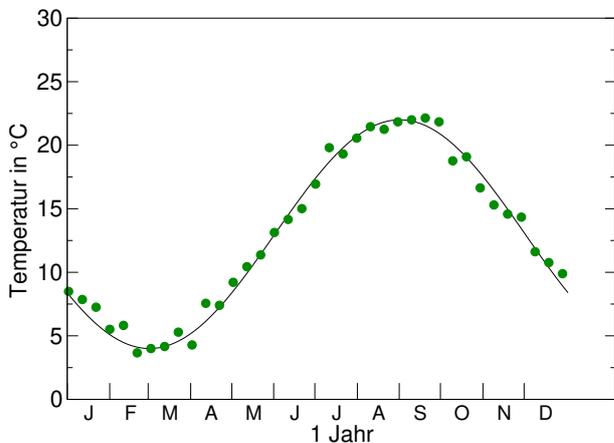


Abbildung 2.2: Jahresgang der Wassertemperatur an der Nordseeküste und daran angepasste Kosinusfunktion.

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

¹ In der Literatur findet man folgende Notation: $y_i = \beta_0 + \beta_1 \cdot x_i + \varepsilon_i, i = 1 \dots n$ 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.

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

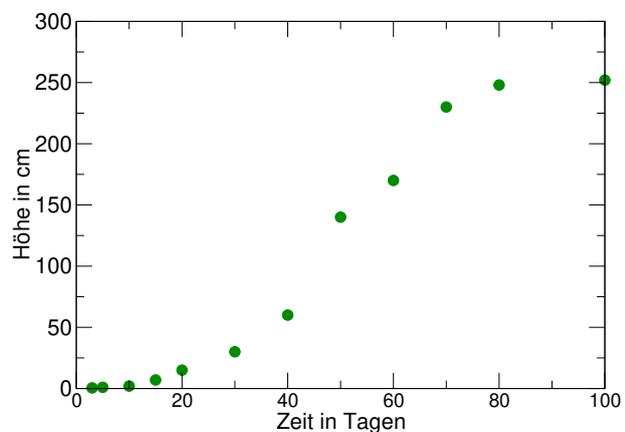


Abbildung 2.3: Bohnenwachstum: Messwerte. Die gestrichelten Linien geben den Zeitraum an, in dem lineares Wachstum angenommen werden kann.

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.

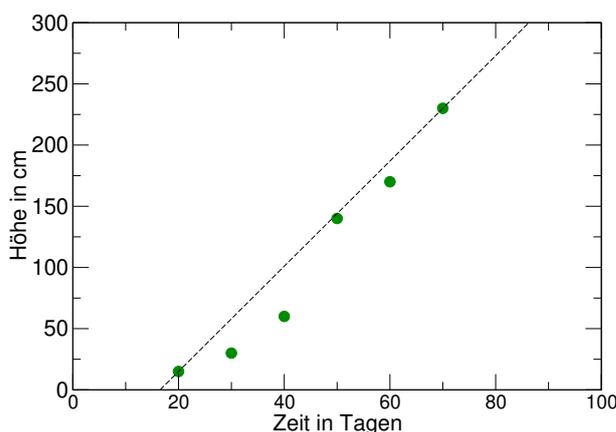


Abbildung 2.4: Bohnenwachstum: Messwerte und die Gerade, die durch die Punkte (20,15) und (70,230) geht.

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 $t_1 < t_2 < \dots < t_n$ die n Zeitpunkte, an denen die n Messwerte y_1, y_2, \dots, y_n gemessen wurden. Der Datenbereich des Beispiels aus 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.

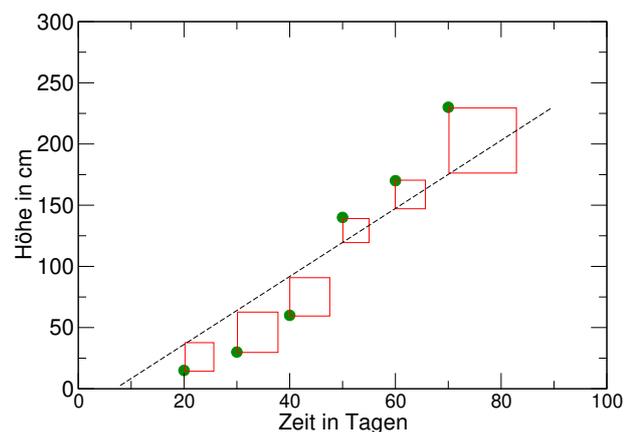


Abbildung 2.5: Bohnenwachstum: Messwerte, mögliche Gerade und ihre Abstandsquadrate.

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

soll also minimal werden. Im Beispiel muss also

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

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 , $i = 1 \dots n$ zu den Zeitpunkten t_i , $i = 1 \dots n$ gegeben.

Die Summe der Abstandsquadrate der Messwerte von der Geraden

$y(t) = m \cdot t + b$ wird durch

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

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 $m = \frac{\text{Cov}(t, y)}{V(t)}$

mit $V(t) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (t_i - \bar{t})^2$ und $\text{Cov}(t, y) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (t_i - \bar{t}) \cdot (y_i - \bar{y})$.

Im Beispiel erhält man die Gerade

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

Das so bestimmte Wachstum beträgt also 4.44 cm/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.

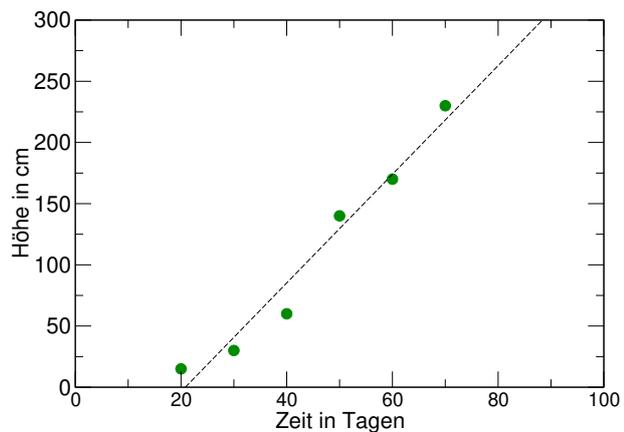


Abbildung 2.6: Bohnenwachstum: Messwerte, für die ein lineares Wachstum angenommen wird, und die Ausgleichsgerade, die sich nach der Methode der kleinsten Quadrate ergibt.

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

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

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 Prozes-

se 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

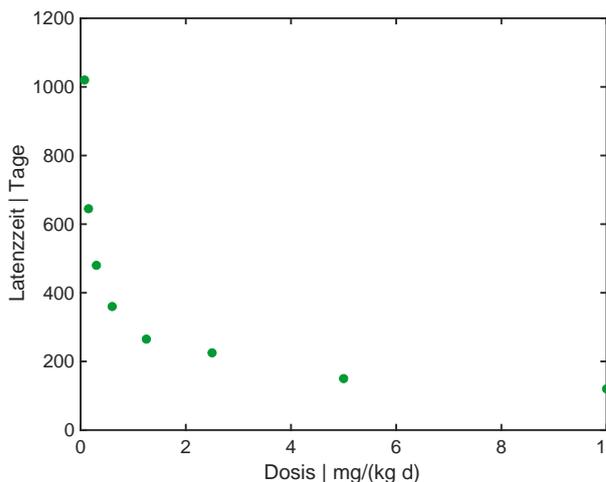


Abbildung 2.7: Karzinogenese bei Ratten. Aufgetragen sind die Dosis an Diethylnitrosamin und die zugehörige Zeit bis zur Ausbildung eines Tumors (Latenzzeit).

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 Quadra-

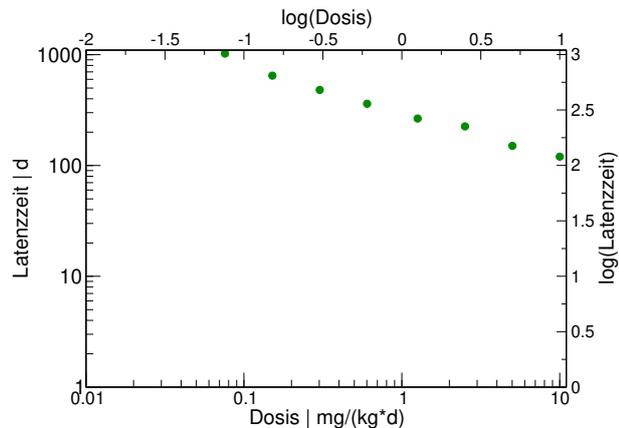


Abbildung 2.8: Karzinogenese bei Ratten. Aufgetragen sind die Dosis an Diethylnitrosamin und die zugehörige Zeit bis zur Ausbildung eines Tumors (Latenzzeit) in doppelt logarithmischer Darstellung.

te 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

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

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).

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. Viel

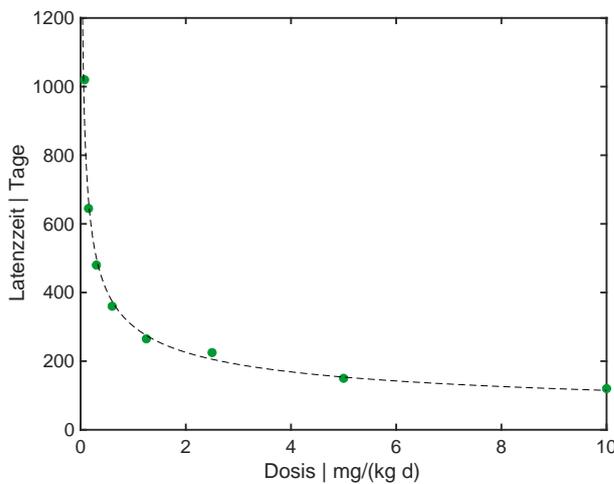


Abbildung 2.9: Karzinogenese bei Ratten. Aufgetragen sind die Dosis an Diethylnitrosamin und die zugehörige Zeit bis zur Ausbildung eines Tumors (Latenzzeit) sowie der funktionale Zusammenhang, der sich nach der Methode der kleinsten Quadrate ergibt.

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:

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

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

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.

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:

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

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. Die Funktion wird nun wie folgt rekonstruiert:

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

Der erste Term a_0 beschreibt den Mittelwert oder auch Gleichanteil, der Laufindex k ist die Ordnungszahl der Harmonischen, den 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 , $i = 1, \dots, N$ äquidistant über die Periode T verteilt, so ergibt sich für die optimalen Parameter

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

Gleichung Gleichung 2.1 nennt man **Fouriersumme** (für $J \rightarrow \infty$ **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:

$$N \geq 2J + 1 \quad (2.3)$$

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.

Das Verfahren der Fourieranalyse ist in vielen Programmen, wie z.B. Matlab, implementiert.

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 für die Temperatur an einem Septembertag.

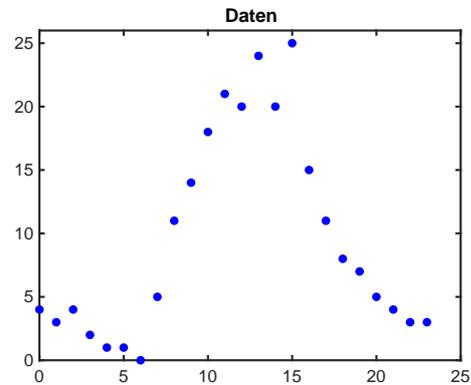


Abbildung 2.10: Temperaturdaten an einem Septembertag.

In diesem Beispiel liegen nun stündliche Temperaturdaten eines Septembertages vor (Abbildung 2.10). Diese sollen nun mit Hilfe der Fourieranalyse und anschließender Synthese durch eine Überlagerung von Sinus- und Kosinusfunktionen beschrieben werden. Die Anzahl der Messwerte ist $N=24$, damit ergibt sich für die Anzahl der Harmonischen $J=11$ ($N \geq 2J + 1$). Das Ergebnis ist in Abbildung 2.11 (rechts) zu sehen. Die einzelnen Messdaten werden von der Funktion getroffen.

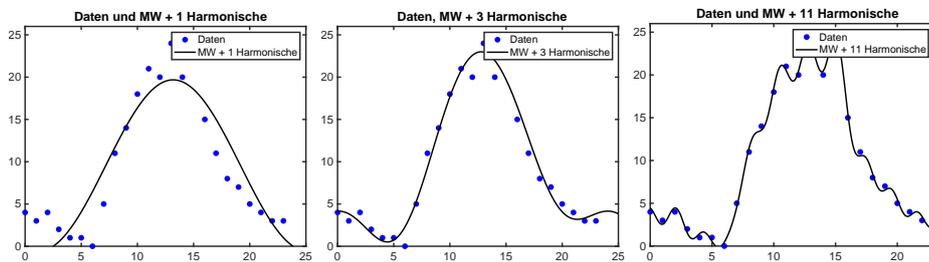


Abbildung 2.11: Fouriersynthese. Dargestellt sind die Messwerte zusammen mit der Synthese aus 1, 2 und 11 Harmonischen (von links nach rechts).

In Abbildung 2.11 (links) sieht man die Approximation durch die Grundwelle (1. Harmonische). Die zugehörige Funktion bis zur 1. Harmonischen lautet entsprechend Gleichung (2.1)

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

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

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 2.12 sind exemplarisch ein paar Harmonische 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.

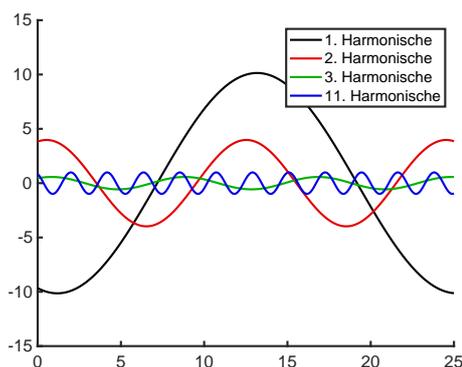


Abbildung 2.12: Darstellung der 1., 2., 3. und 11. Harmonischen.

Beispiel: Heizungsthermostat

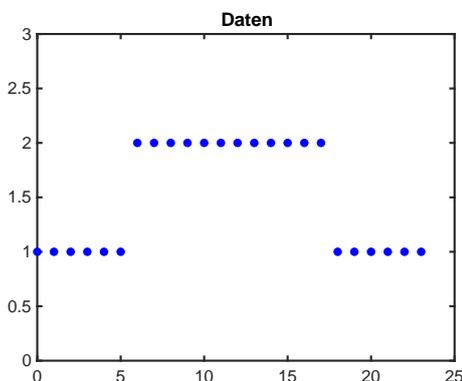


Abbildung 2.13: Solltemperaturen eines Heizungsthermostats.

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

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 2.13 erreichen. Will man dies durch eine einzelne Funktion ausdrücken, so geht dies genauso wie bei dem Beispiel zuvor. Schaut man

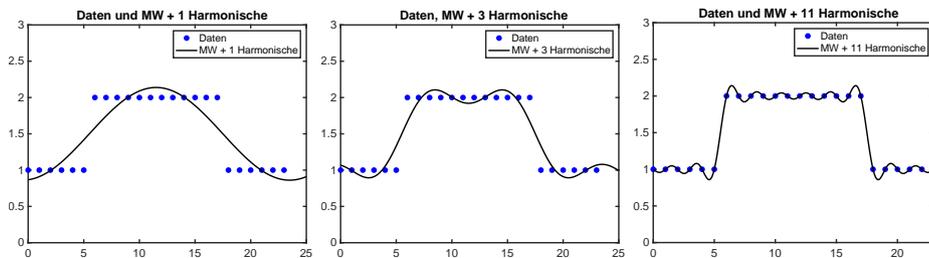


Abbildung 2.14: Fouriersynthese. Dargestellt sind die Messwerte zusammen mit der Synthese von 1, 3 und 11 Harmonischen (von links nach rechts).

sich auch hier einzelne Harmonische an (Abschnitt 2.15), 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).

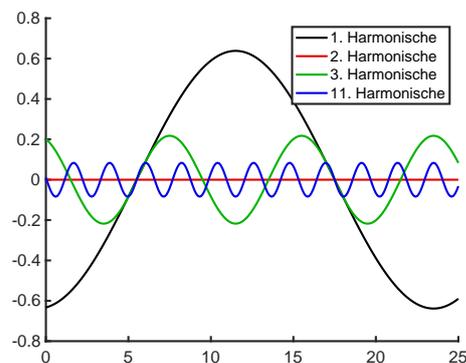


Abbildung 2.15: Einzelne Harmonische. Dargestellt sind exemplarisch die 1. 2. 3. und 11. Harmonische

3 Diskrete Modelle (1D)

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, verhält¹. 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 $m=4.43$ 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)	$x_{n+1} = x_n + m = x_0 + (n + 1) \cdot m$

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

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

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

$$1. \quad x_n = x_{n-1} + m \quad n = 1, 2, \dots$$

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

$$3. \quad x_n = x_0 + n \cdot m \quad n = 1, 2, \dots$$

$$4. \quad x_{n+1} = x_0 + n \cdot m \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Die ersten beiden Formen nennt man **implizite Darstellungen**, da der Folgewert aus dem vorherigen berechnet wird. Die letzteren beiden sind **explizite Darstellungen**, 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 $0.5 \mu\text{m}$.

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
$t_n = n \cdot 20 \text{ min}$	$x_n = 2 \cdot x_{n-1} = 2 \cdot \dots \cdot 2 \cdot x_0 = 2^n \cdot x_0$
$t_{n+1} = (n + 1) \cdot 20 \text{ min}$	$x_{n+1} = 2 \cdot x_n = 2 \cdot \dots \cdot 2 \cdot x_0 = 2^{n+1} \cdot x_0$

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

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

oder in **impliziter (rekursiver) Darstellung**

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

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

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

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:

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

²Beweis 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 $x_n = 2 \cdot x_{n-1} = 2 \cdot 2^{n-1} \cdot x_0 = 2^n \cdot x_0$.

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 ?

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

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

Nun, solch eine Zahl sagt uns anschaulich nicht viel³. 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 $d = 0.5 \mu\text{m} = 0.5 \cdot 10^{-6} \text{ m}$ beträgt

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

Das Gesamtvolumen V beträgt also nach einem Tag

$$V = x_{72} \cdot V_B = 4.7 \cdot 10^{21} \cdot \frac{1}{48} \cdot \pi \cdot 10^{-18} \text{ m}^3 \approx 3 \cdot 10^2 \text{ m}^3 .$$

Dieses Volumen entspricht einem Quader der Kantenlänge $3 \text{ m} \times 10 \text{ m} \times 10 \text{ m}$, also in etwa einem großen Seminarraum. Upps, 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

³Zum Vergleich: Avogadro-Konstante (Anzahl Teilchen pro Mol): $N_A \approx 6,022 \cdot 10^{23}$.

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:

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

Wir erhalten nun folgende explizite Darstellung:

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

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).

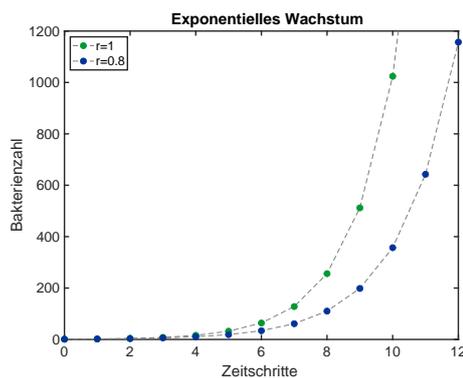


Abbildung 3.1: Vergleich des exponentiellen Wachstums für die Wachstumsrate $r = 1$ (grün) und $r = 0.8$ (blau).

Implementierung in MatLab *

Die explizite Lösung kann man in MatLab sehr leicht implementieren:

```
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 wie folgt numerisch lösen⁴:

```
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
```

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

⁴Geht in MatLab allerdings auch eleganter

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.

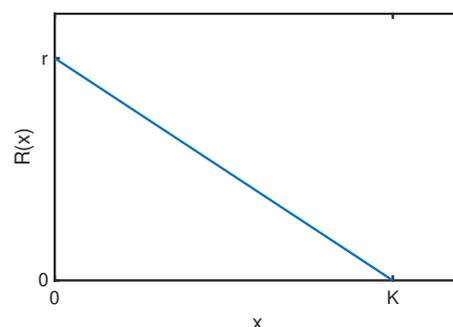
Bakterien brauchen zum Wachstum Nährstoffe und i.a. Sauerstoff. Lässt man eine Bakterienkultur in einer Petrischale auf Nährlösung wachsen, so wird die Nährlösung nach und nach verbraucht. Je dicker der Bakterienrasen wird, desto schlechter werden innen liegende Zellen mit Sauerstoff und Nährstoffen 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

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

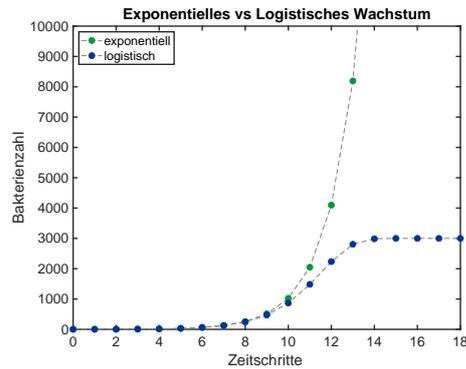
wobei R nun eine Funktion der Bakterienzahl ist, die monoton fallend sein soll, also z.B.

$$R(x) = r \cdot \left(1 - \frac{x}{K}\right)$$



mit der Kapazität K und der maximalen Wachstumsrate r . Für sehr kleine Bakte-

Abbildung 3.2: Vergleich zwischen exponentiellem Wachstum und logistischem Wachstum mit $r = 1$ und $K = 3000$. Der Startwert ist jeweils $x_0 = 1$.



rienzen betragt R nahezu r , und wird immer kleiner, je mehr sich die Zahl der Bakterien der Kapazitat K nahert. Wir 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**. Fur kleine Bakterienzahlen wachst die Population nahezu ungebremst. Je groer die Population wird, desto langsamer wachst sie (Abbildung 3.2). Ist die Zellzahl sehr klein gegenuber der Kapazitat, betragt die Wachstumsrate nun in etwa r .

Die rechte Seite kann man nun als Funktion der Zellzahl x schreiben. Sie gibt an, wie gro die Zellzahl im jeweils nachsten 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 3.3 ist der Graph der Funktion f fur $r = 1$ gegeben. Es handelt sich um eine nach unten geoffnete und nach rechts verschobene Parabel.

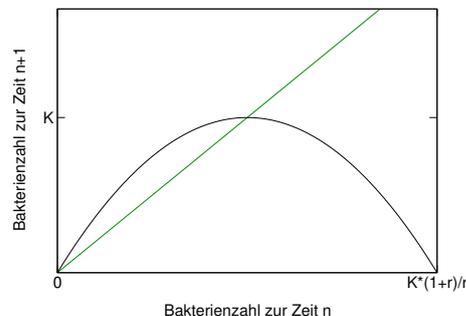


Abbildung 3.3: "Rechte Seite" des Modells zum logistischen Wachstum fur $r = 1$ (schwarz) und die Gerade $y = x$ (grun).

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

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

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 3.4 dargestellt.

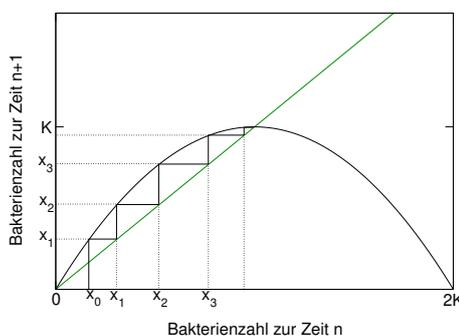


Abbildung 3.4: "Rechte Seite" des Modells zum logistischen Wachstum mit grafischer Lösung (Cobweb plot)

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 3.5). 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 .

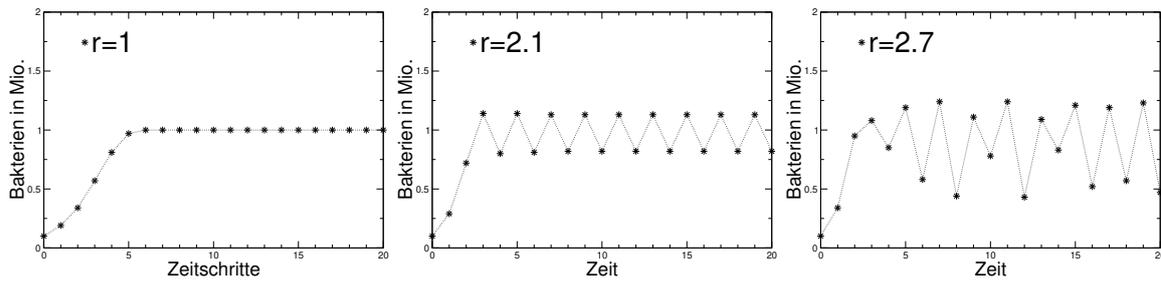


Abbildung 3.5: Logistisches Wachstum für die Wachstumsraten $r = 1.0$ (links), $r = 2.1$ (Mitte) und $r = 2.7$ (rechts). Startwert $x_0 = 0.1$ Mio., $K = 1$ Mio.

Um dieses Verhalten zu vermeiden, muss man den Zeitschritt verkleinern, infinitesimal werden lassen. Dies wird in Kapitel 4 behandelt.

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 3.6).

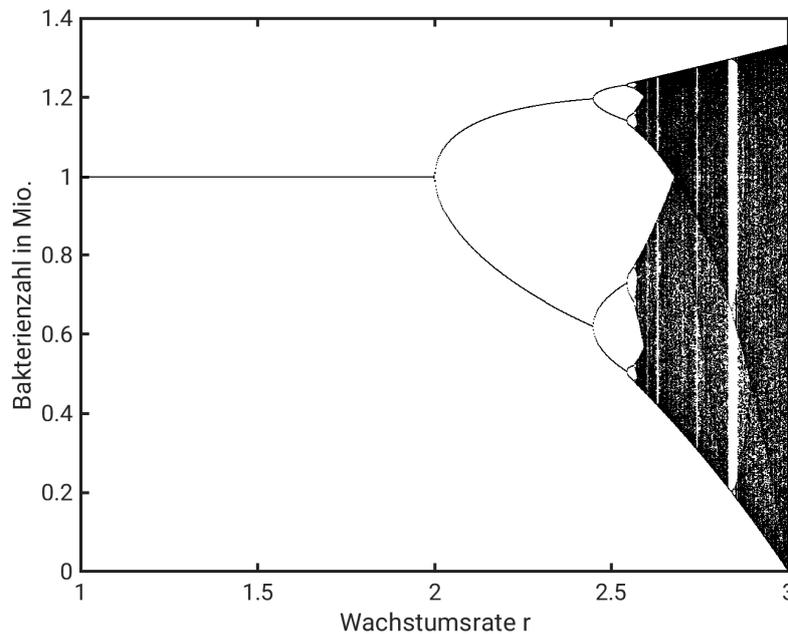


Abbildung 3.6: Bifurkationsdiagramm des logistischen Wachstums.

3.4 Zusammenfassung der Wachstumstypen

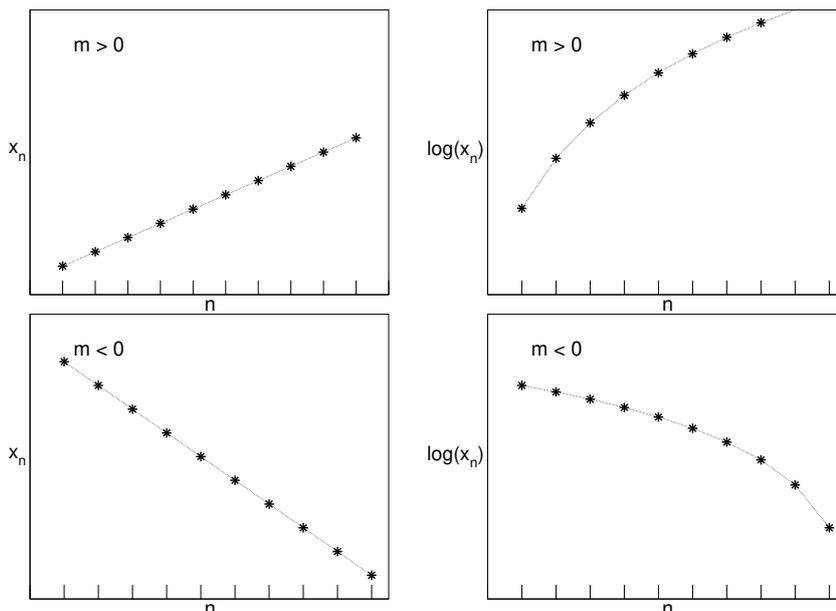
Bisher haben wir das lineare, das exponentielle und das logistische Wachstum betrachtet. Das lineare Wachstum ist durch einen konstanten Zuwachs, das exponentielle Wachstum durch eine konstante Wachstumsrate gekennzeichnet. Beim exponentiellen Wachstum ist das Wachstum proportional zum aktuellen Wert, 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: $x_{n+1} = x_n + m$

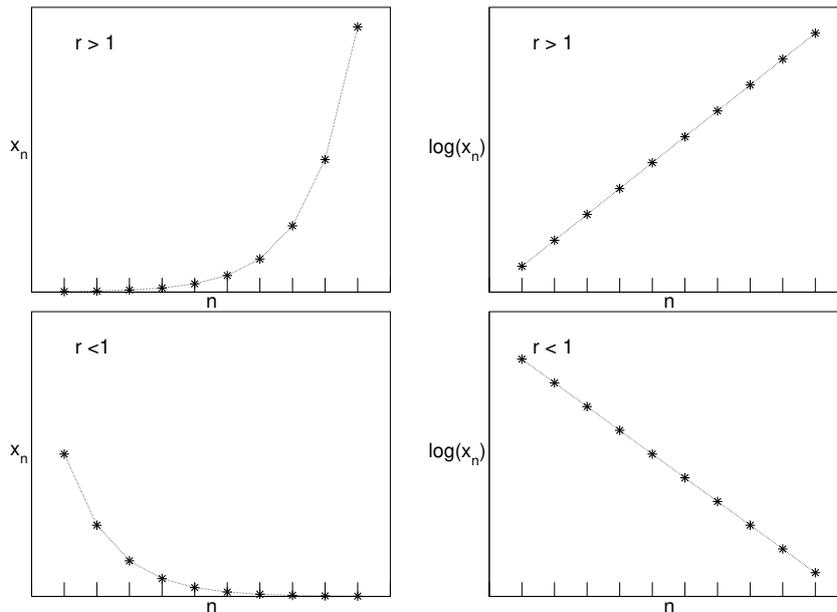
explizite Darstellung: $x_n = x_0 + a \cdot m$



Exponentielles Wachstum

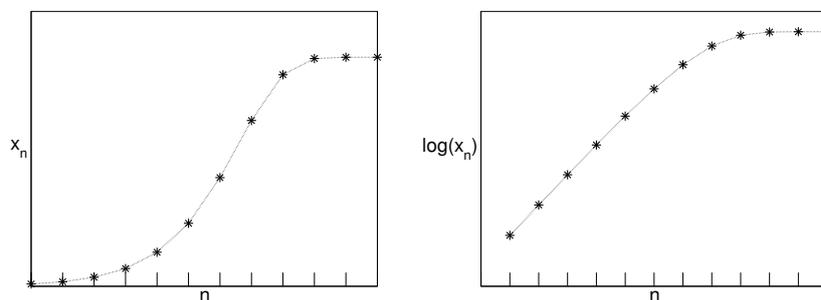
rekursive Darstellung: $x_{n+1} = r \cdot x_n$

explizite Darstellung: $x_n = x_0 \cdot r^n = x_0 \cdot e^{\ln(r) \cdot n} = x_0 \cdot 10^{\log(r) \cdot n}$



Logistisches Wachstum

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



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

4 Differentialgleichungsmodelle (1D)

4.1 Exponentielles Wachstum

Gehen wir noch einmal zurück zu dem diskreten Modell des exponentiellen Wachstums (Bakterienmodell):

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

wobei x_0 als Anfangswert vorgegeben wird. Dieses Modell berechnet die Bakterienzahl von Zeitschritt zu Zeitschritt ($n \rightarrow n + 1$).

Betrachtet man nun die Bakterienzahl zu einer Zeit 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

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

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

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

sie hat die Lösung

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

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

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

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 DGL-Modell nach einem Zeitschritt eine Verdopp-

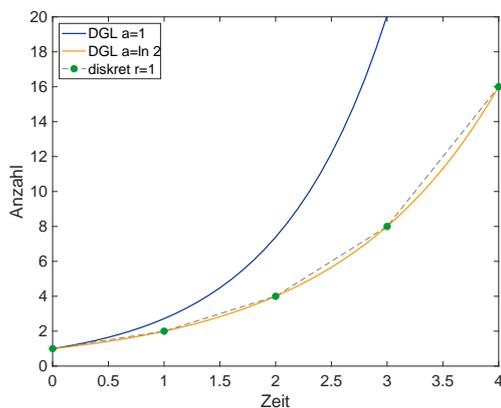


Abbildung 4.1: Vergleich des exponentiellem Wachstums für das diskrete Modell mit der Wachstumsrate $r = 1$ (grün) und das DGL-Modell mit der Wachstumsrate $a = 1$ (blau) und $a = \ln(1 + r)$ (gelb).

lung ($r=1$) erreichen, so gilt $a = \ln 2 \approx 0.69$:

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

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 DGL

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 C.2.1) approximiert werden:

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

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

$$x_{n+1} = x_n + r \cdot x_n \quad n = 0, 1, \dots$$

für $r = 1$ und $y_0 = 1$ liefert.

Es ist wichtig zu verstehen, dass das diskrete Modell und die DGL 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 DGL 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. Ein Verfahren, das meistens gute Ergebnisse liefert, ist das **Runge-Kutta-Verfahren** (Anhang:C.2.2). Obiges Beispiel wird in MatLab wie folgt implementiert:

4.2 Implementierung in Matlab*

4.2.1 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

4.2.2 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

%ODE function
function dydt=f(t,y,r)
dydt=r*y;

```

4.3 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

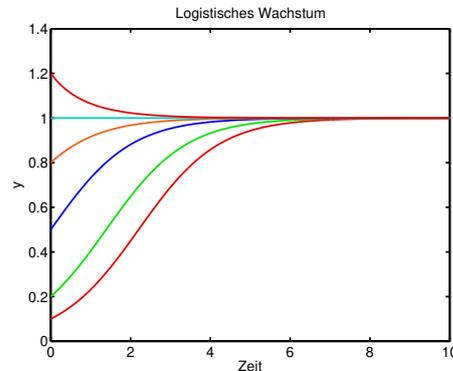
$$\frac{dx(t)}{dt} = r \cdot \left(1 - \frac{x}{K}\right) \cdot x \tag{4.4}$$

über.

Die Lösungen der logistischen DGL weisen im Unterschied zur Differenzenglei-

chung unabhängig von der Parametrisierung nun kein Chaos mehr auf. Man kann

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



man 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 (nicht abgebildet)
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

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

Dies ist eine Funktionenschar, der Scharparameter 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*.

4.4 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 4.3). Ohne die Lösungen der DGL 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“.

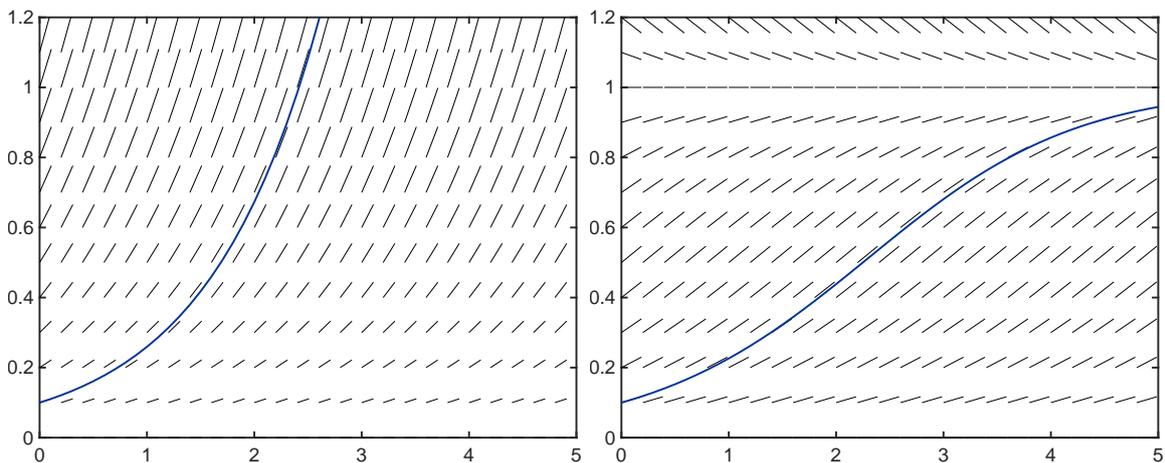


Abbildung 4.3: Richtungsfeld von $\dot{x} = x$ (links) und $\dot{x} = rx(1 - x/K), r = 1, K = 1$ (rechts). Die Richtungsfelder sind t -translationsinvariant, da die Differentialgleichungen autonom sind. Zusätzlich sind die Lösungen zum Anfangswert $x(0)=0.1$ eingezeichnet (blau).

Die kleinen Striche im Richtungsfeld haben keinen bestimmten Namen, wir nennen sie hier mal Linienelemente. Sie werden von den Lösungskurven niemals durch-

kreuzt. 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 Lösung¹. 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.

4.5 Fixpunkte (Stationäre Zustände, Gleichgewichtszustände)

Autonome Systeme² 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** oder kurz **Fixpunkte**.

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

4.5.1 Stabilität von Fixpunkten

Es gibt zwei Arten von Fixpunkten

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

asymptotisch stabil: kleine Abweichungen verschwinden

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

²Systeme, die nicht explizit von der Zeit abhängen.

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.

Mathematisch präzise*

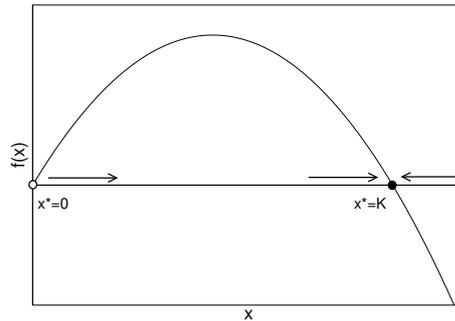
Ein Fixpunkt heißt **stabil**, wenn es zu jedem $\varepsilon > 0$ ein $\delta > 0$ gibt, so dass alle Lösungen, die anfangs höchstens um δ vom Fixpunkt abweichen, für alle späteren Zeiten höchstens um ε vom Fixpunkt abweichen.

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.

4.5.2 Bestimmung der Stabilität eines Fixpunkts

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 4.4): 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 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

Abbildung 4.4: DGL des logistischen Wachstums. Aufgetragen ist die rechte Seite der DGL $f(x) = r \cdot x \cdot (1 - \frac{x}{K})$ 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 DGL). Die Pfeile geben die Änderung von x an.



stationären Zustand³. Es gilt :

$$\frac{df(x^*)}{dx} > 0, \quad \text{dann ist } x^* \text{ ist instabil}$$

$$\frac{df(x^*)}{dx} < 0, \quad \text{dann ist } x^* \text{ ist stabil}$$

$$\frac{df(x^*)}{dx} = 0, \quad \text{es sind weitere Analysen erforderlich}$$

Für das logistische Wachstum erhält man nun folgende Stabilitäten

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

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

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

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.

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

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

Betrachtet man nun die Taylorentwicklung nur bis zum ersten Glied⁴, so erhält man eine neue, lineare DGL für die Störung $z = x^* - x$.

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

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 DGL linearisiert.

4

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

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.

4.5.3 Beispiel: Schafe am Deich



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 Halbsättigungsrate. Die gesamte Gleichung für die Vegetation V lautet nun (die Zeitabhängigkeit von V wird hier nun nicht mehr mit aufgeschrieben):

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

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 zeitlichen 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

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

Gesucht sind nun die Fixpunkte von 4.9 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 4.9 erhält man, wenn man die rechte Seite gleich Null setzt:

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

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

Es gilt aber auch für

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

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 4.8 dargestellt.

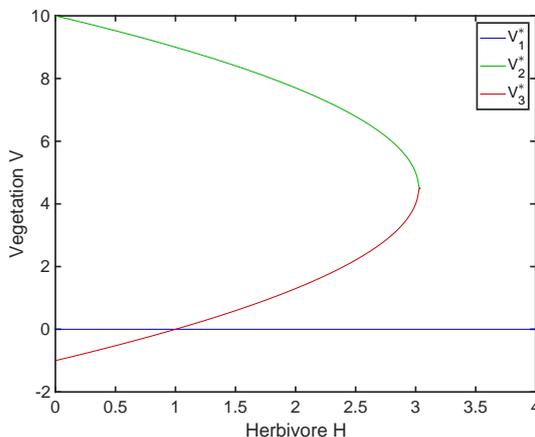


Abbildung 4.5: Lage der Fixpunkte der Vegetation (Gras am Deich) in Abhängigkeit von der Herbivorenbiomasse (Schafe)

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 ($1 < H < H_{\text{crit}}$) 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 4.5.2 $\frac{df(V)}{dV}$ bestimmt:

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

Die Bestimmung der Stabilität der Fixpunkte erfolgt nun wieder durch Einsetzen. Zunächst wird $V_1^* = 0$ in Gleichung 4.11 eingesetzt:

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

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 4.9 dargestellt.

Man erkennt in Abbildung 4.9, dass bei Werten von H unter 1 (wenig Schafe), die Vegetation startend von einem beliebigen Anfangswert zum stabilen Fixpunkt V_2^* strebt. Im Bereich $1 < H < H_{\text{crit}}$ 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 4.10).

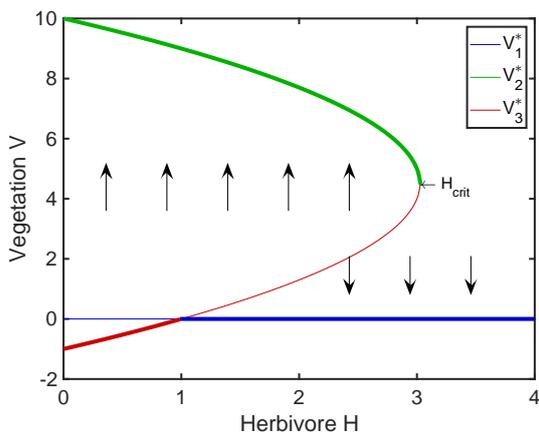


Abbildung 4.6: Stabilität der Fixpunkte der Vegetation (Gras am Deich) in Abhängigkeit von der Herbivorenbiomasse (Schafe). Die Bereiche der Stabilität sind fett dargestellt. Die Pfeile geben die Bewegungsrichtung der Lösungen an.

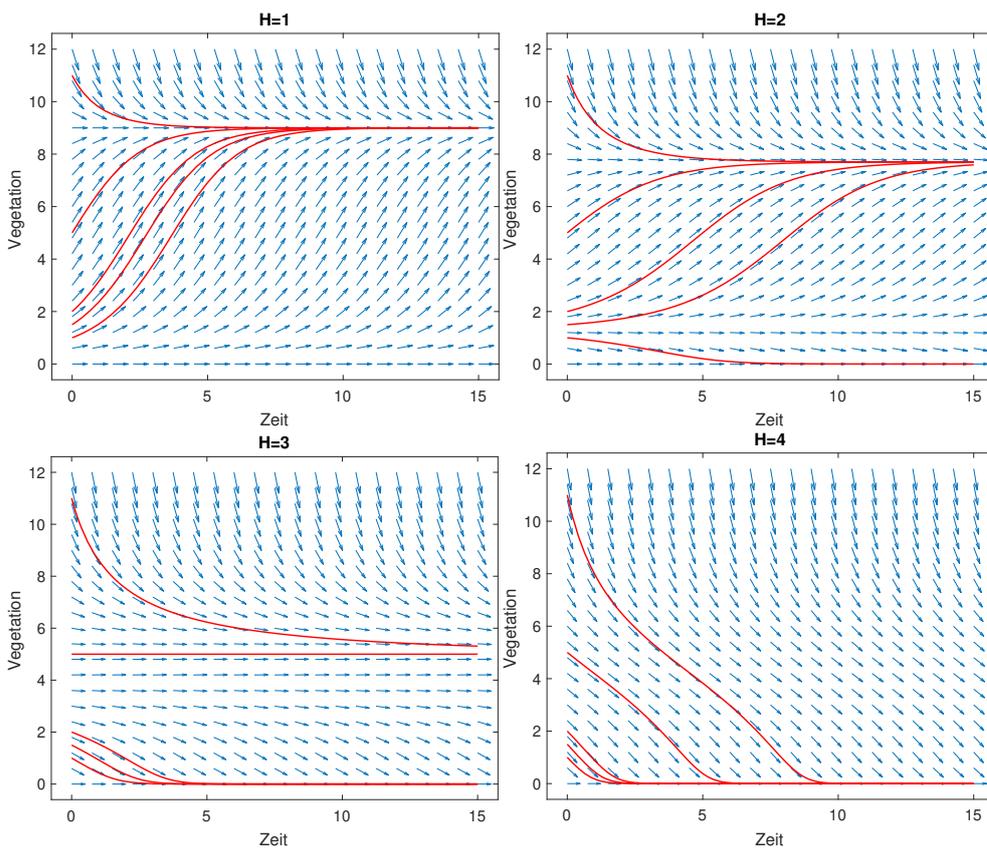


Abbildung 4.7: Richtungsfelder (blau) und Lösungskurven zu verschiedenen Anfangswerten der Vegetation (rot) für verschiedene Werte von Herbivoren (H=1 bis H=4).

4.5.4 Beispiel: Schafe am Deich



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 Halbsättigungsrate. Die gesamte Gleichung für die Vegetation V lautet nun (die Zeitabhängigkeit von V wird hier nun nicht mehr mit aufgeschrieben):

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

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 zeitlichen 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

$$\frac{dV}{dt} = V \cdot \left(1 - \frac{V}{10}\right) - \frac{V}{V + 1} \cdot H \quad (4.9)$$

Gesucht sind nun die Fixpunkte von 4.9 in Abhängigkeit von H . Wir haben zwar bisher von Schafen gesprochen, dies bedeutet aber nicht, dass H nur ganzzahlige Werte annehmen kann. Dies versteht man, wenn man H eher als Herbivorenbiomasse auffasst.

Die Fixpunkte von 4.9 erhält man, wenn man die rechte Seite gleich Null setzt:

$$V \cdot \left(1 - \frac{V}{10}\right) - \frac{V}{V + 1} \cdot H = 0 \quad (4.10)$$

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

Es gilt aber auch für

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

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 4.8 dargestellt.

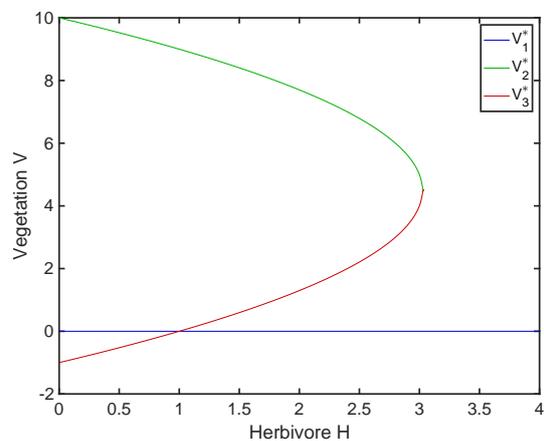


Abbildung 4.8: Lage der Fixpunkte der Vegetation (Gras am Deich) in Abhängigkeit von der Herbivorenbiomasse (Schafe)

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 $H_{\text{crit}} = 3,025$, 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 ($1 < H < H_{\text{crit}}$) 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 4.5.2 $\frac{df(V)}{dV}$ bestimmt:

$$\frac{df(V)}{dV} = 1 - \frac{2V}{10} - \frac{1}{(V+1)^2} \cdot H \quad (4.11)$$

Die Bestimmung der Stabilität der Fixpunkte erfolgt nun wieder durch Einsetzen. Zunächst wird $V_1^* = 0$ in Gleichung 4.11 eingesetzt:

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

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 4.9 dargestellt.

Man erkennt in Abbildung 4.9, dass bei Werten von H unter 1 (wenig Schafe), die Vegetation startend von einem beliebigen Anfangswert zum stabilen Fixpunkt V_2^* strebt. Im Bereich $1 < H < H_{\text{crit}}$ 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 4.10).

Abbildung 4.9: 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.

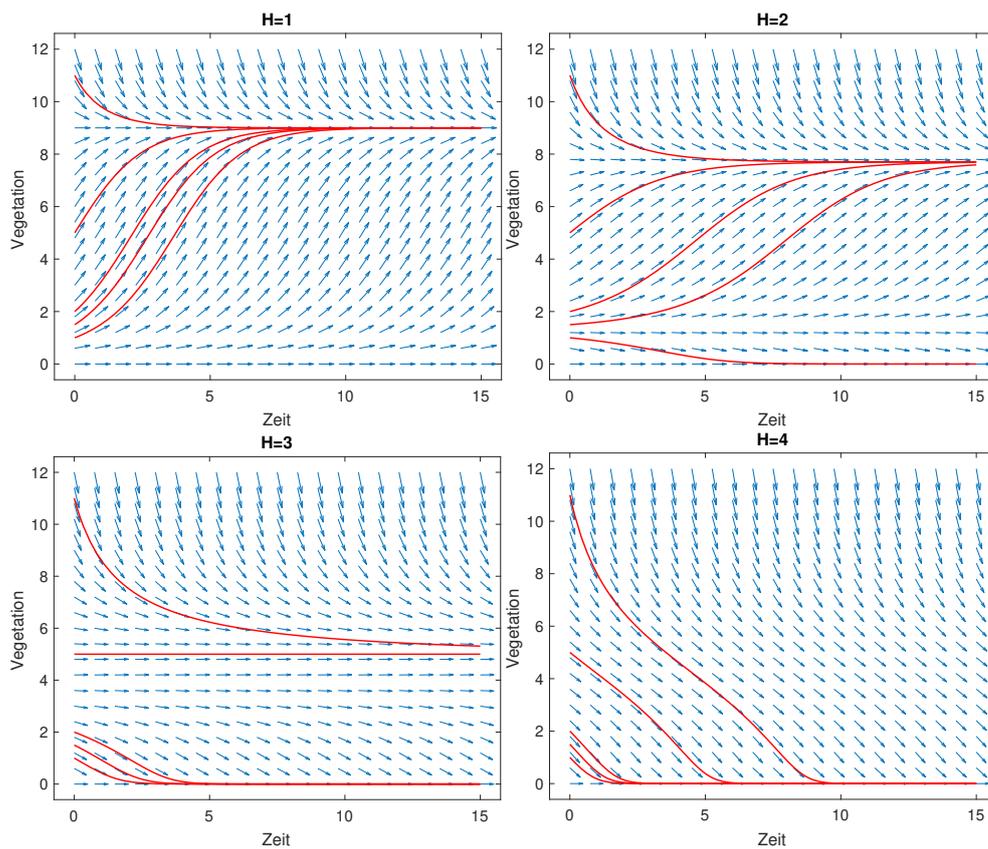
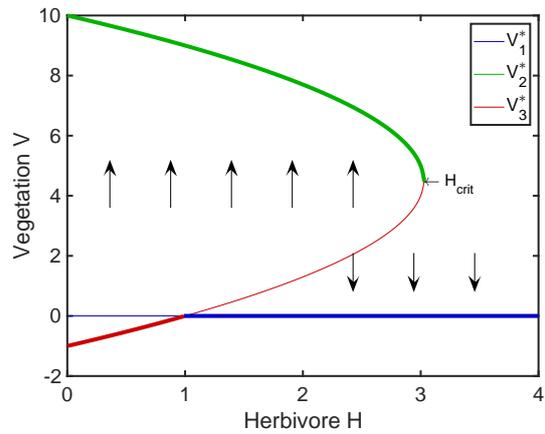


Abbildung 4.10: Richtungsfelder (blau) und Lösungskurven zu verschiedenen Anfangswerten der Vegetation (rot) für verschiedene Werte von Herbivoren ($H=1$ bis $H=4$).

5 Differentialgleichungsmodelle (2D)

5.1 Räuber-Beute-Modell

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.

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** [Lotka 1925, Volterra 1926] zurück. Mit Hilfe dieses sehr einfachen Modells kann man die Schwankungen in der Hasen- und Luchspopulation in Nord-Kanada beschreiben (Abbildung 5.1).

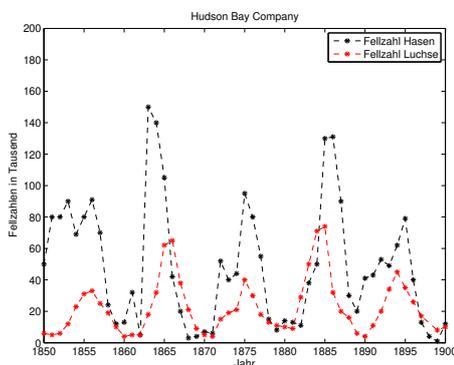


Abbildung 5.1: Fellzahlen von Hasen und Luchsen, die bei der Hudson's Bay Company von Trappern zwischen 1850 bis 1900 abgegeben wurden.

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 Aufnahme rate bezeichnen.

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

Alles zusammengenommen erhält man dann das Räuber-Beute-Modell von **Lotka und Volterra** (1926):

$$\begin{aligned} \dot{B} &= r \cdot B - b \cdot B \cdot R \\ \dot{R} &= b \cdot B \cdot R - s \cdot R \end{aligned} \tag{5.1}$$

Simuliert man nun die Hasen- und Luchszahl (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 usw..

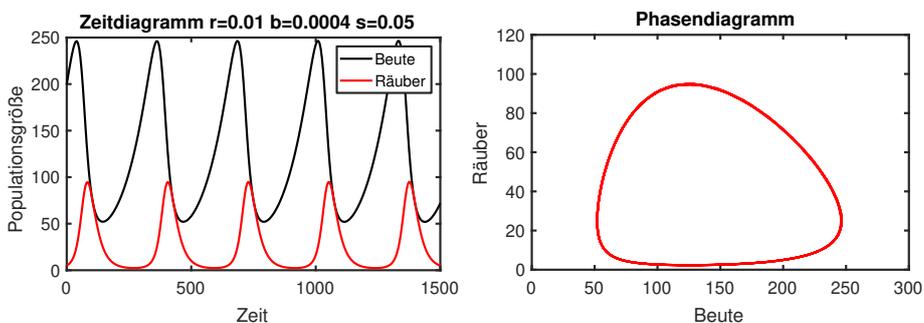


Abbildung 5.3: Lösungskurven des Räuber-Beute Systems für $r=0.01, b=0.0004, s=0.05$. Links: Zeitdiagramm, rechts: Phasendiagramm

5.1.1 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

$$\begin{aligned} \frac{dB(t)}{dt} &= f_1(R(t), B(t)) && \text{kurz } \dot{B} = f_1(R, B) \\ \frac{dR(t)}{dt} &= f_2(R(t), B(t)) && \dot{R} = f_2(R, B) \end{aligned} \tag{5.2}$$

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

5.1.2 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 Eigenschaften 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 diesem 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 ergibt 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 Aufnahme- oder Fressrate war, also $b \cdot B$ die Einheit $1/a$ hat.

Beispiel für konsistente Einheiten im Lotka-Volterra-Modell

$$\begin{aligned} \dot{B} &= r \cdot B - b \cdot B \cdot R \\ \left[\frac{\text{kg}}{\text{a}}\right] &= \left[\frac{1}{\text{a}}\right] \cdot [\text{kg}] - \left[\frac{1}{\text{kg} \cdot \text{a}}\right] \cdot [\text{kg}] \cdot [\text{kg}] \\ \dot{R} &= b \cdot B \cdot R - s \cdot R \\ \left[\frac{\text{kg}}{\text{a}}\right] &= \left[\frac{1}{\text{kg} \cdot \text{a}}\right] \cdot [\text{kg}] \cdot [\text{kg}] - \left[\frac{1}{\text{a}}\right] \cdot [\text{kg}] \end{aligned}$$

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.

5.1.3 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 .

$$\dot{B} = r \cdot B - b \cdot B \cdot R = (r - b \cdot R) \cdot B = 0 \quad (5.3)$$

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

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, dass weder Räuber noch Beute da sind. Wir haben also den Fixpunkt

$$(B_1^*, R_1^*) = (0, 0)$$

Der Fixpunkt wird wiederum durch $*$ gekennzeichnet. Betrachtet man den Fall 2 so bedeutet dies dass $B=0$ 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

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

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 F* und G* beschrieben.

5.1.4 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

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

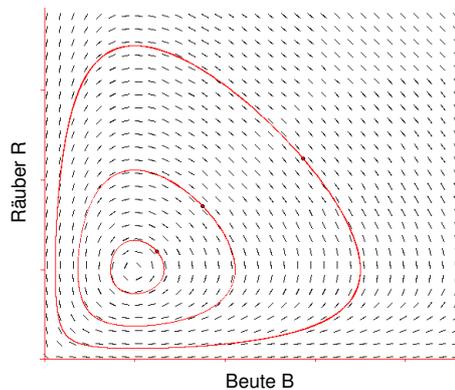


Abbildung 5.4: Richtungsfeld des Lotka-Volterra-Modells mit Lösungskurven zu verschiedenen Anfangswerten.

Die R-B-Ebene nennt man auch **Zustandsraum** oder **Phasenraum** des Systems, eine Lösungskurve auch Bahn oder Trajektorie¹. Beides zusammen heißt auch **Phasendiagramm**.

¹Diese Bezeichnung ist etwas ungenau. Streng genommen ist die Trajektorie eine Abbildung der Zeit in den Zustandsraum, eine Lösung des Anfangswertproblem. Die Bahn ist das Bild, enthält also die Zeitinformation nicht mehr.

5.1.5 Teilgleichgewichte (Halbgleichgewichte, Isoklinen)

Im Richtungsfeld kann man zwei ausgezeichnete Richtungen erkennen. Die, wo die Richtungslinien, waagrecht verlaufen und die, wo die Richtungslinien senkrecht verlaufen. Diese ergeben sich, wenn man die Gleichungen aus 5.3 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:

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

Analog kann man das Teilgleichgewicht für die Räuber definieren:

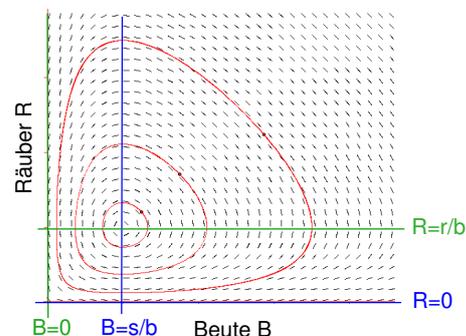
$$\dot{R} = b \cdot B \cdot R - s \cdot R = (b \cdot B - s) \cdot R = 0$$

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

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

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

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



5.1.6 Modellverbesserungen

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

- 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").

Kapazität

Verbessern wir das Modell 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:

$$\dot{B} = r \cdot B \cdot \left(1 - \frac{B}{K}\right) - b \cdot B \cdot R \quad (5.4)$$

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

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.

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

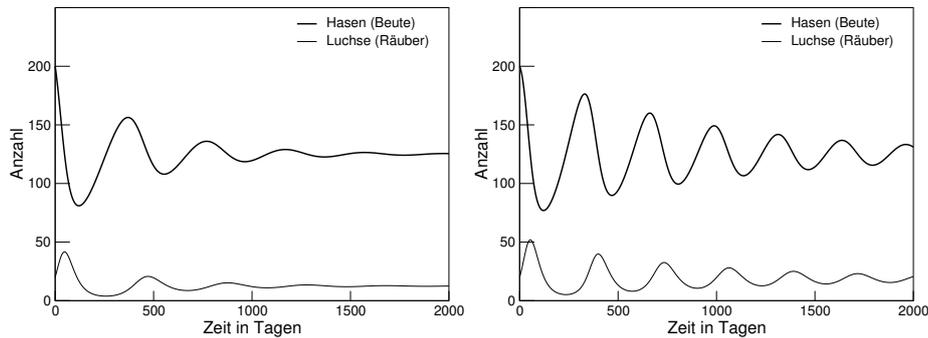


Abbildung 5.6: Lösungskurven des Räuber-Beute Systems mit einer Kapazität für die Hasen (Beute) von $K = 250$ (links) und $K = 500$ (rechts).

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 $B \rightarrow \infty$ gegen b . Somit ist b die maximale Wachstumsrate. Der Wert M ist die sogenannte **Halbsättigungsrate**. Setzt man M in die Funktion f ein, so gilt $f(M) = \frac{b}{2}$. Es wird also gerade die Hälfte der maximalen Rate b erreicht. Die Wachstumsrate b ist in der Dimension $1/\text{Zeit}$ und hat z.B. die Einheit $1/\text{Jahr}$, M hat dieselbe Dimension und Einheit wie B , also zum Beispiel Biomasse in kg. Der

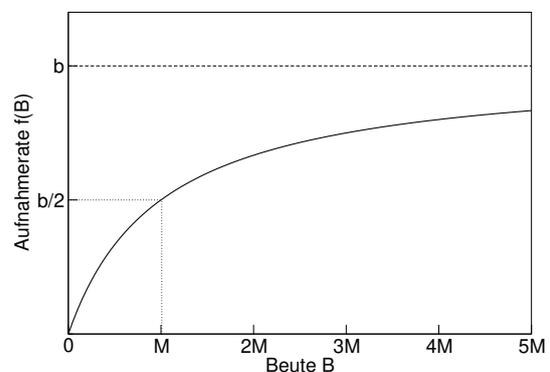


Abbildung 5.7: Graph der Monod-Funktion mit der Halbsättigungskonstanten M und dem Grenzwert b .

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 Halbsättigungskon-

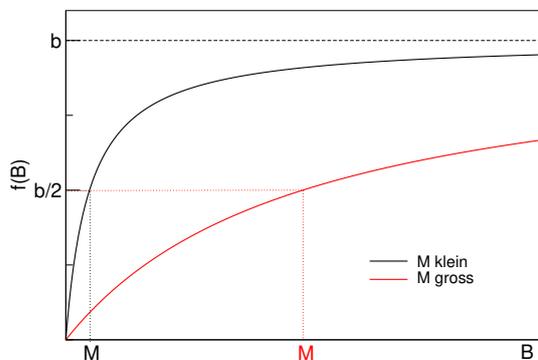


Abbildung 5.8: Graph der Monod-Funktion mit großer (rot) und kleiner (schwarz) Halbsättigungskonstanten M und $b = 1$.

stanten M ist die Fressrate $f(B)$ für nahezu alle Beutekonzentrationen konstant. Der Räuber reagiert quasi nicht auf die Beutekonzentration. Beute 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 ($M \gg K$) wird die Fressrate nahezu null, der Räuber stirbt aus.

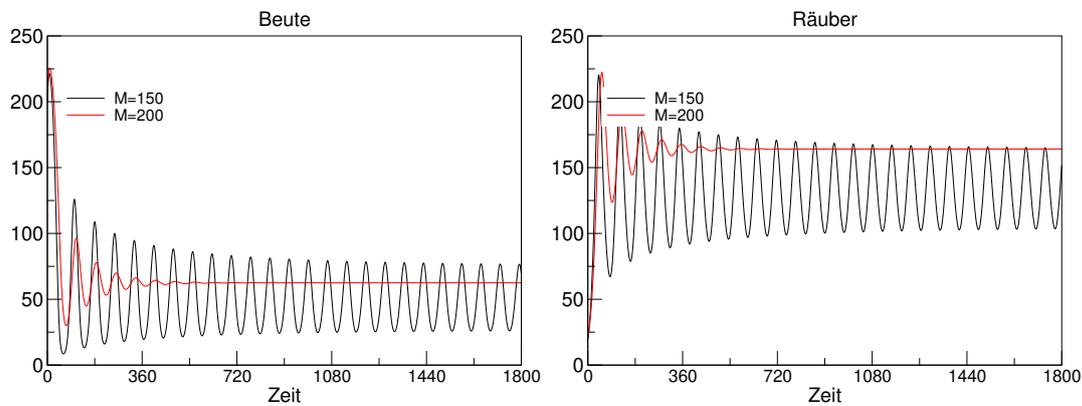


Abbildung 5.9: Simulationsergebnisse des Modells mit der Formulierung in Gleichung A.13 für $M = 150$ und $M = 200$. Weitere Parameterwerte: $r = 0.25$, $K = 250$, $n = 0.7$ $s = 0.05$, $b = 0.3$

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.

Räuber-Beute-Modell nach Rosenzweig und MacArthur

Man erhält nun folgendes allgemeinere Räuber-Beute-Modell ähnlich dem Modell von Rosenzweig und MacArthur [Rosenzweig & MacArthur 1963] mit den Zustandsvariablen B und R und den Parametern gemäß Tabelle 5.1:

$$\begin{aligned}\dot{B} &= r \cdot B \cdot \left(1 - \frac{B}{K}\right) - b \cdot \frac{B}{B + M} \cdot R \\ \dot{R} &= n \cdot b \cdot \frac{B}{B + M} \cdot R - s \cdot R\end{aligned}\tag{5.5}$$

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

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, kommen ihm aber beliebig nahe.

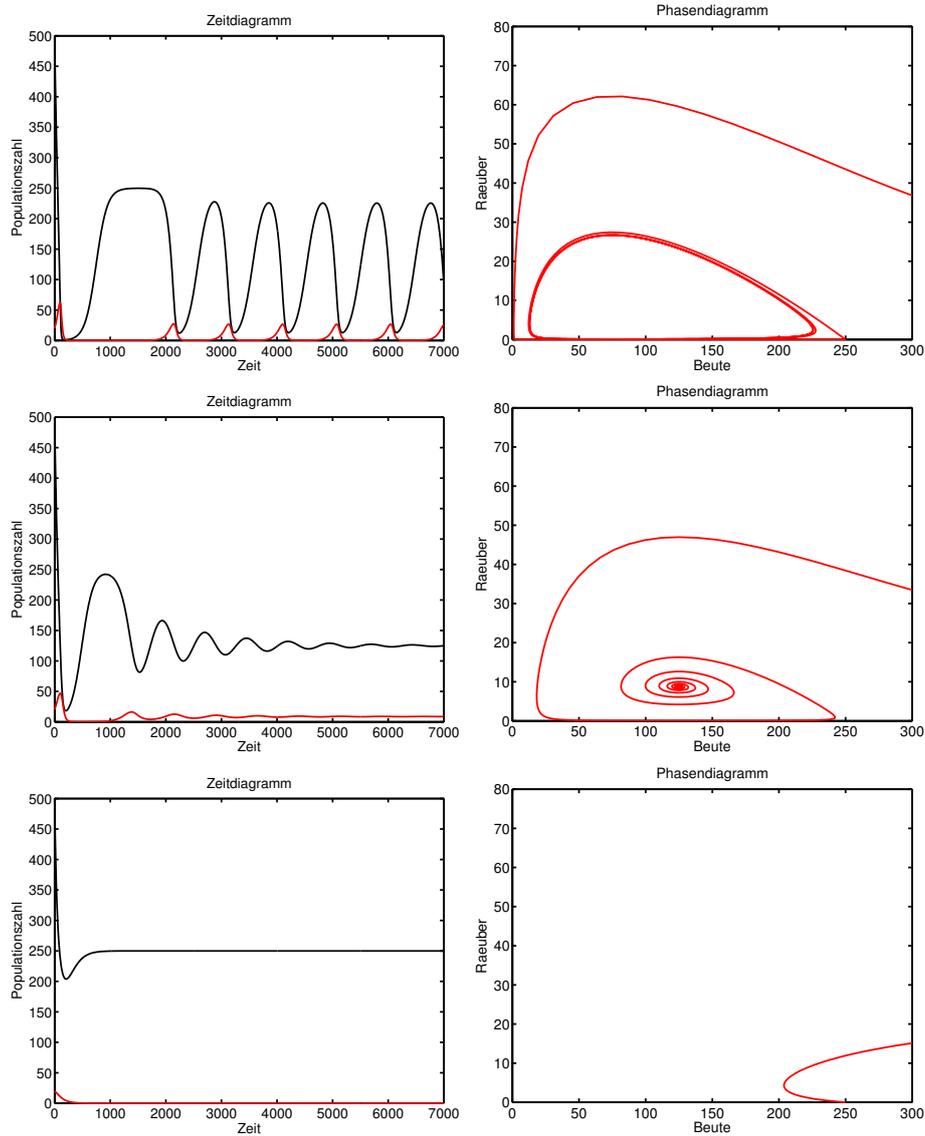


Abbildung 5.10: Simulationsergebnisse für das allgemeine Räuber-Beute-Modell nach 5.5 mit den Parametern $r = 0.01, K = 250, M = 30, s = 0.05, n = 0.7, b = 0.1$ (oben), $r = 0.01, K = 250, M = 50, s = 0.05, n = 0.7, b = 0.1$ (mitte) und $r = 0.01, K = 250, M = 30, s = 0.07, n = 0.7, b = 0.1$ (unten). Links ist jeweils das Zeitdiagramm (Beute:schwarz, Räuber:rot), rechts das Phasendiagramm dargestellt.

5.2 PZ-Modell

Das Räuber-Beute Modell lässt sich gut auf aquatische Systeme übertragen. Ein sehr einfaches Planktonmodell hat die zwei Zustandsvariablen

P Phytoplanktendichte

Z Zooplanktendichte

Wir geben diese Dichten in Biomasse an, z.B. mg C m^{-3} . Zunächst wird das bisherige autonome System betrachtet, eine Sommersituation ohne jahreszeitliche Veränderung. Für die Beute B wird das Phytoplankton P, für die Räuber R wird Zooplankton Z eingesetzt.

$$\dot{P} = r \cdot P \cdot \left(1 - \frac{P}{K}\right) - b \cdot \frac{P}{P + M} \cdot Z \quad (5.6)$$

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

Die Ratenkonstanten r , b und m tragen die Einheiten 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 (5.6) und der angegebenen Parametrisierung dargestellt. Der Wert des Parameters M wurde einmal unter, einmal über dem kritischen Wert gewählt ($M = 900 \text{ mg C m}^{-3}$ und $M = 1200 \text{ mg C m}^{-3}$):

$r = 0.5 \text{ d}^{-1}$	Phytoplanktonzellen teilen sich unter günstigen Bedingungen etwa alle 1-2 Tage: $r = \ln 2/G$ (Generationszeit G).
$K = 2000 \text{ mg C m}^{-3}$	Kapazität des Phytoplanktons
$b = 0.5 \text{ d}^{-1}$	Zooplankter, z.B. Copepoden, nehmen unter günstigsten Bedingungen etwa 50% des Körpergewichtes pro Tag auf
$M = 900 \text{ mg C m}^{-3}$	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.
$m = 0.05 \text{ d}^{-1}$	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

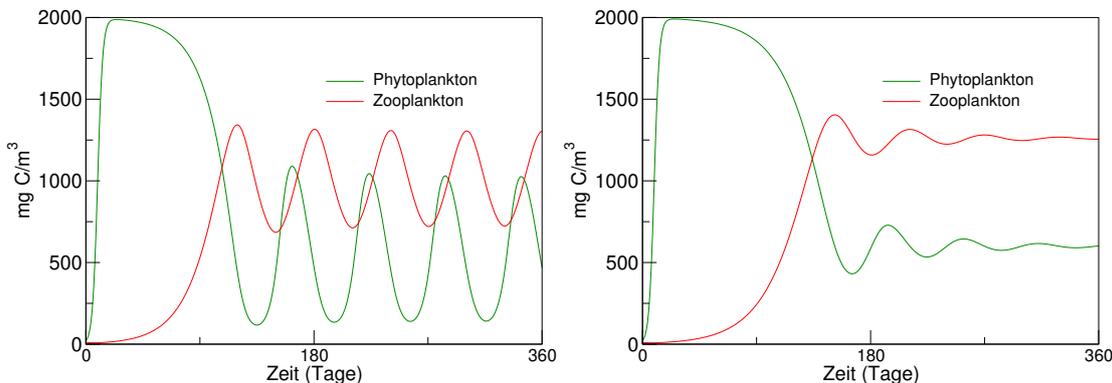


Abbildung 5.11: Simulationsergebnisse für das Planktonmodell (5.6). Je nach Parametrisierung sind die Räuber-Beute-Schwingungen ungedämpft (stabiler Grenzreis) oder gedämpft (stabiler Fixpunkt). Links: $M = 900 \text{ mg C m}^{-3}$, rechts $M = 1200 \text{ mg C m}^{-3}$.

Das Planktonsystem ist in Wirklichkeit kein autonomes System, wie bisher angenommen. 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 Frühlingsblüte des Phytoplankton, nach niedrigen Abundanzen im Winter (Abbildung 5.12). Um diese Verläufe mit dem Modell simulieren zu können, muss das Modell (5.6) erweitert

werden. Die Sonneneinstrahlung wird im folgenden als externer Antrieb für das

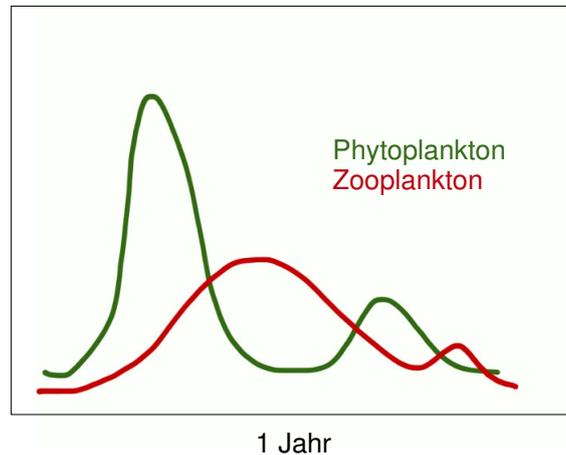


Abbildung 5.12: Schematische Darstellung der Jahresgänge von Phyto- und Zooplankton in gemäßigten Breiten.

Phytoplanktonwachstum berücksichtigt. Vereinfachend nehmen wir folgende Einstrahlungskurve an, bei der wir die Länge eines Modelljahrs auf 360 Tage setzen:

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

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:

$$e_L = \frac{L(t)}{L_{\max}} \quad \text{Lichtregulationsfaktor} \quad (5.7)$$

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

$$\begin{aligned} \dot{P} &= r \cdot e_L \cdot \left(1 - \frac{P}{K}\right) \cdot Z - b \cdot \frac{P}{P + M} \cdot P \\ \dot{Z} &= n \cdot b \cdot \frac{P}{P + M} \cdot Z - m \cdot Z \end{aligned} \quad (5.8)$$

Setzt man den Regulationsfaktor auf 1, so hat man wieder das System (5.6).

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. Es ist kaum nötig, darauf hinzuweisen, dass die Parameterwahl für das Modell nur sehr weitläufig den realen Gegebenheiten entspricht. Das Modell ist noch zu einfach, um die Realität gut widerspiegeln zu können. Insbesondere wird in unseren Breiten ein wesentlich schmaleres Frühjahrsmaximum des Phytoplanktons beobachtet, da Zooplankton erfolgreiche Überwinterungsstrategien besitzt. Seine Dichte sinkt im Winter viel weniger ab als im Modell.

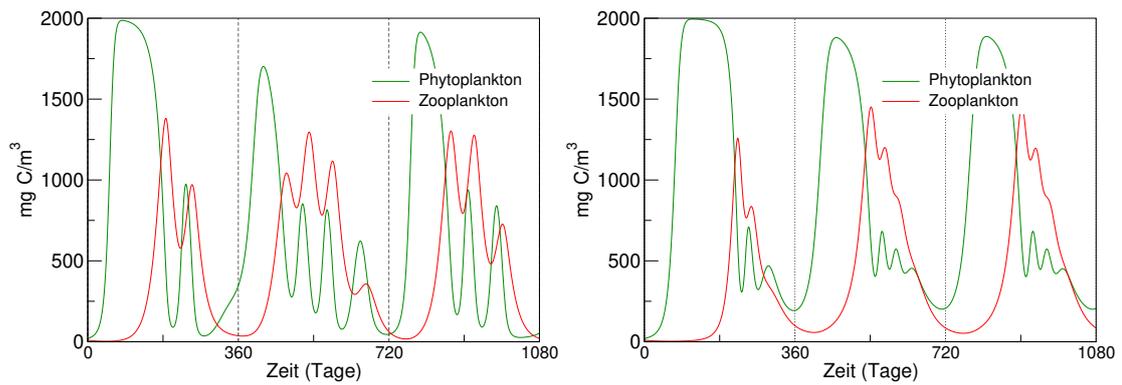


Abbildung 5.13: Simulationen des Modells (5.8) mit Lichtforcing für 3 Modelljahre. Links treten im Sommer starke Schwingungen auf ($M = 900 \text{ mg C m}^{-3}$), rechts sind die Schwingungen gedämpft ($M = 1200 \text{ mg C m}^{-3}$)

6 Diskrete Modelle (2D)

6.1 Fibonacci und die Kaninchen

Leonardo da Pisa, auch Fibonacci (figlio di Bonacci, Sohn des Bonacci, geboren ca. 1180) 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. 1227) 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).

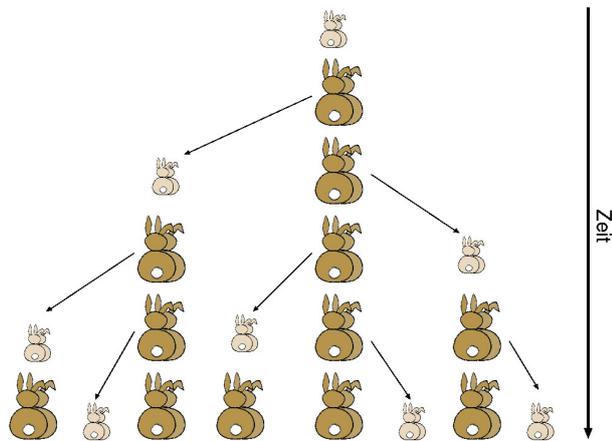


Abbildung 6.1: Kaninchenwachstum nach Fibonacci.

Festlegung der Zustandsvariablen

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:

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

Die Prozesse, die f bestimmen, sind:

Reproduktion: Reproduktive Kaninchen bringen Neugeborene hervor

Altern: Neugeborene Kaninchen werden reproduktiv

Man erhält folgende Gleichungen

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

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 D zusammengefasst. Weitere Informationen zu Matrizen als lineare Abbildungen findet man in Anhang E.

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	...

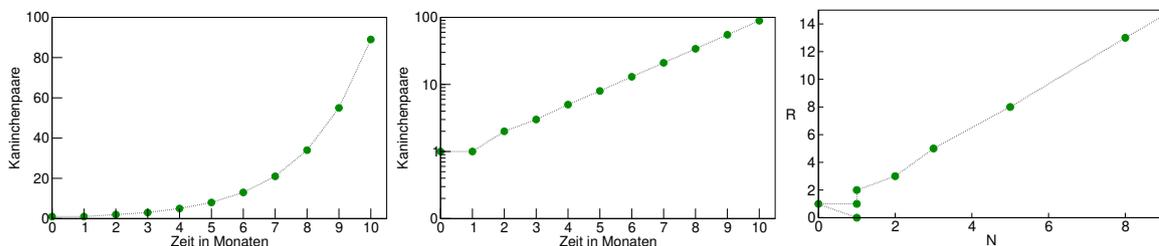


Abbildung 6.2: Das Kaninchenmodell nach Fibonacci. Die ersten Schritte, links linear, mitte logarithmisch, rechts Phasenraum.

Wie Abbildung 6.2 (Mitte) zeigt, besteht ein linearer Zusammenhang, wenn man

den Logarithmus der Ergebnisse betrachtet:

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

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:

$$x_1 = A \cdot x_0 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$x_2 = A \cdot x_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

...

$$x_n = A \cdot x_{n-1} = A^n \cdot x_0$$

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

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

zu tun, 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, dass 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 D und Anhang E). 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 streckt¹.

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

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

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

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

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

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

In die Richtung von v_2 findet eine alternierende Stauchung um den Faktor λ_2 statt,

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

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

$$x_n = \lambda_1^n \cdot v_1 \quad (6.4)$$

und

$$x_n = \lambda_2^n \cdot v_2 \quad (6.5)$$

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 gefundenen Lösungen sagen bisher folgendes aus: Startet man mit einem Verhältnis von Neugeborenen zu Reproduktiven, das 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

$$x_n = a_1 \cdot \lambda_1^n \cdot v_1 + a_2 \cdot \lambda_2^n \cdot v_2 \quad (6.6)$$

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 erhält²:

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

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

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.

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

7 Altersklassenmodell

Streng genommen ist das Kaninchenmodell nach Fibonacci (Abschnitt 6) 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. Juvenile Krill reift zu adulten Tieren¹. 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

$$x_1(n+1) = 600 \cdot x_3(n) \quad (7.1)$$

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

$$x_2(n+1) = 0.01 \cdot x_1(n) \quad (7.2)$$

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

$$x_3(n+1) = 0.1 \cdot x_2(n) - 0.5 \cdot x_3(n) \quad (7.3)$$

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

Diese Modell kann man nun kompakt mit einer Matrix L schreiben

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

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:

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

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

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

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 $x_1 : x_2$, $x_1 : x_3$ und $x_3 : x_2$ 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:

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

für beliebige $a_1, a_2, a_3 \in \mathbb{R}$. Eine spezielle Lösung erhält man, indem man die a 's 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

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

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 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.

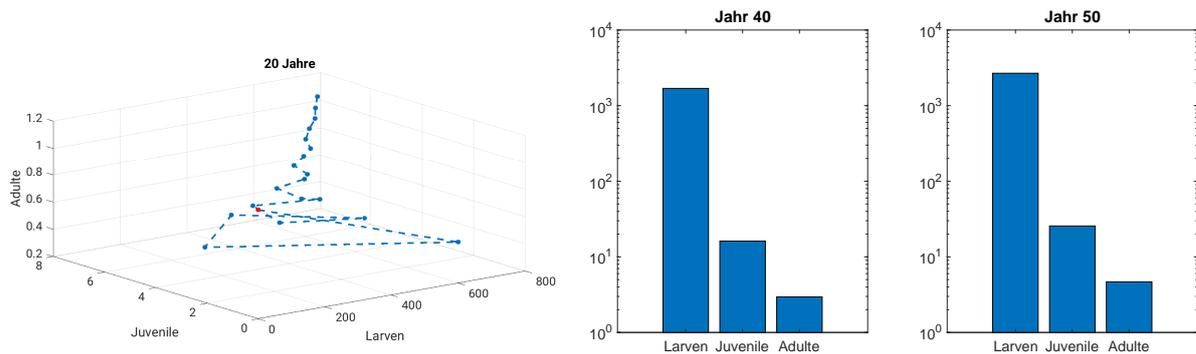


Abbildung 7.1: Links: Wachstum des Krills über 20 Jahre. Der Anfangswert ist rot markiert. Nach ein paar Jahren stellt sich eine stabile Altersverteilung zwischen Larven (x_1), Juvenilen (x_2) und Adulten (x_3) ein. Rechts: Absolutzahlen der Altersklassen nach 40 (links oben) bzw. 50 (rechts oben) Jahren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

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 \vec{x}_{n+1} und \vec{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 Räumliche Modelle

8.1 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, das 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 Stanislaw 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 (~1970) von John Horton Conway (1937-2020).

8.1.1 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 [Wolfram 2002] 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).

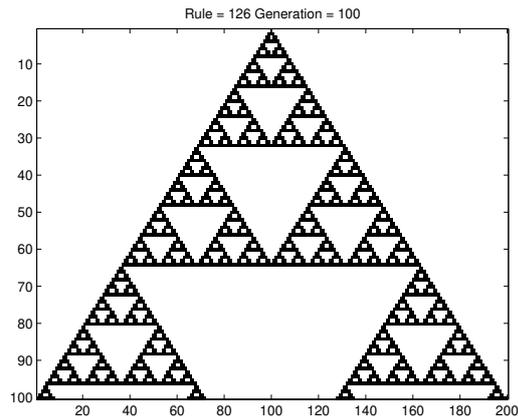


Abbildung 8.1: Wolfram Universum. Die Zeit läuft von oben nach unten

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).

8.1.2 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.

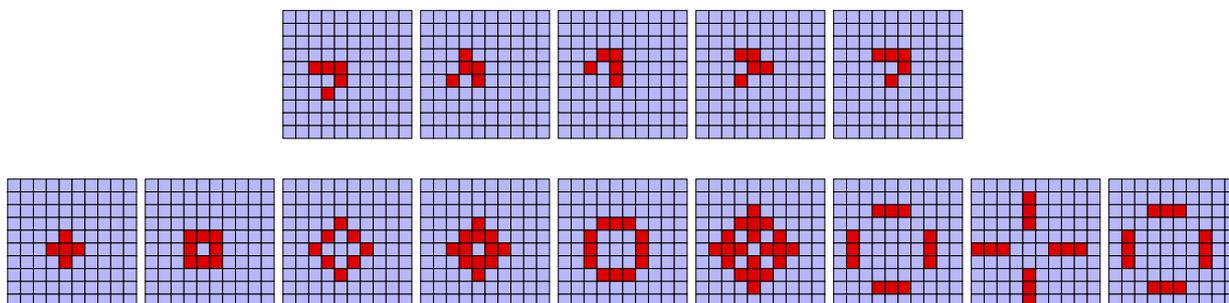


Abbildung 8.2: Gleiter (oben) und Zyklus (unten) in Life

8.1.3 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

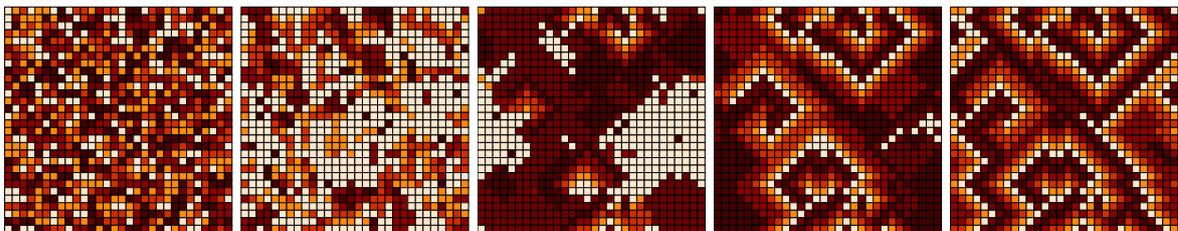


Abbildung 8.3: Selbstorganisation im zirkulären Raum mit $N=6$ Zuständen. Zwischen den Bildern liegen jeweils 6 Generationen

8.1.4 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 Abschnitt 8.2).

8.2 Transportprozesse

Lässt man in zellulären Automaten 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, dass 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.

8.2.1 Advektion (Transportgleichung)

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 8.4), 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.

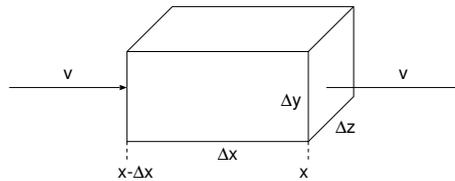


Abbildung 8.4: Das Volumenelement $V = \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z$, in das in x-Richtung mit der Geschwindigkeit v Wasser strömt..

Die Masse an Tinte, die nun in einem Zeitschritt Δt durch die Strömung mit der Strömungsgeschwindigkeit v in das Volumen $\Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z$ gelangt, ist durch

$$m_{in} = c(t, x - \Delta x) \cdot v(t, x - \Delta x) \cdot \Delta t \cdot \Delta y \cdot \Delta z \tag{8.1}$$

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

$$m_{out} = c(t, x) \cdot v(t, x) \cdot \Delta t \cdot \Delta y \cdot \Delta z \tag{8.2}$$

gegeben Die Massendifferenz beträgt also

$$\Delta m = [c(t, x) \cdot v(t, x) - c(t, x - \Delta x) \cdot v(t, x - \Delta x)] \cdot \Delta t \cdot \Delta y \cdot \Delta z \tag{8.3}$$

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:

$$m(t + \Delta t, x) - m(t, x) = -\Delta m \tag{8.4}$$

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 $c = m/V$

$$\frac{c(t + \Delta t, x) - c(t, x)}{\Delta t} = -\frac{c(t, x) \cdot v(t, x) - c(t, x - \Delta x) \cdot v(t, x - \Delta x)}{\Delta x} \tag{8.5}$$

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

$$\frac{\partial c(t, x)}{\partial t} = - \frac{\partial(c(t, x) \cdot v(t, x))}{\partial x} \quad (8.6)$$

Mit der Produktregel erhält man

$$\frac{\partial c(t, x)}{\partial t} = - \left[c(t, x) \cdot \frac{\partial v(t, x)}{\partial x} + v(t, x) \cdot \frac{\partial c(t, x)}{\partial x} \right] \quad (8.7)$$

Für konstante Geschwindigkeit v gilt daher

$$\frac{\partial c(t, x)}{\partial t} = -v \cdot \frac{\partial c(t, x)}{\partial x} \quad (8.8)$$

Gleichung 8.8 heißt **Advektionsgleichung** (für konstante Geschwindigkeiten). Es handelt sich um eine partielle Differentialgleichung, da die Ableitungen nach t und nach x auftauchen.

Diskretisierung

Um nun Gleichung 8.8 numerisch zu lösen, muss die Gleichung diskretisiert werden. Der Schlauch wird durch ein eindimensionales Gitter simuliert. Hierzu wird 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:

$$\frac{c(t + \Delta t, x) - c(t, x)}{\Delta t} + v \cdot \frac{c(t, x) - c(t, x - \Delta x)}{\Delta x} = 0 \quad (8.9)$$

Dies entspricht wieder Gleichung 8.5, was aber nicht zwingend ist. Es gibt andere Diskretisierungen. In Gleichung 8.9 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

$$v \cdot \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1 \quad \text{Courant-Friedrichs-Lewy-Kriterium (CFL)} \quad (8.10)$$

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

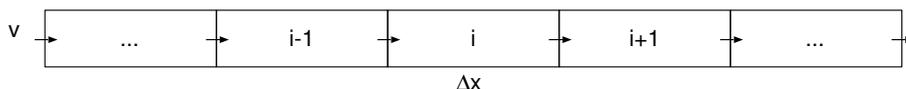


Abbildung 8.5: Diskretisierung des Schlauchs in Gitterzellen der Länge Δx , in die in x -Richtung mit der Geschwindigkeit v Wasser strömt.

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. 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.

8.2.2 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 proportio-

nal 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.

Einheiten: Ist die Konzentration c z.B. in mol/m^3 angegeben und die Zeit in s , so ist die Einheit des Flusses J $\text{mol}/\text{m}^2\text{s}$. 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 8.8, 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

$c(t, 0)$ und $c(t, L)$ f.a $t \geq 0$ **Dirichlet-Problem**

oder man gibt die Ableitungen am Rand vor

$\frac{\partial c}{\partial t}c(t, 0)$ und $\frac{\partial c}{\partial t}c(t, L)$ f.a $t \geq 0$ **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 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), 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 den benachbarten Gitterzellen diskretisiert, indem man die jeweiligen Differenzenquotienten betrachtet:

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

Die zeitliche Diskretisierung führt zu:

$$c(t + \Delta t, x) = c(t, x) + D \cdot \frac{c(t, x + \Delta x) - 2 \cdot c(t, x) + c(t, x - \Delta x)}{\Delta x^2} \cdot \Delta t \quad (8.11)$$

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

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

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 8.11 die Konzentration in den Nachbarzellen schlimmstenfalls null ist.

8.2.3 Der zweidimensionale Transport

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 **Diffusion**

$$\begin{aligned} c(t + \Delta t, i, j) = c(t, i, j) & \qquad (8.12) \\ + D \cdot \frac{c(t, i + 1, j) - 2 \cdot c(t, i, j) + c(t, i - 1, j)}{\Delta x^2} \cdot \Delta t \\ + D \cdot \frac{c(t, i, j + 1) - 2 \cdot c(t, i, j) + c(t, i, j - 1)}{\Delta x^2} \cdot \Delta t \end{aligned}$$

mit der Stabilitätsbedingung

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

und für die **Advektion** mit den Geschwindigkeiten $v_x > 0$ und $v_y > 0$ in die Koor-

Einheitsrichtungen

$$\begin{aligned}c(t + \Delta t, i, j) &= c(t, i, j) && (8.13) \\ &+ v_x \cdot \frac{c(t, i-1, j) - c(t, i, j)}{\Delta x} \cdot \Delta t \\ &+ v_y \cdot \frac{c(t, i, j-1) - c(t, i, j)}{\Delta x} \cdot \Delta t\end{aligned}$$

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

$$(v_x + v_y) \cdot \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1 \quad (8.14)$$

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

8.2.4 Numerische Diffusion*

Die angegebene Diskretisierung der Advektion (Gleichung 8.5) 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.

$$c(t + \Delta t, x) = c(t, x) + \frac{\partial c(t, x)}{\partial t} \cdot \Delta t + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 c(t, x)}{\partial t^2} \cdot \Delta t^2 + \mathcal{O}(\Delta t^3) \quad (8.15)$$

$$c(t, x - \Delta x) = c(t, x) - \frac{\partial c(t, x)}{\partial x} \cdot \Delta x + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 c(t, x)}{\partial x^2} \cdot \Delta x^2 + \mathcal{O}(\Delta x^3) \quad (8.16)$$

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 8.8 ein, so erhält man

$$\begin{aligned} & \frac{c(t + \Delta t, x) - c(t, x)}{\Delta t} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 c(t, x)}{\partial t^2} \cdot \Delta t \\ & + v \cdot \left(\frac{c(t, x) - c(t, x - \Delta x)}{\Delta x} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 c(t, x)}{\partial x^2} \cdot \Delta x \right) = 0 \end{aligned} \quad (8.17)$$

Die zweite zeitliche Ableitung wird man wieder los, indem man Gleichung 8.8 berücksichtigt und annimmt, dass v konstant ist:

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

also

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 c(t, x)}{\partial t^2} &= -v \cdot \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{\partial c(t, x)}{\partial x} \right] = -v \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial c(t, x)}{\partial t} \right] = -v \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[-v \cdot \frac{\partial c(t, x)}{\partial x} \right] \\ &= v^2 \cdot \frac{\partial^2 c(t, x)}{\partial x^2} \end{aligned} \quad (8.18)$$

Setzt man dies nun in Gleichung 8.17 ein und fasst zusammen, so erhält man

$$\begin{aligned} & \frac{c(t + \Delta t, x) - c(t, x)}{\Delta t} + v \cdot \frac{c(t, x) - c(t, x - \Delta x)}{\Delta x} & (8.19) \\ & = \frac{1}{2} \cdot v^2 \cdot \frac{\partial^2 c(t, x)}{\partial x^2} \cdot \Delta t - \frac{1}{2} \cdot v \cdot \frac{\partial^2 c(t, x)}{\partial x^2} \Delta x \\ & = -\frac{1}{2} \cdot v \cdot (\Delta x - v \cdot \Delta t) \cdot \frac{\partial^2 c(t, x)}{\partial x^2} \end{aligned}$$

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:

$$\frac{1}{2} \cdot v \cdot (\Delta x - v \cdot \Delta t) \cdot \frac{\partial^2 c(t, x)}{\partial x^2} \quad (8.20)$$

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 8.10.

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 8.19 berücksichtigt, indem man ihn wie in Abschnitt 8.2.2 diskretisiert. Das Verfahren,

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

$$c(t + \Delta t, x) = c(t, x) + a \cdot (c(t, x - \Delta x) - c(t, x)) \quad (8.21)$$

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

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

8.3 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 8.6).

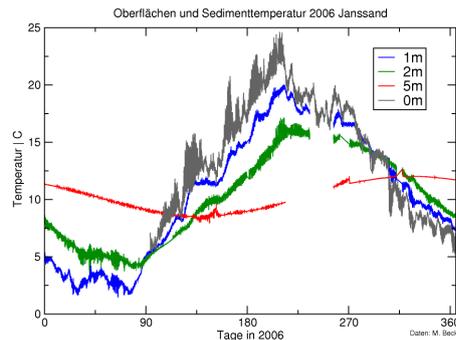


Abbildung 8.6: Temperaturdaten vom Janssand (rot, grün, blau, M. Beck, 2006), Rückseitenwatt von Spiekeroog und vom Messpfahl (grau, M. Grunwald, 2006)

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 8.2.2 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 2.1) um einen vollständigen Jahresgang zu erhalten.

Es wird das eindimensionale Diffusionsschema nach Gleichung 8.11 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 approximierete 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 8.7 dargestellt.

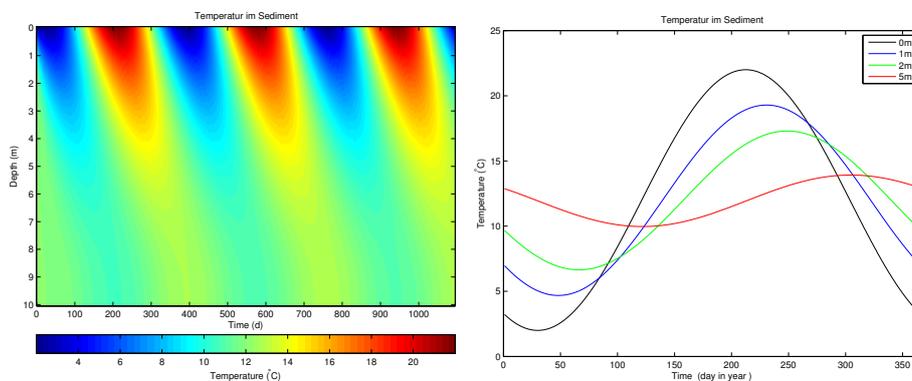


Abbildung 8.7: Simulationsergebnis zur Temperaturverteilung im Sediment über drei Jahre (links) und im Vergleich zu den Messdaten zur Temperaturverteilung im Sediment für das dritte Jahr (rechts).

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 8.6 und Abbildung 8.7 (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).

9 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

9.1 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 Umgebungen der schon klebenden Teilchen. Die Bewegung führt bei jedem Zeitschritt in eine der vier angrenzenden Zellen, relativ zur augenblicklichen Position des Teilchens (Abbildung 9.1).

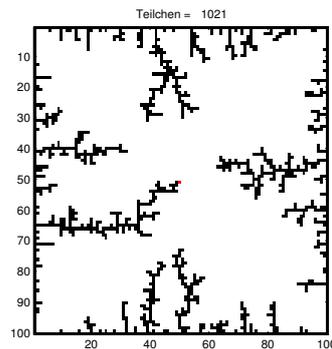


Abbildung 9.1: Dendritenwachstum.

9.2 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 vorgegebenen Bewegungsrichtung.

Nach einer langen Vorlaufzeit (ca. 10000 Schritte) mit einem chaotischen Muster bildet sich eine Struktur, die wie eine Straße aussieht (Abbildung 9.2). Dieses Phänomen ist ein Beispiel für Selbstorganisation.

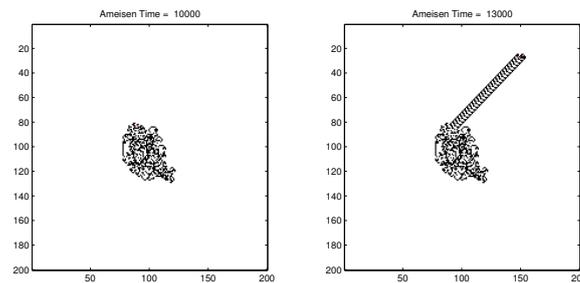


Abbildung 9.2: Ameisenstraße: Links nach 10000 Schritten, rechts nach 13000 Schritten.

9.3 Tracer-Modell zur Larvenansiedlung in aquatischen Systemen

Die Ansiedlung von Larven an Substrat könnte mit einem individuenbasierten Modell beschrieben werden. Larven bewegen sich je nach Art zumeist passiv in der Strömung 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.

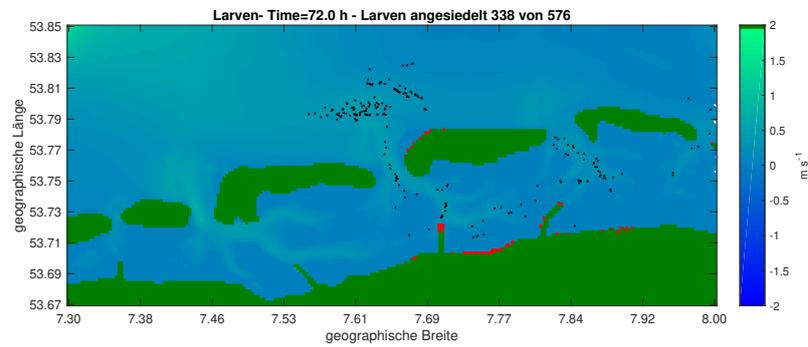


Abbildung 9.3: Screenshot eines Tracermodells zur Ansiedlung von Larven im Rückseitenwatt der ostfriesischen Inseln. Schwarz: schwimmende Larven, rot: angesiedelte Larven. Die Ansiedelung am Ende der Fahrrinnen ist ein Artefakt, der sich aus dem zugrunde liegenden Strömungsfeld ergibt. Quelle: Strömungsdatensatz: K. Lettmann, Modell: C. Feenders & C. Kohlmeier

10 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 [Kermack & McKendrick 1927] zurück.

10.1 Das Epidemiemodell nach Kermack & McKendrick

Das Modell lässt sich am einfachsten wie folgt verstehen. 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, gesendet nach einer gewissen Zeit R (engl. removed, recovered). Es wird hierbei nicht zwischen infizierten und erkrankten Personen unterschieden und gesendete 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 gesunden Personen zur Zeit t

Man nimmt an, dass zu Beginn einer Epidemie eine sehr kleine Anzahl von Personen infiziert ist: $I(0) \ll N$ 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 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 [Kermack & McKendrick 1927]:

$$\begin{aligned} \dot{S} &= -\beta \cdot \frac{I}{N} \cdot S & (10.1) \\ \dot{I} &= \beta \cdot \frac{I}{N} \cdot S - \gamma \cdot I \\ \dot{R} &= \gamma \cdot I \end{aligned}$$

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. Für eine konstante Bevölkerungsgröße gilt zu jeder Zeit $S + I + R = N$. Damit lässt sich das System 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:

$$\dot{S} = -\beta \cdot \frac{I}{N} \cdot S \tag{10.2}$$

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

Diesem System sieht man den Epidemieverlauf bereits an. Für $S > \rho$ gilt $\dot{I} > 0$, für $S < \rho$ gilt $\dot{I} < 0$. Das 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 10.1 dargestellt.

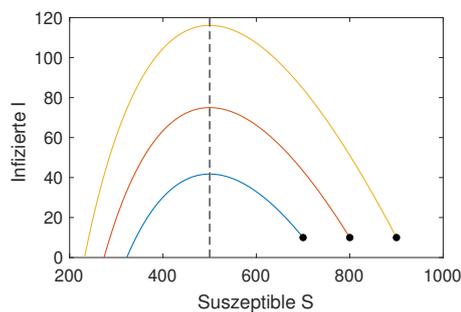


Abbildung 10.1: Lösungen im S-I-Phasenraum des klassischen Epidemiemodells nach Kermack & McKendrick für $\beta = 0.2$ und $N = 1000$ mit Anfangswerten (Punkte) oberhalb des Schwellenwerts $\rho = 500$ (gestrichelt).

10.1.1 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 10.1.2).

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

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 Basisreproduktionszahl $R_0 = \frac{p \cdot k}{\gamma} = \frac{\beta}{\gamma} < 1$ 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
- Impfung

erreicht werden.

10.1.2 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

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

10.1.3 Analyse des SI-Modells*

Fixpunkte

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

Stabilität der Fixpunkte

Es kann mit den Methoden nach Anhang G gezeigt werden, dass für $S > \rho$ der Fixpunkt $(S, 0)$ instabil ist, die Epidemie bricht aus. Für $S < \rho$ ist $(S, 0)$ stabil, die Infizierten verschwinden.

Isoklinen

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

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

Die I-Isokline, also das Teilgleichgewicht, bei dem sich die Zahl der Infizierten nicht mehr ändert, ist dadurch charakterisiert, dass 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 hier waagrecht.

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

10.2 Vergleich von Räuber-Beute-Modell und Epidemiemodell

In Abschnitt 5.1 haben wir 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

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

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

Räuber-Beute-Modell

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

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

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 $\frac{\beta}{N}$ zu einem Parameter (p_2) zusammenfassen.

Epidemiemodell

Räuber-Beute-Modell

$$\dot{x} = - p_2 \cdot x \cdot y$$

$$\dot{x} = p_1 \cdot x - p_2 \cdot x \cdot y$$

$$\dot{y} = p_2 \cdot x \cdot y - p_3 \cdot y$$

$$\dot{y} = p_2 \cdot x \cdot y - p_3 \cdot y$$

Die Ergebnisse der Modelle sind in Abbildung 10.2 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.

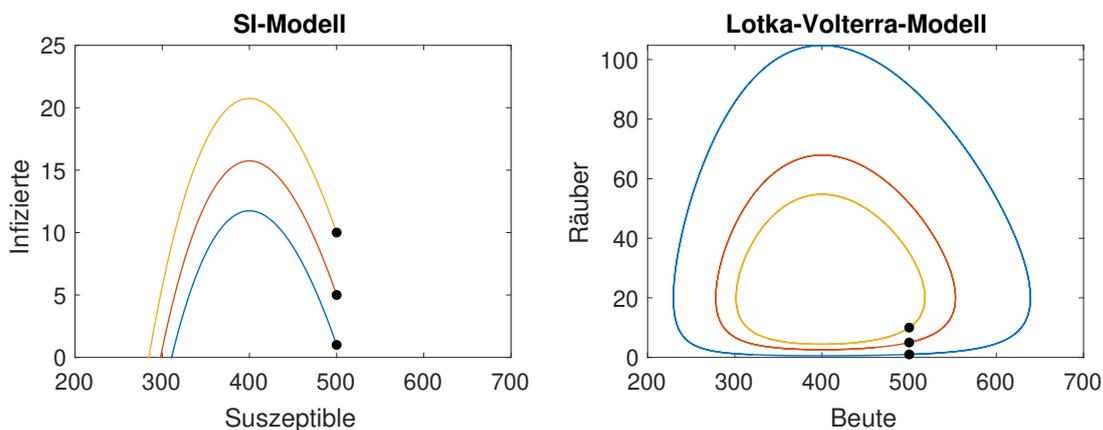


Abbildung 10.2: Vergleich des SI-Modells (links) mit dem Lotka-Volterra-Modell (rechts) im Phasenraum. Es sind jeweils Lösungen für drei verschiedene Anfangswerte (Punkte) dargestellt. Parametrisierung: $p_1 = 0.02$, $p_2 = 0.001$, $p_3 = 0.4$, $x_0 = 500$, $y_0 \in \{1, 5, 10\}$.

10.3 Das SIS-Modell

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

$$\dot{S} = -\beta \cdot \frac{I}{N} \cdot S + \gamma \cdot I \quad (10.3)$$

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

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

$$\dot{I} = \beta \cdot \frac{I}{N} \cdot (N - I) - \gamma \cdot I =: f(I) \quad (10.4)$$

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

$$\frac{df(I)}{dI} = \beta - 2 \frac{\beta}{N} \cdot I - \gamma$$

und damit

$$\frac{df(I^*)}{dI} = \gamma - \beta$$

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

11 Fraktale und fraktale Dimension*

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 $[\frac{2}{3}, 1]$. Mit diesen Intervallen Verfahren wir genauso. Aus jedem der beiden Intervalle wird jeweils wieder das mittlere Drittel herausgeschnitten usw. (siehe Abbildung 11.1). Die Frage ist, was übrig bleibt, wenn man dieses



Abbildung 11.1: 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 11.2): Bestimmt man die Treppenzlänge (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 $\sqrt{2}$.



Abbildung 11.2: Die Treppenzlänge beträgt für jeden Schritt 2. Die Diagonale als Limesbild hat die Länge $\sqrt{2}$.

Betrachten wir noch einmal die Cantor-Menge. Jedes Intervall, das entsteht, 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 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 11.3).

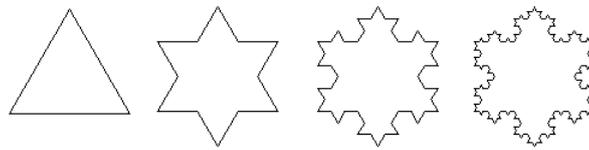


Abbildung 11.3: Die Schneeflockenkurve entsteht indem auf jede Seite eines gleichseitigen Dreiecks in der Mitte ein gleichseitiges Dreieck mit einem Drittel der ursprünglichen Seitenlänge aufgesetzt wird.

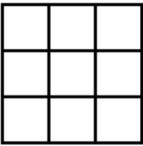
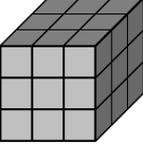
Betrachtet man eine Seite des Dreiecks und setzt die erste Seitenlänge gleich eins, so verlängert sich die Seitenlänge in jedem Schritt um ein Drittel. Letztlich wird die Seite und damit die gesamte Kurve unendlich lang.

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 unbekanntem 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 nicht-ganzzahlige Werte zugelassen sind, die fraktale Dimension:

Fraktale Dimension der Cantor-Menge: $D_{\text{Cantor}} \approx 0,631$

Fraktale Dimension der Kochschen Schneeflockenkurve: $K_{\text{Koch}} \approx 1,262$

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, de-

ren Länge unendlich ist, hat eine Dimension zwischen Strecke ($D=1$) und Fläche ($D=2$).

Ein weiteres bekanntes Fraktal ist das Sierpinski-Dreieck¹. Es entsteht aus einem gleichseitigen Dreieck, aus dem man sukzessive Dreiecke entfernt (Abbildung 11.4).



Abbildung 11.4: Sierpinski-Dreieck.

Beim Sierpinski-Dreieck wird bei einer Verdopplung der linearen Ausdehnung (der Seitenlänge), also einem Skalierungsfaktor von $s=2$, eine Verdreifung 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.

11.1 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 $a \approx$

¹Waclaw Sierpinski (1882-1969)

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 $D \approx 2.79$.
- 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.

11.2 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 (Abbildung ??). 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 definiert².

²Dies 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.

11.3 Das Chaos-Spiel

11.3.1 Cantor Menge

Man kann selbstähnliche Fraktale auch über ein Chaos-Spiel erreichen. Es sei die Strecke \overline{AB} gegeben. Ein Floh hüpfte 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 $x_{\text{alt}} = \frac{2}{3}$, erhält man folgendes Schema:

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

Man erhält so die Zahlenfolge

$$\begin{aligned} x_0 &= \frac{2}{3} \\ x_1 &= \frac{1}{3} \cdot x_0 = \frac{1}{3} \cdot \frac{2}{3} = \frac{2}{9} \\ x_2 &= \frac{2}{3} + \frac{1}{3} \cdot x_1 = \frac{2}{3} + \frac{1}{3} \cdot \frac{2}{9} = \frac{20}{27} \\ x_3 &= \frac{1}{3} \cdot \frac{20}{27} = \frac{20}{81} \\ &\dots \end{aligned}$$

Stellt man diese Folge graphisch dar, so entsteht nach und nach die Cantor-Menge. Ein Programm hierzu ist in I angegeben.

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:

$$\begin{aligned} x_0 &= \frac{2}{3} = 2 \cdot 3^{-1} = 0,2_{\text{TER}} \\ x_1 &= \frac{2}{9} = 0 \cdot 3^{-1} + 2 \cdot 3^{-2} = 0,02_{\text{TER}} \\ x_2 &= \frac{20}{27} = 2 \cdot 3^{-1} + 0 \cdot 3^{-2} + 2 \cdot 3^{-3} = 0,202_{\text{TER}} \\ x_3 &= \frac{20}{81} = 0 \cdot 3^{-1} + 2 \cdot 3^{-2} + 0 \cdot 3^{-3} + 2 \cdot 3^{-4} = 0,0202_{\text{TER}} \end{aligned}$$

11.3.2 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 Sierpinski-Dreieck. Ein Programm hierzu ist in I angegeben.

11.3.3 Der Farn



Zur Erzeugung des Farns wird ausgehend von einem Startpunkt (x_0, y_0) eine von vier affinen Abbildung ausgewählt, die auf den Punkt losgelassen wird. In jedem Schritt wird zufällig eine der vier Abbildungen ausgewählt. Um ein gleichmäßiges Bild zu erhalten, wird eine Abbildung umso häufiger ausgewählt, je

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

$$\begin{pmatrix} x_{\text{neu}} \\ y_{\text{neu}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0,85 & 0,04 \\ -0,04 & 0,85 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_{\text{alt}} \\ y_{\text{alt}} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1,6 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} x_{\text{neu}} \\ y_{\text{neu}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0,2 & -0,26 \\ 0,23 & 0,22 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_{\text{alt}} \\ y_{\text{alt}} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1,6 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} x_{\text{neu}} \\ y_{\text{neu}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0,15 & 0,28 \\ 0,26 & 0,24 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_{\text{alt}} \\ y_{\text{alt}} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0,44 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} x_{\text{neu}} \\ y_{\text{neu}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0,16 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_{\text{alt}} \\ y_{\text{alt}} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Dieses Verfahren zur Erzeugung selbstähnlicher Abbildungen nennt man iteriertes Funktionensystem (IFS). Ein Programm hierzu ist in I angegeben.

11.4 Die Mandelbrot-Menge

Die Mandelbrot-Menge 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:

$$z = a + i \cdot b \quad \text{mit} \quad i = \sqrt{-1}$$

Der Betrag einer komplexen Zahl beträgt $|z| = \sqrt{a^2 + b^2}$

Die Mandelbrot-Menge ist wie folgt definiert:

$$M = \{c \in \mathbb{C} \mid (z_n) \text{ bleibt beschränkt, } z_{n+1} = z_n^2 + c, z_0 = c\}$$

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 über-

prüft, 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 11.5 gegeben. Ein Programm hierzu findet sich in I. Die hübschen Farben, die man auf anderen Bildern häufig sieht ergeben sich, wenn man die Punkte, für die die Iteration nicht beschränkt ist (weiss in Abbildung 11.5), je nach Divergenzgeschwindigkeit unterschiedlich einfärbt.

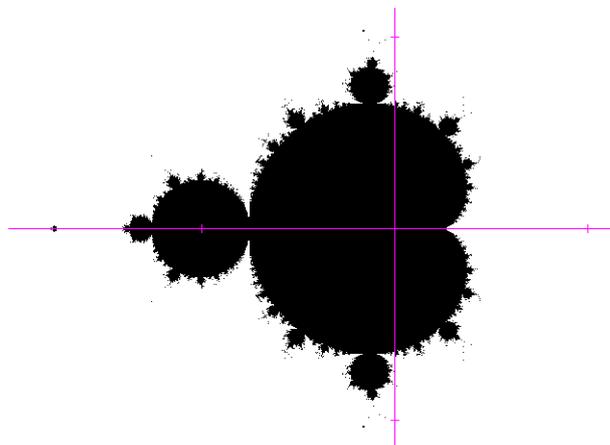


Abbildung 11.5: Mandelbrot-Menge.

Eng verwandt mit der Mandelbrot-Menge sind die Julia-Mengen. Die Julia-Menge ist nach Gaston M. Julia (1893-1978) benannt. Die Julia-Menge zu einem Punkt c ist eine Teilmenge der komplexen Ebene, die durch

$$J_c = \{z \in \mathbb{C} \mid (z_n) \text{ bleibt beschränkt, } z_{n+1} = z_n^2 + c, z_0 = z\}$$

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 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.

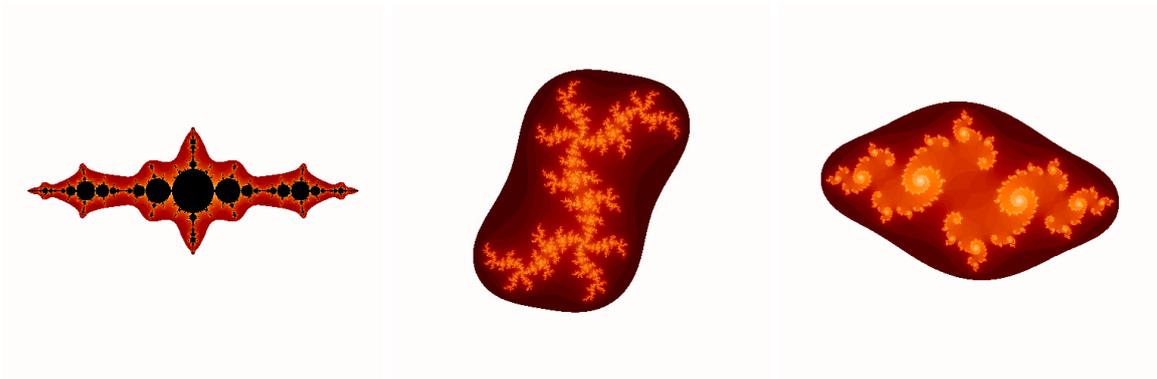


Abbildung 11.6: Julia-Mengen zu den Punkten $c=1,28$ (links) $c= 0,334 - 0,528 i$ (Mitte) und $c= -0,776 + 0,216 i$ (rechts).

Teil II

Weitere Modellbeispiele

12 NPZ-Modell

Nährstoff-Phytoplankton-Zooplankton-Modell

12.1 Modellbeschreibung

In Abschnitt 5.2 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 weitere 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 Jahressgang der 3 Größen Nährstoff, Phytoplankton und Zooplankton simulieren und die Messergebnisse in Abbildung 12.1 reproduzieren. Zuerst muss man sich überlegen, in welchen Ein-

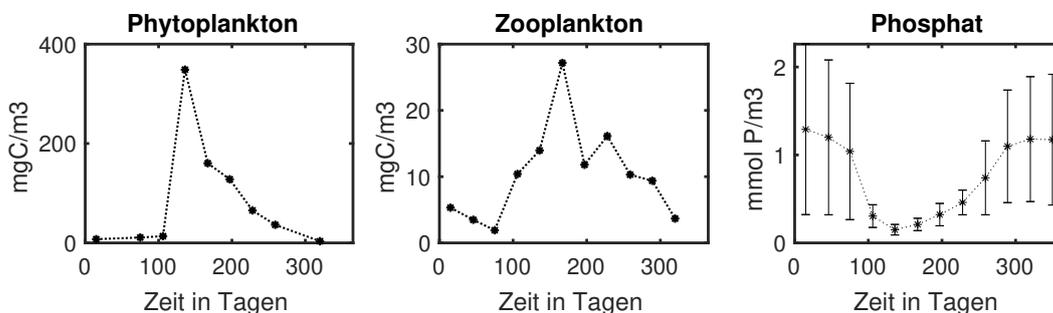


Abbildung 12.1: Messdaten der südlichen Nordsee für Phosphat, Phytoplankton und Zooplankton. Es handelt sich um Monatsmittelwerte. Die "Fehlerbalken" der Phosphatdaten zeigen die hohe Variabilität innerhalb des Zeitraums.

heiten 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. 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 mmol P m^{-3} . Für Phyto- und Zooplankton wählen wird 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:

$$\text{Phosphatkonzentration} = q \cdot \text{Kohlenstoffkonzentration}$$

wobei

$$q = \frac{1 \text{ mmol P}}{106 \text{ mmol C} \cdot \frac{12 \text{ mg}}{\text{mmol C}}} = \frac{1}{106 \cdot 12} \frac{\text{mmol P}}{\text{mmol C}} \quad (12.1)$$

ist.

12.1.1 Prozessbeschreibungen

Wir betrachten also ein Modell mit den drei Zustandsgrößen N,P und Z. Die Prozesse zwischen den Zustandsgrößen sind in Abbildung 12.2 dargestellt und werden im folgenden noch einmal beschrieben. **Assimilation:** Phytoplankton assimiliert 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.

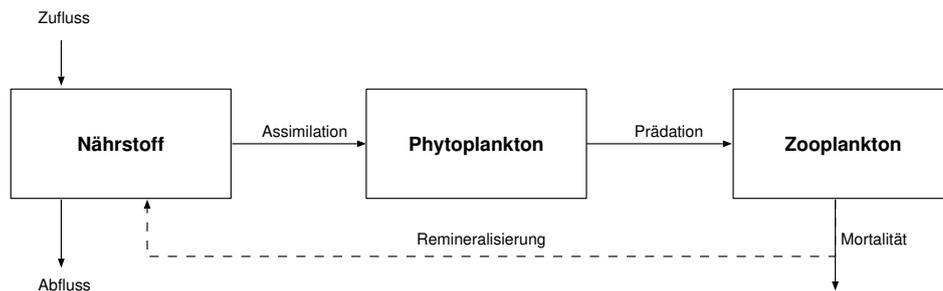


Abbildung 12.2: Schematische Darstellung des NPZ-Modells

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:

$$\begin{aligned}
 \dot{N} &= \text{Remineralisierung} - \text{Assimilation} + \text{Zufluss} - \text{Abfluss} \\
 \dot{P} &= \text{Assimilation} - \text{Prädation} \\
 \dot{Z} &= \text{Prädation} - \text{Mortalität}
 \end{aligned}
 \tag{12.2}$$

Die meisten der Prozesse haben wir schon in Abschnitt 5.2 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

(5.7) 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 Nährstofffluss muss in der Gleichung, die die Änderung des Nährstoffs beschreibt, berücksichtigt werden. Hierzu wird der Kohlenstofffluss mit dem Faktor q (Gleichung 12.1) 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:

$$\text{Prädation} = r_p \cdot \frac{P}{P + P_h} \cdot Z \quad \text{in mg C m}^{-3} \text{ d}^{-1}$$

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

$$\text{Mortalität} = r_m \cdot Z \quad \text{in mg C m}^{-3} \text{ d}^{-1}$$

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:

$$\text{Zufluss} = r_{zu} \cdot N_{zu} \quad \text{in mmol m}^{-3} \text{ d}^{-1}$$

$$\text{Abfluss} = r_{zu} \cdot N \quad \text{in mmol m}^{-3} \text{ d}^{-1}$$

12.2 Gleichungen

$$\dot{N} = -r_a \cdot e_L \cdot \frac{N}{N + N_h} \cdot \left(1 - \frac{P}{K}\right) \cdot P \cdot q + r_{zu} \cdot N_{zu} - r_{zu} \cdot N$$

$$\dot{P} = r_a \cdot e_L \cdot \frac{N}{N + N_h} \cdot \left(1 - \frac{P}{K}\right) \cdot P - r_p \cdot \frac{P}{P + P_h} \cdot Z$$

$$\dot{Z} = n \cdot r_p \cdot \frac{P}{P + P_h} \cdot Z - r_m \cdot Z$$

12.3 Parameter

Name	Bedeutung	Wert und Einheit
r_a	maximale Assimilationsrate	0.4 d^{-1}
r_p	maximale Prädationsrate	0.5 d^{-1}
r_m	Sterberate des Zooplanktons	0.05 d^{-1}
K	Kapazität des Phytoplanktons	400 mg C m^{-3}
P_h	Halbsättigungskonstante der Prädation	200 mg C m^{-3}
n	Effizienz	0.3
N_k	Halbsättigungskonstante Phosphataufnahme	0.5 mmol m^{-3}
N_{zu}	Phosphatkonzentration des Zuflusses	1.5 mmol m^{-3}
r_{zu}	Zuflußrate	0.01 d^{-1}
L_{max}	Lichtintensität, bei der $e_L = 1$	250 W m^{-2}

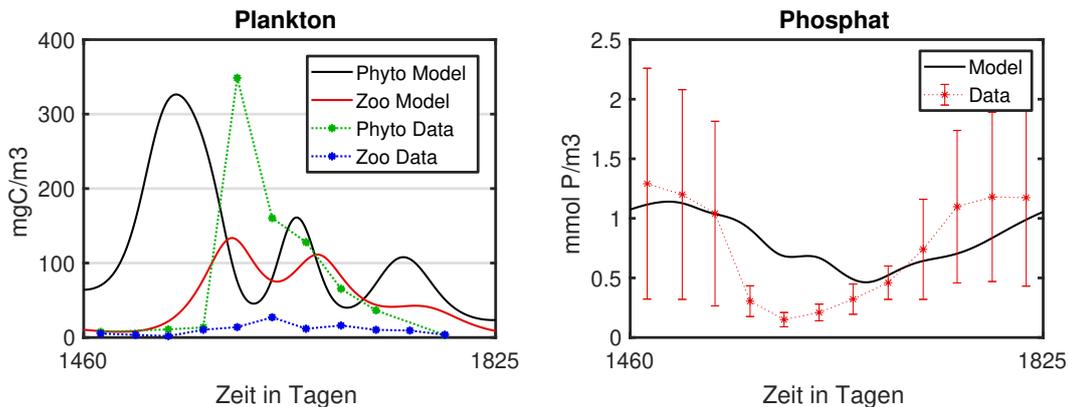


Abbildung 12.3: Simulationsergebnisse und Messdaten der südlichen Nordsee für Phosphat, Phytoplankton und Zooplankton.

12.4 Simulationsergebnisse

Die Simulationsergebnisse in Abbildung 12.3 geben die Größenordnungen der gemessenen Daten wieder. Die Ergebnisse lassen einen 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.

13 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.

13.1 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 (13.1).

$$\dot{B} = \text{Wachstum}(B, A) - \text{Mortalität}(B, A) \quad (13.1)$$

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 (13.2) mit dem Alter A steigen.

$$\text{Wachstum} = r(A) \cdot B \cdot \left(1 - \frac{B}{K}\right) \quad (13.2)$$

Hier ist K die Kapazität der Käfer, eine Wachstumsgrenze, die nie erreicht wird, da eine zusätzliche Mortalität (13.3) durch in (13.1) vorgesehen ist. Dieser Term beschreibt die Dezimierung der Borkenkäfer durch Vogelfrass.

$$\text{Mortalität} = s \cdot \frac{B^2}{B^2 + M^2} \quad (13.3)$$

Der Ansatz (13.3) ist eine sigmoide Kurve. Ohne die Quadrate wäre (13.3) 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, (13.4).

$$r(A) = r \cdot A \quad (13.4)$$

Die Doppelfunktion des Buchstaben r als Wachstumsfunktion $r(A)$ und als Raten-

konstante r wird keine Schwierigkeiten machen, da im folgenden nur noch letztere auftritt. Wird (13.2) bis (13.4) in die Systemgleichung (13.1) eingesetzt, ergibt sich Gleichung (13.5).

$$\dot{B} = r \cdot A \cdot B \cdot \left(1 - \frac{B}{K}\right) - s \cdot \frac{B^2}{B^2 + M^2} \tag{13.5}$$

Die Fixpunkte des Systems erhält man als Schnittpunkte des Wachstumsterms und des Mortalitätsterms (Abbildung 13.1). 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

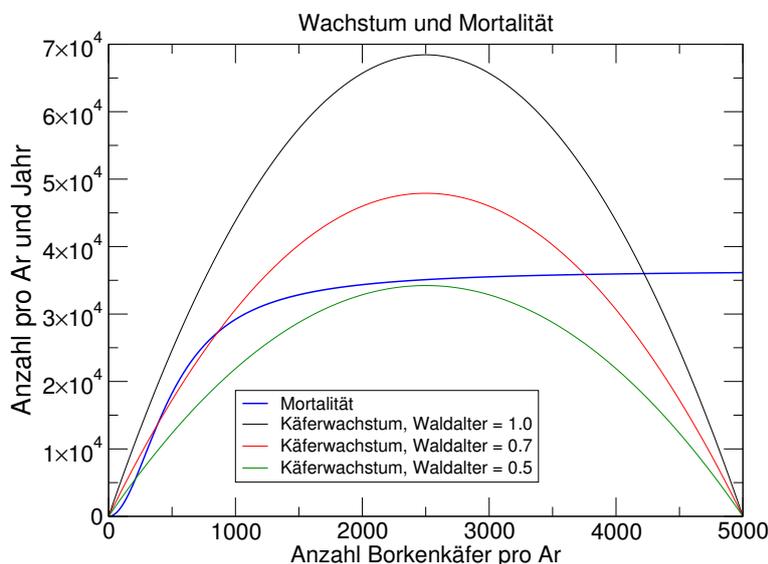


Abbildung 13.1: Vergleich von Wachstum und Mortalität für verschiedene Alter A des Waldes. Bei $A = 0.7$ haben die Graphen von Mortalität (blau) und Wachstum vier Schnittpunkte, in den anderen Fällen zwei, jeweils einschließlich des Nullpunktes. Die Schnittpunkte entsprechen den stationären Zuständen, sie sind abwechselnd stabil und instabil, wobei der Nullpunkt in jedem Falle instabiler stationärer Zustand ist.

schwer analytisch berechenbar ist (wer löst schon gern kubische Gleichungen), betrachtet man die Umkehrfunktion $A(B^*)$ und plotten die Kurve mit vertauschten Achsen:

$$A(B^*) = \frac{s \cdot B^*}{r \cdot \left(1 - \frac{B^*}{K}\right) \cdot (B^{*2} + M^2)} \quad B^* > 0 \tag{13.6}$$

In Abbildung 13.2 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.

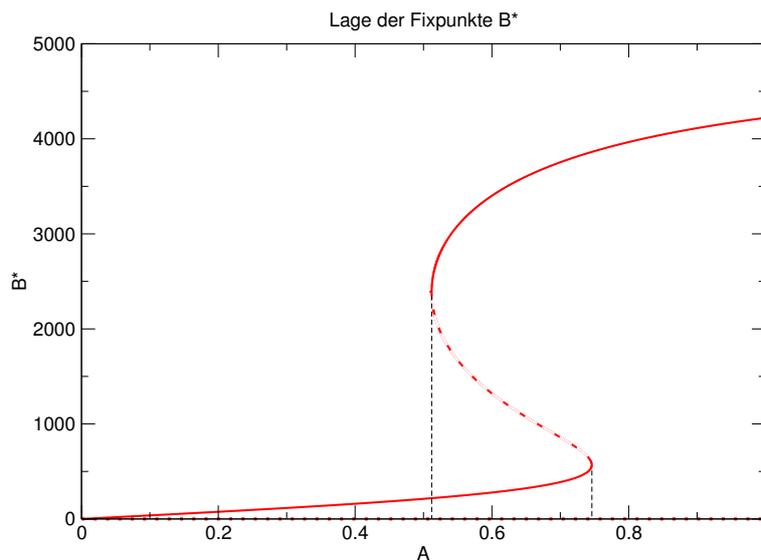


Abbildung 13.2: Stationäre Borkenkäferdichten B^* als Funktion des Alters A des Waldes. Im Bereich $0.55 < A < 0.75$ koexistieren vier stationäre Zustände (einschließlich des trivialen Falles $B^* = 0$). Die Zustände sind abwechselnd instabil (gepunktet) und stabil, beginnend mit $B^* = 0$ instabil.

13.2 Wald-Dynamik

Im diesem Abschnitt wird das Alter A des Waldes dynamisch modelliert. Die Hysterese nach Abbildung 13.2 legt nahe, dass man mit Borkenkäferausbrüchen rech-

nen kann, wenn die Parameter entsprechend gewählt werden. Neben Gleichung (13.1) bzw. (13.5) 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 integrierte 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 (13.7) beschrieben:

$$\dot{B} = \text{Wachstum}(B, A) - \text{Mortalität}(B) \quad (13.7)$$

$$\dot{A} = \text{Altern}(A) - \text{Verjüngung}(B, A)$$

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:

$$\text{Altern}(A) = a \cdot (1 - A) \quad (13.8)$$

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:

$$\text{Verjüngung}(B, A) = b \cdot A \cdot \left(\frac{B}{K}\right)^3 \quad (13.9)$$

Durch den Exponent 3 in (13.9) findet bei geringen Borkenkäferdichten B kaum eine Verjüngung statt.

Die Modellgleichungen sind in (13.10) zusammengefasst.

$$\begin{aligned}\dot{B} &= r \cdot A \cdot B \cdot \left(1 - \frac{B}{K}\right) - s \cdot \frac{B^2}{B^2 + M^2} \\ \dot{A} &= a \cdot (1 - A) - b \cdot A \cdot \left(\frac{B}{K}\right)^3\end{aligned}\quad (13.10)$$

Mit diesen Gleichungen ist es möglich, periodische Ausbrüche von Borkenkäferplagen zu simulieren (Abbildung 13.3).

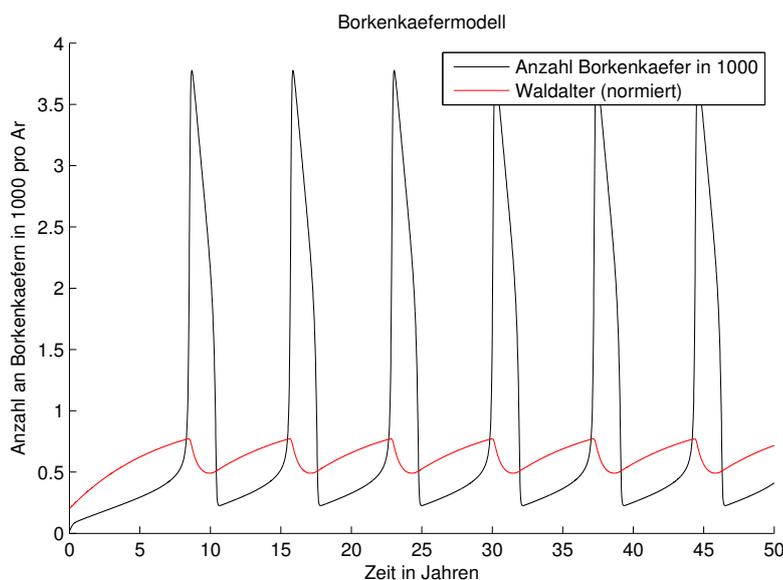


Abbildung 13.3: Simulation von Borkenkäferausbrüchen. Parameter: $r = 0.15 \cdot 365.0$ (1/y), $K = 5000$ (Anzahl/Ar), $s = 100 \cdot 365.0$ (Anzahl/(Ar \cdot y)) $M = 500$ (Anzahl/Ar), $a = 0.15$ (1/y), $b = 1.7$ (1/y).

Ganz befriedigend ist das in Abbildung 13.3 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.

13.3 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.

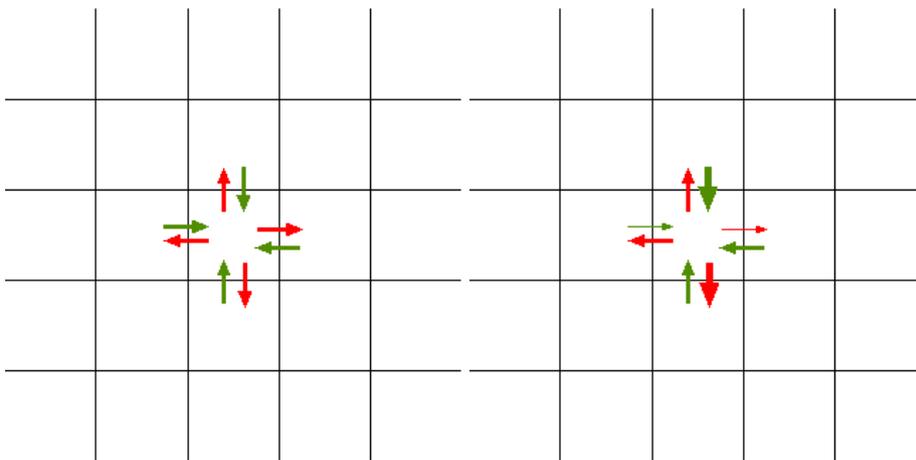


Abbildung 13.4: Räumliche Struktur des Modells mit symmetrischer (rechts) und unsymmetrischer Käferbewegung

13.3.1 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

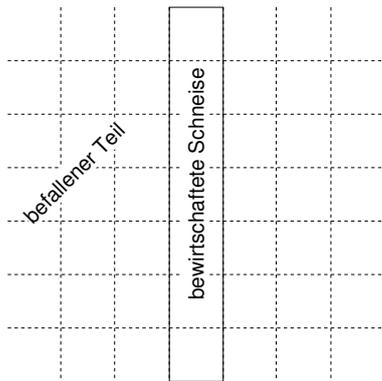


Abbildung 13.5: Bewirtschaftete Schneise zur Bekämpfung der Käferplage

nicht erfasst wurden.

14 Der Wasserstand eines Sees

Angenommen, ihr sitzt nach eurem Bachelorabschluss in einem Umweltplanungsbüro und erhaltet an eurem 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. Dieser See ist für die Trinkwasserversorgung von großer Bedeutung und er möchte wissen, ob ihr helfen könnt. Nun erwartet er vermutlich kein Modell, sondern Vorhersagen und bestenfalls Handlungsanweisungen. Da ihr nicht wisst, was seitens eures Büros so üblich ist und ihr dem Bürgermeister einen Rückruf eures Chefs angekündigt habt, macht ihr euch also den Rest des Tages Gedanken, wie ihr helfen könnt. Viel habt ihr bisher noch nicht erfahren, aber ihr findet per Suchmaschine 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 ihr braucht ist der Wasserstand des Sees im Jahresverlauf. Hier reicht es aber nicht, dass ihr dazu Messdaten vom örtlichen Wasserwerk bekommt. Ihr müsst die Ursache für die Wasserstandsschwankungen richtig beschreiben.

Die Wasserstandsänderungen sollen dabei von Tag zu Tag 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.

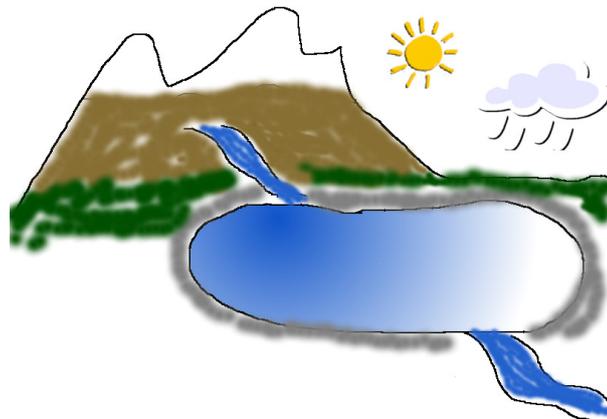


Abbildung 14.1: Der Modellsee



Abbildung 14.2: Schematische Darstellung des Modellsees. Die Pfeile stellen hier materielle Flüsse dar (Wassermengen pro Zeit).

14.1 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 konzeptuelles 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.

14.2 Festlegung der Zustandsvariablen

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 „Wasserstand“ W bezeichnen wir die aktuelle Tiefe des Sees. Es könnte aber auch ein Pegelstand sein, der sich durch eine Nullpunktverschiebung von der aktuellen Tiefe des Sees unterscheidet.

Zustandsvariable¹: **Wasserstand** W

Unser Ziel ist es nun, den jahreszeitlichen Verlauf des Wasserstands zu ermitteln
- wir suchen $W(t)$.

14.3 Beschreibung der 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

¹Der 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.

Pegelnull.

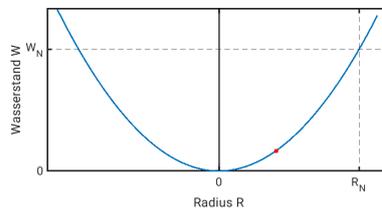


Abbildung 14.3: Schematische Darstellung des Modellsees mit parabelförmigen Querschnitt. W_N gibt den Normwasserstand an. Bei diesem Wasserstand hat der See den Radius R_N also die Fläche $F_N = \pi R_N^2$. Der rote Punkt markiert die Höhe des Abflusses.

Mit dem Wasserstand verknüpft 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:

$$F(R) = \pi R^2 \quad (14.1)$$

Wir nehmen an, dass ein Referenz-Wasserstand W_N und F_N die zugehörige Fläche (z.B. aus Satellitendaten) bekannt sind

$$W(F_N) = W_N \text{ und } F_N = \pi R_N^2 \quad (14.2)$$

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 14.2:

$$W(R_N) = a \cdot R_N^2 = W_N \quad \Rightarrow \quad a = \frac{W_N}{R_N^2} = \pi \frac{W_N}{F_N},$$

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 :

$$F(W) = F_N \cdot \frac{W}{W_N} \quad (14.3)$$

Die Fläche F ist also proportional zur Tiefe W .

14.4 Festlegung der Prozesse

Die Prozesse sind die Vorgänge, die die Zustandsvariablen ändern. Der Wasserstand W wird durch die Prozesse Zufluss, Abfluss und Verdunstung geändert:

Prozesse:	Zufluss	<i>zu</i>
	Abfluss	<i>ab</i>
	Verdunstung	<i>vd</i>

Alle drei Größen haben die Dimension Volumen pro Zeiteinheit, also z.B. die Einheit m^3d^{-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 Differenzgleichungen. Die Prozesse ändern den Wasserstand, indem sie das Volumen ändern:

Volumenänderung = Zufluss - Abfluss - Verdunstung

In unserem Modell soll die Zeit in Tagesschritten Δt fortschreiten (Differenzgleichungsmodell):

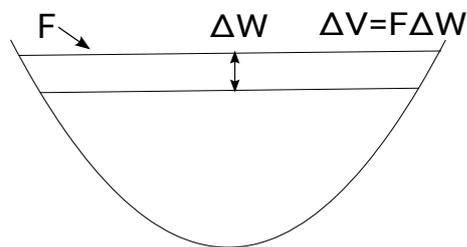
$$\Delta V = (z_u - a_b - v_d) \cdot \Delta t \quad (14.4)$$

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 der Approximationscharakter der Differenzgleichung, denn offensichtlich ist diese Linearität nur für kleine Zeitschritte Δt akzeptabel, nämlich solange sich z_u , a_b und v_d in Δt nur unwesentlich ändern. In Abbildung 14.2 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 z_u , a_b und v_d . Dann müsste sich nämlich aus den augenblicklichen Werten von z_u , a_b und v_d 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!

Abbildung 14.4: Im Zeitintervall Δt , z.B. in einem Tag, ändert sich das Volumen um $\Delta V = (z_u - a_b - v_d) \cdot \Delta t$. Bei gegebener Oberfläche F des Sees sind Volumenänderung und Wasserstandsänderung durch $\Delta V = F \cdot \Delta W$ verknüpft. Damit ergibt sich Gleichung 14.5.



Der Zusammenhang zwischen V und W über die Oberfläche F ist annähernd (diskret) durch

$$\Delta V = F \cdot \Delta W$$

gegeben.

Damit lässt sich Gleichung 14.4 entsprechend umschreiben:

$$\Delta W = \frac{1}{F(W)} (z_u - a_b - v_d) \cdot \Delta t \quad (14.5)$$

Dies ist die gesuchte Modellgleichung. Die Prozesse z_u , a_b und v_d müssen jetzt noch präzisiert werden.

Bemerkung: Der integrale Zusammenhang zwischen V und W über die Oberfläche F ist durch

$$V(W) = \int_0^W F(w) dw \text{ gegeben. Er hat die differentielle Form } \dot{V} = \frac{dV}{dW} \cdot \frac{dW}{dt} = F \cdot \dot{W}.$$

14.5 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.

14.5.1 Niederschlag resp. Zufluss

Der Niederschlag bestimmt letztlich den Zufluss. Will man aus Niederschlagswerten, die meistens in 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.

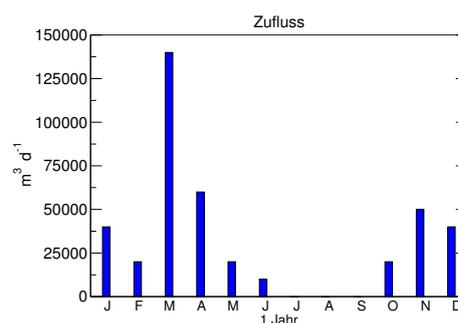


Abbildung 14.5: Monatsmittelwerte des Zuflusses.

Die Dimension der Zuflußdaten v_{zu} ist Volumen pro Zeit. In Abb. abb:see:2 sind die Daten in der Einheit $\text{m}^3 \text{d}^{-1}$ angegeben.

14.5.2 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.

$$T(t) = T_m - T_a \cdot \cos\left(2\pi \frac{t - t_k}{360 \text{ d}}\right) \tag{14.6}$$

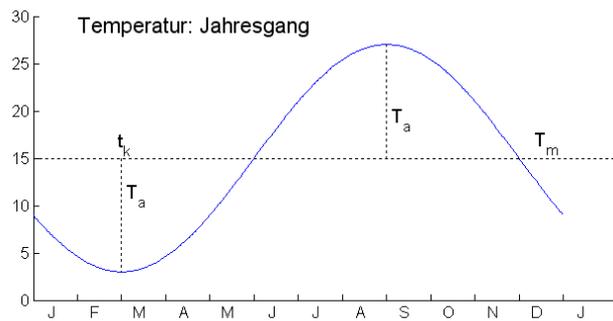


Abbildung 14.6: Temperaturverlauf im Jahresgang in °C . Kältester Tag: 1. März.

14.6 Prozessbeschreibungen

14.6.1 Zufluss

Der Zufluss ist direkt durch die Daten gegeben (Abbildung 14.5). 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 lösen²:

$$m = \left[\frac{1}{30} ((t-1) \bmod 360) + 1 \right]$$

Der Zufluss beträgt somit einfach

$$z_u = v_{zu}(m) \tag{14.7}$$

wobei v_{zu} der mittlere monatliche Zufluss ist. Der Zufluss hängt nicht von der Zustandsvariablen W ab.

14.6.2 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:

$$ab(W) = F_{ab} \cdot \sqrt{\max(0, 2g \cdot (W - W_A))} \cdot sec_{day} \tag{14.8}$$

wobei g die Gravitationskonstante (9.81 m s^{-2}), 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 $\text{m}^3 \text{d}^{-1}$ 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.

²Hier ist $((t-1) \bmod 360)$ 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.

14.6.3 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 angegeben, 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 $vd_{\text{mm}20} \cdot F$ das Volumen, das bei 20°C pro Tag verdunstet. Diese Größe hat bisher allerdings die Einheit $\text{mm m}^2 \text{d}^{-1}$ 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

$$vd(t, W) = vd_{20} \cdot F(W) \cdot e_T \cdot 10^{-3} \quad (14.9)$$

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 z.B. 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:

$$e_T = 2^{\frac{T-20^\circ\text{C}}{T_{vd}}} \quad (14.10)$$

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.

14.7 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 14.1 sind alle Größen, die den See beschreiben, Parameter und Antriebe mit Werten, Einheiten und Bedeutung zusammengefasst.

Symbole	Einheiten	Werte	Erklärung
Konstanten			
g	mm · 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 · 10 ⁶	Seeoberfläche bei Normpegel
W _A	m	2	Lage des Abfluss
Dynamische Parameter			
F _{ab}	m ²	0.04	„Abflussquerschnitt“
vd ₂₀	mm · d ⁻¹	4.0	Verdunstung bei 20°C
T _{vd}	°C	5.0	Verdopplung der Verdunstung
Antriebskräfte			
v _{zu}	10 ³ m ³ · 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 14.1: Zusammenfassung der Seegrößen, Parameter und Antriebe mit Einheiten, Werten und Bedeutung

14.8 Prüfung des Modells auf Konsistenz

Der See hat bei dem Wasserstand $W_N = 6 \text{ m}$ eine Oberfläche von $F_N = 2 \text{ km}^2$.
Bei kreisrunder Seefläche und parabelförmigen Tiefenprofil ergibt das ein

$$\text{Normseevolumen} = 6 \cdot 10^6 \text{ m}^3$$

Der Zufluss ist durch Daten vorgegeben. Er beträgt im Jahr

$$\text{Jährlicher Zufluss} = 30 \cdot \sum_{m=1}^{12} v_{zu}(m) = 12 \cdot 10^6 \text{ m}^3$$

Dies bedeutet, dass der Zufluss das Zweifache des Normseevolumens beträgt.

Bei Normpegel beträgt der Abfluss nach Gl. 14.8

$$ab(W_N) = F_{ab} \cdot \sqrt{2g \cdot (W_N - W_A)} \cdot \text{sec}_{\text{day}} \approx 3 \cdot 10^4 \text{ m}^3 \text{ d}^{-1}$$

Dies ergibt ein jährliches Abflussvolumen von

$$\text{Jährlicher Abfluss} = 11 \cdot 10^6 \text{ m}^3,$$

was in etwa dem Zufluss entspricht.

Die Verdunstung konzentriert sich auf die vier Sommermonate, in denen die Temperaturen um 25°C erreicht werden, also mit in etwa $vd_{20} \cdot 2 \approx 2 \text{ mm d}^{-1}$ erfolgt. In vier Monaten (120 d) ergibt dies bei Normflaeche eine

$$\text{jährliche Verdunstung} = 0.5 \cdot 10^6 \text{ m}^3.$$

Die Verdunstung ist also deutlich 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.

14.9 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):

```

W(1) =5.0 Wasserstand zur Zeit 0
2 dt =1.0 Modellzeitschritt

4 Schleife ueber die Zeitschritte i
    t = i*dt
6     F =
    T =...
8     m =
    ...
10    zu = ...
    ab =...
12    vd =...
    Delta_W = (zu-ab-vd)/F
14    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 z_u , a_b und v_d 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 $W_H(t_0) = W_0$ 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.

voll und wird durch Erfahrung erleichtert.

In Abbildung 14.7 sind die Simulationsergebnisse für verschiedene Startwerte (t_0, H_0) (Zeit und Wasserstand) dargestellt.

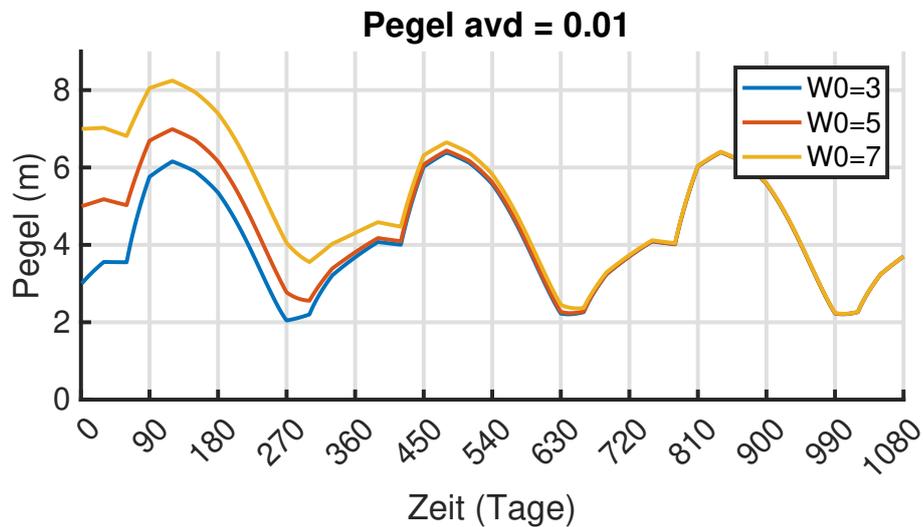


Abbildung 14.7: Wasserstand des Sees im Jahresgang. Unterschiedliche Anfangspegel „vergisst“ das System nach wenigen Monaten. Es stellt sich bei periodischen Antrieben (klimatologisches Jahr) nach einiger Zeit eine periodische Lösung ein.

Man gewinnt aus Abbildung 14.7 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 $W_0 = W(1080 \text{ d}) \approx 2.9 \text{ m}$ gehört, und zu der alle anderen Lösungen hinstreben.

In Abbildung 14.8 sind die Simulationsergebnisse für das dritte Simulationsjahr und die zugehörigen Flüsse dargestellt. Man erkennt sofort den Einfluss des Zuflusses auf den Wasserstand. Im August und September sind Zufluss und Abfluss zeitweilig 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.

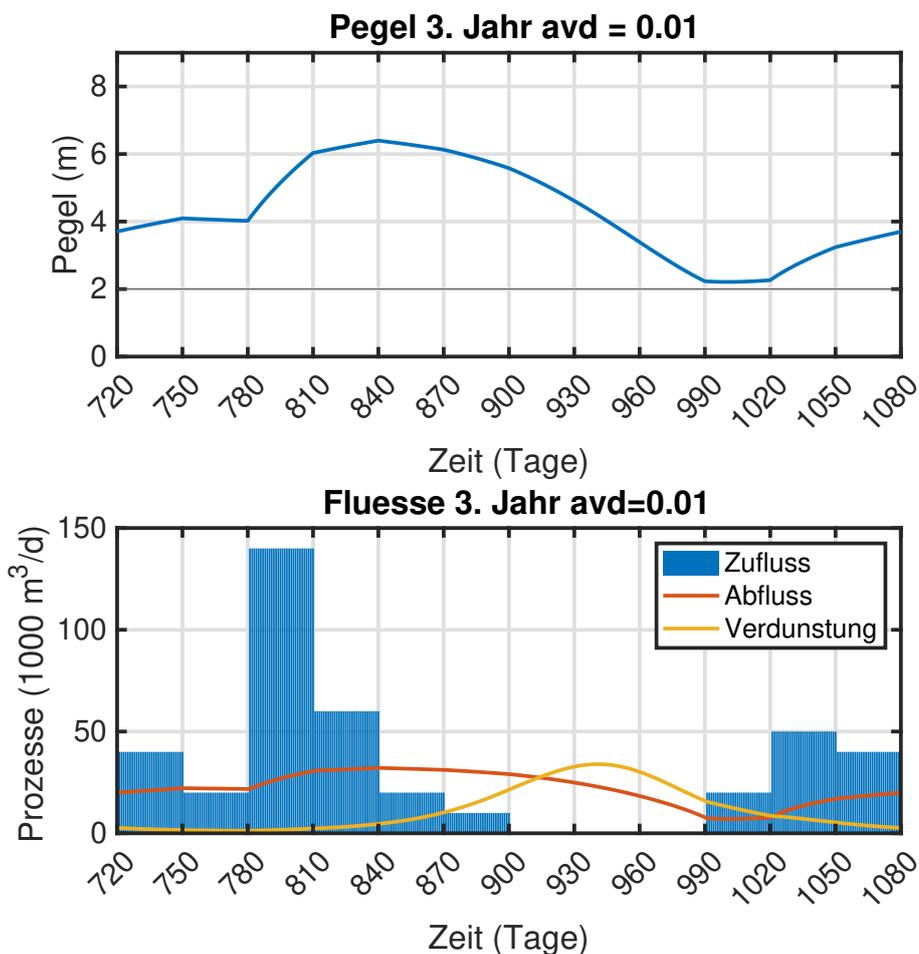


Abbildung 14.8: Oben: Wasserstand des Sees des 3. Jahres. Die schwarze Linie markiert die Höhe der Abflussschwelle. Unten: Zufluss, Abfluss und Verdunstung des 3. Jahres.

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.

14.10 Modellverbesserung

Spätestens an dieser Stelle erweist sich der Modellierungsprozess als Iterations-schleife. Man muss wieder und wieder die Modellgleichungen in Frage stellen

(nicht nur den Code oder die Parameterwerte) und die Implementierung überprüfen. Eventuell müssen sogar die Ziele des Modells und dessen Gültigkeitsbereich hinterfragt werden. Der Vergleich zwischen Simulation und Messdaten wird zur Verbesserung des Modells herangezogen.

14.11 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.

14.12 Erweiterung: Einleitung eines Schadstoffs in den See

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 davon abgeleitet werden. Gleichung 14.5

$$\Delta W = \frac{1}{F(W)}(z_u - a_b - v_d) \cdot \Delta t$$

geht unter Berücksichtigung der Beziehung $\Delta V = F \cdot \Delta W$ über in

$$\Delta V = (z_u - a_b - v_d) \cdot \Delta t$$

Weiterhin werden wir das Modell als DGL-Modell betrachten, um im folgenden Instabilitäten durch zu schnelle Änderungen zu vermeiden:

$$\dot{V} = z_u - a_b - v_d \tag{14.11}$$

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:

$$a_{us} = a_b \cdot C$$

Wir nehmen weiter an, dass der Zufluss in den See schadstofffrei ist und auch keine Schadstoffverdunstung oder Ausfällung stattfindet.

Die Modellgleichungen erhalten somit die Form 14.12.

$$\begin{aligned}\dot{V} &= zu - ab - vd & (14.12) \\ \dot{M} &= ein - aus\end{aligned}$$

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 14.12 äquivalente System 14.13.

$$\begin{aligned}\dot{V} &= zu - ab - vd & (14.13) \\ \dot{C} &= \frac{1}{V} (ein - C \cdot zu + C \cdot vd)\end{aligned}$$

Die Gleichungen zeigen, dass die Menge des Schadstoffs durch den Abfluss abnimmt, dass der Abfluss aber 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 10g des Schadstoffs eingeleitet werden, ergibt sich der in Abbildung 14.9 dargestellte Verlauf.

14.12.1 Vermeidung hoher Schadstoffkonzentrationen

Die Einleitung $ein(t)$ 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 November bis April zu beschränken und dafür zu verdoppeln oder auf einen kurzen Zeitraum vor dem Hochwasser zu konzentrieren. In der Simulation werden

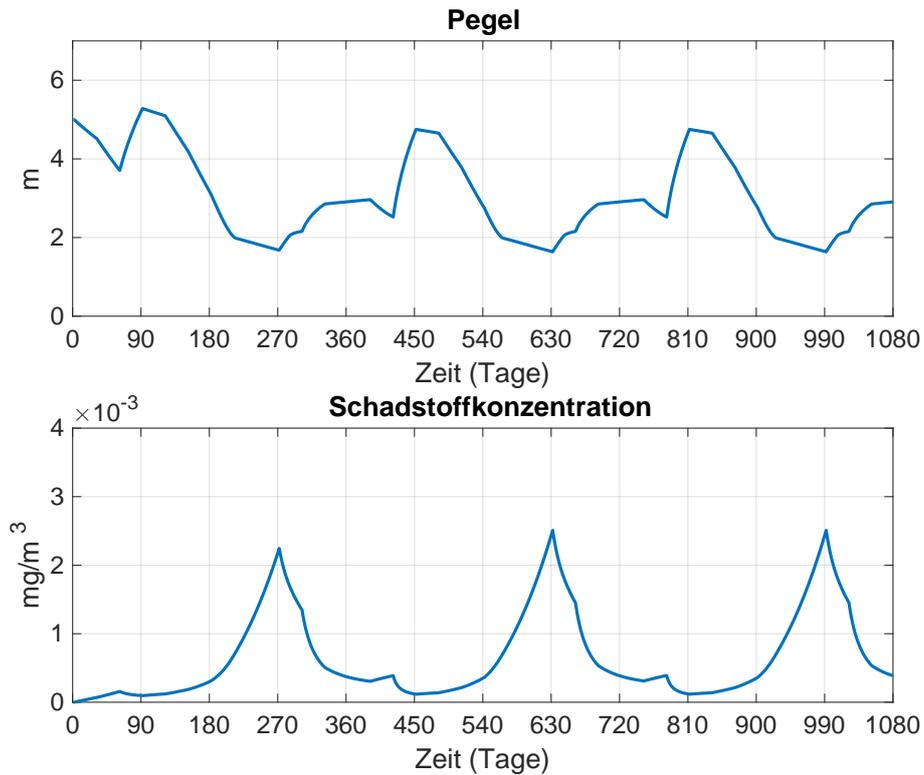


Abbildung 14.9: Schadstoffeinführung in einen See. Simulation über 3 Jahre. Oben Pegelstand, unten Schadstoffkonzentration bei einer Einleitung von 10 g pro Tag.

drei Szenarien verglichen.

1. konstante Einleitung von 10g pro Tag
2. Einleitung von 40 g pro Tag von Juni bis August
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 14.10 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. Der Ausstrom hängt vom Was-

serabfluss ab. Es dauert etwa fünf Jahre bis sich die periodische Lösung einstellt.

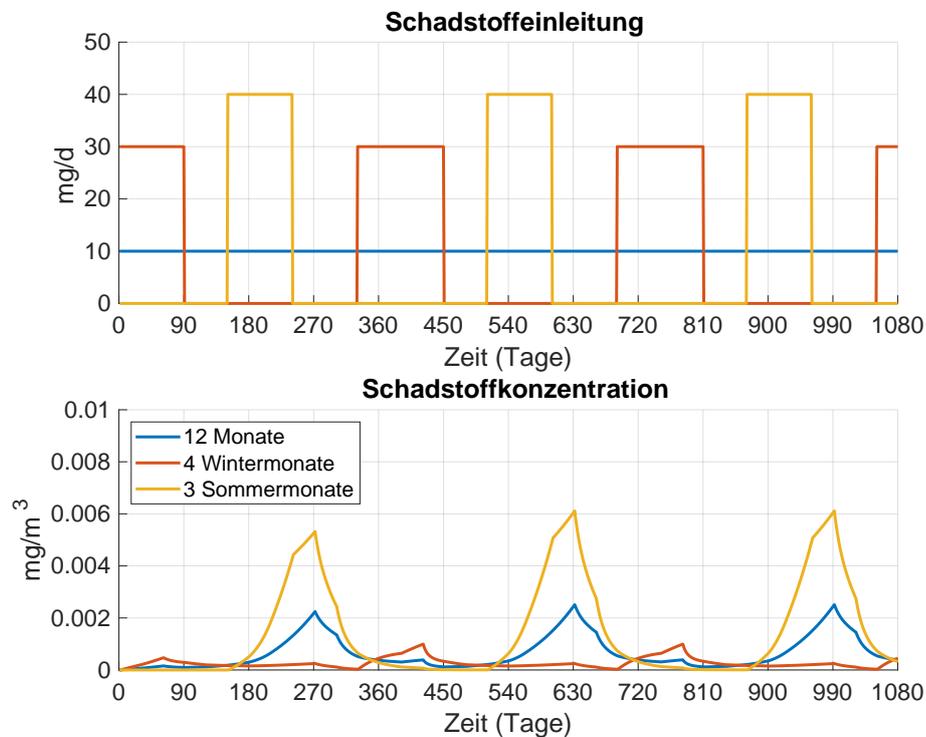


Abbildung 14.10: Schadstoffeinleitung in einen See. Die gleiche Menge eines Schadstoffs wird auf 12 Monate verteilt (schwarz), oder auf 3 Sommermonate (grün) bzw. 4 Wintermonate (rot) konzentriert. Die mittlere Einleitung beträgt jeweils 10 g pro Tag.

14.12.2 Bakterieller Abbau

Findet im See ein bakterieller Abbau des Schadstoffs statt, so verringert dieser die Schadstoffmenge:

$$\dot{V} = zu - ab - vd \quad (14.14)$$

$$\dot{M} = \text{ein} - \text{aus} - \text{abbau}$$

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 14.10 so kann man denn Abbau durch

$$\text{abbau} = r \cdot e_T \cdot M$$

beschreiben. Die Ergebnisse der Simulation sind in Abbildung 14.11 dargestellt.

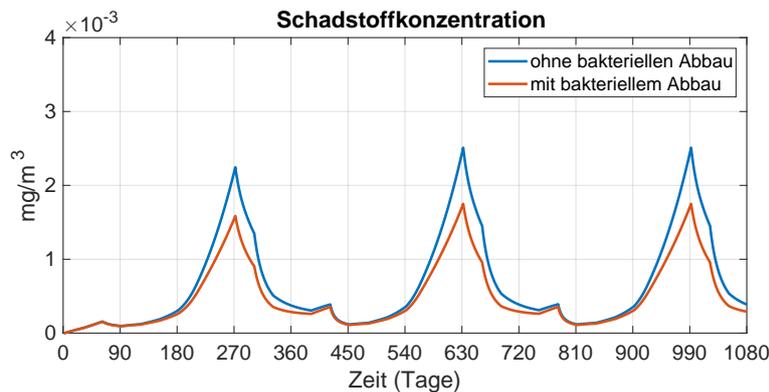


Abbildung 14.11: Schadstoffeinführung von 10g pro Tag in einen See. Dargestellt ist die Entwicklung der Konzentration im See ohne (schwarz) und mit (rot) bakteriellem Abbau von 5‰ der aktuellen Schadstoffmenge im See pro Tag.

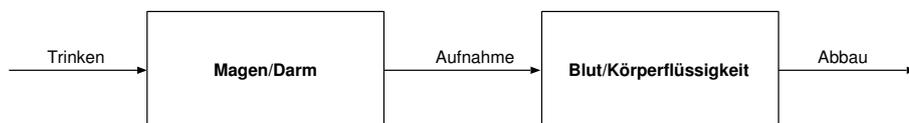
Man sieht deutlich die Wirkung des bakteriellen Abbaus.

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 Schadstoffmenge angenommen wird. Auch steigt der bakterielle Abbau bei zunehmender Temperatur stärker an, so dass der Temperaturfaktor besser nach der van't Hoff'schen Regel [Sommer2005] bestimmt wird. Noch besser wäre, die Bakterien als weitere dynamische Größe (Zustandsvariable) zu betrachten und ihr Wachstum von der Nährstoffkonzentration abhängig machen.

15 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:

$$\dot{M} = \text{Trinken} - \text{Aufnahme}$$

$$\dot{B} = \text{Aufnahme} - \text{Abbau}$$

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 angegeben!!). Die Versuchsperson nimmt also 100 g Alkohol in 2 Stunden ($T = 2\text{h}$) auf und trinkt danach nichts mehr. Der Prozess Trinken ist also zeitabhängig, aber in diesem Rahmen nicht zustandsabhängig:

$$\text{Trinken}(t) = \lambda \cdot \delta(t) \quad \text{mit} \quad \delta(t) := \begin{cases} 1 & 0 \leq t \leq T \\ 0 & t > T \end{cases}$$

Die Funktion $\delta(t)$ ist dimensionslos¹.

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

¹In 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.

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 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 $\text{g/kg}=1/1000$, was Promille entspricht.

Es müssen noch die Parameter μ (maximale Abbaurate in g/h) und K (Michaelis-konstante 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 $\mu = 10\text{g/h}$ und $K = 0.1‰$ gilt.

Man erhält also folgendes System:

$$\begin{aligned} \dot{M} &= \lambda \cdot \delta(t) - r \cdot M \\ \dot{B} &= r \cdot M - \mu \frac{\frac{B}{qG}}{\frac{B}{qG} + K} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} T = 2\text{h} & & T_H = 0.5\text{h} & & \mu = 10\text{g/h} \\ K = 0.1‰ & & r = \ln 2/t_h & & G = 70\text{kg} \quad q \approx 0.6 \text{ (w) resp. } 0.7 \text{ (m)} \end{aligned}$$

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 handelt es sich bei der ersten nicht um eine DGL,

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.

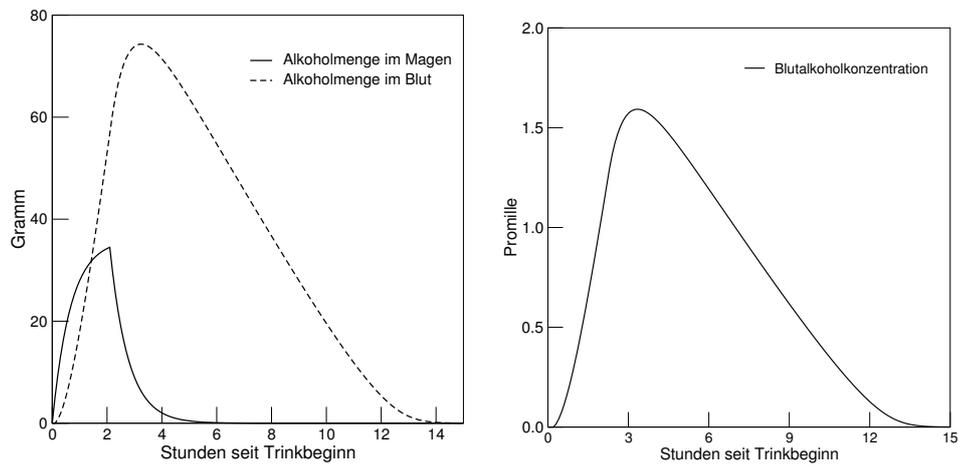


Abbildung 15.1: Zeitliche Entwicklung der Alkoholmengen in Magen-Darm-Trakt und in der Körperflüssigkeit (links) und der Entwicklung des Promillegehalts im Blut (rechts) nach einer Zufuhr von 100 g Alkohol über einen Zeitraum von zwei Stunden.

16 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 1 pro 100.000 Erkrankungen zum Auftreten der sog. subakuten sklerosierenden Panenzephalitis (SSPE), die immer zum Tod führt. 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 auswanderenden 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.

$$\dot{S} = \mu \cdot N - B \cdot S - \mu \cdot S$$

$$\dot{I} = B \cdot S - \gamma \cdot I - \mu \cdot I$$

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

Zustandsvariablen:

S: Dichte der Suszeptiblen in Einwohner/km²

I: Dichte der Infizierten in Einwohner/km²

R: Dichte der Immunen in Einwohner/km²

Parameter:

N: Bevölkerungsdichte in Einwohner/km²

μ : Zuwanderungsrate in 1/Tag

B: Infektionsrate in 1/Tag

γ : Gesundungsrate 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. 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 16.1 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

Das Model beschreibt ausschließlich die Abhängigkeit der Infiziertenzahlen von der Kontaktzahl. In einem realistischeren Modell muss zusätzlich der Impfstatus der Bevölkerung berücksichtigt werden.

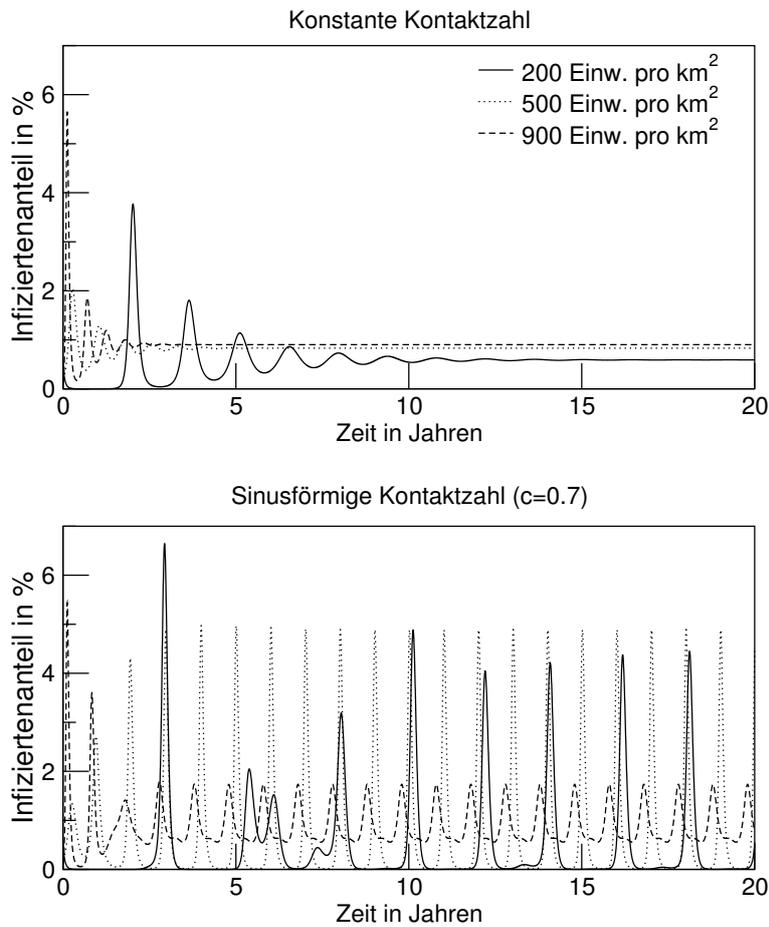


Abbildung 16.1: Simulationsergebnisse für die Masernepidemie mit konstanter Kontaktzahl (oben) und sinusförmiger Kontaktzahl mit einem Minimum im Sommer ($c=0.7$, unten).

17 Covid-19 Ausbreitung in Deutschland

Stand 14.10.2020

In diesem Kapitel wird ein erweitertes SIR-Modell (vgl. Kapitel 10), das eine Modifikation und Erweiterung des SIR-Modells von [Kermack & McKendrick 1927] 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 genesen 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 17.1 dargestellt. Interessanterweise werden in Epidemiemodellen häufig 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 Infizierten 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.

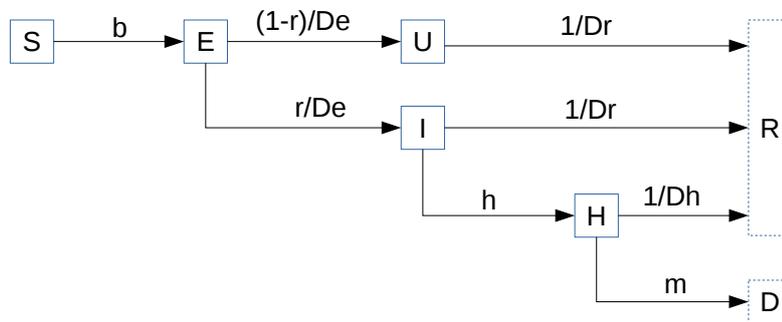


Abbildung 17.1: Diagramm. Anfällige (S) werden mit der Übertragungsrate b (1/Tag) latent infiziert (E). Nach der Latenzzeit von im Mittel D_e Tagen, werden Personen infektiös. Der Teil r wird gemeldet (I), der Rest bleibt unerkannt (U) und erholt sich nach im Mittel D_r Tagen. Die Hospitalisierungsrate 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.

$\dot{S} = -b \cdot S \cdot U/N$	susceptible	(17.1)
$\dot{E} = b \cdot S \cdot U/N - E/D_e$	exposed	
$\dot{I} = r \cdot E/D_e - I/D_r - h \cdot I$	reported infectious	
$\dot{U} = (1 - r) \cdot E/D_e - U/D_r$	unreported infectious	
$\dot{H} = h \cdot I - H/D_h - m \cdot H$	hospitalized	

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.

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 17.1: Parameter und Anfangswerte des Covid-19-Modells

Zusätzlich wird berücksichtigt, dass vom 22. März 2020 bis 11. Mai 2020 strenge Maßnahmen wie z.B eine Kontaktsperrre 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 [Heiden 2020] geschätzt und teilweise automatisch angepasst (hier nicht weiter erläutert). Alle Parameterwerte sind in Tabelle 17 angegeben.

Die Simulationsergebnisse sind zusammen mit den Daten der Johns Hopkins Universität ([CSSE 2020]) in Abbildung 17.2 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 Verringerung 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 17.2, 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 17.3. 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.

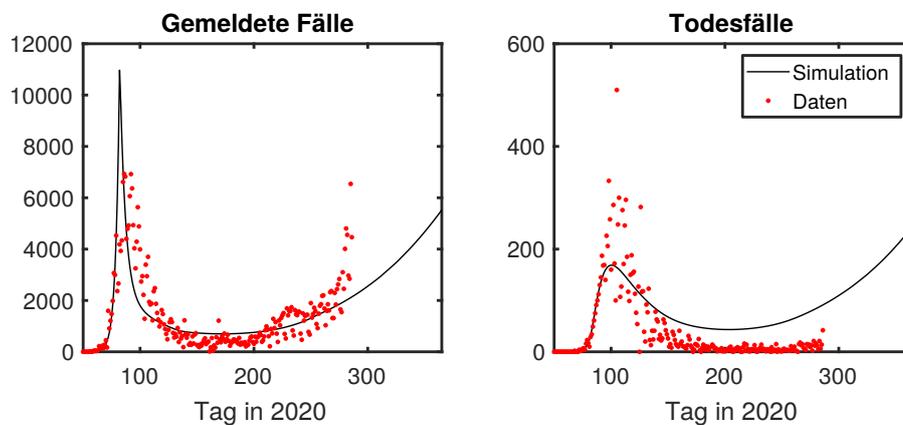


Abbildung 17.2: Simulationsergebnisse (schwarz) verglichen mit Daten (rot) von [CSSE 2020] bis zum 14. Oktober 2020. Gemeldete Covid-19 Fälle (links) und Todesfälle (rechts) für Deutschland.

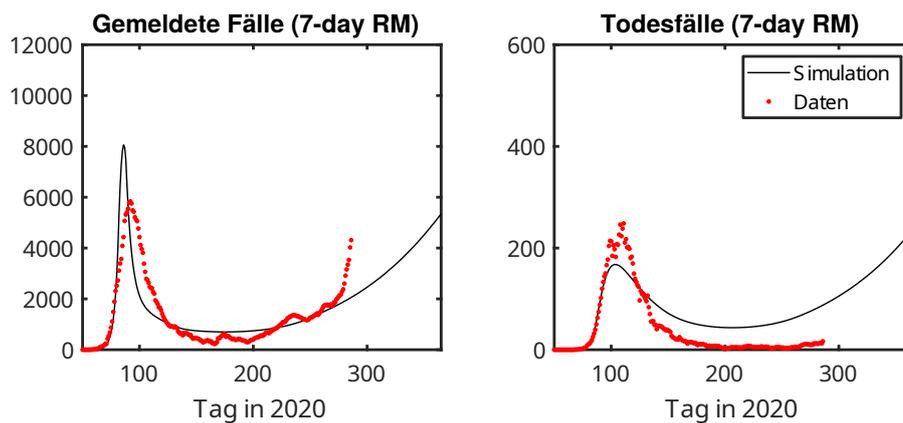


Abbildung 17.3: Darstellung als 7-Tage laufende Mittelwerte. Simulationsergebnisse (schwarz) verglichen mit Daten (rot) von [CSSE 2020] bis zum 14. Oktober 2020. Gemeldete Covid-19 Fälle (links) und Todesfälle (rechts) für Deutschland.

18 HIV-Modell

Bei der Krankheit AIDS (acquired 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 Epidemiomodells 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

$$\dot{S} = -B \cdot S$$

$$\dot{I} = B \cdot S - \gamma \cdot I$$

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

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

$$B = p \cdot k \cdot \frac{I}{I + S} \tag{18.1}$$

Die Lösungskurven für dieses modifizierte Modell sind in Abbildung 18.1 gegeben. Man sieht, dass letztlich die Bevölkerung ausstirbt, was nach heutigem Kenntnisstand unrealistisch ist. Die Ursache hierfür liegt darin, dass seitens der Bevölke-

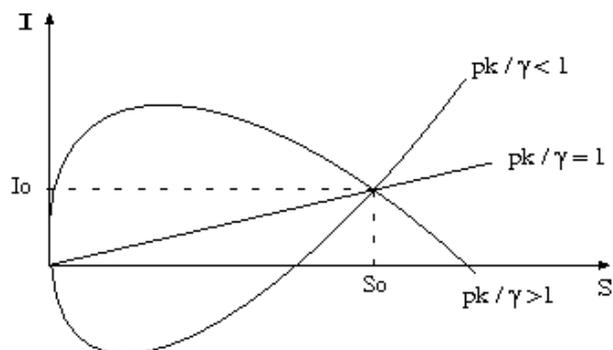


Abbildung 18.1: Die Modifikation des klassischen Modells nach Gleichung 18.1 führt zum Aussterben der Population.

rung keine Reaktion auf die bisherigen Fallzahlen stattfindet und dass keine Sätti-

gungseffekte 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“. Diese Wanderung ist so angelegt, dass ohne HIV-infizierte die Gruppengrößen konstant bleiben (Fließgleichgewicht). Als Anfangsverteilung wird eine Binomialverteilung 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:

$$B_i = p \cdot k_i \frac{\sum_{j=1}^n I_j}{\sum_{j=1}^n I_j + S_j} \quad (18.2)$$

Der Bruch gibt die Anzahl aller fatalen Kontakte bezogen auf die Anzahl sämtlicher Kontakte an. Die Zahl der Neuinfizierten $I_{\text{neu},i}$ in der i -ten Gruppe ergibt sich aus der Anzahl der Nichtinfizierten in der i -ten Gruppe und der Ansteckungsrate:

$$I_{\text{neu},i} = B_i \cdot S_i \quad (18.3)$$

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 18.2). Um diesem Verlauf seit Beginn der Epidemie gerecht zu werden, wird die Dauer der Infektion berücksichtigt. Ist v die Wahrscheinlichkeitsdichte für die Inkubationszeit, so erhält man die Zahl der Neuerkrankten der i -ten Gruppe $R_{\text{neu},i}$ durch (muss für das Modell noch diskretisiert werden):

$$R_{\text{neu},i}(t) = \int_0^t I_{\text{neu},i}(s) \cdot v(t-s) \, ds \quad (18.4)$$

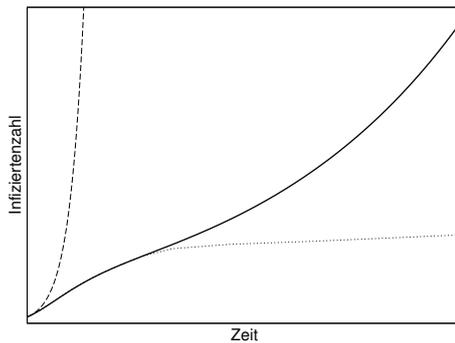


Abbildung 18.2: Qualitativer Verlauf der Infiziertenzahlen (schwarz). Aufgrund des transienten Effekts wird die Epidemie anfangs überschätzt (gestrichelt). Die tatsächliche Verringerung der Neuerkrankungen wird fälschlicherweise als Abklingen der Epidemie interpretiert (gepunktet).

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 18.3 zeigen, dass die Berücksichtigung der Reaktion auf die Fallzahlen zu wesentlich realistischeren Ergebnissen führt. An den 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.

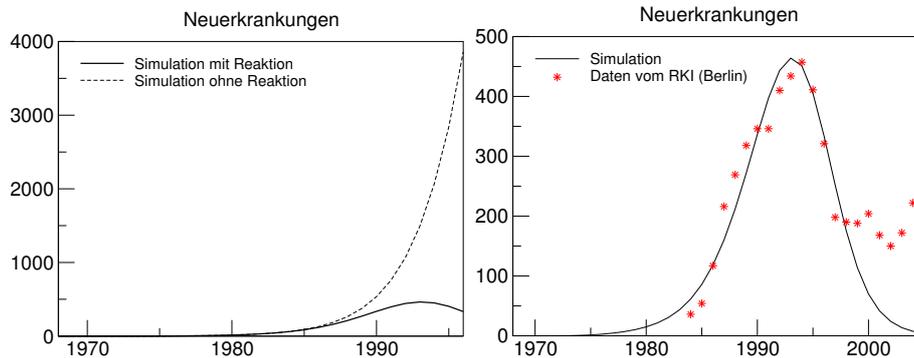
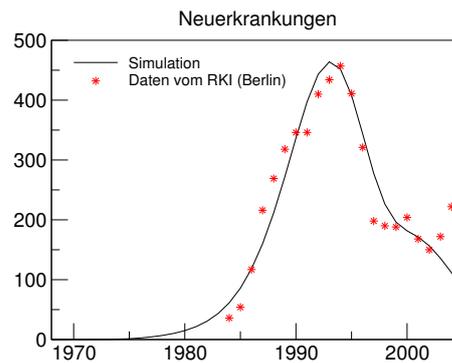


Abbildung 18.3: Modellergebnisse mit dem AIDS-Modell AiMo. Dargestellt sind jeweils die Zahl der Neuerkrankungen in den Jahren bis 1995 mit Berücksichtigung der Reaktion der Bevölkerung auf die Fallzahlen der vergangenen Jahre (rechts, solide) und ohne Reaktion der Bevölkerung (rechts, gestrichelt) für 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.

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 18.4). Man darf natürlich nicht den Fehler machen, aufgrund der

Abbildung 18.4: 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.

19 Kinetik chemischer Reaktionen

Reaktion 1. Ordnung

Die einfachste Form einer chemischen Reaktion ist durch den Zerfall eines Moleküls (z.B. radiokativer Zerfall) gegeben.



Hierbei gibt k die Reaktionsgeschwindigkeit an, die in der Realität u.a. von der Temperatur abhängt. Die stöchiometrische Gleichung 19.1 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

$$\frac{d}{dt}[X] = -k[X] \quad (19.2)$$

welche die Lösung

$$[X](t) = [X]_0 \cdot e^{-k \cdot t} \quad (19.3)$$

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:

$$\frac{d}{dt}[Y] = +k[X], \quad \frac{d}{dt}[Z] = +k[X] \quad \dots$$

Reaktion 2. Ordnung

Bei der Mehrheit chemischer Reaktionen reagieren zwei Moleküle X und Y miteinander:



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

$$\frac{d}{dt}[X] = -k[X][Y], \quad (19.5)$$

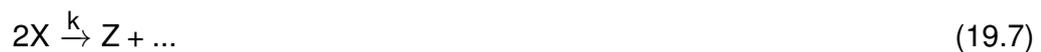
die die Änderung der Konzentration der Substanz X beschreibt. Hier muss man berücksichtigen, dass der Parameter k, die Reaktionskonstante, nun die Einheit $l/(\text{mol s})$ hat.

Für die weiteren Reaktionspartner ergibt sich:

$$\frac{d}{dt}[Y] = -k[X][Y], \quad \frac{d}{dt}[Z] = +k[X][Y] \quad \dots \quad (19.6)$$

Reaktion 2. Ordnung mit einem Ausgangsstoff

Die Reaktion



führt zu folgender DGL

$$\frac{d}{dt}[X] = -2k[X]^2, \quad (19.8)$$

Gleichgewichtsreaktionen

Reaktionen, die in beide Richtungen ablaufen können, heißen Gleichgewichtsreaktionen. Die Gleichgewichtsreaktion



mit den Reaktionskonstanten k_1 für die Hinreaktion und k_2 für die Rückreaktion wird durch das DGL-System

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}[X] &= -k_1[X] + k_2[Y][Z] \\ \frac{d}{dt}[Y] &= k_1[X] - k_2[Y][Z] \\ \frac{d}{dt}[Z] &= -k_1[X] - k_2[Y][Z] \end{aligned} \quad (19.10)$$

beschrieben.

Kombinierte Reaktionen mit zweiatomigen Molekülen

Folgende Reaktionen laufen gemeinsam ab:



mit den Reaktionskonstanten k_1 , k_2 , k_3 und k_4 . Das zugehörige DGL-System lautet:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}[X_2] &= -k_1[X_2][Y_2] + k_2[XY_2][X] + k_4[X]^2 & (19.12) \\ \frac{d}{dt}[Y_2] &= -k_1[X_2][Y_2] + k_2[XY_2][X] - k_3[X][Y_2] \\ \frac{d}{dt}[XY_2] &= k_1[X_2][Y_2] - k_2[XY_2][X] + k_3[X][Y_2] \\ \frac{d}{dt}[X] &= k_1[X_2][Y_2] - k_2[XY_2][X] - k_3[X][Y_2] - 2k_4[X]^2\end{aligned}$$

20 Das Karbonatsystem des Ozeans

Die hier dargestellte Betrachtungsweise ist stark vereinfacht und dient als Einstieg in das Thema.

Die Bedeutung des Karbonatsystems des Ozeans wird deutlich, wenn man sich vergegenwärtigt, dass mehr als 98% des Kohlenstoffs des Atmosphäre-Ozeansystems im Ozean in Form von gelösten anorganischen Kohlenstoff vorliegen [Zeebe 2001]. 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 präindustrielle atmosphärische Partialdruck betrug 280 ppm, u.a. durch die Verbrennung fossiler Brennstoffe beträgt der heutige Wert 410 ppm [IPCC2021]. 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 [IPCC2021]. 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

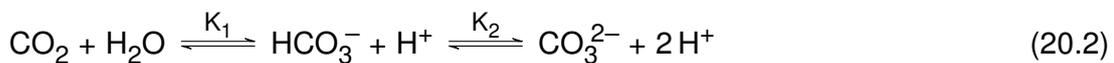
Da der Anteil an Kohlensäure H_2CO_3 im Wasser sehr gering ist, wird diese zusammen mit CO_2 betrachtet. Die Gesamtmenge an gelöstem anorganischen Kohlenstoff (DIC, Gesamtkarbonat, dissolved inorganic carbon) im Meerwasser beträgt

also

$$\text{DIC} = [\text{HCO}_3^-] + [\text{CO}_3^{2-}] + [\text{CO}_2] \quad (20.1)$$

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 Gleichgewichtsreaktionen¹ im Meerwasser sind vereinfacht wie folgt gegeben



Die einzelnen Gleichgewichtsreaktionen sind durch Gleichgewichtskonstanten gekoppelt und nach dem Massenwirkungsgesetz gelten folgende Beziehungen

$$K_1 = \frac{[\text{HCO}_3^-][\text{H}^+]}{[\text{CO}_2]} \quad (20.3)$$

$$K_2 = \frac{[\text{CO}_3^{2-}][\text{H}^+]}{[\text{HCO}_3^-]} \quad (20.4)$$

Die Konzentrationen der Größen sind dabei in eckigen Klammern angegeben. Die temperaturabhängigen Gleichgewichtskonstanten K_1 und K_2 sind in Anlehnung an [Zeebe 2001] gewählt². 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

$$\text{pK} = -\log_{10}(K) \quad (20.5)$$

angegeben.

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.

Man halt also die unbekanntn Größen $[HCO_3^-]$, $[CO_3^{2-}]$, $[CO_2]$ und $[H^+]$. Somit haben wir 2 Gleichungen (Gleichungen 20.3 und 20.4) 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

$$pH = -\log_{10}(H_3O^+) \tag{20.6}$$

erhalten, wobei hier H^+ mit H_3O^+ identifiziert wird (vergleiche Anhang A.4.1). Zusätzlich geben wird die Gesamtmenge an anorganischen Kohlenstoff DIC (Gleichung 20.1) vor. Damit verbleiben 2 Gleichungen und zwei Unbekannte. Dies zu lösen, ist etwas mühsam, lässt sich aber noch von Hand machen. In Abbildung 20.1 ist das Ergebnis für pH-Werte von 1 bis 13 dargestellt. Bei einem pH-Wert von 8.1, der typisch für Oberflächenwasser im Meer ist³, sind liegen ca. 83 % in Form von Hydrogenkarbonat und 16 % in Form von Karbonat vor. Freies CO_2 macht weniger als 1 % aus.

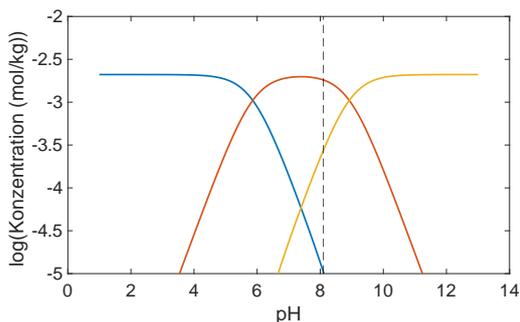


Abbildung 20.1: Vereinfachte Bjerrum-Grafik für die Komponenten des Karbonatsystems im Meerwasser. $DIC = 2.1\text{mmol/kg}$, $S=35$, $T=25\text{ }^\circ\text{C}$, $pK_1 = 5.86$ und $pK_2 = 8.92$. Die zugehörigen K-Werte haben die Einheit mol/kg. Die gestrichelte senkrechte Linie gibt einen pH-Wert von 8.1 an.

Die Betrachtungsweise in Abbildung 20.1 soll nicht implizieren, dass der pH-Wert die steuernde Größe ist. Im Meerwasser bestimmt das Verhältnis der Kohlenstoffkomponenten den pH-Wert.

20.1 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.

³Stand 2001, mittlerweile ist der pH-Wert niedriger.

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 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

$$[\text{CO}_2] = K_0 \cdot p\text{CO}_2 \quad \text{Gesetz von Henry} \quad (20.7)$$

wobei die Löslichkeit K_0 sehr stark von der Temperatur abhängt (vgl. [Zeebe 2001] 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

$$[\text{HCO}_3^-] + 2[\text{CO}_3^{2-}] + [\text{H}^+] + [\text{OH}^-] = 0 \quad \text{in destilliertem Wasser} \quad (20.8)$$

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,

⁴Dies 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.

da für die Dissoziation von Wasser

$$K_W = \frac{[\text{CO}_3^{2-}][\text{H}^+]}{[\text{OH}^-]} \quad (20.9)$$

mit der Gleichgewichtskonstanten K_W gilt, und somit

$$[\text{OH}^-] = \frac{K_W}{[\text{H}^+]} \quad (20.10)$$

gilt.

Im Meerwasser gibt es aber viele weitere Ionen, so dass die Summe in 20.8 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 $\text{Alk}=2.2$ 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 [Zeebe 2001] Abbildung 1.2.10), wird in dieser konzeptionellen Überlegung darauf verzichtet⁵. Wir arbeiten stattdessen mit einer vereinfachten Definition der Alkalinität:

$$\text{Alk} = [\text{HCO}_3^-] + 2[\text{CO}_3^{2-}] + [\text{H}^+] + [\text{OH}^-] \quad \text{Arbeitsdefinition} \quad (20.12)$$

⁵Die Alkalinitätsdefinition (practical alkalinity), wie sie in [Zeebe 2001] verwendet wird lautet:

$$\text{PA} = [\text{HCO}_3^-] + 2[\text{CO}_3^{2-}] + [\text{B(OH)}_4^-] + [\text{H}^+] + [\text{OH}^-] \quad (20.11)$$

Damit ergibt sich folgendes Gleichungssystem

$$[\text{CO}_2] = K_0 \cdot p\text{CO}_2 \quad (20.13)$$

$$K_1 = \frac{[\text{HCO}_3^-][\text{H}^+]}{[\text{CO}_2]} \quad (20.14)$$

$$K_2 = \frac{[\text{CO}_3^{2-}][\text{H}^+]}{[\text{HCO}_3^-]} \quad (20.15)$$

$$K_W = [\text{H}^+][\text{OH}^-] \quad (20.16)$$

$$\text{Alk} = [\text{HCO}_3^-] + 2[\text{CO}_3^{2-}] + [\text{H}^+] + [\text{OH}^-] \quad (20.17)$$

mit den Unbekannten CO_2 , HCO_3^- , CO_3^{2-} , H^+ und OH^- und den Vorgaben $p\text{CO}_2$ und Alk. Ein Lösungsansatz für das Gleichungssystem ist im grauen Kasten angegeben, kann aber beim Lesen auch übersprungen werden.

Lösungsansatz für das Gleichungssystem 20.13

Um die Sache übersichtlicher zu gestalten, werden folgende Abkürzungen verwendet

$c_0 = [\text{CO}_2]$, $c_1 = [\text{HCO}_3^-]$, $c_2 = [\text{CO}_3^{2-}]$, $h = [\text{H}^+]$, $oh = [\text{OH}^-]$,
alle andern Größen werden klein geschrieben:

$$(1) \quad c_0 = k_0 \cdot p_{\text{CO}_2}$$

$$(2) \quad k_1 = c_1 \cdot h/c_0$$

$$(3) \quad k_2 = c_2 \cdot h/c_1$$

$$(4) \quad k_w = h \cdot oh$$

$$(5) \quad \text{alk} = c_1 + 2c_2 + h + oh$$

Gleichung (2) nach c_1 auflösen und (1) einsetzen

$$(2a) \quad c_1 = k_1 \cdot c_0/h = k_1 \cdot k_0 \cdot p_{\text{CO}_2}/h$$

Gleichung (3) nach c_2 auflösen und (2a) einsetzen

$$(3a) \quad c_2 = k_2 \cdot c_1/h = k_2 \cdot k_1 \cdot k_0 \cdot p_{\text{CO}_2}/h^2$$

Gleichung (4) nach $oh = k_w/h$ auflösen und mit (1), (2a) und (3a) in (5) einsetzen

$$(5a) \quad \text{alk} = k_1 \cdot k_0 \cdot p_{\text{CO}_2}/h + 2 k_2 \cdot k_1 \cdot k_0 \cdot p_{\text{CO}_2}/h^2 - h + k_w/h$$

Die Gleichung (5a) muss nun nach der gesuchten Größe h aufgelöst werden, dann kann man sukzessive c_0 , c_1 und c_2 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 $\text{Alk} = 2.2 \text{ mmol/kg}$.

Die verwendeten Gleichgewichtskonstanten sind in Tabelle 20.1 angegeben

Tabelle 20.1: Die Parameter wurden mit den Formeln aus [Zeebe 2001] Anhang A) für $S=35$ und $T=10\text{ }^\circ\text{C}$ 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 $(\text{mol/kg})^2$ (K_W).

Parameter	Wert
pK_0	7.3577
pK_1	6.0014
pK_2	9.1900
pK_W	13.8406

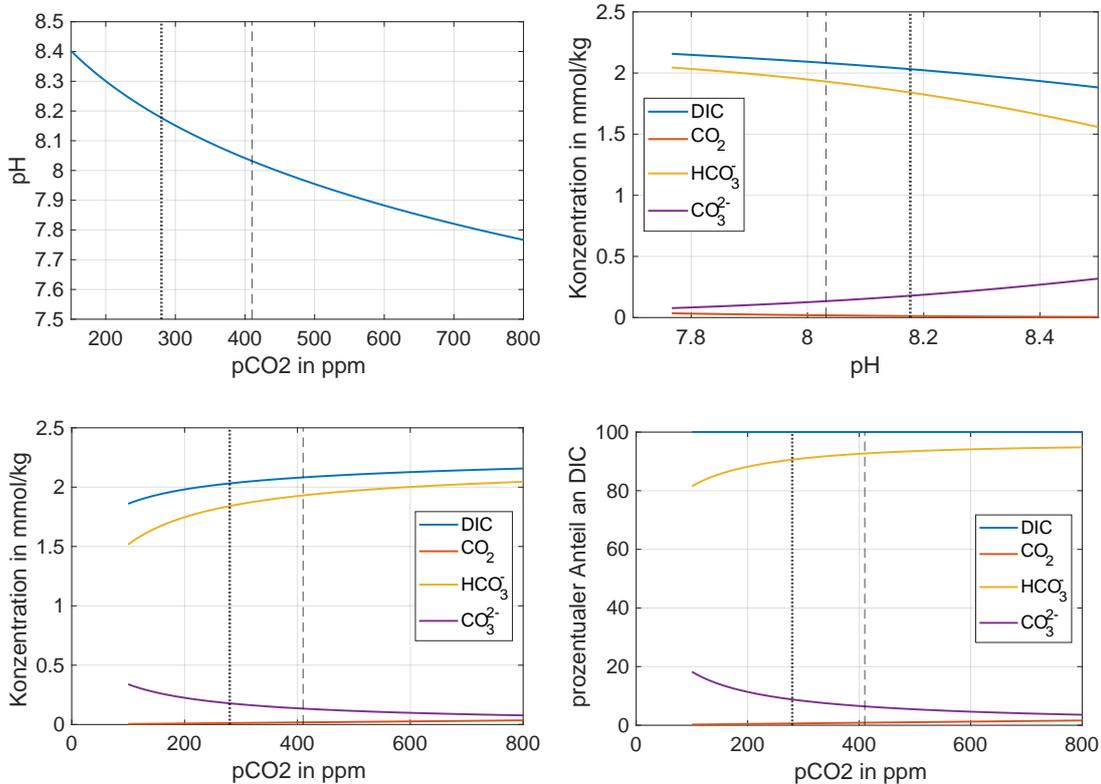


Abbildung 20.2: Veränderung des pH-Werts bei Zunahme des CO₂-Partialdrucks in der Atmosphäre (links oben) und die Zunahme der Gesamtkarbonatkonzentration inkl. der Verteilung auf die einzelnen Komponenten bei Zunahme des pH-Werts (rechts oben). Unten links ist die Veränderung der Verteilung bei Änderung des CO₂-Partialdrucks dargestellt, unteren rechts die prozentuale Verteilung. Die gepunktete Linie kennzeichnet den präindustriellen Wert (pCO₂ = 280 ppm), die gestrichelte Linie den aktuellen Wert (pCO₂ = 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 20.1 angegeben.

In Abbildung 20.2 sind die Ergebnisse dargestellt. Der Anteil an CO₃²⁻ und gelöstem CO₂ ist bei den in der Atmosphäre vorkommenden CO₂-Partialdruckwerten gering. Der größte Anteil liegt in Form von HCO₃⁻ vor (Abbildung 20.2 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 20.2 unten). Bezogen auf den präindustriellen 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 entspricht⁶, 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 ppm) 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 [IPCC2014], 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.

⁶Bei einer Erderwärmung um 4 °C verglichen mit dem präindustriellen Wert ist ein Wert von 800 ppm im Jahre 2100 wahrscheinlich [IPCC2014].

Teil III

Anhang

Die Anhänge ersetzen nicht die Mathematikvorlesungen. Sämtliche Anhänge erheben nicht den Anspruch auf Vollständigkeit. Aus Gründen der Übersichtlichkeit wird häufig auf die Überprüfung und Angabe von Voraussetzungen verzichtet! Sie beschreiben mathematische Inhalte, die in der Vorlesung benötigt werden. Allen, die bisher keine ausreichenden Mathematikkenntnisse erworben haben, wird daher dringend empfohlen, die Inhalte zu vertiefen. Hierzu hilfreich sind einführende Lehrbücher für Nebenfächler (Mathe für Biologen, Mathe für Ingenieure) oder auch Schulbücher.

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:

$$\begin{aligned} f : D &\longrightarrow W && \text{(A.1)} \\ x &\mapsto f(x) \end{aligned}$$

x heißt unabhängige Variable oder Argument. Eine Funktion wird auch Abbildung genannt.

Die Menge aller Punkte $G := \{(x, f(x)) \mid x \in D\}$ der Funktion (A.1) heißt Graph der Funktion.

Beispiel:

$$\begin{aligned} f : [0, 5] &\longrightarrow \mathbb{R} && \text{(A.2)} \\ x &\rightarrow x^2 \end{aligned}$$

Das Argument x ist anschaulich gesehen ein Platzhalter und ist beliebig durch einen anderen Buchstaben austauschbar. Durch

$$\begin{aligned} f : [0, 5] &\longrightarrow \mathbb{R} \\ t &\rightarrow t^2 \end{aligned}$$

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:

$$y = 5 \cdot x^2 \tag{A.3}$$

Aber was ist, wenn die Vorschrift $y = a \cdot b^2$ gegeben 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:

$$y(b) = a \cdot b^2$$

Ist nun $a = 5$, so haben wir 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 (einzigem) 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

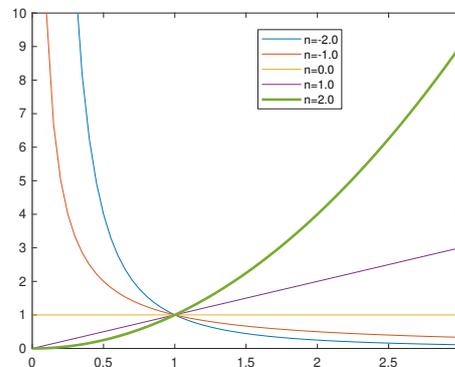
Funktionen der Form

$$y(x) = c \cdot x^n \tag{A.4}$$

heißen Potenzfunktionen, wobei hier im Gegensatz zu Polynomen auch negative und reelle Exponenten zugelassen sind. Kann man natürliche System 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 $p(x) = a_m \cdot x^m + \dots + a_1 \cdot x + a_0$, $m \in \mathbb{N}$ 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

$$x_{1,2} = -\frac{p}{2} \pm \sqrt{\frac{p^2}{4} - q} \quad (\text{A.6})$$

Diese Lösungen müssen im Reellen nicht existieren, sie können komplex sein (Abschnitt A.8)..

Eine quadratische Gleichung kann auch mal anders aussehen, z.B.

$$ax^2 + bx + c = 0 \quad \text{oder auch} \quad x^2 - 3x = 5$$

dann wird sie in die Form nach A.5 umgeformt¹.

¹Man kann natürlich auch die Lösung zu $ax^2 + bx + c = 0$, $a \neq 0$ bestimmen, sie lautet:

$$x_{1,2} = -\frac{b}{2a} \pm \frac{\sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \quad (\text{A.7})$$

Die Lösungsformeln ergeben sich durch quadratische Ergänzung.

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:

$$y(t) = y_0 \cdot e^{a \cdot t} \quad (\text{A.8})$$

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 wächst, 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 \log_{10} 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 verschiede-

nen 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. Speziell ist der dekadische Logarithmus \log_{10} , also der Logarithmus zur Basis 10, um den Faktor $\ln 10 = 2.3026 \dots$ kleiner als der natürliche Logarithmus.

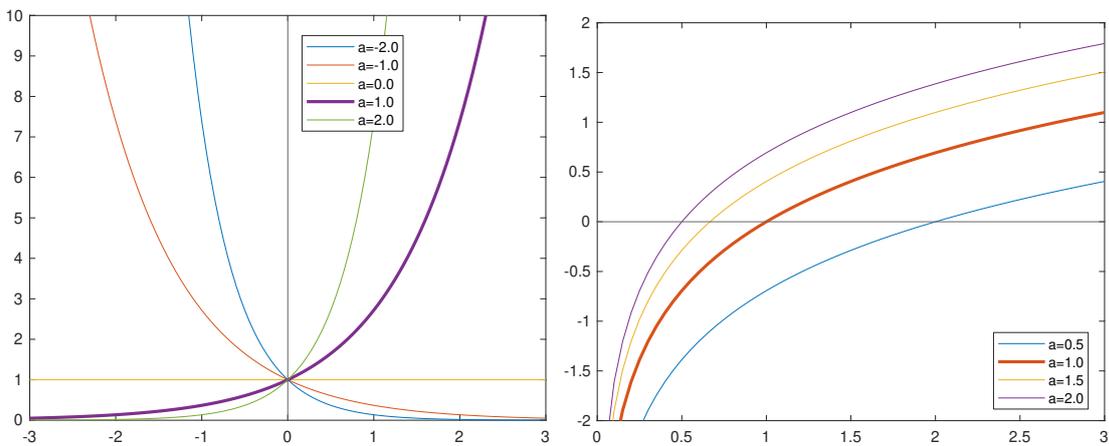


Abbildung A.2: Exponentialfunktion $f(x) = e^{a \cdot x}$ (links) und Logarithmusfunktion $f(x) = \log_{10}(a \cdot x)$ (rechts, nur positive Argumente) für verschiedene Werte von a .

Einige Rechenregeln

$$e^0 = 1$$

$$\log 1 = 0$$

$$e^{a+b} = e^a \cdot e^b$$

$$\log(a \cdot b) = \log a + \log b$$

$$e^{a-b} = \frac{e^a}{e^b}$$

$$\log \frac{a}{b} = \log a - \log b$$

$$e^{-b} = \frac{1}{e^b}$$

$$\log b^{-1} = -\log b$$

$$e^{a \cdot b} = (e^a)^b$$

$$\log(a^n) = n \cdot \log a$$

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).

$$y = a \cdot b^{c \cdot x} \Leftrightarrow Y = e^X \text{ mit } Y = \frac{y}{a}, \quad X = (c \cdot \ln b) \cdot x \quad (\text{A.9})$$

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:

$$2^{bt} = e^{at} = 10^{ct} \text{ für alle } t, \text{ wenn } b \cdot \ln 2 = a = c \cdot \ln 10 \quad (\text{A.10})$$

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

$$\text{pH} = -\log_{10} \left(\frac{c(\text{H}_3\text{O}^+)}{c^0} \right) \quad c^0 = 1 \text{ Mol pro Liter}$$

Die Division durch c^0 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

$$V_{\text{OM}}(t) = V_{\text{ATM}} \cdot e^{-\lambda \cdot t} \quad \lambda \text{ Zerfallsrate in 1/Jahr}$$

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

$$\lambda = \frac{\ln 2}{T_H} \approx \frac{0.69}{5730} = 1.21 \cdot 10^{-4} \frac{1}{\text{a}}$$

A.4.3 Einfach-logarithmische Darstellung

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

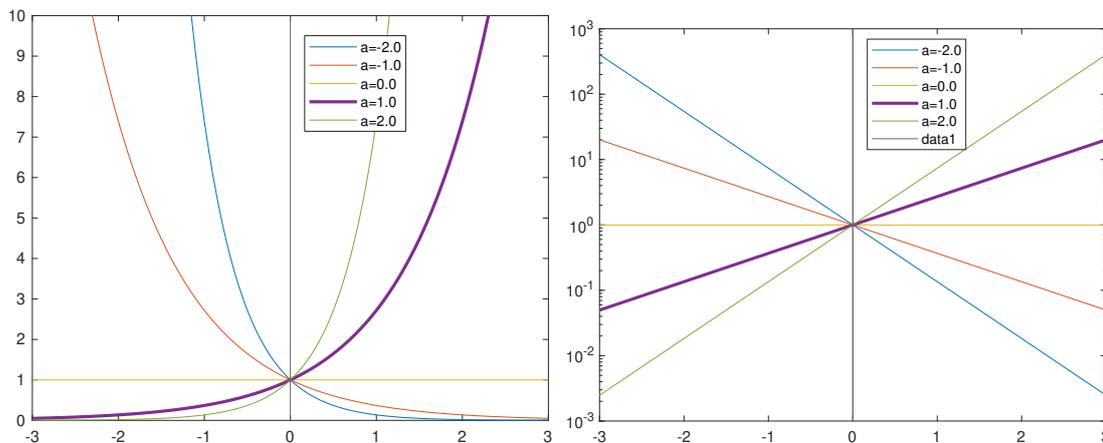


Abbildung A.3: Exponentialfunktion $f(x) = e^{a \cdot x}$ in „normaler“ Darstellung (links, siehe auch A.2) und in einfach logarithmischer Darstellung (rechts) für verschiedene Werte von a .

$$\begin{aligned}
 y = b \cdot e^{a \cdot t} &\Rightarrow \ln y = \ln b + a \cdot t \\
 &\Rightarrow Y = B + a \cdot t
 \end{aligned}
 \tag{A.11}$$

In der zweiten Gleichung sind die Logarithmen durch Großbuchstaben ersetzt, um die Form der Geradengleichung hervorzuheben. Die Steigung der Geraden ist der Faktor a in der Potenz. Zum Vergleich sollte man noch einmal die doppelt logarithmische Darstellung der Potenzfunktionen in (A.12) ansehen.

A.4.4 Doppelt-logarithmische Darstellung

In der „doppelt-logarithmischen“ Darstellung erscheinen alle Potenzfunktionen als Gerade mit der Steigung n :

$$\begin{aligned}
 y = c \cdot x^n &\Rightarrow \log y = n \cdot \log x + \log c \\
 &\Rightarrow Y = n \cdot X + C
 \end{aligned}
 \tag{A.12}$$

Hier stehen in der zweiten Zeile von (A.12) die Großbuchstaben für die Logarithmen. So erkennt man die Geradengleichung. Die doppelt-logarithmische Auftragung erlaubt es, zu erkennen ob das Potenzgesetz erfüllt ist, und ermöglicht, die Parameter direkt aus dem Graphen abzulesen.

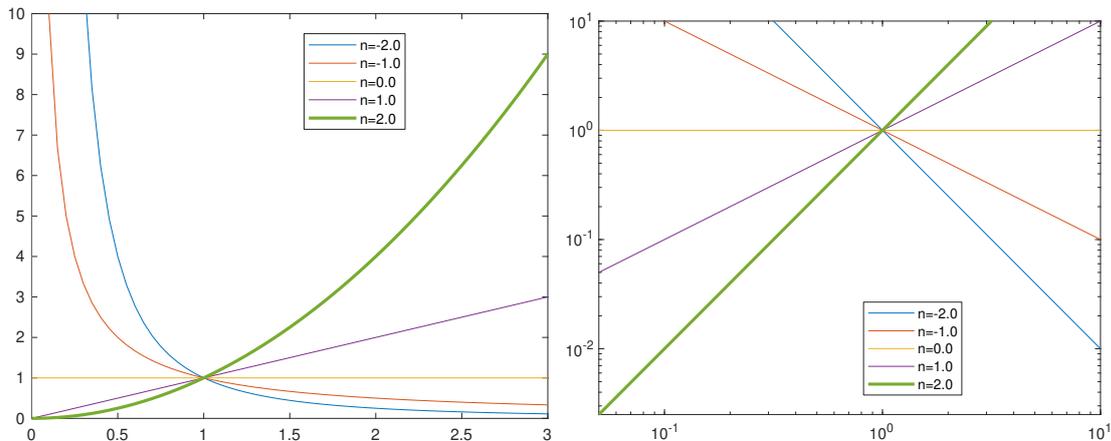


Abbildung A.4: Potenzfunktionen $f(x) = x^n$ für positive Argumente in „normaler“ Darstellung (links, siehe auch A.1) und in doppelt logarithmischer Darstellung (rechts) für verschiedene Werte von n . Die Normalparabel ($n=2$) ist fett dargestellt.

A.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 $lbf \cdot s$ ausgelegt, die um den Faktor 4,45 geringere Werte liefert.”²
- Beim Bau der Hoahrheinbrücke 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 entschei-

²Quelle: https://de.wikipedia.org/wiki/Mars_Climate_Orbiter

³Quelle: <https://de.wikipedia.org/wiki/Hoahrheinbrücke>

dend. 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
- Exponentialschreibweise für Zehnerpotenzen verwenden, z.B. 1 mg = 10^{-3} 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?

Ångström ist eine nicht mehr zulässige, aber immer noch gebräuchliche Längeneinheit: $1 \text{ Å} = 10^{-10} \text{ m}$.

$$\begin{aligned} 60 \frac{\text{km}}{\text{h}} &= 60 \frac{10^3 \text{m}}{\text{h}} = 60 \frac{10^3 \cdot 10^{10} \text{Å}}{\text{h}} = 60 \cdot 10^{13} \frac{\text{Å}}{\frac{1}{24} \text{d}} \\ &= 24 \cdot 60 \cdot 10^{13} \frac{\text{Å}}{\text{d}} = 24 \cdot 6 \cdot 10^{14} \frac{\text{Å}}{\text{d}} = 144 \cdot 10^{14} \frac{\text{Å}}{\text{d}} \end{aligned}$$

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 angegeben 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 :

$$1 \text{ Mol } \text{CO}_2 = 12 \text{ g C} + 2 \cdot 16 \text{ g O}_2 = 44 \text{ g } \text{CO}_2$$

Durch erweitern mit $44\text{g CO}_2/\text{MolCO}_2$ 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

$$= \frac{400 \cdot 44 \text{ g CO}_2}{22.4 \cdot 10^3 \text{ m}^3}$$

Hat man nun keinen Taschenrechner zur Hand geht es überschlägig weiter, falls dies ausreicht

$$\approx \frac{400 \cdot 44 \text{ g CO}_2}{22 \cdot 10^3 \text{ m}^3} = \frac{400 \cdot 2 \text{ g CO}_2}{10^3 \text{ m}^3} = 0.8 \frac{\text{g CO}_2}{\text{m}^3}$$

Somit enthält ein Kubikmeter Luft mit einem CO_2 -Gehalt von 400 ppm in etwa 0.8g 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.

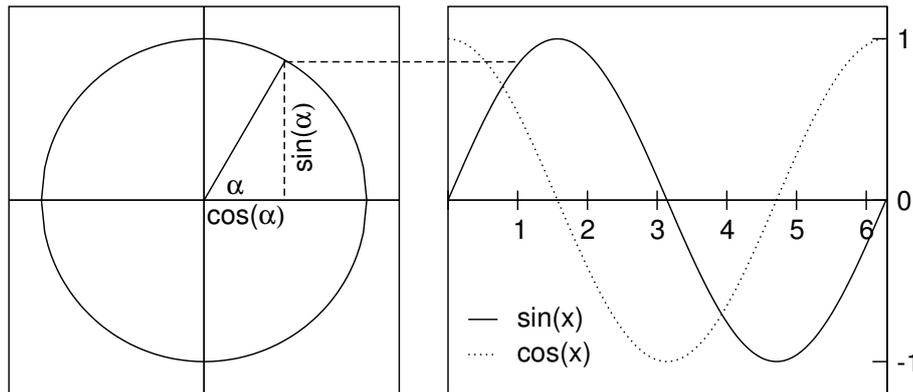


Abbildung A.5: Der Einheitskreis und die Winkelfunktionen

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 2π 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

$$f(B) = b \cdot \frac{B}{B + M} \quad (\text{A.13})$$

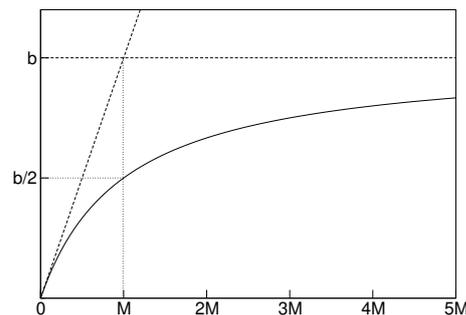


Abbildung A.6: Graph der Monod-Funktion mit der Halbsättigungskonstanten M und dem Grenzwert b .

Diese Funktion wird auch **Monod-Funktion**, **Michaelis-Menten-Kinetik** oder 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

$$x^2 = -1 \quad (\text{A.14})$$

hat im reellen Zahlenraum keine Lösung. Mit

$$i = \sqrt{-1} \quad (\text{A.15})$$

wird eine "imaginäre Zahl" Zahl definiert, für die $i^2 = -1$ gilt. Eine komplexe Zahl ist die durch

$$z = a + ib \quad (\text{A.16})$$

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

$$z + y = a + c + i(b + d) \quad (\text{A.17})$$

$$z \cdot y = (a + ib) \cdot (c + id) = ac + aid + ibc + iibd = ac - bd + i(ad + bc) \quad (\text{A.18})$$

$$e^z = e^{a+ib} = e^a \cdot e^{ib} \quad (\text{A.19})$$

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).

$$\exp(ix) = \cos(x) + i \cdot \sin(x) \quad \text{Eulersche Formel} \quad (\text{A.20})$$

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 :

$$a \bmod n = a - \left[\frac{a}{n} \right] \cdot n \quad (\text{A.21})$$

Hierbei ist $[\cdot]$ die sogenannte Gaußklammer, 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 $f'(x)$

$$f'(x) \equiv \frac{d}{dx}f(x) \equiv \frac{df(x)}{dx} \quad \text{sprich: } df(x) \text{ nach } dx$$

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

$$\frac{\partial f(x, y)}{\partial y} \quad \text{sprich: } df(x, y) \text{ nach } dy$$

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 $f + g: t \mapsto f(t) + g(t)$ ist in t_0 differenzierbar:

$$[f + g]'(t_0) = f'(t_0) + g'(t_0)$$

2. Für $c \in \mathbb{R}$ ist $cf: t \mapsto cf(t)$ in t_0 differenzierbar:

$$[cf]'(t_0) = cf'(t_0)$$

3. Das Produkt $f \cdot g: t \mapsto f(t) \cdot g(t)$ ist in t_0 differenzierbar:

$$[f \cdot g]'(t_0) = f'(t_0) \cdot g(t_0) + f(t_0) \cdot g'(t_0) \quad \textbf{Produktregel}$$

4. Der Quotient $\frac{f}{g}: t \mapsto \frac{f(t)}{g(t)}$ ist in t_0 mit $g(t_0) \neq 0$ differenzierbar:

$$\left[\frac{f}{g} \right]'(t_0) = \frac{f'(t_0) \cdot g(t_0) - f(t_0) \cdot g'(t_0)}{g(t_0)^2} \quad \textbf{Quotientenregel}$$

Ableitungen einiger wichtiger Funktionen:

$$\begin{array}{ll}
 f(t) = c, \quad c \in \mathbb{R} & f'(t) = 0 \\
 f(t) = t^n, \quad n \in \mathbb{Z} & f'(t) = n \cdot t^{n-1} \\
 f(t) = \cos(t) & f'(t) = -\sin(t) \\
 f(t) = \sin(t) & f'(t) = \cos(t) \\
 f(t) = \exp(t) & f'(t) = \exp(t) \\
 f(t) = \ln(t) & f'(t) = \frac{1}{t}
 \end{array} \tag{A.22}$$

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 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).

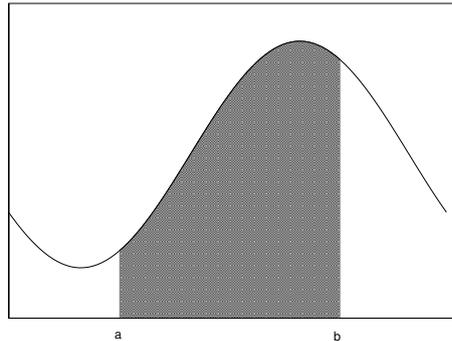


Abbildung A.7: Fläche unter einem Kurvenstück.

Es sei f eine stetige Funktion, die 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:

$$F(b) - F(a) = \int_a^b f(x) \, dx = F(x) \Big|_a^b \quad (\text{A.23})$$

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

$$\int_a^b f(x) \, dx = F(x) \Big|_a^b = F(b) - F(a). \quad (\text{A.24})$$

$\int_a^b f(x) dx$ 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 $F + C$, $C \in \mathbb{R}$, dh. 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

$$\int f(x) dx = F(x) + C, \quad C \in \mathbb{R}. \quad (\text{A.25})$$

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

$$\begin{array}{ll}
 f(t) = 0, \quad c \in \mathbb{R} & F(t) = C, C \in \mathbb{R} \\
 f(t) = t^n, \quad n \in \mathbb{Z} \setminus \{-1\} & F(t) = \frac{1}{n+1} \cdot t^{n+1} \\
 f(t) = \cos(t) & F(t) = \sin(t) \\
 f(t) = \sin(t) & F(t) = -\cos(t) \\
 f(t) = \exp(t) & F(t) = \exp(t) \\
 f(t) = \frac{1}{t} & F(t) = \ln|t|
 \end{array} \tag{A.26}$$

A.11.2 Rechenregeln

Seien f, g auf $[a, b]$ integrierbare Funktionen und $c \in \mathbb{R}$, so gilt

$$\begin{array}{l}
 1. \int_a^b f(x) + g(x) \, dx = \int_a^b f(x) \, dx + \int_a^b g(x) \, dx \\
 2. \int_a^b c \cdot f(x) \, dx = c \cdot \int_a^b f(x) \, dx \\
 3. \int_a^b f(x) \, dx = -\int_b^a f(x) \, dx
 \end{array}$$

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

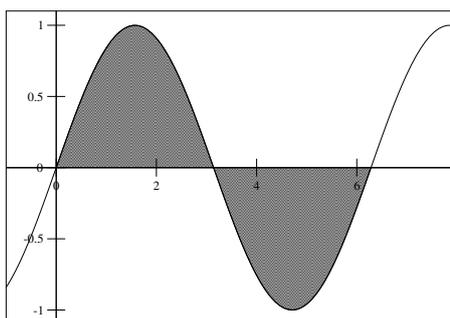


Abbildung A.8: Fläche „unter“ dem Sinus.

muss nun berücksichtigt werden, dass der Sinus auch negative Werte annimmt. Bestimmt man zuerst naiv einfach das bestimmte Integral so erhält man folgendes Ergebnis:

$$\int_0^{2\pi} \sin(x) \, dx = -\cos(x) \Big|_0^{2\pi} = -\cos(2\pi) - (-\cos(0)) = (-1) - (-1) = 0 \tag{A.28}$$

Berücksichtigt man, dass beim Integrieren Flächen unterhalb der x-Achse negativ gezählt werden, so ergibt sich die Fläche zu:

$$\begin{aligned} & \int_0^{\pi} \sin(x) \, dx - \int_{\pi}^{2\pi} \sin(x) \, dx \\ &= (-\cos(x) \Big|_0^{\pi}) - (-\cos(x) \Big|_{\pi}^{2\pi}) \\ &= (-\cos(\pi) - (-\cos(0))) - (-\cos(2\pi) - (-\cos(\pi))) \\ &= (1 - (-1)) - (-1 - 1) = 4 \end{aligned}$$

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

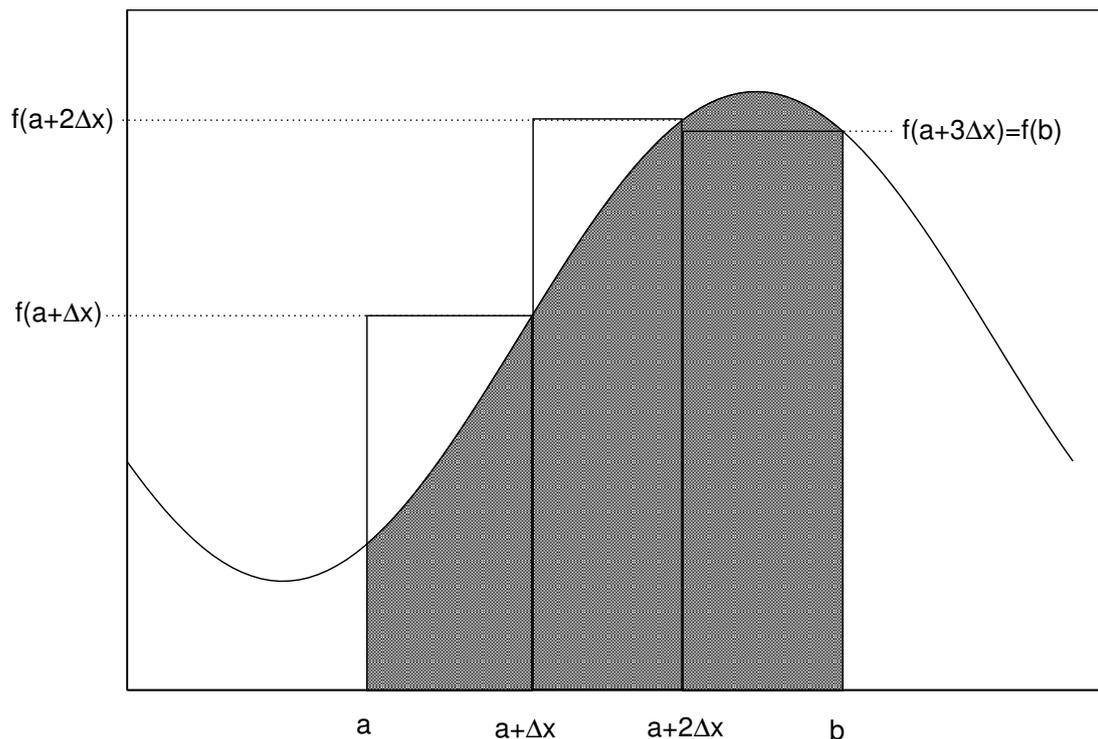


Abbildung A.9: Approximation der Fläche durch 3 Rechtecke.

sind, so gilt für die Streifenbreite

$$\Delta x = \frac{b-a}{n}, \quad (\text{A.29})$$

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 $\Delta x = \frac{b-a}{n}$

$$F_n = \sum_{k=1}^n f(a + k \cdot \Delta x) \cdot \Delta x \quad (\text{A.30})$$

Nun sieht man auch, woher die Schreibweise \int kommt. Sie leitet sich von \sum ab. Das Δx geht beim Grenzübergang $n \rightarrow \infty$ in dx über.

$$\sum_{k=1}^n f(a + k \cdot \Delta x) \cdot \Delta x \rightarrow \int_a^b f(x) dx \quad (\text{A.31})$$

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

$$\int_0^b x^2 dx = \frac{1}{3} x^3 \Big|_0^b = \frac{1}{3} b^3 \quad (\text{A.32})$$

ist. Nun wollen wir dieses Ergebnis durch die Streifenmethode approximieren.

Die Fläche bei n Streifen ist durch

$$F_n = \sum_{k=1}^n (0 + k \cdot \Delta x)^2 \cdot \Delta x = \Delta x^3 \sum_{k=1}^n k^2 \quad (\text{A.33})$$

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

$$\begin{aligned} F_n &= \Delta x^3 \cdot \frac{1}{6} n \cdot (n+1) \cdot (2n+1) = \frac{b^3}{n^3} \cdot \frac{1}{6} \cdot n \cdot (n+1) \cdot (2n+1) \\ &= \frac{b^3}{6} \cdot \frac{(n+1) \cdot (2n+1)}{n^2} \\ &= \frac{b^3}{6} \cdot \left(\frac{2n^2 + 3n + 1}{n^2} \right) = \frac{b^3}{6} \cdot \left(\frac{2n^2}{n^2} + \frac{3n}{n^2} + \frac{1}{n^2} \right) = \frac{b^3}{6} \cdot \left(2 + \frac{3}{n} + \frac{1}{n^2} \right) \\ &\rightarrow \frac{b^3}{3} \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} \int_0^2 (3x + 1)^2 \, dx &= \int_{\varphi(0)}^{\varphi(2)} \varphi(x)^2 \frac{1}{3} d\varphi(x) = \int_{3 \cdot 0 + 1}^{3 \cdot 2 + 1} \frac{1}{3} y^2 \, dy \\ &= \frac{1}{3} \cdot \frac{1}{3} x^3 \Big|_1^7 = \frac{1}{9} \cdot (7^3 - 1^3) = \frac{1}{9} \cdot (343 - 1) = 38 \end{aligned}$$

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 Voraussetzungen⁴ in der Umgebung einer Stelle t approximieren. Sei y eine reellwertige Funktion von t , die mindestens $(n + 1)$ -mal stetig differenzierbar ist, dann heißt

$$y(t + \Delta t) = y(t) + y'(t) \cdot \Delta t + \frac{1}{2} \cdot y''(t) \cdot \Delta t^2 + \frac{1}{2 \cdot 3} \cdot y'''(t) \cdot \Delta t^3 + \dots + \frac{1}{2 \cdot 3 \cdot \dots \cdot n} \cdot y^{(n)}(t) \cdot \Delta t^n + R_{n+1}(t) \tag{A.34}$$

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, das 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: $k! = 1 \cdot 2 \cdot \dots \cdot k$. 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,

⁴Die Funktion muss oft genug stetig differenzierbar sein.

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 $y(t) = e^{r \cdot t}$

$$y(t + \Delta t) = e^{r \cdot t} + r \cdot e^{r \cdot t} \cdot \Delta t + \frac{1}{2} \cdot r^2 \cdot e^{r \cdot t} \cdot \Delta t^2 + \frac{1}{6} \cdot r^3 \cdot e^{r \cdot t} \cdot \Delta t^3 + \dots$$

Die Entwicklung an $t = 0$ ergibt

$$y(\Delta t) = 1 + r \cdot \Delta t + \frac{1}{2} \cdot r^2 \cdot \Delta t^2 + \frac{1}{6} \cdot r^3 \cdot \Delta t^3 + \dots = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(r \cdot \Delta t)^k}{k!}$$

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

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \quad n = 0 \dots$$

bis $|x_n| < G$ gilt.

B 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 ?

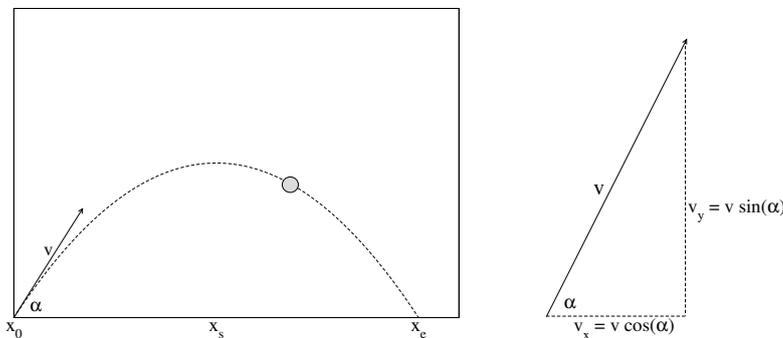


Abbildung B.1: Die Wurfparabel und die Zerlegung der Geschwindigkeit v in die Komponenten v_x und v_y

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 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 zurück-

gelegte Strecke in y-Richtung beträgt also

$$\int_0^t v_g(s) ds = \int_0^t g \cdot s ds = \frac{1}{2}gs^2 \Big|_0^t = \frac{1}{2}gt^2$$

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 wir 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

$$y(x) = \frac{\sin \alpha}{\cos \alpha} \cdot x - \frac{g}{2v^2 \cdot \cos^2 \alpha} \cdot x^2. \quad (\text{B.1})$$

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

$$x_e = \frac{2v^2}{g} \cdot \sin \alpha \cdot \cos \alpha, \text{ den Auftreffpunkt.} \quad (\text{B.2})$$

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):

$$x_e \approx 19,36 \text{ m} \quad y_s \approx 4,06 \text{ m}$$

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).

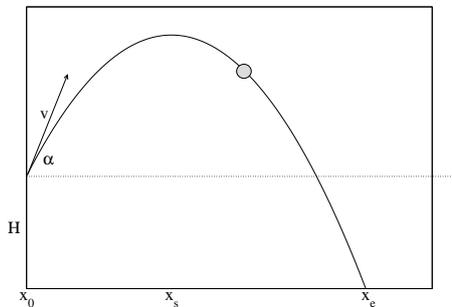


Abbildung B.2: Die Wurfparabel bei Abwurf vom erhöhten Standpunkt aus.

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 quadrati-

schen Gleichung erhält:

$$x_{1,2} = \frac{v^2}{g} \cos \alpha \left(\sin \alpha \pm \sqrt{\sin^2 \alpha + \frac{2gH}{v^2}} \right), \quad (\text{B.5})$$

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 :

$$x_s = \frac{v^2}{g} \cdot \sin \alpha \cdot \cos \alpha \quad (\text{B.6})$$

Einsetzen von x_s in Gleichung B.4 ergibt die maximale Flughöhe (vom Boden aus gemessen):

$$y_s = H + \frac{\sin \alpha}{\cos \alpha} \cdot x_s - \frac{g}{2v^2 \cdot \cos^2 \alpha} \cdot x_s^2. \quad (\text{B.7})$$

C Differentialgleichungen

In einer Differentialgleichung (DGL) wird eine (unbekannte) Funktion mit ihren Ableitungen verknüpft, z.B.

$$\frac{dy(x)}{dx} = y(x) \quad (\text{C.1})$$

C.1 Gewöhnliche Differentialgleichungen 1. Ordnung

Eine Gleichung der Form

$$\frac{dy(x)}{dx} = f(x, y(x)) \quad (\text{C.2})$$

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 DGL erfüllt, heißt Lösung der DGL. Eine DGL 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 :

$$\frac{dy(t)}{dt} = f(t, y(t)) \quad \text{oder kürzer} \quad \frac{dy}{dt} = f(t, y) \quad \text{oder auch} \quad \dot{y} = f(t, y) \quad (\text{C.3})$$

Eine DGL heißt **autonom**, wenn f nicht explizit von der unabhängigen Variable x (bzw. t) abhängt:

$$\frac{dy}{dx} = f(y) \quad \text{z.B.} \quad \frac{dy}{dx} = a \cdot y \quad (\text{C.4})$$

sonst heißt sie nicht-autonom, z.B.

$$\frac{dy(x)}{dx} = f(x, y(x)) \quad \text{z.B.} \quad \frac{dy}{dx} = -x \cdot y \quad (\text{C.5})$$

C.1.1 Richtungsfeld

Was kann man einer DGL ansehen? Betrachten wir zum Beispiel die DGL $\dot{y} = a \cdot y$. 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 4.3). Ohne die Lösungen der DGL 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“.

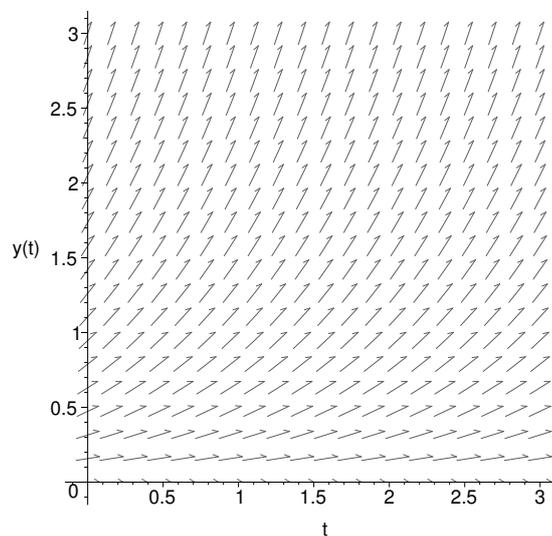


Abbildung C.1: Richtungsfeld von $\dot{y} = y$. Das Richtungsfeld ist t -translationsinvariant.

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

Lösung¹. 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.

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 DGL 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

$$\dot{y} = 0.5 \cdot y, \quad y(2) = 3 \quad (\text{C.6})$$

Die allgemeine Lösung zu $\dot{y} = 0.5 \cdot y$ lautet

$$y(t) = C \cdot e^{0.5 \cdot t} \quad (\text{C.7})$$

wobei C eine freie Konstante ist.

$$y'(t) = C \cdot 0.5 \cdot e^{0.5 \cdot t} = 0.5 \cdot y(t) \quad (\text{C.8})$$

Nun muss noch C angepasst werden

$$3 \stackrel{!}{=} y(2) = C \cdot e^{0.5 \cdot 2} = C \cdot e \quad (\text{C.9})$$

also ist

$$y(t) = \frac{3}{e} \cdot e^{0.5 \cdot t} \approx 1.1 \cdot e^{0.5 \cdot t} \quad (\text{C.10})$$

die gesuchte Lösung zum Anfangswertproblem.

¹Dies gilt nicht für alle DGLn. Weiter hilft hier der Satz von Picard-Lindelöf: f muss Lipschitzbedingung für y erfüllen.

C.2 Numerisches Lösen von Differentialgleichungen

Die wenigsten Differentialgleichung, 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. Gegeben sei das Anfangswertproblem:

$$y' = f(t, y(t)), \quad y(t_0) = y_0$$

C.2.1 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:

$$y_{k+1} = y_k + f(t_k, y_k) \cdot \Delta t \quad k = 0, 1, \dots$$

Dieses Verfahren ist recht ungenau.

Beispiel Euler Verfahren

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-Verfahren und einer Schrittweite von $\Delta t = 1$, so erhält man als approximative

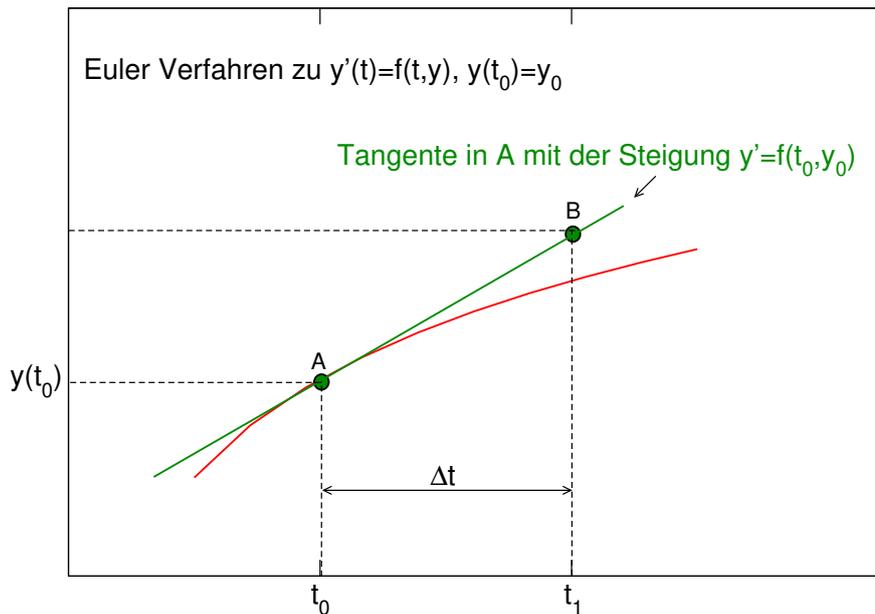


Abbildung C.2: Euler-Verfahren zu $\dot{y} = f(t, y)$, $y(t_0) = y_0$.

Lösung 1024. Der exakte Wert beträgt (auf 2 Nachkommastellen gerundet) 22026.47.

Fehlerabschätzung beim Euler Verfahren*

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 Eulerverfahrens 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 .

C.2.2 Runge-Kutta-Verfahren 2. Ordnung* (Verbessertes Euler-Verfahren, Heun-Verfahren)

Statt die Steigung an der Stelle t als Geradensteigung zu verwenden, werden die Steigungen in (t, y) und $(t + \Delta t, y + f(t, y) \cdot \Delta t)$ gemittelt. 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:

$$y(t + \Delta t) = y(t) + \frac{f(t, y(t)) + \overbrace{f(t + \Delta t, y(t) + f(t, y(t)) \cdot \Delta t)}^{\text{Funktionswert nach einem Euler-Schritt}}}{2} \cdot \Delta t$$

Ausgedrückt in Zeitschritten

$$y_{k+1} = y_k + \frac{f(t_k, y_k) + f(t_{k+1}, y_k + f(t_k, y_k) \cdot \Delta t)}{2} \cdot \Delta t \quad k = 0, 1, \dots$$

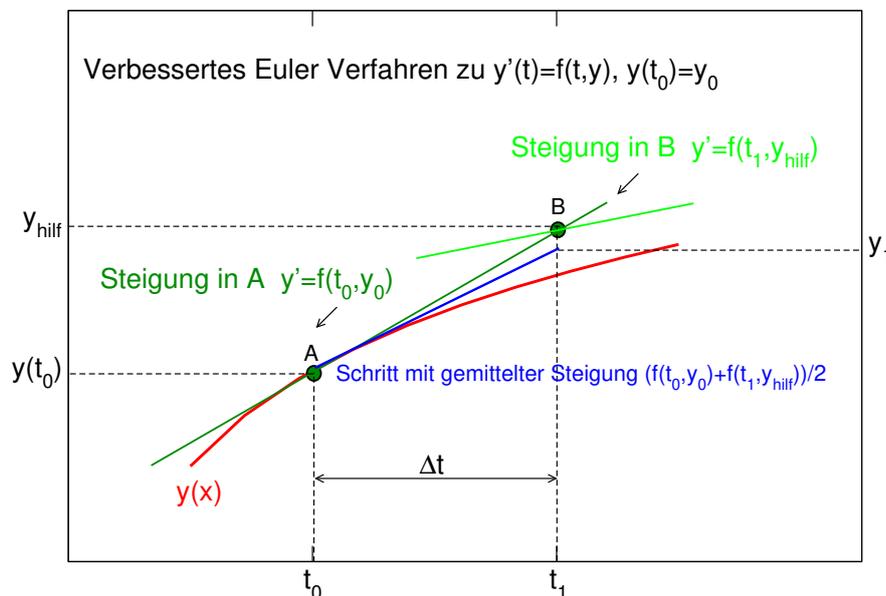


Abbildung C.3: Verbessertes Euler-Verfahren zu $\dot{y} = f(t, y)$, $y(t_0) = y_0$.

Runge-Kutta-Verfahren 4. Ordnung*

Das bekannteste Verfahren approximiert die Lösung bis zur 4. Ordnung. 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 Steigung 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:

$$y(t + \Delta t) = y(t) + \frac{s_1 + 2s_2 + 2s_3 + s_4}{6} \cdot \Delta t$$

$$s_1 = f(t, y(t))$$

$$s_2 = f\left(t + \frac{\Delta t}{2}, y(t) + s_1 \cdot \frac{\Delta t}{2}\right)$$

$$s_3 = f\left(t + \frac{\Delta t}{2}, y(t) + s_2 \cdot \frac{\Delta t}{2}\right)$$

$$s_4 = f(t + \Delta t, y(t) + s_3 \cdot \Delta t)$$

Ausgedrückt in Zeitschritten

$$y_{k+1} = y_k + \frac{s_1 + 2s_2 + 2s_3 + s_4}{6} \cdot \Delta t \quad k = 0, 1, \dots$$

$$s_1 = f(t_k, y_k)$$

$$s_2 = f\left(t_k + \frac{\Delta t}{2}, y_k + s_1 \cdot \frac{\Delta t}{2}\right)$$

$$s_3 = f\left(t_k + \frac{\Delta t}{2}, y_k + s_2 \cdot \frac{\Delta t}{2}\right)$$

$$s_4 = f(t_k + \Delta t, y_k + s_3 \cdot \Delta t)$$

Dieses Verfahren ist in vielen Programmen implementiert. Bessere Verfahren sind implizite Verfahren, Verfahren mit einer automatischen Zeitschrittanpassung resp. Prediktor-Korrektor-Verfahren.

D Vektoren und Matrizen

D.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 (\mathbf{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.

D.1.1 Vektoren im Koordinatensystem

Wir legen das übliche kartesische 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 \mathbf{v} ein Vektor in der Ebene, dessen Anfangspunkt im Koordinatenursprung liegt. Die Koordinaten (v_1, v_2) seines Endpunkts sind dann die Komponenten von \mathbf{v} :

$$\mathbf{v} = (v_1 \ v_2)$$

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 $\mathbf{0}$ geschrieben.

Einheitsvektor

$\mathbf{e}_1 = (1 \ 0)$ und $\mathbf{e}_2 = (0 \ 1)$ 2-dimensional

$\mathbf{e}_1 = (1 \ 0 \ 0)$, $\mathbf{e}_2 = (0 \ 1 \ 0)$ und $\mathbf{e}_3 = (0 \ 0 \ 1)$ 3-dimensional.

D.1.2 Rechenregeln für Vektoren

Seien \mathbf{u} , \mathbf{v} , \mathbf{w} Vektoren desselben Raumes, also hier entweder 2-dimensional oder dreidimensional), so gilt: **Addition**

$$\mathbf{u} + \mathbf{v} = \mathbf{v} + \mathbf{u} \quad (\text{D.1})$$

$$\mathbf{u} + \mathbf{0} = \mathbf{u}$$

$$\mathbf{u} + (\mathbf{v} + \mathbf{w}) = (\mathbf{u} + \mathbf{v}) + \mathbf{w}$$

Multiplikation mit einem Skalar Seien \mathbf{u} , \mathbf{v} Vektoren desselben Raumes, also hier entweder 2-dimensional oder dreidimensional und λ und μ reelle Zahlen (Skalare), so gilt:

$$1 \cdot \mathbf{u} = \mathbf{u} \quad (\text{D.2})$$

$$(\lambda \cdot \mu) \cdot \mathbf{u} = \lambda \cdot (\mu \cdot \mathbf{u})$$

$$(\lambda + \mu) \cdot \mathbf{u} = \lambda \cdot \mathbf{u} + \mu \cdot \mathbf{u}$$

$$\lambda \cdot (\mathbf{u} + \mathbf{v}) = \lambda \mathbf{u} + \lambda \mathbf{v}$$

Rechenregeln für die Koordinatendarstellung

Seien $\mathbf{u} = (u_1, u_2)$ und $\mathbf{v} = (v_1, v_2)$ zwei Vektoren und λ und μ reelle Zahlen, so gilt:

$$\mathbf{u} + \mathbf{v} = (u_1 + v_1, u_2 + v_2) \quad (\text{D.3})$$

$$\lambda \cdot \mathbf{u} = (\lambda \cdot u_1, \lambda \cdot u_2)$$

Norm eines Vektors

Die Länge (Norm) eines Vektors wird mit $|\mathbf{u}|$ oder $\|\mathbf{u}\|$ bezeichnet und ergibt sich nach dem Satz des Pythagoras. Für den Vektor $\mathbf{u} = (u_1, u_2)$ gilt:

$$\|\mathbf{u}\| = \sqrt{u_1^2 + u_2^2}$$

und für $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)$

$$\|\mathbf{u}\| = \sqrt{u_1^2 + u_2^2 + u_3^2}$$

D.1.3 Zeilen- und Spaltenvektoren

Vektoren kommen als Zeilen oder Spaltenvektoren vor:

Zeilenvektoren: $(1 \ 2 \ 3)$ oder $(-5 \ 3)$

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.

D.1.4 Multiplikation von Zeilen- mit Spaltenvektor

Die Multiplikation von einem Zeilenvektor mit einem Spaltenvektor derselben Länge ergibt eine Zahl

$$(u_1 \quad u_2 \quad u_3) \cdot \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{pmatrix} = u_1 \cdot v_1 + u_2 \cdot v_2 + u_3 \cdot v_3$$

D.1.5 Inneres Produkt oder auch Skalarprodukt

Das innere Produkt oder Skalarprodukt zweier Vektoren \mathbf{u} und \mathbf{v} , die den Winkel θ einschließen, ist definiert als

$$\langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle = \|\mathbf{u}\| \|\mathbf{v}\| \cos \theta \quad (\text{D.4})$$

Ist einer der beiden Vektoren der Nullvektor, so ist $\langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle = 0$, 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:

$$\|\mathbf{u}\| = \sqrt{\langle \mathbf{u}, \mathbf{u} \rangle}$$

Rechenregeln für die Koordinatendarstellung

Das innere Produkt oder Skalarprodukt zweier Vektoren $\mathbf{u} = (u_1 \quad u_2)$ und $\mathbf{v} = (v_1 \quad v_2)$, berechnet sich wie folgt

$$\langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle = u_1 v_1 + u_2 v_2 \quad (\text{D.5})$$

D.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.

D.2.1 Rechenregeln für Matrizen

Es sei A und B $n \times m$ -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 $n \times m$ -Matrix und B eine $m \times r$ -Matrix, dann gilt

$$A \cdot B = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nm} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} b_{11} & \cdots & b_{1r} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{m1} & \cdots & b_{mr} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^m a_{1i} \cdot b_{i1} & \cdots & \sum_{i=1}^m a_{1i} \cdot b_{ir} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{i=1}^m a_{ni} \cdot b_{i1} & \cdots & \sum_{i=1}^m a_{ni} \cdot b_{ir} \end{pmatrix}$$

Das Ergebnis ist eine $n \times r$ -Matrix.

Für den Fall $r = 1$ kann man die Matrix B als Spaltenvektor auffassen ($m \times 1$ -Matrix). Damit ergibt sich die Multiplikation einer $n \times m$ 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

$$a \cdot B = (a_1 \quad \cdots \quad a_n) \cdot \begin{pmatrix} b_{11} & \cdots & b_{1m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{n1} & \cdots & b_{nm} \end{pmatrix} = \left(\sum_{i=1}^n a_i \cdot b_{i1}, \quad \cdots, \quad \sum_{i=1}^n a_i \cdot b_{im} \right)$$

Das Ergebnis ist ein m -dimensionaler Zeilenvektor. Die Multiplikation eines n -dimensionalen Zeilenvektors a mit einem n -dimensionalen Spaltenvektor b ergibt

$$a \cdot b = (a_1 \quad \cdots \quad a_n) \cdot \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^n a_i \cdot b_i$$

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.

D.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 .

$$\text{Sei } A = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \quad \text{dann ist } A^T = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{n1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{1n} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

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.

D.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

$$\begin{array}{rcl} a_{11} \cdot x_1 & + \cdots + & a_{1m} \cdot x_m = b_1 \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n1} \cdot x_1 & + \cdots + & a_{nm} \cdot x_m = b_n \end{array}$$

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.

E 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:

$$\text{Drehung} \quad \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi \\ \sin \varphi & \cos \varphi \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

$$\text{Scherung} \quad \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & b \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

$$\text{Streckung} \quad \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & d \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

$$\text{Projektion} \quad \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

$$\text{Spiegelung} \quad \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

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 \vec{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 \vec{v} zum Eigenwert λ gilt

$$A \cdot \vec{v} = \lambda \cdot \vec{v}$$

oder anders mit der Einheitsmatrix I geschrieben:

$$(A - \lambda I) \cdot \vec{v} = \vec{0}$$

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 $c \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $c \in \mathbb{R} \setminus 0$.

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 $x_1 = c$, $c \in \mathbb{R} \setminus 0$. 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 $c \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{3}{2} \end{pmatrix}$, $c \in \mathbb{R} \setminus 0$.

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 $\begin{pmatrix} b \\ \lambda - a \end{pmatrix}$. Für $c \neq 0$ kann man $v_2 = c$ setzen und erhält den Eigenvektor $\begin{pmatrix} \lambda - d \\ c \end{pmatrix}$. 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.

F 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

$$\begin{aligned} f : \mathbb{R}^2 &\longrightarrow \mathbb{R} \\ (t, x) &\mapsto f(t, x) \end{aligned} \tag{F.1}$$

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.

F.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

$$\frac{\partial f(t, x)}{\partial t} \quad \text{und} \quad \frac{\partial f(t, x)}{\partial x} \tag{F.2}$$

Achtung: Es handelt sich um runde ∂ 's, um die partiellen Ableitungen zu kenn-

zeichnen.

Fasst man die partiellen Ableitungen in einem Vektor zusammen, so nennt man diesen Vektor **Gradient** von f :

$$\nabla f := \begin{pmatrix} \frac{\partial f(t, x)}{\partial t} \\ \frac{\partial f(t, x)}{\partial x} \end{pmatrix} \quad (\text{F.3})$$

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.

F.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, ($\Delta t \rightarrow dt$ und $\Delta x \rightarrow dx$), so gilt

$$df = \frac{\partial f(t, x)}{\partial t} dt + \frac{\partial f(t, x)}{\partial x} dx = \nabla f \cdot \begin{pmatrix} dt \\ dx \end{pmatrix} \tag{F.4}$$

Den Ausdruck F.4 nennt man **totales Differential**. Der Punkt \cdot deutet an, dass es sich um das Skalarprodukt handelt. Bezieht man dieses wiederum auf ein infinitesimal kleines Zeitintervall, so erhält man die **totale Ableitung**

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f(t, x)}{\partial t} + \frac{\partial f(t, x)}{\partial x} \cdot \frac{dx}{dt} \tag{F.5}$$

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.

F.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 f 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 F.5

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f(t, x)}{\partial t} + \frac{\partial f(t, x)}{\partial x} \cdot \frac{dx}{dt} = 0 \quad (\text{F.6})$$

gelten und somit gilt

$$\frac{\partial f(t, x)}{\partial t} = -\frac{\partial f(t, x)}{\partial x} \cdot \frac{dx}{dt} \quad (\text{F.7})$$

F.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 F.7 muss dann nicht mehr gelten, sondern man hat

$$\frac{\partial f(t, x)}{\partial t} = -\frac{\partial f(t, x)}{\partial x} \frac{dx}{dt} + R \quad (\text{F.8})$$

wobei R nun die Reaktionsterme beschreibt.

F.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

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

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

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

$$f_1(R, B) = r \cdot B - b \cdot B \cdot R \text{ und } f_2(R, B) = b \cdot B \cdot R - s \cdot R$$

jede für sich skalar ist.

Allgemein handelt es sich also bei einer vektorwertigen 2-dimensionalen Funktion um eine Funktion der Form:

$$f : \mathbb{R}^2 \longrightarrow \mathbb{R}^2 \quad (\text{F.9})$$

$$(x, y) \mapsto \begin{pmatrix} f_1(x, y) \\ f_2(x, y) \end{pmatrix}$$

Die Ableitung der Funktion F.9 ist durch die sogenannte Jacobimatrix gegeben:

$$J(x, y) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1(x, y)}{\partial x} & \frac{\partial f_1(x, y)}{\partial y} \\ \frac{\partial f_2(x, y)}{\partial x} & \frac{\partial f_2(x, y)}{\partial y} \end{pmatrix} \quad (\text{F.10})$$

Beispiel: $f(x, y) = (x^3 \cdot y, y^2 \cdot \sin(x))$

$$J(x, y) = \begin{pmatrix} 3x^2y & x^3 \\ y^2 \cdot \cos(x) & 2y \cdot \sin(x) \end{pmatrix}$$

G Stabilitätsanalyse autonomer Systeme (2D)*

Die Fixpunkte autonomer Systeme mit zwei Zustandsvariablen der Form

$$\begin{aligned}\dot{X} &= f(X, Y) \\ \dot{Y} &= g(X, Y)\end{aligned}\tag{G.1}$$

lassen sich bestimmen, indem

$$\begin{aligned}f(X, Y) &= 0 \\ g(X, Y) &= 0\end{aligned}\tag{G.2}$$

gesetzt wird, und die Lösungen (X^*, Y^*) dieses Gleichungssystems bestimmt werden.

Im Gegensatz zu eindimensionalen Systemen können im zweidimensionalen Fall aber auch 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. Bei autonomen Systemen mit zwei Zustandsvariablen läuft jede Lösung entweder

- auf einen Fixpunkt zu, oder
- nähert sich einer geschlossenen Bahn (Grenzkreis) an, oder
- läuft nach unendlich.

G.0.1 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

$$\begin{pmatrix} \dot{X} \\ \dot{Y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(X, Y) \\ g(X, Y) \end{pmatrix} \quad (\text{G.3})$$

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!!):

$$\begin{pmatrix} \dot{x} \\ \dot{y} \end{pmatrix} = J(X^*, Y^*) \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \quad (\text{G.4})$$

mit

$$J(X^*, Y^*) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f(X^*, Y^*)}{\partial X} & \frac{\partial f(X^*, Y^*)}{\partial Y} \\ \frac{\partial g(X^*, Y^*)}{\partial X} & \frac{\partial g(X^*, Y^*)}{\partial Y} \end{pmatrix} \quad (\text{G.5})$$

Die Matrix $J := J(X^*, Y^*)$ heißt Jacobi-Matrix. 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 G.4 ersetzt in der Nähe des Fixpunkts (X^*, Y^*) das kompliziertere nichtlineare System G.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.

Hat die Matrix J zwei verschiedene Eigenwerte λ_1 und λ_2 , so kann man eine allgemeine Lösung des linearen Systems G.4 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 eines Fixpunkts des Systems G.1 gilt:

1. Der Fixpunkt (X^*, Y^*) von G.1 ist asymptotisch stabil, falls alle Eigenwerte von negative Realteile besitzen .
2. Der Fixpunkt (X^*, Y^*) ist instabil, falls mindestens ein Eigenwert einen positiven Realteil besitzt.
3. Sind alle Realteile aller Eigenwerte kleiner oder gleich Null und mindestens ein Realteil gleich Null, so kann anhand der Linearisierung 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 **stabile 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. G.1 und Tab. G.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

$$\det(J - \lambda I) = 0$$

Man kann leicht ausrechnen, dass die Lösungen nur von der Spur

$$\tau = \frac{\partial f(X^*, Y^*)}{\partial X} + \frac{\partial g(X^*, Y^*)}{\partial Y} \quad (\text{G.6})$$

und Determinante

$$\Delta = \frac{\partial f(X^*, Y^*)}{\partial X} \cdot \frac{\partial g(X^*, Y^*)}{\partial Y} - \frac{\partial f(X^*, Y^*)}{\partial Y} \cdot \frac{\partial g(X^*, Y^*)}{\partial X} \quad (\text{G.7})$$

der Matrix J abhängen. Die Lösungen (Eigenwerte) lauten:

$$\lambda_{1,2} = \frac{\tau}{2} \pm \sqrt{\frac{\tau^2}{4} - \Delta} \quad (\text{G.8})$$

Aus Spur τ und Determinante Δ kann der Typ des Fixpunkts ermittelt, ohne die Eigenwerte (G.8) zu berechnen. Darauf basiert auch die Darstellung in der τ - Δ -

Ebene (Abbildung G.1). Die Darstellungen in Abbildung G.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 ?? eine Lupe benutzt, um die Umgebung des Fixpunkts zu untersuchen. In Tabelle

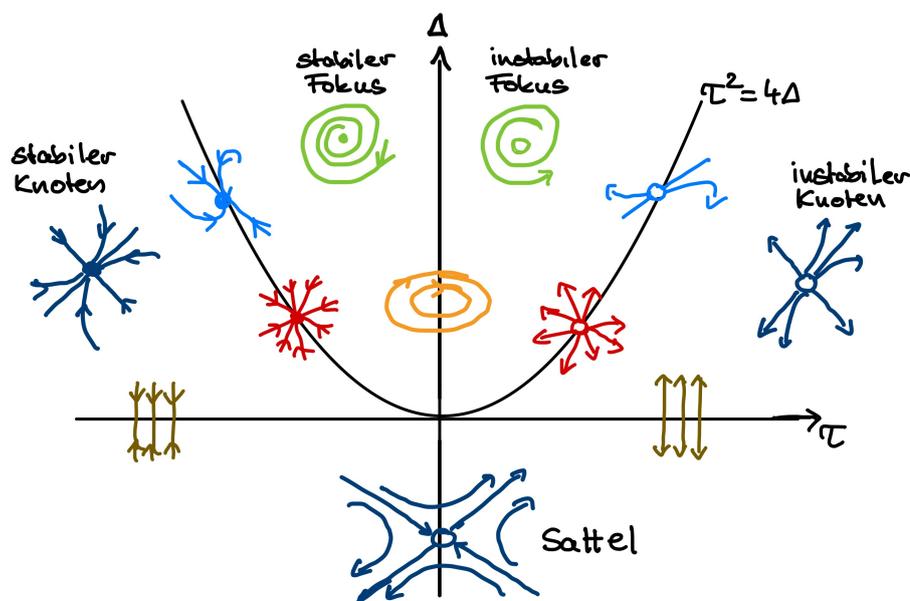


Abbildung G.1: Lage der Fixpunkte autonomer Systemen mit zwei Variablen in Abhängigkeit von der Spur τ und der Determinante Δ der Jacobi-Matrix. Benannt sind die 5 Hauptfälle. Die Grenzfälle sind der stabile und der instabile Stern (rot), das Zentrum (orange), der stabile und instabile degenerierte Knoten (hellblau) und die Grenzfälle, bei denen die Determinante verschwindet (braun).

G.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 (G.1) kann die Stabilität der marginal stabi-

$A \neq aI$	Determinante	Spur	Bezeichnung	Stabilität
$\lambda_{1,2}$ komplex, $\text{Re}(\lambda) < 0$	$\Delta > \tau^2/4$	$\tau < 0$	Fokus	stabil
$\lambda_{1,2}$ imaginär, $\text{Re}(\lambda) = 0$	$\Delta > \tau^2/4$	$\tau = 0$	Zentrum	marginal stabil
$\lambda_{1,2}$ komplex, $\text{Re}(\lambda) > 0$	$\Delta > \tau^2/4$	$\tau > 0$	Fokus	instabil
$\lambda_2 < \lambda_1 < 0$	$0 < \Delta < \tau^2/4$	$\tau < 0$	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
$0 < \lambda_2 < \lambda_1$	$0 < \Delta < \tau^2/4$	$\tau > 0$	Knoten	instabil
$\lambda_2 = \lambda_1 < 0$	$\Delta = \tau^2/4$	$\tau < 0$	degenerierter Knoten	stabil
$\lambda_2 = \lambda_1 = 0$	$\Delta = 0$	$\tau = 0$	lineare Bewegung	instabil
$\lambda_2 = \lambda_1 > 0$	$\Delta = \tau^2/4$	$\tau > 0$	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 G.1: Phänomenologie der Fixpunkte autonomer Systemen mit zwei Variablen in Abhängigkeit von den Eigenwerten λ der Jacobi-Matrix J .

len 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.

H Vergleich der Stabilitätsanalyse diskreter und kontinuierlicher linearer Modelle*

Das DGL-System

$$\dot{x} = A \cdot x \quad A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \quad (\text{H.1})$$

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:

$$x(t) = C_1^A \cdot e^{\lambda_1^A \cdot t} \cdot \vec{v}_1^A + C_2^A \cdot e^{\lambda_2^A \cdot t} \cdot \vec{v}_2^A$$

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 H.1 zugehörige diskrete System lautet

$$\dot{x}_n = x_{n-1} + A \cdot x_{n-1} = (I + A) \cdot x_{n-1} \quad (\text{H.2})$$

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:

$$x_n = c_1 \cdot \lambda_1^n \cdot \vec{v}_1 + c_2 \cdot \lambda_2^n \cdot \vec{v}_2$$

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.

Damit ist der Fixpunkt $x^* = (0, 0)$ stabil, wenn $|\lambda_{1,2}| < 1$

Die Eigenwerte der Matrix $I + A$ lauten:

$$\begin{aligned}\lambda_{1,2} &= \frac{(a+1) + (d+1)}{2} \pm \sqrt{\frac{((a+1) + (d+1))^2}{4} - ((a+1)(d+1) - bc)} \\ &= 1 + \frac{a+d}{2} \pm \sqrt{\frac{(a+d)^2}{4} - (ad - bc)} \\ &= 1 + \lambda_{1,2}^A\end{aligned}$$

Damit ist der Zustand $x^* = (0, 0)$ des diskreten Systems stabil, genau dann, wenn die Eigenwerte des kontinuierlichen Systems negativ sind.

Zusammenhang der allgemeinen Lösungen

$$\begin{aligned}x_n &= C_1 \cdot \lambda_1^n \cdot \vec{v}_1 + C_2 \cdot \lambda_2^n \cdot \vec{v}_2 \\ &= C_1 \cdot e^{n \cdot \ln(\lambda_1)} \cdot \vec{v}_1 + C_2 \cdot e^{n \cdot \ln(\lambda_2)} \cdot \vec{v}_2 \\ &= C_1 \cdot e^{n \cdot \ln(1 + \lambda_1^A)} \cdot \vec{v}_1 + C_2 \cdot e^{n \cdot \ln(1 + \lambda_2^A)} \cdot \vec{v}_2 \\ &\approx C_1 \cdot e^{n \cdot \lambda_1^A} \cdot \vec{v}_1 + C_2 \cdot e^{n \cdot \lambda_2^A} \cdot \vec{v}_2\end{aligned}$$

I Pseudo-Code Programme

I.1 Cantor-Menge

```
' Initialisierung
randomize(1)
cls
'Skalierungsfaktor fuer die Ausgabe
scale=400
'Anzahl der Schritte
N=100
'Startpunkt
x =2/3
for j = 1 to N
'Zufallszahl erzeugen (1 oder 2)
  p=int(2*rnd)+1
  if p=1 then
    x=x/3
  else
    x=2/3+x/3
  endif
' Linie zeichnen
  line 100+scale* x,100,100+scale* x,200, color p
next j
end
```

I.2 Sierpinski-Dreieck

```
' Initialisierung
randomize(1)
cls
'Skalierungsfaktor fuer die Ausgabe
scale=4
'Anzahl der Schritte
N=10000
'Eckpunkte
DIM px(3)
DIM py(3)
px(1)=0
py(1)=0
px(2)=100
py(2)=0
px(3)=50
py(3)=87
'Startpunkt
x =50
y =50
for j = 1 to N
  'Zufallszahl erzeugen (1,2 oder 3)
  p=int(3*rnd)+1
  x=(x+px(p))/2
  y=(y+py(p))/2
  pset 100+scale*x,400 -scale*y color p
next j
end
```

I.3 Farn

```
scale=50
' Startwert
xalt = 1
yalt = 0
' Wahrscheinlichkeiten (Summe=1)
w1=0.79
w2=0.1
w3=0.1
w4=0.01

FOR i = 1 to 100000
q = rnd
  IF q<w1 THEN
    x = .85*xalt + .04*yalt
    y = -.04*xalt + .85*yalt + 1.6
  ELSEIF q<w1+w2 THEN
    x = .2*xalt - .26*yalt
    y = .23*xalt +.22*yalt + 1.6
  ELSEIF q<w1+w2+w3 THEN
    x = -.15*xalt + .28*yalt
    y = .26*xalt +.24*yalt + .44
  ELSE
    x=0
    y=0.16*yalt
  ENDIF

  pset 300+scale*x,600-scale*y color 2
  xalt=x
  yalt=y
NEXT i
END
```

I.4 Mandelbrot-Menge

```
' Iteration c=c*c+c
' c=c_re +c_im
cls
scale=200
minx=-2
maxx=0.5
miny=-1.2
maxy=1.2
acc=50
fine=0.005
FOR c_im=miny to maxy step fine
  FOR c_re=minx to maxx step fine
    ' Iterationsstartwert
    zx=c_re
    zy=c_im
    count=0
    WHILE (zx*zx+zy*zy<4) AND count<acc
      tempx=zx*zx-zy*zy+c_re
      zy=2*zx*zy+c_im
      zx=tempx
      count=count+1
    WEND
    if count>=acc THEN
      PSET 500+scale*c_re,250- scale*c_im
    endif
  NEXT
NEXT
END
```

Literaturverzeichnis

- [CSSE 2020] CSSE 2020. Center for Systems Science and Engineering. Johns Hopkins University, COVID-19 Data Repository
<https://github.com/CSSEGISandData/COVID-19>
- [IPCC2014] IPCC 2014: Klimaänderung 2013: Naturwissenschaftliche Grundlagen. Häufig gestellte Fragen und Antworten ? Teil des Beitrags der Arbeitsgruppe I zum Fünften Sachstandsbericht des Zwischenstaatlichen Ausschusses für Klimaänderungen (IPCC) [T.F. Stocker, D. Qin, G.-K. Plattner, M. Tignor, S.K. Allen, J. Boschung, A. Nauels, Y. Xia, V. Bex und P.M. Midgley (Hrsg.)]. Deutsche Übersetzung durch die deutsche IPCC-Koordinierungsstelle und Klimabüro für Polargebiete und Meeresspiegelanstieg, Bonn, 2017. <https://www.deutsches-klima-konsortium.de/de/klimafaq-3-3.html>
- [IPCC2021] IPCC, 2021: Summary for Policymakers. In: Climate Change 2021: The Physical Science Basis. Contribution of Working Group I to the Sixth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change [Masson-Delmotte, V., P. Zhai, A. Pirani, S. L. Connors, C. Péan, S. Berger, N. Caud, Y. Chen, L. Goldfarb, M. I. Gomis, M. Huang, K. Leitzell, E. Lonnoy, J.B.R. Matthews, T. K. Maycock, T. Waterfield, O. Yelekçi, R. Yu and B. Zhou (eds.)]. Cambridge University Press. In Press.
- [Heiden 2020] an der Heiden M, Buchholz U (2020). Modellierung von Beispielszenarien der SARS-CoV-2-Epidemie 2020 in Deutschland. DOI 10.25646/6571.2
- [Kermack& McKendrick 1927] Kermack, WO and McKendrick, AG (1927). A Contribution to the Mathematical Theory of Epidemics. Proc. Roy. Soc. Lond. A 115, 700-721.
- [Lotka 1925] Lotka, AJ (1925). Elements of Physical Biology. Williams and Wilkins.
- [Volterra 1926] Volterra, V (1926). Variazioni e fluttuazioni del numero d'individui in specie animali conviventi. Mem. Acad. Lincei Roma. 2: 31–113.
- [Redfield 1934] Redfield, AC (1934). On the proportions of organic derivations in sea water and their relation to the composition of plankton. In: James John-

stone Memorial Volume. Hrsg. von R. J. Daniel. University Press of Liverpool, 176–192.

[Rosenzweig & MacArthur 1963] Rosenzweig, ML & MacArthur, RH (1963). Graphical representation and stability conditions of predator-prey interactions. *American Naturalist*. 97 (895): 209–223. doi:10.1086/282272.

[Sommer2005] Sommer U (2005), *Biologische Meereskunde* 2. Auflage 2005, Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, ISBN 3-540-23057-2.

[Wolfram 2002] Wolfram S (2002). *A New Kind of Science*
<https://www.wolframscience.com/nks/>

[Zeebe 2001] Zeebe R und Wolf-Gladrow D (2001) *CO₂ in Seawater: Equilibrium, Kinetics, Isotopes*. Elsevier Oceanography Book Series Amsterdam, ISBN 0-444-50946-1