

Mathematische Modellierung und Simulation

Wintersemester 2004/05

Jens Struckmeier

Fachbereich Mathematik
Universität Hamburg
Bundesstr. 55
20146 Hamburg

Inhaltsverzeichnis

Kapitel 1. Was ist mathematische Modellierung?	1
1. Von realen Fragestellungen zum mathematischen Modell – und zurück	1
2. Grundlegende Prinzipien der Modellierung	3
3. Klassifikation mathematischer Modell	5
4. Simulationswerkzeuge	12
5. Modellierungsaufgaben und –beispiele	13
Literaturverzeichnis	21

KAPITEL 1

Was ist mathematische Modellierung?

1. Von realen Fragestellungen zum mathematischen Modell – und zurück

Was versteht man unter dem Begriff *Mathematische Modellierung*? Eine pragmatische Beschreibung findet man etwa bei dem holländischen Mathematiker Rienstra ¹:

(Mathematical modeling means) describing a real-world problem in a mathematical way by what is called a model, such that it becomes possible to deploy mathematical tools for its solution. The accuracy of the description should be limited, in order to make the model not unnecessarily complex.

Mathematische Modellierung bedeutet also offenbar eine reale Fragestellung (*real-world problem*) in der Sprache der Mathematik (*mathematical model*) auszudrücken, um damit in der Lage zu sein, die gegebene Fragestellung mit Hilfe mathematischer Werkzeuge zu lösen. Weiter formuliert Rienstra, dass die Komplexität der (mathematischen) Beschreibung sorgfältig abgewägt werden sollte.

In den Naturwissenschaften bedient man sich bereits seit Jahrhunderten mathematischer Modelle. So schreibt Kant im Jahr 1796: ²

dass in jeder besonderen Naturlehre nur so viel eigentliche Wissenschaft angetroffen werden könne, als darin Mathematik anzutreffen ist.

In der Tat werden seit jeher physikalische Gesetzmäßigkeiten in der Sprache der Mathematik formuliert.³ Ähnliches gilt für die modernen *Ingenieurwissenschaften*, die heutzutage ohne mathematische Methoden und Modelle nicht auskommen. Nicht ohne Grund ist daher die Mathematik ein wesentlicher Bestandteil im Grundstudium der Natur- und Ingenieurwissenschaften und auch der Informatik.

Seit Ende des 19. Jahrhunderts werden mathematische Modelle zunehmend aber auch in den sogenannten *weichen* Wissenschaften eingesetzt, also den Lebens- und Sozialwissenschaften. Unter *realen Fragestellungen* wollen wir aber mehr verstehen als ein durch eine *Wissenschaft* definiertes Problem:

Wie groß muss eine Parklücke beim Einparken sein? Wieviel Liter Farbe braucht ein Maler zum Neuanstrich einer Hausfassade? Wie legt eine Billigfluglinie ihre Preise fest? Wie sollte eine Autobahnausfahrt konstruiert sein? Wie kann ein durch die Konkurrenz bedrohter Betreiber eines Internet-Cafes seine Gebühren festlegen?

¹The Art of Modelling, erscheint demnächst als Textbuch

²Das Kant'sche Diktum

³*Mathematische Physik* bewegt sich stets im Grenzgebiet zwischen Mathematik und Physik

Wie kommt man nun von einer gegebenen realen Fragestellung zu einem mathematische Modell? Darauf gibt es keine eindeutige Antwort, kein Rezept, das stets zum Ziel führt. Das Problem ist komplex, komplexer als die Mathematik selbst, weil die reale Fragestellung nicht schon in formalisierter Form vorliegt⁴ und daher ihre Beziehung zur Mathematik, die mathematischen Methoden mit der sie bearbeitet werden soll, selbst nicht mathematisierbar ist. Dennoch lassen sich einige Regeln angeben, die beachtet werden sollten. Der gemeinsame Durchschnitt fast aller Lehrbücher über mathematische Modellbildung ist das Diagramm in Abbildung 1. In diesem Diagramm geht es um die Tätigkeiten, die auszuführen sind, um zu einem *fertigen* Modell zu kommen, den *Modellierungsprozess*.⁵ Ausgangspunkt ist ein reales Problem oder erklärungsbedürftiges Phänomen, hieraus wird ein mathematisches Problem entwickelt, ein Bild der Wirklichkeit, dieses wird mit mathematischen Methoden gelöst, die mathematische Lösung wird hinsichtlich ihrer realen Bedeutung interpretiert und auf ihre Relevanz für das reale Problem überprüft.

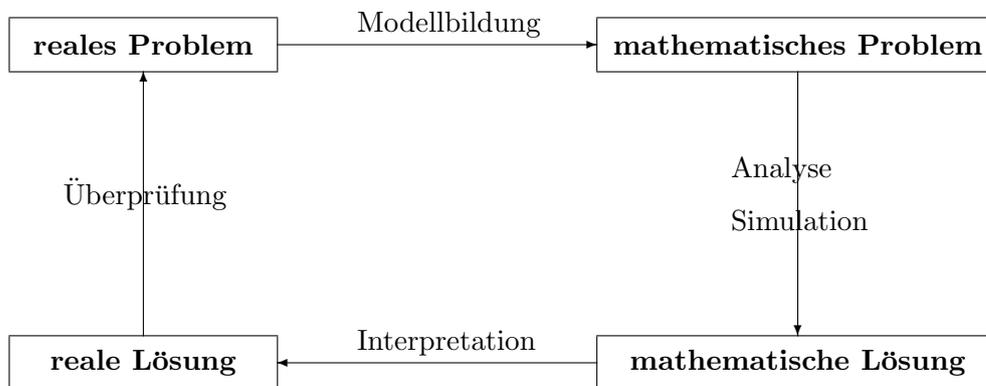


Abbildung 1: Schematische Darstellung des Modellierungsprozesses.

Das Schema kann den irreführenden Eindruck vermitteln, es handle sich bei der mathematischen Modellbildung um eine Art Algorithmus, den man nur in Gang setzen müsse, um gesicherte Erkenntnisse zu produzieren. So ist es keineswegs, auch wenn das Schema durchaus hilfreich sein kann. Aber es bleibt ein Schema, der tatsächliche Modellierungsprozess ist meistens komplexer, weil zum Beispiel die Formulierung und die Lösung der mathematischen Probleme miteinander in Wechselwirkung stehen.

⁴sonst bräuhete man ja nicht mehr zu modellieren

⁵Die Betonung liegt hier auf einem *fertigen* Modell, den häufig wird der Modellierungsprozess nicht vollständig abgeschlossen

2. Grundlegende Prinzipien der Modellierung

Der Begriff des *Mathematischen Modells* ist erst Ende des 19. Jahrhunderts aufgekommen und wurde wesentlich geprägt von dem Physiker Heinrich Hertz⁶. Hertz nennt in seinen *Prinzipien der Mechanik*⁷ die folgenden allgemeinen Modellierungsprinzipien: mathematische Modelle müssen richtig sein, d.h. das gegebene Problem korrekt beschreiben. Sie müssen in sich widerspruchsfrei sein, also logisch zulässig. Mathematische Modelle sind nie eindeutig, i.a. existieren mehrere richtige und widerspruchsfreie Modelle des gleichen Problems. Von diesen wähle man das ökonomischste aus, d.h. jenes, welches den geringsten Aufwand erfordert.

Aus diesen Hertz'schen Prinzipien lassen sich drei wesentliche Kriterien erkennen, die ein fertiges Modell erfüllen sollte:

- *Richtigkeit*

Die Richtigkeit von Modellen läßt sich im mathematischen Sinne nicht *beweisen*, sondern nur an Experimenten überprüfen und bei negativem Ausgang widerlegen. Umgekehrt folgt aus der Übereinstimmung mit experimentellen Beobachtungen allenfalls eine Art *vorläufige Richtigkeit* bis zum Beweis des Gegenteils im nächsten Experiment.

- *Zulässigkeit*

Ein Modell ist (logisch) zulässig, wenn es auf eindeutige Weise formuliert ist und keine Widersprüche enthält. Dieses Kriterium korrespondiert zur mathematischen Widerspruchsfreiheit, seine Überprüfung ist insofern ein innermathematisches Problem und beinhaltet etwa, dass das Modell tatsächlich eine mathematische Lösung besitzt.

- *Zweckmäßigkeit*

Ein Modell ist zweckmäßig, wenn es keine für das behandelte Problem überflüssigen Anteile enthält, die es unnötig komplizieren. Von zwei richtigen und zulässigen Modellen für dasselbe reale Problem ist das einfachere vorzuziehen, oder anders gesagt: Ein Modell sollte so einfach wie möglich und so kompliziert wie nötig sein. Welcher Komplexitätsgrad nötig ist, hängt auch davon ab, welche Ziele mit dem Modell erreicht werden sollen.

Man fragt sich nun, ob eine allgemeine Methodik angegeben werden kann, im Laufe des Modellierungsprozesses ein Modell zu entwickeln, das den Hertz'schen Prinzipien genügt. Wir versuchen im Folgenden einige grundsätzliche *Leitlinien* anzugeben, nach denen ein Modellierungsprozess ablaufen sollte:

1. Modellentwicklung: Vom realen Problem zum mathematischen Modell

1.1 Worin besteht das reale Problem?

⁶geb. 22.2.1857 in Hamburg, gest. 1.1.1894 in Bonn

⁷erschienen ein halbes Jahr nach seinem Tod

Zunächst muss versucht werden die reale Fragestellung möglichst präzise herauszuarbeiten. Was ist wesentlich, was unwesentlich? Welche Ziele sollen erreicht werden? Wie genau müssen im Rahmen dieser Ziele die Antworten sein? Oft zeigt sich, dass eine an sich als klar erscheinende Problemstellung alles andere als klar ist. Insbesondere in den “weichen” Wissenschaften ist die Präzisierung der Fragen manchmal schon der wesentliche Nutzen mathematischer Modellierung.

1.2 Gesetzmäßigkeiten

Durch welche Gesetzmäßigkeiten ist das reale Problem bestimmt, und wie lassen sie sich in mathematischer Sprache fassen? Sofern das Problem in Zusammenhang mit einer anderen Wissenschaft steht, ist es in der Regel bereits “theoretisch vorbelastet”. Welche Vorstellungen hat die Substanzwissenschaft von den zu Grund liegenden Gesetzmäßigkeiten? Wie weit liegen sie bereits in mathematisierter Form vor? Was läßt sich davon nutzbar machen?

1.3 Übertragen von Ansätzen aus bekannten Modellen

Gibt es bereits mathematische Modelle für ähnliche Probleme? Wurde ein Teilproblem bereits anderswo modelliert? Gibt es strukturelle Analogien zu Fragestellungen aus ganz anderen Wissensbereichen? Läßt sich beispielsweise ein physikalisches oder mechanisches Modell für das Problem formulieren?

1.4 Benötigte und überflüssige Informationen

Welche Informationen (Daten) werden benötigt? Welche sind vorhanden, welche davon ggf. überflüssig, welche müssen erst noch beschafft werden? Wie sicher sind diese Informationen? “Modelliererinnen” sollten generell nicht davon ausgehen, dass der “Anwender” von sich aus weiß, was wichtig ist und was nicht. Modellierungsprozesse haben manchmal nur die Funktion, empirische Untersuchungen anzuregen, auf die ohne den Versuch der Mathematisierung aber niemand gekommen wäre.

1.5 Modellvariablen und -parameter

Durch welche Variablen soll das Modell beschrieben werden? Welche extern vorgegebenen Parameter gehen in das Problem ein? Welche inhaltliche Bedeutung haben sie? Wie genau lassen sie sich bestimmen? Welche Variationsbreite haben sie? Was sind die Maßeinheiten von Variablen und Parametern? Mit den Maßeinheiten lassen sich die in das Modell eingehenden Terme einer ersten Konsistenzprüfung unterziehen: Ein Term beispielsweise, der aus einer Summe von Größen mit verschiedenen Maßeinheiten besteht, ist sinnlos.

2. Analyse und Simulation: Vom mathematischen Problem zu seiner Lösung

2.1 Das reale Problem nicht vergessen!

Für den Weg vom mathematischen Problem zu seiner Lösung stehen natürlich alle mathematischen Werkzeuge zur Verfügung, und es scheint sich hier um ein rein innermathematisches Vorgehen zu handeln. Man sollte dennoch das real zu lösende Problem in Erinnerung behalten, da es auch als Leitfaden für den mathematisch zu beschreitenden Weg dienen kann.

2.2 Analytische Lösungen und qualitatives Modellverhalten

Läßt sich das Modellverhalten auf analytischem Weg zumindest qualitativ bestimmen? Gibt es (im regelhaft nicht erreichbaren Idealfall) eine geschlossene Formel für die Lösung?

2.3 Spezialfälle und Vereinfachungen, Modellreduktion

Läßt sich eine Lösung zumindest für spezielle Fälle lösen? Gibt es einfachere, aber ähnliche Probleme (z.B. mit geringerer Dimension), die sich analytisch lösen lassen? Man sollte stets versuchen, die Anzahl der Modellparameter zu reduzieren, zum Beispiel durch passende Wahl der Maßeinheiten und dimensionslose Schreibweise des Problems.

2.4 Computersimulationen und Parameterstudien

Für Computersimulationen ist es nötig, alle Modellparameter mit numerischen Zahlenwerten zu belegen. Sofern diese nicht bekannt sind, müssen sie auf geeignete Weise variiert werden. Das geht nicht für unbegrenzt viele, hier liegt die Bedeutung der vorausgegangenen Reduktion ihrer Anzahl. Darüber hinaus ist es vielleicht möglich, weitere Parameter auf Grund der realen Gegebenheiten festzulegen. Welche der zu variierenden Parameter sind kritisch, d.h. von welchen hängt das Modellverhalten sensitiv ab?

3. Interpretation und Validierung des Modells

3.1 Interpretierbarkeit von Ergebnissen

Lassen sich die gefundenen mathematischen Ergebnisse und die mathematischen Voraussetzungen, unter denen sie gelten, überhaupt real deuten? Sind Ergebnisse und Voraussetzungen realistisch? Liegen die gefundenen Lösungen im interpretierbaren Bereich, werden beispielweise Bestandsgrößen nicht negativ? Läßt sich das analytisch oder qua Computersimulation gefundene Modellverhalten in der Sprache der realen Fragestellung ausdrücken?

3.2 Visualisierung der Ergebnisse

Man sollte die Ergebnisse in eine Form bringen, die überblickt und interpretiert werden kann! Bei einem ungeordneten Haufen von auch nur 1000 Zahlen ist das unmöglich. Man muss daher die Ergebnisse visualisieren und bedient sich dazu der Möglichkeiten moderner Computer.

3.3 Vergleich mit Beobachtungsdaten und Experimenten

Lassen sich die gefundenen Ergebnisse mit Beobachtungsdaten vergleichen? Gibt das Modell Anlass zu Experimenten oder Beobachtungen, die erst noch durchzuführen sind? Stimmen Modellverhalten und Beobachtungsdaten überein, ggf. nach Anpassung der Modellparameter? Im negativen Fall ist zu klären, woher die Diskrepanz kommt und was im Modell daher zu verändern ist.

3. Klassifikation mathematischer Modell

In der einschlägigen Literatur zur mathematischen Modellbildung findet man nur selten den Versuch einer Klassifikation mathematischer Modelle. In diesem Abschnitt versuchen wir zunächst eine Klassifikation von Modellen auf einer *Black-White-Skala*. Danach beschäftigen wir uns mit alternativen Modellklassifikationen, die sich auf die Art der mathematischen Objekte und Beschreibungen beim Aufstellen eines Modells beziehen.

3.1. Black-, Grey- und White-Modelle. Eine sehr allgemeine Klassifikation ist die Einteilung auf einer Skala von White- zu Black-Modellen. Ohne sofort eine nähere Erläuterung zu diesen Begriffen zu geben, motivieren wir diese Modelltypen anhand einiger typischer Beispiele.

1) *Die geradlinige Bewegung mit konstanter Beschleunigung*

Auf einer reibungsfreien Fahrbahn wird ein Wagen der Masse m mit Hilfe einer konstanten Kraft F angetrieben. Bestimmt werden sollen die Weg-Zeit- und Geschwindigkeits-Zeit-Diagramme des Problems. Aus den Newtonschen Gesetzen der klassischen Mechanik, die schon im Physikunterricht der gymnasialen Oberstufe vermittelt werden, ergeben sich die folgenden Beziehungen: Startet der Wagen zur Zeit $t = 0$ am Ort $x_0 = 0$, so ergibt sich das Modell

$$(1.1) \quad x(t) = \frac{1}{2}at^2$$

$$(1.2) \quad v(t) = at$$

wobei $x(t)$ und $v(t)$ den Ort bzw. die Geschwindigkeit des Wagens zur Zeit t bezeichnet und die Beschleunigung a durch das Gesetz $F = m \cdot a$ gegeben ist.

Aus Sicht der Differentialrechnung lassen sich die Gleichungen (1.1), (1.2) auch in der differentiellen Form

$$(1.3) \quad \frac{dx(t)}{dt} = v(t)$$

$$(1.4) \quad \frac{dv(t)}{dt} = a$$

schreiben, also in Form eines (linearen) Systems von Differentialgleichungen. Die beiden Darstellungen sind aber nur dann zueinander äquivalent⁸, wenn bei der differentiellen Darstellung zusätzlich die beiden *Anfangsbedingungen*

$$x(0) = 0, \quad v(0) = 0$$

gefordert werden.

2) *Die Eutrophierung von Gewässern*

Unter dem Begriff Eutrophierung versteht man die Erhöhung der Nährstoffgehalte in einem Gewässer, vor allem an Phosphor und Stickstoffverbindungen. Die wichtigste Folge der Eutrophierung ist die Zunahme des Pflanzenwachstums im Gewässer. Aus der Tagespresse ist vielleicht das Problem der *Killer-Alge*⁹ bekannt, die in den zurückliegenden Jahren regelmässig das Ökosystem Mittelmeer aus dem Gleichgewicht gebracht hat und dem Tourismus an einigen Küstenstreifen erheblichen finanziellen Schaden zufügte.

Das Aufstellen eines vollständigen mathematischen Modells erfordert eine Modellierung des Ökosystems und läßt sich mit einfachen Methoden nicht durchführen. Zu Beginn der

⁸im mathematischen Sinne

⁹Fachterminologie: *Caulerpa taxifolia*

80'er Jahre des letzten Jahrhunderts wurde von Guidorzi ein sogenanntes Input–Output–Modell angegeben, das die Eutrophierung des Mittelmeers für die Jahre 1968 bis 1972 beschreibt, in dem die Modellparameter anhand von Meßdaten *identifiziert* werden.¹⁰

Guidorzi verwendet dabei monatlich gemittelte Meßdaten für die folgenden typischen Werte für einen spezifischen Küstenstreifen am Mittelmeer: Algenkonzentration, gelöster Sauerstoff, Wassertemperatur und –durchfluß, Alkalinität und NO_3 –Gehalt des Wassers sowie die Wasserhärte.

Als mathematisches Modell wählt Guidorzi ein diskretes, lineares Zustandsraummodell der Form

$$(1.5) \quad x_{k+1} = Ax_k + Bu_k, \quad y_k = Cu_k, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

Die Werte $u_k \in \mathbb{R}^r$ bilden die Eingangsdaten, mit denen das Modell gespeist wird, $y_k \in \mathbb{R}^m$ sind die beobachteten Ausgangsdaten und die $x_k \in \mathbb{R}^n$ sind die inneren Zustände des Systems. Die Parameter dieses Zustandsraummodells sind die Einträge in den Systemmatrizen A , B und C .

Ziel der Systemidentifikation ist es nun die Modellparameter so zu bestimmen, dass das durch die Meßdaten gegebene Input–Output–Verhalten durch das Modell rekonstruiert wird. Wählt man als Eingangsdaten Wassertemperatur und –durchfluß, Alkalinität und NO_3 –Gehalt des Wassers sowie die Wasserhärte, als Ausgangsdaten die Algenkonzentration und den Anteil gelösten Sauerstoff, können in der Tat Systemmatrizen angegeben werden, die die Meßdaten in der angegebenen Zeit von März 1968 bis November 1972 hinreichend genau reproduzieren.

Welchen Nutzen kann man aus einer solchen Art der Modellbildung ziehen? Hat man ein solches Modell anhand vorhandener Meßdaten nur genügend *trainiert*, so kann man mit Hilfe des Modells *Zukunftsprognosen* erstellen, in dem man das Modell mit aktuellen Eingangsdaten *füttert*. Diese Form der Modellierung ist in den 60'er Jahren des letzten Jahrhunderts aufgetreten, ist heute ein wesentlichen Bestandteil der *System- und Kontrolltheorie* und hat letztendlich zu dem Begriff der *Neuronalen Netze* geführt.

3) Follow–the–Leader Modelle für den Straßenverkehr

Aufgrund des steigenden Verkehrsaufkommen begannen Mitte des letzten Jahrhunderts Wissenschaftler damit, mathematische Modelle für den Straßenverkehr aufzustellen.¹¹ Bei den sogenannten *Follow–the–Leader Modellen*¹² beschreibt man den Straßenverkehr mit Hilfe einer endlichen Anzahl von Fahrzeugen, die sich zur Zeit t am Ort $x_i(t)$ befinden und sich mit der Geschwindigkeit $v_i(t)$ bewegen. Da die Ableitung des Orts $x_i(t)$ nach der Zeit t gerade die Geschwindigkeit $v_i(t)$, erhalten wir zunächst für $i = 1, \dots, n$ die Differentialgleichungen

$$\frac{dx_i(t)}{dt} = v_i(t)$$

¹⁰Man bezeichnet dies als *Systemidentifikation*; zugehörige Methoden als *Identifikationsalgorithmen*.

¹¹Einen wesentlichen Beitrag lieferten Lighthill und Whitham mit einer Arbeit aus dem Jahre 1955.

¹²Ich bevorzuge die Übernahme der englischen Terminologie.

Diese Beziehungen folgen analog zur Gleichung (1.3) einer physikalischen Gesetzmäßigkeit und sind daher unter dem gegebenen Modellansatz fest vorgegeben. Nun wissen wir, dass Fahrzeuge auf Autobahnen nicht dem Gesetz der geradlinigen Bewegung mit konstanter Beschleunigung unterliegen, d.h. die Beziehung (1.4) kann für des Verkehrsflußmodell nicht übernommen werden.

Der wesentliche Teil des Modellierungsprozesses ist damit eine Bestimmungsgleichung für die Änderungen der Fahrzeuggeschwindigkeiten anzugeben. Ist man selbst als Autofahrer im Straßenverkehr unterwegs, kann man sich selbst fragen, nach welchen Gesetzmäßigkeiten man seine Fahrgeschwindigkeit verändert. Fährt man alleine auf einer großzügig ausgebauten Autobahn, so hat vielleicht jeder Autofahrer eine typische Wunschgeschwindigkeit.¹³ Fährt man auf ein langsamerer Fahrzeug auf, so bremst man automatisch ab, wenn ein Überholvorgang unmöglich ist. Typischerweise beschleunigen Autofahrer, wenn sie aus einem Stau oder einer Baustelle mit Geschwindigkeitsbegrenzung herausfahren.

Ein in der Literatur häufig verwendetes Modell, das einen Teil der oben angeführten Aspekte berücksichtigen soll, ist in der nachfolgenden Gleichung für die Geschwindigkeitsänderung angegeben:

$$(1.6) \quad \frac{dv_i(t)}{dt} = \frac{1}{\tau_i} \left(V_i(x_{i+1}(t) - x_i(t)) - v_i(t) \right), \quad i = 1, \dots, n$$

Man nimmt dabei an, dass sich die n Fahrzeuge auf einem geschlossenen Kreisverkehr der Länge L bewegen und setzt damit $x_{n+1}(t) = x_1(t) + L$. Der Parameter τ_i modelliert eine *individuelle Reaktionszeit* eines Fahrers, die Funktion V_i beschreibt so etwas wie eine *individuelle Wunschgeschwindigkeit*, die bei diesem Ansatz allein vom Abstand zum vorausfahrenden Fahrzeug abhängt.

Zur Bestimmung der Funktion $V(x)$ kann man Beobachtungsdaten verwenden und diese zeigen, dass die folgenden Annahmen an die Funktion $V(x)$ sinnvoll sind:¹⁴

- a) Die Funktion ist positiv und monoton wachsend.
- b) Es gilt

$$V(0) = 0, \quad \lim_{x \rightarrow \infty} V(x) = V_{\max},$$

wobei V_{\max} die Höchstgeschwindigkeit des zugehörigen Fahrzeuges ist.

- c) Für die Funktion $V(x)$ gilt $V''(x) > 0$ für $x < b$ und $V''(x) < 0$ für $x > b$, wobei b eine vorgegebene Konstante ist.

ÜBUNG 1.1. Interpretieren Sie das qualitative Verhalten der Gleichung (1.6) und diskutieren Sie die oben angegebenen Bedingungen an die Wunschgeschwindigkeit $V(x)$.

Wie helfen nun die oben angeführten drei Beispiele bei der Klassifikation mathematischer Modelle auf einer Skala von *Schwarz nach Weiß*?

Im ersten Beispiel – der geradlinigen Bewegung mit konstanter Beschleunigung – steht uns eine *physikalische Gesetzmäßigkeit* zur Verfügung, die wir direkt zum Aufstellen eines mathematischen Modells verwenden können. Modellparameter ist allein die *Beschleunigung* – eine in der klassischen Mechanik bekannte Größe. Insofern besteht keine Unsicherheit über

¹³zum Beispiel die Richtgeschwindigkeit von 130 km/h auf deutschen Autobahnen

¹⁴siehe die sich anschließende Übungsaufgabe

das Modell. Es ist *richtig*, *zulässig* und gleichzeitig auch *zweckmäßig* und erfüllt zudem die oben angegebenen *Leitlinien* des Modellierungsprozesses. Ein solches Modell, das alleine aus bekannten Gesetzmäßigkeiten abgeleitet wird, bezeichnet man als ein *White-Modell*. Betrachten wir nun das mathematische Modell zu der Eutrophierung des Mittelmeers. Wir verwenden hier ein Modell, das auf keinen gegebenen (physikalischen) Gesetzmäßigkeiten beruht, sondern versuchen vielmehr – unter Vorgabe einer gewissen Modellklasse¹⁵ – die zugehörigen Modellparameter¹⁶ so zu bestimmen, dass das resultierende Modell die gegebenen Beobachtungsdaten *hinreichend genau* reproduziert. Der Ansatz eines solchen Modells – ohne Hinzunahme bekannter Gesetzmäßigkeiten – erinnert an das Prinzip einer *Blackbox* und man bezeichnet daher ein solches Modell als ein *Black-Modell*.

Unser drittes Beispiel ist ein typisches *Grey-Modell*: die Ableitung der Ortskoordinate $x_i(t)$ nach der Zeit ist die Geschwindigkeit $v_i(t)$ eines Fahrzeuges. Der eigentliche Modellierungsprozess, für den uns keine bekannten Gesetzmäßigkeiten zur Verfügung, ist die Vorgabe einer Geschwindigkeitsänderung der individuellen Fahrzeuge. Im Prinzip ist dies eine *Spielwiese* des Modellierers, der je nach Kenntnisstand, eigenen Erfahrungen, in der Regel aber auf Grund vorhandener Beobachtungsdaten oder Plausibilitätsbetrachtungen ein bestimmtes Veränderungsgesetz angibt und damit ein fertiges mathematisches Modell erstellt.

Beim Prozess der *Modellentwicklung* kann die Berücksichtigung einer Klassifikation mathematischer Modelle auf einer *Black-White-Skala* durchaus von entscheidender Bedeutung sein. Dies betrifft zunächst den unter den Leitlinien angegebenen Abschnitt *Modellentwicklung*, wird aber auch durch die nächsten beiden Leitaspekte *Analyse und Simulation* und *Interpretation und Validierung des Modells* beeinflusst. So macht es etwa keinen Sinne bei komplizierten Sachverhalten vermeintliche (auch physikalisch motivierte) Gesetzmäßigkeiten aufzustellen, die nicht durch Experimente oder Beobachtungsdaten validiert werden können. Ein weiteres Kriterium kann die Anzahl der vorhandenen Modellparametern: ist das Modell zu komplex und einer Computersimulation schwer zugänglich, so ist die Bestimmung *zulässiger* Parameterintervalle eine nur schwer zu bewältigende Aufgabe.

3.2. Deterministische, stochastische, diskrete und kontinuierliche Modelle.

Beim ersten Schritt eines Modellierungsprozesses muß auch geklärt werden, welche mathematischen Objekte zur Beschreibung des realen Problems eingesetzt werden sollen.

Bei vielen Fragestellungen sind die Ergebnisse in gewissen Sinne *durch den Zufall* bestimmt. Typische Beispiele sind die wöchentlichen Ziehungen der Lottozahlen, die Auswahlen der Spielpaarungen im DFB-Pokal, aber auch Gesellschaftsspiele, wie etwa das bekannte *Mensch-ärgere-Dich nicht!*-Spiel. Will man für dieses Spiel ein mathematisches Modell für eine erfolgreiche Spieltaktik aufstellen, kommt man nicht umhin, zufällige Ereignisse zu modellieren.

In der mathematischen Sprache werden zufällige Ereignisse mit Hilfe der *Stochastik* beschrieben, die als Sammelbegriff für die beiden Gebiete *Wahrscheinlichkeitstheorie* und *Statistik* steht. Wird ein Modell (teilweise) in der Sprache der Stochastik formuliert, spricht man daher von einem *stochastischen* Modell.

¹⁵Hier das unter der Formel (1.6) angegebene Modell.

¹⁶Die Einträge in den Systemmatrizen A , B und C

Ein *deterministisches* Modell ist demnach ein Modell, bei dem unter Vorgabe der zugehörigen Modellparameter und dem Anfangszustand des Systems der Ausgang eines Modell-experimentes eindeutig bestimmt ist. Unser Modell zum Kreisverkehr aus Abschnitt 3.1 ist ein solches deterministisches Modell – solange die Funktion V_i zur Bestimmung der Wunschgeschwindigkeit keine zufälligen Parameter enthält. Man könnte natürlich auch Funktionen wählen, die jedem Fahrzeug eine zufällige Wunschgeschwindigkeit innerhalb eines vorgegebenen Geschwindigkeitsbereiches zuordnet, und damit den durchaus unterschiedlichen Wunschgeschwindigkeiten einzelner Fahrer oder den unterschiedlichen Höchstgeschwindigkeiten der Fahrzeuge Rechnung trägt.

Neben der Entscheidung ein deterministisches oder stochastisches Modell zu verwenden existiert eine weitere Einteilung in Modellklassen, nämlich die der diskreten oder kontinuierlichen Modelle.

Wir motivieren diese Einteilung anhand einer sehr allgemeinen, abstrakten und übergreifenden Definition mathematischer Modelle, den sogenannten *Dynamischen Systemen*:

DEFINITION 1.2. *Ein dynamisches System Σ ist definiert durch die folgenden mathematischen Objekte:*

- 1) *einer Menge T – die zum System gehörenden Zeit,*
- 2) *einer Menge W – die vom System angenommenen Werte,*
- 3) *einer Menge $\mathcal{B} \subset W^T$ – das zum System zugehörnde Systemverhalten.*

Die Elemente eines dynamischen Systems sind also die *Signale*, die durch die Funktionen

$$w : T \rightarrow W$$

beschrieben sind. Die Menge W^T ist die Menge aller Funktionen von T nach W und damit die Menge aller möglichen Signale, die aber nicht notwendigerweise vom System auch angenommen werden.

Zunächst sind also die mathematischen Objekte, die ein dynamisches System definieren, die beiden (abstrakten) Mengen T und W . Im konkreten Anwendungsfall müssen diese also geeignet gewählt werden und dies führt direkt auf die Klassifikation diskreter und kontinuierlicher Modelle.

Die Menge T ist unser mathematisches Modell der *Zeit* und die beiden wichtigsten Beispiele sind

$$T = \mathbb{R}_+ := [0, \infty) \quad \text{und} \quad T = \mathbb{N} = \{0, 1, 2, \dots\}$$

Im ersten Fall operiert also unser dynamisches System auf einer kontinuierlichen Zeit, im zweiten Fall arbeiten wir mit einer diskreten Zeit.

Die Zustände oder Signalwerte des Systems sind Elemente der (abstrakten) Menge W und auch hier sind die beiden wichtigsten Beispiele gegeben durch

$$W = \mathbb{R} := (-\infty, \infty) \quad \text{und} \quad W = \mathbb{Z} = \{\dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots\}$$

Im ersten Fall kann das System jede reelle Zahl als Zustand annehmen, im zweiten Fall sind nur diskrete Systemzustände erlaubt.

Unser lineares Zustandsraummodell (1.5) ist also diesbezüglich ein diskretes Modell in der Zeit. Dies ist eine sinnvolle Annahme, da die Bestimmung der Modelldaten auf monatlich gemittelten – und damit an diskreten Zeitpunkten gegebenen – Meßdaten basiert. Ein

entsprechendes kontinuierliches Modell in Form eines System gewöhnlicher Differentialgleichungen würde den Modellierungsprozess nur unnötig kompliziert machen.

Ein mathematisches Modell, das ein reales Problem mit Hilfe diskreter Zustände beschreibt, kann unter Umständen durch den Übergang auf eine kontinuierliche Darstellung der Zustände vereinfacht werden. Man spricht dann – von der physikalisch motivierten – *Kontinuumshypothese*¹⁷: unter Standardbedingungen besteht Luft aus einer Vielzahl von individuellen Gasmolekülen, ein typischer Richtwert sind 10^{23} Teilchen pro Kubikmeter. Selbst wenn sich Luft unter diesen Bedingungen in Ruhe befindet, bewegen sich die einzelnen Moleküle aufgrund thermischer Fluktuationen und diese Bewegungen lassen sich mit Hilfe stochastischer Gesetze auch mathematisch beschreiben. Ein mögliches mathematische Modell zur Beschreibung von Luftströmungen wäre also die Verwendung von *stochastischen Teilchensystemen*, wobei man allerdings – wie oben angegeben – etwa 10^{23} Teilchen pro Kubikmeter benötigen würde. Man nennt dies eine *mikroskopische Beschreibung*.

Unter der Kontinuumshypothese versteht man den Übergang von einzelnen Molekülen zu sowohl räumlich als auch zeitlich berechneten Mittelwerten. Dies führt letztendlich auf ein mathematisches Modell, das eine Luftströmung allein durch die Berechnung der Massendichte, der Geschwindigkeit und des Drucks beschreibt. Man spricht dann auch von einer *makroskopischen Beschreibung*.

ÜBUNG 1.3. *Unser Modell zum Kreisverkehr aus Abschnitt 3.1 ist offensichtlich ein mikroskopischer Modell. Welche Beschreibung liefert hier die Anwendung der Kontinuumshypothese und unter welchen Bedingung ist sie gerechtfertigt?*

Es lassen sich auch Beziehungen zwischen Modelle mit diskreter und kontinuierlicher Zeit angeben. Wir betrachten hier nur ein einfaches Beispiel ohne systematisch auf diese Fragestellung einzugehen. Gegeben sei ein dynamisches System mit kontinuierlichen Zuständen und diskreter Zeit, d.h. ausgehend vom Anfangszustand $w(0) = w_0$ betrachten wir die Rekursion

$$(1.7) \quad w(t + \Delta t) = w(t) + g(\Delta t, w(t))$$

wobei $\Delta t > 0$ den diskreten Zeitschritt bezeichnet.

Beim *Langzeitverhalten* interessiert man sich für die Zustände über einen längeren Zeitraum – nehmen wir an bis zur Zeit $T = n\Delta t$, $n \gg 1$. Auf dieser *Zeitskala* ist der diskrete Zeitschritt Δt klein im Vergleich zu T . Schreiben wir nun die Rekursion (1.7) in der Form

$$\frac{w(t + \Delta t) - w(t)}{\Delta t} = \frac{g(\Delta t, w(t))}{\Delta t}$$

so steht auf der linken Seite ein Differenzenquotient, der im Grenzfall Δt die zeitliche Ableitung der Funktion w liefert. Existiert für alle $n \in \mathbb{N}$ der Grenzwert

$$(1.8) \quad \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{g(\Delta t, w(n\Delta t))}{\Delta t} = f(w(n\Delta t))$$

¹⁷Nicht zu verwechseln mit der von Georg Cantor aufgestellten Kontinuumshypothese aus dem Jahre 1878, das erste ungelöste mathematische Problem aus der berühmten Liste der 23 Probleme, die David Hilbert beim Internationalen Mathematischen Kongress im Jahre 1900 vorstellte.

so erhalten wir als ein Modell mit kontinuierlicher Zeit die gewöhnliche Differentialgleichung

$$(1.9) \quad \frac{dw(t)}{dt} = f(w(t))$$

ÜBUNG 1.4. *Leiten Sie Bedingungen an die Funktion g her, sodass der unter (1.8) angegebene Grenzwert existiert.*

Hat man also eine große Zahl von Beobachtungsdaten, so bietet sich sowohl ein Modell mit diskreter Zeit als auch eine Beschreibung mit kontinuierlicher Zeit in Form einer gewöhnlichen Differentialgleichung an und es läßt sich eine Beziehung zwischen beiden Ansätzen herstellen.

Die unterschiedlichen Modellansätze – deterministisch und stochastisch, diskret und kontinuierlich – lassen sich ja nach Fragestellung beliebig kombinieren. Die oben angedeutete Fragestellung, welche Modelltypen ineinanderübergeführt werden können, ist nur teilweise untersucht und bietet viel Spielraum für weitere Untersuchungen. Man kann sich etwa fragen, ob durch die Anwendung der Kontinuumshypothese mikroskopische stochastische Modelle stets auf deterministische makroskopische Modelle führen, der stochastische Aspekt im Teilchenbild also durch eine Kontinuumshypothese *herausgemittelt* wird. Gleichzeitig gibt es Beispiele, bei denen kontinuierliche deterministische Modelle beim Übergang auf diskrete Zustände zwangsläufig auf stochastische Gesetzmäßigkeiten führen.

4. Simulationswerkzeuge

Mathematische Modelle sind oft aufgrund ihrer Komplexität analytischen Methoden nur schwer zugänglich, auch wenn die Bestimmung von analytischen Lösungen bei einer speziellen Wahl von Modellannahmen oder Modellparametern wichtig sein kann (siehe Abschnitt 1.2). Ein wichtiger Bestandteil des Modellierungsprozesses ist daher die Auswertung eines fertigen mathematischen Modells mit Hilfe von Computersimulationen. Hat man es zudem mit einer großen Datenmenge zu tun, müssen Simulationsergebnisse oder auch Meßdaten *visualisiert* werden.

Grundlage einer Computersimulation ist ein numerisches Verfahren oder ein Algorithmus, der das gegebene mathematische Problem approximativ löst. Sind diese Verfahren komplex und erfordern die Bewältigung großer Datenmengen spricht man auch vom *Wissenschaftlichen Rechnen*.¹⁸ Hier werden numerische Algorithmen mit Hilfe höherer Programmiersprachen wie C++ oder JAVA in Computerprogramme übersetzt und am Computer implementiert. Häufig kommen kommerzielle Programmbibliotheken zum Einsatz, die bereits fertige Routinen für einzelne numerische Verfahren enthalten, zum Beispiel iterative Lösungsverfahren für lineare Gleichungsverfahren.

Modellierungsaufgaben führen nicht zwangsläufig auf hoch-komplexe Computersimulationen. Daher kann man alternativ zu höheren Programmiersprachen auch fertige Simulationspakete wie MATLAB und SIMULINK oder MATEMATICA verwenden. Diese (kommerziellen) Pakete enthalten bereits Module zu verschiedenen numerischen Verfahren und diverse Visualisierungstechniken. Für analytische Berechnungen kann auch der Einsatz von

¹⁸im anglo-amerikanischen Sprachraum: Scientific Computing

Computeralgebrasystemen, wie MAPLE, sinnvoll sein. Auch dieses Paket enthält elementare numerische Module, etwa zur numerischen Lösung von Differentialgleichungen, aber auch Module zur graphischen Darstellungen von Funktionen mehrerer Veränderlicher oder diskreter Datenmengen.

Die in dieser Vorlesung behandelten Modellierungsaufgaben lassen sich alle mit Hilfe von MATLAB bearbeiten und die dazu notwendigen Kenntnisse können leicht neben der Vorlesung im Selbststudium der Vorlesung erworben werden. Für das Selbststudium besonders geeignete Fachbücher sind zum Beispiel die Bücher von Beucher und Gramlich, siehe Literaturliste.

5. Modellierungsaufgaben und –beispiele

5.1. Wie schnell wachsen Bäume? Für die Holzindustrie ist es von Interesse abschätzen zu können, wie schnell Bäume wachsen. Die Modellierungsaufgabe ist also ein mathematisches Modell aufzustellen, das diese Fragestellung unter Hinzunahme von Beobachtungsdaten modelliert. Am Beispiel der Kiefernart *Pinus sylvestris* in Schottland, für die Beobachtungsdaten erhoben wurden, haben Mooney und Swift [7] folgendes mathematische Modell aufgestellt.

Zunächst stellt man fest, dass nicht alle Bäume gleich schnell wachsen, die Gründe für ein unterschiedliches Wachstum aber sehr vielfältig und bei realen Gegebenheiten nicht präzise bekannt sind. Das Baumwachstum wird daher mit Hilfe eines stochastischen Prozesses modelliert, dessen Parameter über die vorhandenen Beobachtungsdaten bestimmt werden. Es handelt sich daher um ein *Black-Modell*. Um die Beobachtungsdaten klein zu halten, werden die Bäume entsprechend dem Umfang ihrer Stämme in eine feste Zahl von Größenklassen eingeteilt. Unser System *Baumwachstum* kann also nur diskrete Zustände annehmen.

Die Veränderungen des Bestandes innerhalb der einzelnen Größenklassen wird in einem Zeitabstand von 6 Jahren erhoben, in dem man einfach die vorhandenen Bäume in den diskreten Klassen zählt und mit der letzten Erhebung vergleicht. In unserem konkreten Fall aus Schottland ergaben sich dabei die in Tabelle 1.1 angegebenen Daten.

Klasse	Anzahl (alt)	Anzahl (neu)
1	4461	3214
2	2926	3276
3	1086	1710
4	222	444
5	27	68
6	1	11

Tabelle 1.1: Census-Daten zu *Pinus sylvestris* aus Corrou, Schottland

Eine Summation über die 6 Größenklasse zeigt, dass der Gesamtbestand mit 8723 Bäumen gleichgeblieben ist, also kein Baum gestorben oder hinzugekommen ist.

Wie können die im Abstand von 6 Jahren ermittelten Daten in ein stochastisches Modell

zum Baumwachstum überführt werden? Dazu müssen wir eine zentrale *Modellannahme* treffen: wir gehen davon aus, dass alle Bäume im Verlauf von 6 Jahren entweder in ihrer Größenklasse geblieben oder in die nächsthöhere eingetreten sind, also keine Klassen übersprungen haben.

Man kann nun aus den gegebenen Daten berechnen, wieviele Bäume in der jeweiligen Klasse verblieben sind und einen Anteil q_i der in der Größenklasse i verbliebenen Bäume berechnen. Die entsprechenden Ergebnisse findet man in der Tabelle 1.2.

Klasse	geblieben	q_i
1	3214	0.7205
2	2029	0.6934
3	813	0.7486
4	171	0.7703
5	17	0.6296
6	1	1

Tabelle 1.2: Zahl und Anteil der in einer Größenklasse verbliebenen Bäume

Die Anteile in der letzten Spalte lassen sich als eine Wahrscheinlichkeit interpretieren, dass ein Baum der Größenklasse i im Verlaufe von 6 Jahren in ihr verbleibt. Entsprechend lassen sich die Übergangswahrscheinlichkeiten p_{ij} vom Zustand j zum Zustand i definieren:

$$p_{ij} = P(N(t+1) = i \mid N(t) = j),$$

wobei $N(t)$ den vom System zum Zeitpunkt t eingenommenen Zustand bezeichne.

Anschaulich gesprochen ist p_{ij} die Wahrscheinlichkeit dafür, dass ein Baum, der bei der ersten Erhebung zur Größenklasse j gehörte, nach 6 Jahren in die Größenklasse i übergegangen ist.

In unserem konkreten Beispiel ergibt sich damit die *Übergangsmatrix* P in der Form

$$P = \begin{pmatrix} q_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 - q_1 & q_2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 - q_2 & q_3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 - q_3 & q_4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 - q_4 & q_5 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 - q_5 & 1 \end{pmatrix}$$

Der Vektor $w(t) \in \mathbb{R}_+^6$ der Wahrscheinlichkeiten

$$w_i(t) = P(N(t) = i),$$

dass sich das System zum Zeitpunkt t im Zustand i befinde ($i = 1, \dots, 6, t \in \mathbb{R}_0$), genügt dann der Iterationsvorschrift

$$(1.10) \quad w(t+1) = Pw(t)$$

Diese Art des stochastischen Modells wird als *Markov-Prozess* bezeichnet und wir werden im zweiten Kapitel näher darauf eingehen. Mit Hilfe dieses Markov-Prozesses kann nun

die Verteilung auf die Größenklassen nach einer größeren Anzahl von Zeitschritten oder auch die mittlere Dauer bis zum Erreichen der größten Klasse von irgendeiner anderen aus untersucht werden.

Das Modell ist aber auch einer direkten stochastischen Simulation zugänglich. Ausgehend von einem festen Baumbestand und seiner Einteilung in Größenklassen kann nun mit Hilfe von Zufallszahlen eine konkrete Realisierung oder Trajektorie berechnet werden. Eine Mitteilung über eine große Zahl von (unabhängigen) Trajektoiren genügt dann – asymptotisch gesehen – der Iterationsvorschrift (1.10).

5.2. Ein lineares Modell zur Mäusepopulation. In unserem Modell zu einer fiktiven Mäusepopulation betrachten wir ein Modell mit drei verschiedenen Altersklassen. Es handelt sich um eine unsterbliche Rasse, die sich nach folgenden Gesetzmäßigkeiten fortpflanzt:

- jedes erwachsene Mäusepaar bringt alle drei Wochen vier neue Paare zur Welt,
- jedes neugeborene Paar wird nach sechs Wochen erwachsen.

Um die beiden Zeiträume, die für die Reproduktion eine Rolle spielen, erfassen zu können, betrachten wir drei verschiedene Altersklassen und einen Zeitschritt von drei Wochen:

- $x_1(t)$ bezeichne die Anzahl der Mäusepaare, die zum Zeitpunkt t zwischen 0 und 3 Wochen alt sind (Kinder),
- $x_2(t)$ bezeichne die Anzahl der Mäusepaare, die zum Zeitpunkt t zwischen 3 und 6 Wochen alt sind (Jugendliche),
- $x_3(t)$ bezeichne die Anzahl der Mäusepaare, die zum Zeitpunkt t älter als sechs Wochen sind (Erwachsene).

Unser lineares Modell, das den oben stehenden Gesetzmäßigkeiten folgt, lautet dann

$$\begin{aligned}x_1(t+1) &= 4x_3(t) \\x_2(t+1) &= x_1(t) \\x_3(t+1) &= x_2(t) + x_3(t)\end{aligned}$$

Mit der Matrix

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 4 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

ergibt sich die Standardform eines deterministischen zeitdiskreten dynamischen Systems

$$(1.11) \quad x(t+1) = Ax(t)$$

In der Tabelle 1.3 sind die drei Klassen der Mäusepopulation ausgehend für ein neugeborenes Mäusepaar und einen Zeitraum von 45 Wochen dargestellt.

Die Ergebnisse legen die Vermutung nah, dass sich langfristig gesehen die Population alle drei Wochen verdoppelt und sich einem Größenverhältnis der Altersklassen von 2 zu 1 zu 1 annähert.

t	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
x_1	1	0	0	4	4	4	20	36	52	132	276	484	1012	2116	4052	8100
x_2	0	1	0	0	4	4	4	20	36	52	132	276	484	1012	2116	4052
x_3	0	0	1	1	1	5	9	13	33	69	121	253	529	1013	2025	4141

Tabelle 1.3: Entwicklung der Mäusepopulation mit $x_1(0) = 1, x_2(0) = 0, x_3(0) = 0$.

Um diese Vermutung zu untermauern, berechnen wir die Eigenwerte und zugehörigen Eigenvektoren der oben angegebenen Matrix A . Diese sind gegeben durch

$$\lambda_1 = 2, w_1 = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \lambda_{2,3} = -\frac{1}{2} \pm \frac{i}{2}\sqrt{7}, w_{2,3} = \begin{pmatrix} -1 \pm i\sqrt{7} \\ -\frac{3}{2} \pm \frac{i}{2}\sqrt{7} \\ 1 \end{pmatrix},$$

Jedem Eigenwert λ_k und zugehörigem Eigenvektor w_k entspricht nun aber eine – reelle oder komplexe – Lösung der Form

$$y_k(t) = \lambda_k^t w_k$$

von (1.11), denn

$$y_k(t+1) = \lambda_k^{t+1} w_k = A \lambda_k^t w_k = A y_k(t)$$

Alle Lösungen von (1.11) lassen sich dann als eine Linearkombination der y_k s darstellen:

$$x_k(t) = \alpha_1 y_1(t) + \alpha_2 y_2(t) + \alpha_3 y_3(t)$$

wobei $\alpha_k \in \mathbb{C}, k = 1, 2, 3$.

Die *spezielle* Lösung, die der gegebenen Anfangsbedingung

$$x(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

erhält man aus der Lösung eines linearen Gleichungssystems für die Koeffizienten α_1, α_2 und α_3 und die spezielle Lösung lautet dann

$$(1.12) \quad x(t) = 2^t \begin{pmatrix} 1/4 \\ 1/8 \\ 1/8 \end{pmatrix} + \left(-\frac{1}{2} - \frac{i}{2}\sqrt{7}\right)^t \begin{pmatrix} \frac{3}{8} - \frac{i}{8\sqrt{7}} \\ -\frac{1}{16} + \frac{11i}{16\sqrt{7}} \\ -\frac{1}{16} - \frac{5i}{16\sqrt{7}} \end{pmatrix} \\ + \left(-\frac{1}{2} + \frac{i}{2}\sqrt{7}\right)^t \begin{pmatrix} \frac{3}{8} + \frac{i}{8\sqrt{7}} \\ -\frac{1}{16} - \frac{11i}{16\sqrt{7}} \\ -\frac{1}{16} + \frac{5i}{16\sqrt{7}} \end{pmatrix}$$

Die komplexen Größen in dieser Formel treten allesamt in Gestalt von Summen konjugiert komplexer Zahlen auf, deren Imaginärteile sich deswegen wegheben. Es handelt sich also um eine Formel für eine reelle Lösung, die sich aber ohne den Umweg über die komplexen

Zahlen nicht so ohne Weiteres angeben ließe.

Mit

$$|\lambda_{2,3}| = \sqrt{2}$$

folgt

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \left(\frac{\lambda_{2,3}}{\lambda_1} \right)^t = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{2}^t} = 0$$

d.h. mit wachsendem t erhält der größte Eigenwert $\lambda_1 = 2$ in der Lösungsformel (1.12) ein immer größeres Gewicht. Daher gilt

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{x(t)}{2^t} = \begin{pmatrix} 1/4 \\ 1/8 \\ 1/8 \end{pmatrix}$$

Das ist eine mathematisch präzise Fassung der oben eher vage formulierten Vermutung, dass die Population sich langfristig in jedem Zeitschritt von drei Wochen verdoppelt und sich einem Größenverhältnis der Altersklassen von 2 zu 1 zu 1 annähert. Die Beziehung

$$(1.13) \quad x(t) \sim 2^t \begin{pmatrix} 1/4 \\ 1/8 \\ 1/8 \end{pmatrix}$$

ist eine andere Fassung derselben asymptotischen Aussage. Die *absolute Abweichung* der exakten Lösung $x(t)$ von diesem langfristigen Verhalten wird mit wachsendem t immer größer und ist tatsächlich von der Größenordnung $\sqrt{2}^t$. Die *relative Abweichung* aber geht in der Tat gegen 0. Auf die Aussage in (1.13) gehen wir hier nicht näher ein. Sie ist im Sinne der *asymptotischen Analysis* zu verstehen, auf die wir im zweiten Kapitel näher eingehen werden.

ÜBUNG 1.5. *Jemand kauft sich ein Kaninchenpaar, das einer von drei verschiedenen Rassen angehört. Das Wachstum der Kaninchen-Population, gemessen in der Anzahl der Paare, soll berechnet werden. Allen drei Rassen ist gemeinsam:*

- *Jedes neugeborene Paar wird nach sechs Wochen erwachsen.*

Die drei Rassen unterscheiden sich hinsichtlich ihrer Reproduktions- und Sterberaten:

- *Jedes erwachsene Paar bringt alle sechs Wochen ein neues Paare zur Welt und stirbt nie.*¹⁹
- *Jedes erwachsene Paar bringt einmal, nämlich sechs Wochen nach Eintritt ins Erwachsenenalter, zwei neue Paare zur Welt, bekommt anschließend keine Jungen mehr, stirbt aber nie.*
- *Jedes erwachsene Paar bringt einmal, nämlich sechs Wochen nach Eintritt ins Erwachsenenalter, drei neue Paare zur Welt und stirbt anschließend.*

Welcher der drei Rassen wächst am schnellstens? Welche prozentuale Verteilung auf die Altersklassen stellt sich langfristig ein?

¹⁹Überlegungen unter dieser Annahme gehen bereits auf Leonardo von Pisa (1170–1240) zurück, der unter dem Namen *Fibonacci* bekannter ist.

5.3. Ein Modell für eine Abmagerungskur. Ein Abmagerungskur läuft häufig nach dem folgenden Schema ab:

- die betreffende Person trifft die Entscheidung das Körpergewicht um einen bestimmten Betrag zu reduzieren,
- es wird ein Diätplan sowie ein Trainingsprogramm zur körperlichen Ertüchtigung erstellt,
- am Anfang wird ein rapider Gewichtsverlust erzielt,
- unter Umständen erreicht die Person das gewünschte Körpergewicht,
- dieses Gewicht bleibt für eine (im allgemeinen nur) kurze Zeit erhalten,
- (da) die betreffende Person zu den normalen Essgewohnheiten von vor Beginn der Diät zurück,
- kurze Zeit später nimmt das Körpergewicht wieder zu, wobei das endgültige Körpergewicht häufig höher als vor der Abmagerungskur ist.

Das von Mickens et al. [8] aufgestellte mathematische Modell zur Abmagerungskur beschreibt die Veränderung des Körpergewichts anhand einer nichtlinearen gewöhnlichen Differentialgleichung erster Ordnung. Sei dazu $w(t)$ das Körpergewicht zur Zeit t . Die zeitliche Veränderung von $w(t)$ hänge von den folgenden Faktoren ab:

- einer Funktion $f(t)$, die die Gewichtszunahme durch Aufnahme von Nahrungsmitteln beschreibt,
- einer Funktion $e(t)$, die den Gewichtsverlust durch ein während der Abmagerungskur aufgenommenes körperliches Trainingsprogramm beschreibt,
- einer Funktion $m(w)$, die den Körpermetabolismus beschreibt und vom aktuellen Körpergewicht abhängig ist.

Unter den oben gemachten Annahmen lautet unser mathematische Modell damit

$$(1.14) \quad \frac{dw}{dt} = f(t) - e(t) - m(w)$$

Zunächst wissen wir nur, dass alle Funktionen auf der rechten Seite von (1.14) nichtnegativ sind.

Die vorhandenen Daten zur Metabolismusfunktion zeigen übereinstimmt, dass $m(w)$ proportional zu einer bestimmten Potenz des Körpergewichtes ist,

$$m(w) \sim w^\alpha, \quad \alpha \approx 0.7$$

Wir verwenden daher im folgenden die Darstellung

$$m(w) = \beta w^{3/4}$$

mit der positiven Proportionalitätskonstanten β .²⁰

Es stellt sich die Frage, wie die beiden Funktionen $f(t)$ und $e(t)$ gewählt werden können. Eine Diät besteht im Prinzip darin, für einen festen Zeitraum täglich eine bestimmte – gegenüber dem gewöhnlichen Essverhalten reduzierte – Menge an Kalorien aufzunehmen. Demgegenüber steht ein Verlust an Kalorien durch ein körperliches Trainingsprogramm. Eine der einfachsten Diätstrategien könnte es sein, die Aufnahme und Abnahme von Kalorien während eines gewünschten Zeitraums konstant zu halten. In diesem Fall nimmt

²⁰siehe [8] für eine komplexere Abhängigkeit.

die betreffende Person \bar{f} Kalorien pro Tag durch Nahrungsmittel zu sich und verbrennt \bar{e} Kalorien pro Tag durch das Trainingsprogramm, wobei beide Werte als konstant angenommen werden. Damit erhalten wir für die über einen Tag gemittelte Funktionen $f(t)$ und $e(t)$ die Darstellung

$$(f(t) - e(t))_{\text{gemittelt}} = \bar{f} - \bar{e} = \lambda$$

Aus physiologischer Sicht ist weiterhin die Annahme $\lambda > 0$ gerechtfertigt. Damit entsteht aus (1.14) unsere Modellgleichung

$$(1.15) \quad \frac{dw}{dt} = \lambda - \beta w^{3/4}$$

also eine nichtlineare gewöhnliche Differentialgleichung mit den beiden Parametern λ und β .

Die Differentialgleichung (1.15) läßt sich analytisch nicht in geschlossener Form lösen und wir werden daher im folgenden das qualitative Verhalten von Lösungen untersuchen.

Aus der Theorie gewöhnlicher Differentialgleichungen weiss man, dass etwas das Langzeitverhalten von Lösungen wesentlich durch die *stationären Punkte* der Gleichung beschrieben wird. Dies sind gerade die Werte \bar{w} , für die die rechte Seite der Gleichung verschwindet. Damit ist $w(t) = \bar{w}$ eine Lösung von (1.15), denn es gilt dann

$$\frac{dw}{dt} = 0$$

Aus (1.15) erhalten wir den einzigen Fixpunkt als

$$(1.16) \quad \bar{w} = \left(\frac{\lambda}{\beta}\right)^{4/3}$$

Man kann sich nun fragen, was mit Lösungen passiert, die zur Zeit $t = 0$ in der Nähe des stationären Punktes \bar{w} starten. Dies ist die Frage nach der (lokalen) Stabilität des stationären Punktes und man kann die Frage mit Hilfe einer *Linearisierung* der gegebenen Differentialgleichung beantworten.

Wir suchen dazu eine Lösung $w(t)$ in der Form

$$(1.17) \quad w(t) = \bar{w} + \epsilon(t), \quad \epsilon(0) \ll \bar{w}$$

Setzt man (1.17) in die Gleichung (1.15) ein, so erhält man zunächst

$$(1.18) \quad \frac{d\epsilon}{dt} = \lambda - \beta(\bar{w} + \epsilon(t))^{3/4}$$

Für festes t erhalten wir über eine Taylorentwicklung der rechten Seite von (1.18) bezüglich $\bar{\epsilon} = \epsilon(t)$ um die Null

$$R.S. = \lambda - \beta \left(\bar{w}^{3/4} + \frac{3}{4} \bar{w}^{-1/4} \bar{\epsilon} + O(\bar{\epsilon}^2) \right) = -\frac{3}{4} \beta \bar{w}^{-1/4} \bar{\epsilon} + O(\bar{\epsilon}^2)$$

Die *linearisierte Gleichung* ergibt sich, in dem man die Taylorentwicklung der rechten Seite nach dem linearen Term abbricht, also

$$(1.19) \quad \frac{d\epsilon}{dt} = -p\epsilon, \quad p = \frac{3}{4} \beta \left(\frac{\beta}{\lambda}\right)^{1/3}$$

Für die Konstante p gilt unter den Annahmen $\lambda, \beta > 0$ weiterhin $p > 0$ und für die Lösungen von (1.19) gilt daher

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \epsilon(t) = 0$$

d.h. kleine Störungen um das durch (1.16) definierte stationäre Körpergewicht verschwinden mit der Zeit.

Das globale Verhalten von Lösungen mit positiven Anfangsdaten, i.e. $w(0) > 0$, kann über das Vorzeichenverhalten der rechten Seite der Differentialgleichung abgelesen werden: es gilt

$$\frac{dw}{dt} = \begin{cases} < 0 & : w > \bar{w} \\ > 0 & : 0 < w < \bar{w} \end{cases}$$

Daraus folgt aber auch, dass

$$\lim_{t \rightarrow \infty} w(t) = \bar{w}$$

d.h. der Gleichgewichtspunkt \bar{w} ist bezüglich positiver Anfangsdaten global stabil.

Wenn uns der Parameter β für eine die Diät betreffende Person bekannt ist, so legt der zweite Parameter λ , der eine Diätstrategie beschreibt, über die Beziehung (1.16) bereits das durch die Diät zu erreichende Körpergewicht fest. Dieses Gewicht ist proportional zu $\lambda^{4/3}$ und wächst damit stärker als linear mit λ .

Soll das Körpergewicht reduziert werden, was das eigentliche Ziel sein wird, und ist das Ausgangsgewicht w_a , das Wunschgewicht w_e , so folgt

$$\lambda_a = \beta w_a^{3/4} > \lambda_e = \beta w_e^{3/4},$$

was etwa bedeutet, dass bei gleichbleibender Nahrungsaufnahme entsprechend mehr körperlich trainiert werden muss. Äquivalent dazu, muss bei gleichbleibendem körperlichem Training die Kalorienaufnahme reduziert werden. Da das Wunschgewicht zudem stärker mit λ als eine lineare Funktion, ziehen signifikante Änderungen im Lebensstil der betreffenden Person auch signifikante Änderungen im Körpergewicht nach sich.

Eine tiefere Stabilitätsanalyse zeigt auch, dass unsere Modellgleichung vorhersagt, dass Gewichtsänderungen am Anfang der Diät drastischer sind als später, wenn das Wunschgewicht nahezu erreicht ist. Ein eher negatives Resultat unseres Modell ist allerdings, dass man die Diät eigentlich nie absetzen kann, wenn man langfristig sein Idealgewicht halten möchte.

Literaturverzeichnis

- [1] C. P. Ortlieb, Mathematische Modellierung und Simulation, Vorlesungsskript, Fachbereich Mathematik, Universität Hamburg.
- [2]
- [3] H. Neunzert und E. Zerz, Modeling of Input–Output Systems, Vorlesungsskript, Wintersemester 2001/02, Fachbereich Mathematik, TU Kaiserslautern.
- [4] G. Gramlich,
- [5]
- [6]
- [7] D. Mooney und R. Swift, A course in mathematical modeling, Mathematical Association of America, 1999.
- [8] R. Mickens et al., *A model of dieting*, SIAM Rev. 40, 667–672 (1998).
- [9] E. Hinch, Perturbation methods, Cambridge University Press, ...