

## Kapitel 2

# Grundprinzipien der Mathematischen Modellierung

Im folgenden diskutieren wir einige Grundprinzipien mathematischer Modellierung und des Arbeitens mit mathematischen Modellen. Ausführlichere Darstellung dieser Inhalte findet man in [13, 15].

### 2.1 Modellierungszyklus

Der Zyklus der mathematischen Modellierung läuft im allgemeinen wie folgt ab:

1. Verständnis des realen Problems.
2. Wahl der Skalen und der entsprechenden mathematischen Beschreibung.
3. Entwicklung eines mathematischen Modells.
4. Sensitivitätsanalyse und eventuelle Vereinfachung des Modells.
5. Numerische Simulation des Modells.
6. Interpretation der Lösung.
7. Vergleich der Lösung mit realen Daten.
8. Falls nötig, Verfeinerung des Modells oder (optimale) Änderung von Parametern.

Nicht zu vernachlässigen ist auch ein weiterer, abschliessender Schritt, nämlich die Präsentation der Ergebnisse.

Mathematische Modellierung ist keine Einbahnstrasse. Die Modellierung verfolgt meist das klare Ziel durch besseres Verständnis gezielt in den Prozess eingreifen zu können. Dies kann durch die Anpassung von Parametern (Kontrolle) oder überhaupt durch Auslegung eines neuen Prozesses (Design) erfolgen. Deshalb werden sich in der Praxis die obigen Schritte stark gegenseitig (und nicht nur in aufsteigender Richtung) beeinflussen. So kann zum Beispiel die numerische Simulation und Interpretation der Lösung zum besseren Verständnis des Verhaltens des ursprünglichen Problems beitragen, oder auch dazu führen dass man die ursprüngliche Wahl der Skalen und des Modells korrigieren muss. Der gesamte Modellierungszyklus mit seinen Wechselwirkungen ist in Abbildung 2.1 dargestellt.

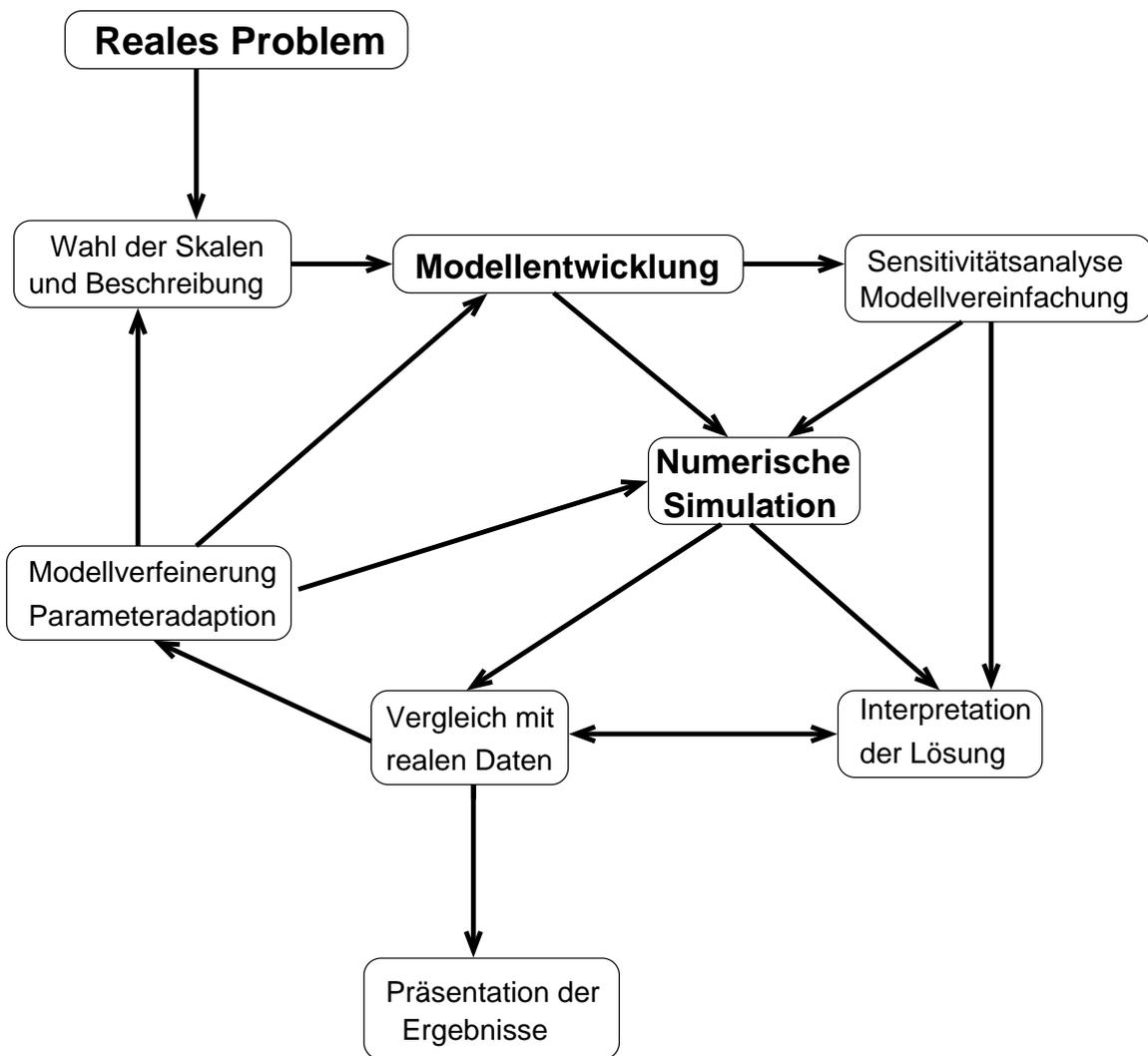


Abbildung 2.1: Schematische Darstellung des Modellierungszyklus.

Der Vergleich mit realen Daten ermöglicht es oft, Fehlerquellen zu finden und zu eliminieren. Diese können von Modellierungsfehlern über Fehler bei der numerischen Berechnung (Diskretisierungsfehler, Verfahrensfehler, Rundungsfehler) bis hin zu Programmierfehlern bei der Implementierung reichen. Um diese effizient aufspüren zu können ist es wichtig, geeignete (einfache) Testfälle zu betrachten.

Für die weitere Diskussion der einzelnen Schritte werden wir nun ein “generisches Modell” verwenden, d.h., eine Abbildung der Form

$$y = \mathcal{M}(x(p); p), \quad (2.1)$$

wobei  $\mathcal{M} : \mathcal{X} \times \mathcal{P} \rightarrow \mathcal{Y}$  eine Abbildung zwischen Mengen in (möglicherweise unendlichdimensionalen) Banachräumen ist. Wir werden  $x \in \mathcal{X}$  als die *Variablen*,  $y \in \mathcal{Y}$  als Output, und  $p \in \mathcal{P}$  als externe *Parameter* betrachten. Wir betrachten das Modell zunächst als abstrakte Abbildungsvorschrift, in der Praxis wird die Auswertung des Operators  $\mathcal{M}$  aber die Lösung von Gleichungssystemen, Optimierungsproblemen, oder stochastische Simulationen erfordern, aus denen man die Variablen  $x(p)$  bestimmt.

## 2.2 Dimensionlose Variable und Skalierung

Ein wichtiger erster Schritt bei der Betrachtung eines realen Modells ist Überführung in eine dimensionslose Form und eine geeignete Skalierung. Die Variablen und Parameter in einem Modell haben im allgemeinen eine (physikalische) Dimension und es kann nur im Vergleich mit anderen auftretenden Grössen entschieden werden, ob ein Wert gross oder klein ist. Eine Länge von einem Millimeter ist zum Beispiel für die Simulation der Wärmeleitung in einem Wohnraum relativ klein, für die Simulation eines modernen Halbleitertransistors aber riesig. Um absolute Grössen zu erhalten, ist es wichtig alle auftretenden Grössen richtig zu skalieren.

Sei nun  $x_i \in \mathbb{R}$  eine Komponente der Variablen, dann kann man die Skalierung als eine Variablentransformation der Form

$$\tilde{x}_i = f_i(x_i)$$

mit einer geeigneten bijektiven Funktion  $f_i : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  betrachten. Optimalerweise sollte für in der Praxis auftretende Werte von  $x_i$  immer  $\tilde{x}_i \approx 1$  oder  $|\tilde{x}_i| \leq 1$  gelten. Um dies zu erreichen, muss man *typische Werte* der Variable  $x_i$  abschätzen, was meist eine grundlegende Einsicht in die Physik des Problems erfordert.

Die neue Variable  $\tilde{x}_i$  heisst *dimensionslos*, falls  $f_i(x)$  keine physikalische Dimension hat. Die einfachste und häufigst eingesetzte Art der Skalierung ist eine affin-lineare, d.h.

$$\tilde{x}_i = a_i x_i + b_i,$$

mit Konstanten  $a_i, b_i \in \mathbb{R}$ . Dabei hat  $b_i$  keine physikalische Dimension und  $a_i^{-1}$  die selbe Dimension wie  $x_i$ , man wählt dann  $a_i$  als einen typischen Wert oder Maximalwert von  $x_i$ .

In der gleichen Weise wie die Variablen  $x_i$  kann man auch den Output  $y_j$  (und folglich die Abbildung  $\mathcal{M}$  skalieren und in dimensionslose Form  $\tilde{y}_j$  transformieren. Für die Parameter  $p_k$  bleibt dann weniger Freiheit, bei richtiger Skalierung erhält man automatisch dimensionslose Parameter  $\tilde{p}_k$ . Dies werden wir an einem einfachen Beispiel erläutern.

**Beispiel 2.1.** Wir betrachten den Flug eines (sehr kleinen) Balls, der über einer Ebene (mit Normale  $(0, 0, 1)$ ) mit einer Kraft  $\mathbf{V} = (V_1, V_2, V_3)$  abgeschossen wird und wollen als Output

seine maximal erreichte Höhe und die Entfernung bis zum Auftreffen auf der Ebene berechnen. Dazu führen wir zunächst die Zeit  $t \in \mathbb{R}$  und die zeitabhängigen Variablen  $(x_1, x_2, x_3)$  ein, um die Ortskoordinaten des Balls zu bestimmen (wir ignorieren seinen Radius und betrachten den Ball einfach als Massepunkt). Wir wählen die Zeitskala und die Anfangswerte so, dass

$$\mathbf{x}(0) = (x_1(0), x_2(0), x_3(0)) = (0, 0, 0)$$

und

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt}(0) = \left( \frac{dx_1}{dt}(0), \frac{dx_2}{dt}(0), \frac{dx_3}{dt}(0) \right) = \mathbf{V} = (V_1, V_2, V_3)$$

gilt.

Aus den Newton'schen Bewegungsgleichungen erhalten wir dann (es wirkt nur die Schwerkraft)

$$\text{Masse} \times \text{Beschleunigung} = m \frac{d^2\mathbf{x}}{dt^2} = \text{Kraft} = -mg \frac{R^2}{(x_3(t) + R)^2} (0, 0, 1),$$

wobei  $m$  die Masse des Balls,  $g$  die Erdbeschleunigung und  $R$  der Erdradius ist. Um den Output zu berechnen benötigen wir noch Variablen  $T_1, T_2$  und die Gleichungen

$$\frac{dx_3}{dt}(T_1) = 0, \quad x_3(T_2) = 0$$

um diese zu bestimmen. Der Output ist dann gegeben durch

$$y_1 = x_3(T_1), \quad y_2 = \sqrt{x_1(T_2)^2 + x_2(T_2)^2}.$$

Zusammenfassend hat das Modell also die Variablen  $t, T_1, T_2$ , und  $\mathbf{x}(t)$ , die Parameter  $m, g, R$ , und  $\mathbf{V}$ , sowie den Output  $y_1, y_2$ . Wir beginnen nun die Skalierung mit den Zeitvariablen und führen eine typische Zeitskala  $\tau$  ein. Die transformierten dimensionslosen Variablen erhalten wir als

$$(\tilde{t}, \tilde{T}_1, \tilde{T}_2) = \tau^{-1}(t, T_1, T_2).$$

In gleicher Weise skalieren wir die Ortvariable mittels typischer Längen  $\ell_i$  als

$$\tilde{x}_i(\tilde{t}) = \tilde{x}_i(\tau^{-1}t) = \ell_i^{-1}x_i(t).$$

Durch die Umskalierung der Zeit ändert sich auch die Zeitableitung, die wir mittels Kettenregel als

$$\frac{d\tilde{x}_i}{d\tilde{t}} = \frac{d(\ell_i^{-1}x_i)}{dt} \frac{dt}{d\tilde{t}} = \frac{\tau}{\ell_i} \frac{dx_i}{dt}$$

berechnen. Setzen wir diese Identität in die Formel für den Anfangswert ein, so erhalten wir

$$\frac{d\tilde{x}_i}{d\tilde{t}}(0) = \frac{\tau}{\ell_i} \frac{dx_i}{dt} = \frac{\tau}{\ell_i} V_i.$$

D.h., aus der Skalierung der Orts- und Zeitvariablen erhalten wir automatisch die dimensionslosen Geschwindigkeiten  $\frac{\tau V_i}{\ell_i}$ . In diesem Fall sind die gegebenen Werte aber die Geschwindigkeiten und wir kennen eigentlich keine typischen Längen, sodass wir die Skalierung als  $\ell_i = \tau V_i$  wählen. Dies ist unmittelbar einleuchtend, denn wenn die Geschwindigkeit in eine Richtung

doppelt so gross ist wie in eine andere, wird der Ball auch ungefähr die doppelte Länge in dieser Richtung zurcklegen. Die dimensionslosen Anfangsbedingungen sind nun einfach

$$\frac{d\tilde{x}_i}{dt}(0) = 1.$$

Durch Anwendung der Kettenregel auf die zweiten Ableitungen der Bewegungsgleichung erhalten wir

$$\frac{d^2\tilde{x}_i}{d\tilde{t}^2} = \frac{\tau^2}{\ell_i} \frac{d^2x_i}{dt^2},$$

und damit die dimensionslosen Bewegungsgleichungen

$$\frac{d^2\tilde{x}_i}{d\tilde{t}^2}(\tilde{t}) = 0, \quad i = 1, 2$$

und

$$\frac{d^2\tilde{x}_3}{d\tilde{t}^2}(\tilde{t}) = -\frac{g\tau^2}{\ell_3} \frac{R^2}{(\ell_3^2\tilde{x}_3(\tilde{t}) + R)^2} = -\frac{\alpha}{(\beta\tilde{x}_3(\tilde{t}) + 1)^2},$$

mit den dimensionslosen Parametern  $\alpha = \frac{g\tau^2}{\ell_3}$  und  $\beta = \frac{\ell_3^2}{R^2}$ . Wir haben nun noch die Freiheit, die typische Zeiteinheit  $\tau$  zu wählen und können dies so realisieren, dass  $\alpha = 1$  gilt. Daraus erhalten wir dann mit den obigen Gleichungen für  $\ell_i$

$$\tau = \frac{V_3}{g}, \quad \ell_i = \frac{V_3 V_i}{g}.$$

Man beachte, dass man aus der Skalierung automatisch Information über typische Orts- und Zeitskalen in Abhängigkeit der gegebenen Parameter (hier der Geschwindigkeiten und Erdbeschleunigung bekommt). Andererseits ist diese Wahl nicht eindeutig, wir hätten auch eine Skalierung so wählen können, dass  $\beta = 1$  gilt.

Für den Output können wir die natürlichen Skalierungen

$$\tilde{y}_1 = \ell_3^{-1} y_1, \quad \tilde{y}_2 = \min\{\ell_1^{-1}, \ell_2^{-1}\} y_2$$

verwenden. Nehmen wir an, das  $\ell_2 < \ell_1$  gilt, dann ist

$$\tilde{y}_1 = \tilde{x}_3(\tilde{T}_1), \quad \tilde{y}_2 = \sqrt{\tilde{x}_1(\tilde{T}_2)^2 + \gamma \tilde{x}_2(\tilde{T}_2)^2},$$

mit  $\gamma = \frac{\ell_2^2}{\ell_1^2} < 1$ .

Im resultierenden dimensionslosen System treten nur mehr die (dimensionslosen) Parameter  $\beta = \frac{V_3^4}{R^2 g^2}$  und  $\gamma = \frac{V_2^2}{V_1^2}$  auf, d.h. die Anzahl der Parameter reduziert sich von ursprünglich sechs auf zwei. So ein Verhalten ist typisch, es gibt fast immer redundante Parameter (hier die Masse  $m$ ) bzw. weitere die man durch die Skalierung eliminiert. Die am Ende auftretenden Parameter sind fast immer relative Grössen zwischen den ursprünglichen Parametern, man nennt sie *effektive Parameter*.

## 2.3 Sensitivitätsanalyse

Ein weiterer wichtiger Aspekt der Modellierung ist die Sensitivitätsanalyse. Man betrachtet dabei die Sensitivität des Systems bezüglich der Parameter  $p$ . Im speziellen ist man daran interessiert, wie sich der Output des Modells bei kleinen Variationen der Parameter ändern wird.

Wenn wir ein generisches Modell mit Parametern  $p$  betrachten, so können wir den Output auch als Funktion der Parameter betrachten, d.h.,  $y = y(p)$ . Bei einer kleinen Variation  $\Delta p$  der Parameter können wir die Änderung des Outputs gut durch eine Taylor-Approximation erster Ordnung beschreiben, d.h.,

$$y(p + \Delta p) \approx y(p) + \frac{\partial y}{\partial p}(p)\Delta p.$$

Für die relative Änderung haben wir dann die Abschätzung

$$\frac{\|\Delta y\|}{\|\Delta p\|} = \frac{\|y(p + \Delta p) - y(p)\|}{\|\Delta p\|} \preceq \left\| \frac{\partial y}{\partial p}(p) \right\|.$$

Damit können wir die relative Änderung erster Ordnung durch die Grösse der Ableitung nach dem Parameter abschätzen, man nennt diese deshalb auch *Sensitivität*.

Wir betrachten eine Sensitivitätsanalyse für das obige Beispiel 2.1 bezüglich einer Änderung der Geschwindigkeiten  $V_i$ . Wir beginnen mit der Sensitivität des Outputs  $y_1$  bezüglich der vertikalen Anfangsgeschwindigkeit  $V_3$ . Für die Variation gilt

$$\frac{\partial y_1}{\partial V_3} = \frac{\partial x_3}{\partial V_3}(T_1) + \frac{\partial x_3}{\partial t}(T_1) \frac{\partial T_1}{\partial V_3} = \frac{\partial x_3}{\partial V_3}(T_1).$$

Weiters können wir Anfangsbedingungen und Bewegungsgleichung bezüglich  $V_3$  differenzieren, dies liefert

$$\frac{\partial x_3}{\partial V_3}(0) = 0, \quad \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial x_3}{\partial V_3}(0) = 1,$$

und

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \frac{\partial x_3}{\partial V_3} = 2g \frac{R^2}{(x_3 + R)^3} \frac{\partial x_3}{\partial V_3}.$$

Dieses System können wir als Anfangswertproblem für die Funktion  $u(t) := \frac{\partial x_3}{\partial V_3}(t)$  sehen und da wir einen Anfangswert der Grössenordnung 1 haben, müssen wir auch mit

$$\left\| \frac{\partial y_1}{\partial V_3} \right\| = \|u(T_1)\| = \mathcal{O}(1)$$

rechnen. Dies bedeutet, dass  $V_3$  einen starken Einfluss auf  $y_1$  hat, was physikalisch unmittelbar einleuchtet, denn der Ball wird umso höher fliegen, umso schneller er in die vertikale Richtung abgeschossen wird.

Analog können wir die Sensitivität bezüglich  $V_1$  betrachten. Dabei erhalten wir

$$\frac{\partial x_3}{\partial V_1}(0) = 0, \quad \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial x_3}{\partial V_1}(0) = 0,$$

und

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \frac{\partial x_3}{\partial V_1} = 2g \frac{R^2}{(x_3 + R)^3} \frac{\partial x_3}{\partial V_1}.$$

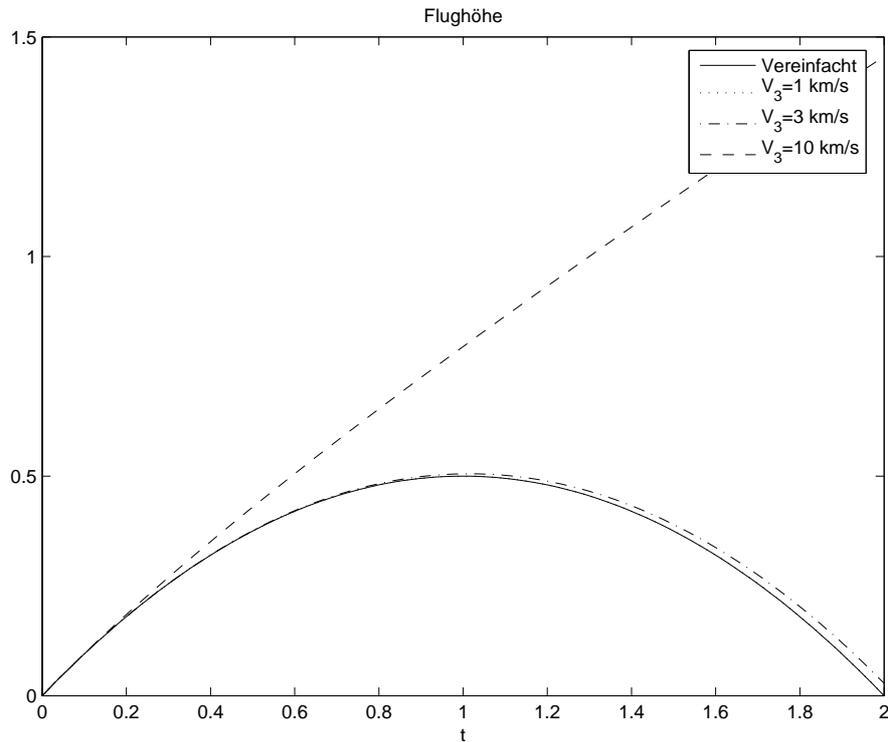


Abbildung 2.2: Lösung in Beispiel 2.1 für verschiedene Werte von  $\beta$ .

Dies ist ein homogenes Anfangswertproblem für  $u(t) := \frac{\partial x_3}{\partial V_1}(t)$ , woraus  $u \equiv 0$  folgt. Daraus erhalten wir

$$\left\| \frac{\partial y_1}{\partial V_1} \right\| = \|u(T_1)\| = 0,$$

d.h., die Flughöhe hängt nicht von der Anfangsgeschwindigkeit  $V_1$  ab, was ebenfalls physikalisch klar ist.

## 2.4 Modellvereinfachung: Ballwurf

Sehr häufig enthalten Modelle Terme, die das Ergebnis nicht stark beeinflussen, aber die (numerische) Lösung des Modells erschweren. In solchen Fällen ist es wünschenswert, Modelle durch Weglassen dieser Terme zu vereinfachen.

Im speziellen vereinfacht man Modelle durch Eliminieren kleiner Terme und Parameter. Um entscheiden zu können, welche Terme klein sind, muss man das Problem geeignet skalieren, wie wir oben gesehen haben. Danach sieht man, welche Terme mit kleinen Parametern multipliziert werden und weggelassen werden können.

Wir illustrieren die Modellvereinfachung wieder für Beispiel 2.1. In der skalierten Version treten nur die Parameter  $\beta$  und  $\gamma$  auf. Im allgemeinen wird man vermuten, dass die Höhe des Balls klein im Vergleich zum Erdradius ist. Dieser Fall tritt ein für  $V_3^2 \ll Rg$  und damit  $\beta \ll 1$ . Da  $\beta$  nun nur skalierte Terme multipliziert, können wir auch folgern, dass  $\beta|\tilde{x}_i| \ll 1$

und damit  $\beta\tilde{x}_i + 1 \approx 1$  gilt. Also vereinfachen wir die Bewegungsgleichung zu

$$\frac{d^2\tilde{x}_3}{d\tilde{t}^2} = -1$$

und erhalten die explizite Lösung  $\tilde{x}_3 = \tilde{t} - \frac{\tilde{t}^2}{2}$ , sowie  $T_1 = \frac{V_3}{g}$  und  $y_1 = \frac{V_3^2}{2g}$ . Zum Vergleich des vereinfachten mit dem ursprünglichen Modell zeigt Abbildung 2.2 die Flughöhe aus dem vereinfachten Modell und die numerische Simulation des ursprünglichen Modells für drei verschiedene Werte der Anfangsgeschwindigkeit. Man erkennt, dass die Vereinfachung bis zu einer Anfangsgeschwindigkeit von 1km/s sehr gut das Modell approximiert. Bei 3km/s kommt es zu einer sichtbaren aber noch akzeptablen Abweichung vom Modell im Verlauf der Zeit, während das Verhalten bei 10km/s bereits völlig unterschiedlich ist.

## 2.5 Modellhierarchien: Chemische Reaktionskinetik

Wir betrachten nun ein klassisches Beispiel aus der Chemie, nämlich die Modellierung von Reaktionen. Wir betrachten zwei Stoffe A und B (z.B. O und CO) und einen Stoff AB, der aus den beiden besteht. Zwei Moleküle von A und B können sich zu AB verbinden, umgekehrt kann AB aber wieder zu A und B zerfallen. Die Modellierung der Reaktion basiert meist auf Poisson-Prozessen, d.h. die Wahrscheinlichkeit dass ein Molekül A und ein Molekül B in einem infinitesimalen Zeitintervall  $(t, t+dt)$  reagieren, ist  $k_+dt$  für eine Reaktionsrate  $k_+$ . Umgekehrt ist die Wahrscheinlichkeit für den Zerfall eines Moleküls AB in diesem Zeitintervall gleich  $k_-dt$ . Damit hat man auch gleich ein erstes mikroskopisches Modell, da alle Möglichkeiten als stochastische Prozesse eindeutig beschrieben sind. Zur Vorhersage von Dichten scheint so ein Modell jedoch ziemlich unbrauchbar, da es mit einem enormen Simulationsaufwand verbunden ist.

Als nächstgrößeren Schritt in der Modellhierarchie werden wir asymptotisches Modell betrachten, das wieder in natürlicher Weise auf partielle Differentialgleichungen führt. Wir werden versuchen die Evolution der Wahrscheinlichkeit  $p(\ell, m, n, t)$  zu berechnen, die das Ereignis zum Zeitpunkt  $t$  genau  $\ell$  Teilchen A,  $m$  Teilchen B und  $n$  Teilchen AB zu finden beschreibt. Dies erscheint auf den ersten Blick genauso schwer wie das mikroskopische stochastische Modell, da man ausgehend von einem Zustand zum Anfangszeitpunkt (als  $t = 0$  gewählt) alle möglichen Reaktionen betrachten müsste, die zum Zustand  $(\ell, m, n)$  zum Zeitpunkt  $t$  führen. Wir werden jedoch zwei Eigenschaften verwenden, die ein gängiges Modellierungsprinzip darstellen, und in natürlicher Weise auf Differentialgleichungen führen:

- Die *Markov-Eigenschaft* von Poisson-Prozessen, d.h. der Zustand zur Zeit  $t + \Delta t$  hängt nur vom Zustand zur Zeit  $t$  ab, und von den möglichen Reaktionen in einem Zeitintervall der Länge  $\Delta t$ . Dies erlaubt den Prozess auf einem nur sehr kurzen Zeitintervall zu betrachten.
- Ein geeigneter Grenzwert  $\Delta t \rightarrow 0$ , der es erlaubt die vielen Möglichkeiten von Reaktionen dramatisch zu verringern. Die Wahrscheinlichkeit einer Reaktion in einem solchen Zeitintervall ist proportional zu  $\Delta t$ , während die Wahrscheinlichkeit für zwei oder mehr Reaktionen schon von der Ordnung  $\Delta t^2$  ist und damit typischerweise vernachlässigt werden kann.

- Eine kontinuierliche Asymptotik in  $\ell$ ,  $m$ , und  $n$ , die eine Taylor-Entwicklung und wieder die Vernachlässigung von Termen höherer Ordnung erlaubt. Hier spielt wieder die Skalierung eine wichtige Rolle, da man ja kaum einen Ausdruck wie  $p(\ell + 1, m + 1, n - 1)$  um  $(\ell, m, n)$  entwickeln wird und dann auch noch Restglieder vernachlässigen kann. Man wird eher zu einer skalierten Funktion

$$q\left(\frac{\ell}{N}, \frac{m}{N}, \frac{2n}{N}, t\right) = p(\ell, m, n, t)$$

übergehen, wobei  $N$  die Gesamtzahl der beteiligten Moleküle (bzw. eine typische Grösse dafür) ist. Ein Schritt der Grösse eins in  $p$  entspricht dann einem Schritt der Grösse  $\frac{1}{N}$  in  $q$ . Und da bei chemischen Reaktionen die Anzahl der Moleküle immer gross, in den meisten Anwendungen extrem gross ist, machen sowohl die kontinuierliche Näherung als auch die Taylor-Entwicklung Sinn.

Wir betrachten nun die Wahrscheinlichkeit den Zustand  $(\ell, m, n)$  zur Zeit  $t + \Delta t$  zu finden. Es gibt drei Übergänge vom Zeitpunkt  $t$ , die mit weniger als zwei Reaktionen und damit einer Wahrscheinlichkeit niedrigerer Ordnung als  $\Delta t^2$  möglich sind:

1. Der Zustand  $(\ell + 1, m + 1, n - 1)$  bei einer Reaktion von  $A$  und  $B$  zu  $AB$ . Da wir dann  $(\ell + 1)(m + 1)$  Möglichkeiten zur Auswahl zweier solcher Moleküle haben, ist die Wahrscheinlichkeit für diesen Übergang

$$P(\{(\ell + 1, m + 1, n - 1) \rightarrow (\ell, m, n)\}) = (\ell + 1)(m + 1)k_+\Delta t + \mathcal{O}(\Delta t)^2$$

2. Der Zustand  $(\ell - 1, m - 1, n + 1)$  beim Zerfall eines  $AB$  Moleküls. Da wir  $n + 1$  solche Moleküle zur Verfügung haben, ist die Wahrscheinlichkeit für diesen Übergang

$$P(\{(\ell - 1, m - 1, n + 1) \rightarrow (\ell, m, n)\}) = (n + 1)k_-\Delta t + \mathcal{O}(\Delta t)^2$$

3. Der Zustand  $(\ell, m, n)$  auch zur Zeit  $t$ , und keine Reaktion im Zeitintervall  $(t, t + \Delta t)$ . Die Wahrscheinlichkeit dafür ist

$$P(\{(\ell, m, n) \rightarrow (\ell, m, n)\}) = 1 - \ell m k_+ \Delta t - n k_- \Delta t + \mathcal{O}(\Delta t)^2$$

Also folgern wir

$$\begin{aligned} p(\ell, m, n, t + \Delta t) &= p(\ell + 1, m + 1, n - 1, t)(\ell + 1)(m + 1)k_+\Delta t + \\ & p(\ell - 1, m - 1, n + 1, t)(n + 1)k_-\Delta t + \\ & p(\ell, m, n, t)(1 - \ell m k_+ \Delta t - n k_- \Delta t) + \mathcal{O}(\Delta t)^2. \end{aligned}$$

Einfaches Umstellen impliziert

$$\begin{aligned} \frac{p(\ell, m, n, t + \Delta t) - p(\ell, m, n, t)}{\Delta t} &= p(\ell + 1, m + 1, n - 1, t)(\ell + 1)(m + 1)k_+ + \\ & p(\ell - 1, m - 1, n + 1, t)(n + 1)k_- - \\ & p(\ell, m, n, t)(\ell m k_+ + n k_-) + \mathcal{O}(\Delta t) \end{aligned}$$

und damit die sogenannte *Master-Gleichung* im Grenzwert  $\Delta t \rightarrow 0$

$$\begin{aligned} \frac{\partial p}{\partial t}(\ell, m, n, t) &= p(\ell + 1, m + 1, n - 1, t)(\ell + 1)(m + 1)k_+ + \\ &\quad p(\ell - 1, m - 1, n + 1, t)(n + 1)k_- - \\ &\quad p(\ell, m, n, t)(\ell m k_+ + n k_-) \end{aligned}$$

Nun approximieren wir die Differenzenoperatoren im Ort noch durch partielle Ableitungen um eine asymptotische Differentialgleichung zu erhalten. Dazu verwenden wir die reskalierte Dichte  $q$  und wählen  $N = \ell + m + 2n$ . Da die Gesamtzahl der Moleküle  $A$  und  $B$  erhalten bleibt, ist  $N$  konstant in der Zeit. Als neue Variable wählen wir die Konzentrationen  $x = \frac{\ell}{N}$ ,  $y = \frac{m}{N}$  und  $z = \frac{2n}{N}$ . Es gilt dann

$$\begin{aligned} \frac{\partial q}{\partial t}(x, y, z, t) &= q(x + \frac{1}{N}, y + \frac{1}{N}, z - \frac{1}{N}, t)(x + \frac{1}{N})(y + \frac{1}{N})N^2k_+ + \\ &\quad q(x - \frac{1}{N}, y - \frac{1}{N}, z + \frac{1}{N}, t)(z + \frac{1}{N})Nk_- - \\ &\quad q(x, y, z, t)(xyN^2k_+ + zNk_-). \end{aligned}$$

zur neuen Zeitvariable  $\frac{t}{N}$ , die wir wieder als  $t$  bezeichnen. Der folgende Grenzwert macht nur Sinn, wenn  $\tilde{k}_+ := Nk_+$  ungefähr in der selben Grössenordnung wie  $\tilde{k}_- = \frac{k_-}{2}$  ist, andernfalls ist eine andere Skalierung zu suchen. Es gilt dann mit Taylor-Entwicklung in den Ortsvariablen

$$\begin{aligned} \frac{\partial q}{\partial t}(x, y, z, t) &= \frac{\partial}{\partial x}((\tilde{k}_+xy - \tilde{k}_-z)q(x, y, z, t)) + \frac{\partial}{\partial y}((\tilde{k}_+xy - \tilde{k}_-z)q(x, y, z, t)) - \\ &\quad \frac{\partial}{\partial z}((\tilde{k}_+xy - \tilde{k}_-z)q(x, y, z, t)) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N}\right). \end{aligned}$$

Wir betrachten also die durch Vernachlässigung der Ordnung  $\frac{1}{N}$ -Terme entstehende Gleichung für die reskalierte Wahrscheinlichkeitsdichte  $q$ , in kompakter Form geschrieben als

$$\frac{\partial q}{\partial t} = \nabla \cdot \left( (\tilde{k}_+xy - \tilde{k}_-z) q (1, 1, -1)^T \right), \quad (2.2)$$

wobei  $\nabla \cdot$  die Divergenz bezeichnet. Eine Gleichung dieser Form, nämlich

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \nabla \cdot (q\mathbf{v}) = 0, \quad (2.3)$$

mit einem Vektorfeld  $\mathbf{v}$  (die Geschwindigkeit) werden wir später noch als kanonische Form einer Kontinuitätsgleichung für Dichten kennen lernen. Im allgemeinen kann jedoch die Existenz einer Wahrscheinlichkeitsdichte nicht angenommen werden, und sollte eher für ein zeitabhängiges Wahrscheinlichkeitsmaß  $\mu_t$  formuliert werden. Dies ist über die schwache Formulierung von (2.3) möglich, die man durch Multiplikation mit einer stetig differenzierbaren Testfunktion  $\varphi$  mit kompaktem Träger und anschliessender partieller Integration (bzw. Anwendung des Gauss'schen Satzes) erhält:

$$- \int_0^T \int_{\mathbb{R}^3} q \left( \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \varphi \right) d\mathbf{x} dt = 0. \quad (2.4)$$

Dies ist der Spezialfall eines Maes mit Wahrscheinlichkeitsdichte  $q$ , der fur ein allgemeines Ma direkt zu

$$- \int_0^T \int_{\mathbb{R}^3} \left( \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \varphi \right) d\mu_t(\mathbf{x}) dt = 0. \quad (2.5)$$

Die Gleichung fur die Wahrscheinlichkeitsdichte liegt in der Modellhierarchie schon eine Stufe unter dem ursprunglichen stochastischen Prozess. Eine numerische Simulation erscheint mit realistischem Aufwand moglich, allerdings ist die Berechnung der Wahrscheinlichkeitsverteilung noch relativ unbefriedigend. Vor allem wenn die Varianz der Variablen relativ klein ist (was man fur grosses  $N$  wegen einem Gesetz der grossen Zahl erwarten wurde), erscheint die Berechnung der Verteilung unnotig und man wurde lieber direkt den Erwartungswert berechnen. Wir betrachten also die Evolution der Erwartungswerte

$$X(t) := \int_{\mathbb{R}^3} q(x, y, z, t) x dx dy dz = E \left[ \frac{\ell(t)}{N} \right] + \mathcal{O} \left( \frac{1}{N^2} \right) \quad (2.6)$$

$$Y(t) := \int_{\mathbb{R}^3} q(x, y, z, t) y dx dy dz = E \left[ \frac{m(t)}{N} \right] + \mathcal{O} \left( \frac{1}{N^2} \right) \quad (2.7)$$

$$Z(t) := \int_{\mathbb{R}^3} q(x, y, z, t) z dx dy dz = E \left[ \frac{n(t)}{N} \right] + \mathcal{O} \left( \frac{1}{N^2} \right). \quad (2.8)$$

Es gilt

$$\begin{aligned} \frac{dX}{dt}(t) &= \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\partial q}{\partial t}(x, y, z, t) x dx dy dz \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} \nabla \cdot \left( (\tilde{k}_+ xy - \tilde{k}_- z) q(x, y, z, t) (1, 1, -1)^T \right) x dx dy dz \\ &= - \int_{\mathbb{R}^3} (\tilde{k}_+ xy - \tilde{k}_- z) q(x, y, z, t) dx dy dz \\ &= -\tilde{k}_+ \int_{\mathbb{R}^3} q(x, y, z, t) xy dx dy dz + \tilde{k}_- Z(t) \end{aligned}$$

und analoge Gleichungen fur  $Y(t)$  und  $Z(t)$ . Leider erhalt man kein geschlossenes System fur  $X$ ,  $Y$  und  $Z$ , es tritt auch das Integral uber  $xyq$  auf, d.h. der Erwartungswert des Produkts der entsprechenden Zufallsvariablen. Um ein geschlossenes System zu erhalten benotigt man nun eine Abschlussrelation, ein klassisches Problem bei der Reduktion in Modellhierarchien. Die einfachste Abschlussrelation ist naturlich Unkorreliertheit der Zufallsvariablen, d.h.

$$\int_{\mathbb{R}^3} q(x, y, z, t) xy dx dy dz = X(t)Y(t).$$

Damit erhalten wir das System von gewohnlichen Differentialgleichungen

$$\frac{dX}{dt}(t) = -\tilde{k}_+ X(t)Y(t) + \tilde{k}_- Z(t) \quad (2.9)$$

$$\frac{dY}{dt}(t) = -\tilde{k}_+ X(t)Y(t) + \tilde{k}_- Z(t) \quad (2.10)$$

$$\frac{dZ}{dt}(t) = \tilde{k}_+ X(t)Y(t) - \tilde{k}_- Z(t). \quad (2.11)$$

Diese Abschlussrelation ist tatsachlich exakt, wenn die Dichte konzentriert, d.h. deterministisch ist:

$$q(x, y, z, t) = \delta(x - X(t))\delta(y - Y(t))\delta(z - Z(t)). \quad (2.12)$$

Die Dirac  $\delta$ -Distribution ist dabei durch folgende Eigenschaft definiert

$$\int_{\mathbb{R}} \delta(x - a)\psi(x) dx = \psi(a),$$

für jede stetige Funktion  $\psi$  - die  $\delta$ -Distribution ist also eigentlich ein Maß und keine Funktion. Wie wir in den Übungen sehen werden, ist (2.12) tatsächlich eine (schwache) Lösung von (2.2). Wenn wir also den Anfangswert ohne (stochastische) Ungewissheit kennen, bleibt die Verteilung für alle Zeiten deterministisch. Damit haben wir also im Grenzwert  $N \rightarrow \infty$  tatsächlich jegliche Stochastizität der Evolution eliminiert.

Wir erhalten als einfachstes Modell nun das obige System aus gewöhnlichen Differentialgleichungen bzw. die Reskalierung zu den ursprünglichen Variablen - der Anzahl der Moleküle

$$L(t) = NX(t), \quad M(t) = NY(t), \quad \tilde{N}(t) = 2NZ(t).$$

Der Einfachheit halber werden wir im Folgenden  $N(t)$  statt  $\tilde{N}(t)$  schreiben. Die Evolution der Anzahl ist dann beschrieben durch

$$\frac{dL}{dt}(t) = -k_+L(t)M(t) + k_-N(t) \tag{2.13}$$

$$\frac{dM}{dt}(t) = -k_+L(t)M(t) + k_-N(t) \tag{2.14}$$

$$\frac{dN}{dt}(t) = k_+L(t)M(t) - k_-N(t). \tag{2.15}$$

Es ist dabei zu beachten, dass es sich bei der Lösung nur um Erwartungswerte für die Molekülanzahl handelt, die im allgemeinen nicht ganzzahlig sind.

Da es sich hier um ein System ohne weiter äussere Beeinflussung handeln, erwartet man dass sich nach gewisser Zeit ein Gleichgewicht einstellt. Mathematisch bedeutet dies, dass im Grenzwert  $t \rightarrow \infty$  die Zeitableitungen gegen Null gehen. Das Gleichgewicht ist dann durch

$$k_+L_\infty M_\infty = k_-N_\infty \tag{2.16}$$

beschrieben. Wir sehen sofort, dass die stationäre Lösung nicht eindeutig sein kann, da wir nur eine Gleichung für drei Unbekannte zur Verfügung. Im Zusammenhang mit der stationären Lösung stellen sich zwei mathematische Fragen, die wir im folgenden etwas näher beleuchten werden: die Frage der Eindeutigkeit und die Frage der Stabilität. Wir werden diese Fragen anhand einer allgemeinen (autonomen) gewöhnlichen Differentialgleichung

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt}(t) = F(\mathbf{x}(t)), \tag{2.17}$$

mit  $\mathbf{x} : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}^M$  und  $F : \mathbb{R}^M \rightarrow \mathbb{R}^M$ .

## Eindeutigkeit von Lösungen

Die Frage der Eindeutigkeit von Lösungen ist ein klassisches mathematisches Problem, das auch aus Sicht der Modellierung wichtig ist. Für die gewöhnliche Differentialgleichung (2.17) garantiert der Satz von Picard-Lindelöf die Eindeutigkeit bei gegebenem Anfangswert  $\mathbf{x}(0)$ , wenn  $F$  nur lokal Lipschitz-stetig ist. Dies ist offensichtlich auch bei unserem chemischen Reaktionsmodell der Fall, sodass die Eindeutigkeit für das System (2.13) - (2.15) gilt. Dies ist

typisch für ein zeitabhängiges Modell, die Dynamik ist aus dem Anfangszustand bei einem sinnvollen Modell eindeutig festgelegt.

Was passiert aber im stationären Fall  $F(\mathbf{x}_\infty) = 0$ ? Wir sehen schon aus (2.16), dass keine Eindeutigkeit vorliegt. Welchen stationären Zustand werden wir also beobachten? Die Antwort dafür liegt wieder in der Dynamik bzw. in den Eigenschaften des Anfangswerts. In den meisten Fällen gibt es *Erhaltungsgrößen*, d.h. gewisse Kombinationen der Variablen die während der Dynamik unverändert bleiben. Im Fall der obigen chemischen Reaktion sehen wir sofort, dass  $L + N$  und  $M + N$  erhalten bleiben (d.h. die Gesamtzahl der  $A$  bzw.  $B$  Moleküle), da

$$\frac{d}{dt}(L(t) + N(t)) = \frac{d}{dt}(M(t) + N(t)) = 0 \quad (2.18)$$

gilt. Damit werden bei gegebenem Anfangszustand nur Lösungen in Frage kommen, die

$$L_\infty + N_\infty = L(0) + N(0), \quad M_\infty + N_\infty = M(0) + N(0) \quad (2.19)$$

erfüllen. Dies reicht zusammen mit (2.16) bereits aus, um gleich viele Gleichungen wie Unbekannte zu bekommen.

Im allgemeinen Fall wäre eine Erhaltungsgröße von der Form  $E_i(\mathbf{x})$  mit  $E_i : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$ . Die Erhaltungsbedingung ist dann

$$0 = \frac{d}{dt}E_i(\mathbf{x}(t)) = \nabla E_i(\mathbf{x}(t)) \cdot \frac{d\mathbf{x}}{dt}(t) = \nabla E_i(\mathbf{x}(t)) \cdot F(\mathbf{x}(t)).$$

Also sind Erhaltungsgrößen auf jenen Flächen  $E_i(\mathbf{x}) = c$ , die  $F$  als Normalenrichtung haben ( $\nabla E_i$  ist die Tangentenrichtung).

In den meisten Fällen findet man aber nicht genug Erhaltungsgleichungen, um ein eindeutiges Gleichgewicht zu charakterisieren. Hat man mehrere mögliche Gleichgewichtszustände, kommt es meist auch auf lokale Eigenschaften an, d.h. im wesentlichen die Nähe zum Anfangswert und auch die Stabilitätseigenschaften der Gleichgewichtszustände. Diese werden wir im nächsten Abschnitt kurz diskutieren.

## Langzeitverhalten und Lineare Stabilität

Wir haben oben die Eindeutigkeit von stationären (Gleichgewichts-) Zuständen untersucht, allerdings die Frage offen gelassen, ob solch ein Zustand überhaupt auftreten wird. Dies ist eine interessante Frage bei einem dynamischen Modell, die oft schwierig zu charakterisieren ist. Wenn eine solche Charakterisierung gelingt, stellt sich natürlich die Frage mit welcher Geschwindigkeit so ein Zustand angenähert wird, d.h. man sucht eine monoton gegen Null fallende Funktion  $f : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}_+$  mit

$$\|\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}_\infty\| \leq f(t).$$

Bevor man sich der schwierigen Frage des allgemeinen Langzeitverhaltens widmet, sollte man zunächst das lokale Verhalten um einen stationären Zustand  $\mathbf{x}_\infty$  betrachten. Hier kann eine Vereinfachung mittels linearer Stabilitätsanalyse durchgeführt werden. Der Ansatz dabei ist einen Anfangszustand der Form  $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_\infty + \epsilon\mathbf{y}(0)$  mit  $\epsilon \ll 1$  zu betrachten. Dann suchen wir eine Lösung der Form

$$\mathbf{x}(t) = \mathbf{x}_\infty + \epsilon\mathbf{y}(t) + \mathcal{O}(\epsilon^2)$$

und mittels Taylor-Entwicklung erhalten wir

$$\epsilon \frac{d\mathbf{y}}{dt}(t) = \frac{d\mathbf{x}}{dt}(t) = F(\mathbf{x}_\infty + \epsilon \mathbf{y}(t)) = \underbrace{F(\mathbf{x}_\infty)}_{=0} + \epsilon \nabla F(\mathbf{x}_\infty) \mathbf{y}(t) + \mathcal{O}(\epsilon^2).$$

Nach Vernachlässigung von Termen höherer Ordnung erhalten wir die linearisierte Differentialgleichung

$$\mathbf{y}(t) = A\mathbf{y}(t), \quad A = \nabla F(\mathbf{x}_\infty),$$

die als Basis für die lineare Stabilitätsanalyse dient. Das Verhalten der Störung  $y$  wird also von der Matrix  $A$  bestimmt, und deshalb ist es natürlich die Eigenwerte von  $A$  zu betrachten.

Im skalaren Fall ist  $A$  gleich seinem einzigen Eigenwert und die Lösung der linearisierten Gleichung durch

$$\frac{dy}{dt}(t) = e^{At} \mathbf{y}(0)$$

gegeben. Für  $A < 0$  fällt die Störung mit exponentieller Geschwindigkeit ab, wir sprechen dann von linearer Stabilität. Für  $A > 0$  wird die Störung exponentiell verstärkt, es tritt also lineare Instabilität auf. Daraus sehen wir, dass das Vorzeichen der Eigenwerte entscheidend ist, im allgemeinen Fall wird dies das Vorzeichen des Realteils betreffen. Sei  $\lambda \in \mathbb{C}$  ein Eigenwert von  $A$  und  $v \in \mathbb{C}^M$  ein zugehöriger Eigenvektor. Dann gilt für die Lösung der Gleichung mit Anfangswert  $y(0) = \alpha(0)v$  mit  $\alpha(t)$  in  $\mathbb{C}$ :

$$\frac{d\alpha}{dt}(t)v = \lambda \alpha(t)v,$$

d.h.  $\alpha(t) = e^{\lambda t} \alpha(0)$ . Es gilt

$$|\alpha(t)| = |e^{\lambda t}| |\alpha(0)| = e^{\operatorname{Re}(\lambda)t} |\alpha(0)|.$$

Wir sehen also, dass für Eigenwerte mit negativem Realteil die entsprechenden Frequenzanteile abgedämpft werden, während für Eigenwerte mit positivem Realteil die Störungen exponentiell verstärkt werden. Damit erhalten wir

$$\operatorname{Re}(\lambda) < 0 \quad \text{für alle Eigenwerte } \lambda \text{ von } \nabla F(\mathbf{x}_\infty)$$

als Bedingung für lineare Stabilität. Es lässt sich in diesem Fall beweisen, dass für alle Anfangswerte  $\mathbf{x}(0)$  in einer Umgebung von  $\mathbf{x}_\infty$  die Lösung  $\mathbf{x}(t)$  gegen  $\mathbf{x}_\infty$  konvergiert für  $t \rightarrow \infty$ . Ist der Realteil auch nur eines Eigenwerts positiv, erhält man potentielle Instabilität, da Störungen in Richtung des entsprechenden Eigenvektors verstärkt werden.

Das globale Langzeitverhalten lässt sich nicht in dieser Allgemeinheit charakterisieren. Wir werden später bei einigen Modellen noch spezieller darauf zurück kommen.