

# Mathematik III

## Kapitel 3: Modelle

---

Prof. Dr. Erich Walter Farkas  
<http://www.math.ethz.ch/~farkas>  
HS 2021

**ETH** zürich

3.1. Modellbildung

3.2. Systeme

3.3. Beispiele von Modellen

3.4. Lineare Kompartimentmodelle

3.5. SIR-Modell

Ein grosser Dank geht an meinen Doktoranden Alexander Smirnow, der dieses Skript mitgestaltet und übersetzt hat.

Trotz unserer Bemühungen, das Skript fehlerfrei zu halten, schleichen sich doch ab und an Fehler ein. Es ist immer eine grosse Hilfe und wir freuen uns, wenn Fehler gemeldet werden, sodass wir diese schnell beheben können.

Bitte senden Sie Fehlermeldungen und Verbesserungsvorschläge an Alexander Smirnow ([alexander.smirnow@bf.uzh.ch](mailto:alexander.smirnow@bf.uzh.ch)).

# Modellbildung

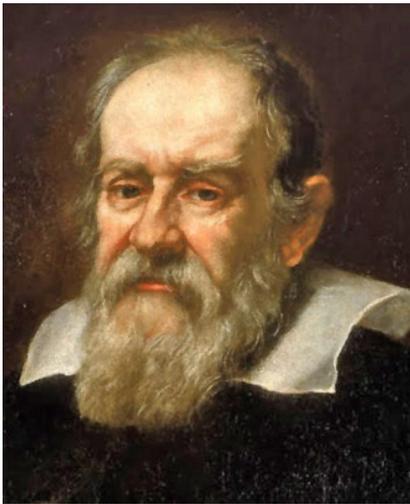
---

## Grundfragen.

- ▷ Was ist ein Modell?
- ▷ Wie erstellt man ein Modell?
- ▷ Was ist die Beziehung zwischen Modell und Realität?
- ▷ Was kann man mit einem Modell anstellen?

### Antwortversuch.

Ein mathematisches Modell ist die Beschreibung eines realen Phänomens in der Sprache der Mathematik.



### Galileo Galilei sagte 1623:

Das Buch der Natur ist in der Sprache der Mathematik geschrieben und ihre Buchstaben sind Dreiecke, Kreise und andere geometrische Figuren, ohne die es ganz unmöglich ist auch nur einen Satz zu verstehen, ohne die man sich in einem dunklen Labyrinth verliert. (Galileo Galilei: *Il Saggiatore*, 1623, *Edizione Nazionale*, Bd. 6, Florenz 1896, S. 232).



### **Eugene Wigner ergänzte 1960:**

The miracle of the appropriateness of the language of mathematics for the formulation of the laws of physics is a wonderful gift which we neither understand nor deserve. We should be grateful for it . . . (aus: The Unreasonable Effectiveness of Mathematics in the Natural Sciences).



### **Albert Einstein war kritischer eingestellt:**

Wie ist es möglich, dass die Mathematik, die doch ein von aller Erfahrung unabhängiges Produkt des menschlichen Denkens ist, auf die Gegenstände der Wirklichkeit so vortrefflich passt? (...) Hier- auf ist nach meiner Ansicht kurz zu antworten: Insofern sich die Sätze der Mathematik auf die Wirklichkeit beziehen, sind sie nicht sicher, und insofern sie sicher sind, beziehen sie sich nicht auf die Wirklichkeit. (Einstein, Geometrie und Erfahrung, 1921).

Aber wie sieht es mit Modellen ausserhalb der Physik aus?



**Israel Gelfand (1913–2009) meinte einst:**

There is only one thing which is more unreasonable than the unreasonable effectiveness of mathematics in physics, and this is the unreasonable ineffectiveness of mathematics in biology.



**Avner Friedman hält dem 2010 entgegen:**

The gulf between biology and mathematics is narrowing as each domain tackles the language, concepts, and methods of the other.

Typischerweise beschränken sich Modelle auf einen eng begrenzten Ausschnitt der Realität. Sie beschreiben Komponenten oder Subsysteme von grösseren Systemen. Das ist der sogenannte *reduktionistische Ansatz*. *Kritik:* Was nicht ins Modell passt wird ausgeblendet und man verliert die grösseren Zusammenhänge aus dem Auge.

Deshalb ist manchmal auch die Synthese von Modellen gefragt, der sogenannte *holistische Ansatz*.

Beide Ideologien können für unterschiedliche Situationen geeignet sein. Modelle sind eine vereinfachte Beschreibung der Wirklichkeit und es kann eine Vielzahl von Modellen für ein und dasselbe Naturphänomen geben.

Die Modellbildung ist *keine* mathematische Disziplin.

Es sind Kenntnisse aus der jeweiligen Disziplin über den zu modellierenden Vorgang erforderlich. Zu Beginn muss man sich Folgendes klar machen:

- ▷ Welchen Ausschnitt aus der Realität will man modellieren? Man legt also *Systemgrenzen* fest.
- ▷ Welche Effekte sind *relevant*, welche sind vernachlässigbar?
- ▷ Welche *mathematischen Strukturen* sind geeignet? Benutzen wir ODEs, PDEs, Statistik, lineare Algebra, Geometrie, ...?

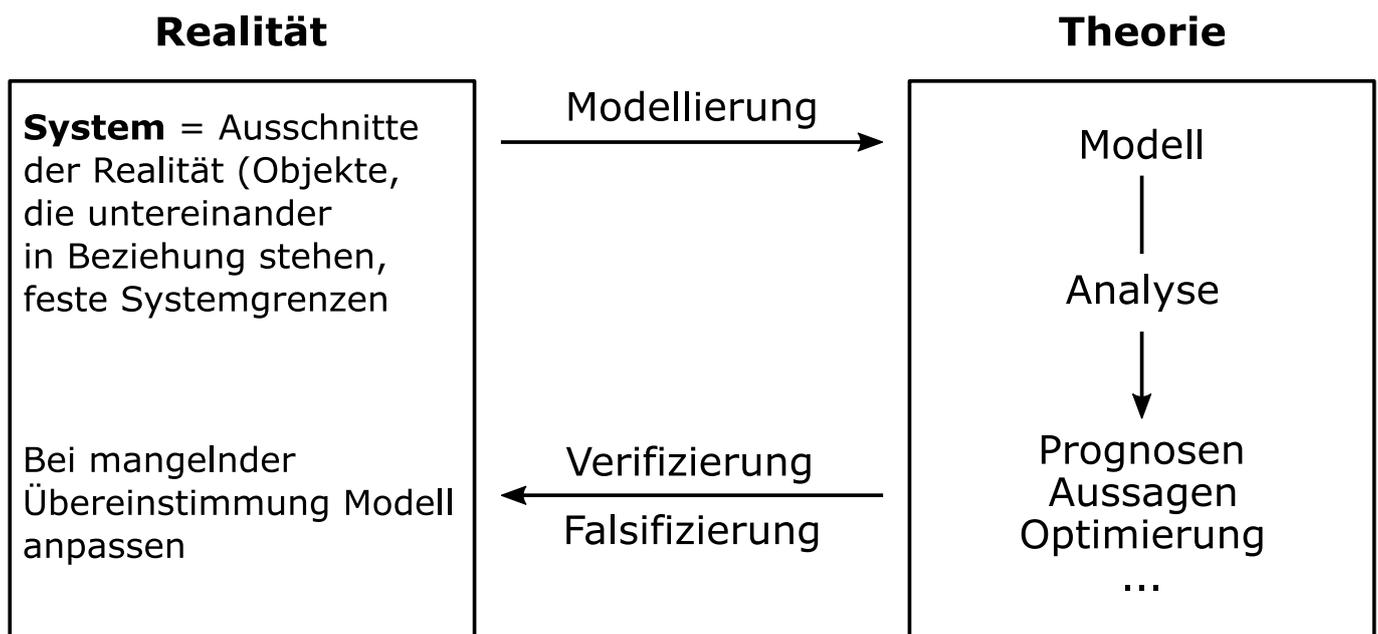
Folgende Überlegungen helfen oft bei der Modellbildung:

- ▷ Bilanzierung von Masse, Energie, Teilchenzahl, Individuen, etc.,
- ▷ Aufstellen einer Reaktionsgleichung,
- ▷ Betrachten von Wachstums-, Zerfalls- und Interaktionsprozessen,
- ▷ Betrachtung von Transportprozessen (Austausch, Diffusion),
- ▷ Ausweichen auf statistische Methoden bei Systemen mit vielen Freiheitsgraden (bei subjektiver oder objektiver Unsicherheit).

- ▷ Zuerst: Beobachten!
- ▷ Daten sammeln: Messungen,
- ▷ Daten ordnen: Suche nach mathematischen Mustern,
- ▷ Verstehen: Erkennen der Grundprinzipien, Erstellen des mathematischen Modells,
- ▷ Überprüfen (Validieren) des Modells: Vergleich mit der Realität,
- ▷ Anpassen, Verfeinern oder Verallgemeinern.

## Grundsatz:

Modell  $\neq$  Realität

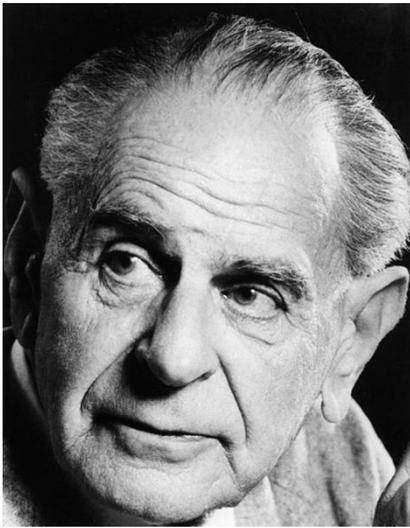


Die (mathematische) Analyse liefert nur innerhalb der Theorie korrekte Resultate, das bedeutet, nur wenn alle getroffenen Annahmen wahr sind.

Ist die mathematische Analyse zu schwierig, helfen numerische Simulationen und Berechnungen. Diese gelten natürlich nur approximativ.

Beispiele bekannter Theorien sind unter anderem

- ▷ Newtonsche Mechanik,
- ▷ Einsteins Relativitätstheorie,
- ▷ Quantenmechanik (Werner Heisenberg, Erwin Schrödinger, ...),
- ▷ Teilchenphysik (Vorhersage des Higgs Bosons),
- ▷ Statik (Festigkeit von Bauwerken),
- ▷ Mendelsche Gesetze (Vererbungslehre),
- ▷ Evolutionstheorie (Charles Darwin),
- ▷ Doppelhelixmodell der DNS (James Watson, Francis Crick),
- ▷ Zellbiologie (Anton van Leeuwenhoek, Robert Hooke).



## Karl Popper über Theorien:

Eine Theorie kann nicht verifiziert werden, sondern nur falsifiziert. (Logik der Forschung, 1934)

## Einstein über Theorien:

Neue Theorien entstehen zum einen, wenn neue Fakten nicht mit bestehenden Theorien erklärt werden können, zum anderen durch das Streben nach Vereinheitlichung und Vereinfachung zu einer Theorie als Ganzem.

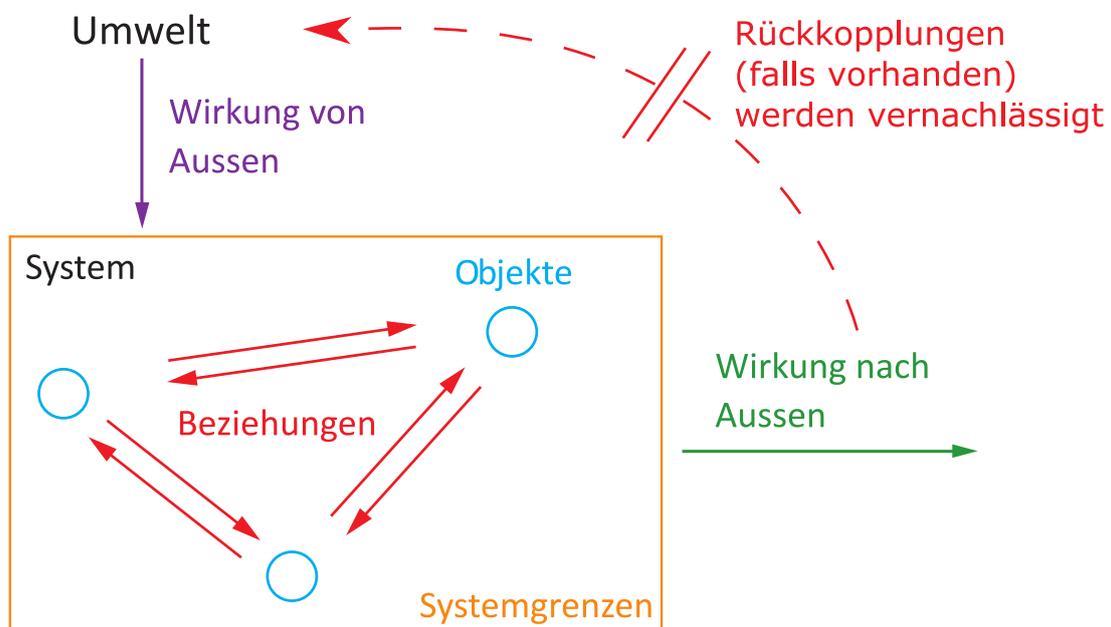
Modelle können nützlich sein für

- ▷ *Besseres Verständnis*: Welche Ursache hat welche Wirkung? Zum Beispiel, welche Parameter beeinflussen die Ausbreitung einer Seuche?
- ▷ *Optimierung*: Zum Beispiel zur Verringerung des Luftwiderstands bei Fahrzeugen, oder optimale Dosierung von Medikamenten.
- ▷ *Simulation*: Wenn theoretische oder analytische Methoden zu komplex sind, zum Beispiel bei Klimamodellen.
- ▷ *Virtuelle Experimente*: Wenn reale Experimente zu teuer, zu gefährlich oder undurchführbar sind. Zum Beispiel: Welche Erhöhung des Treibhausgases CO<sub>2</sub> führt zu welchem globalen Temperaturanstieg?
- ▷ *Prognose*: Modelle erlauben Vorhersagen über die Zukunft, zum Beispiel Wettervorhersagen.

# Systeme

---

Systemanalyse ist der erste Schritt der Modellbildung.

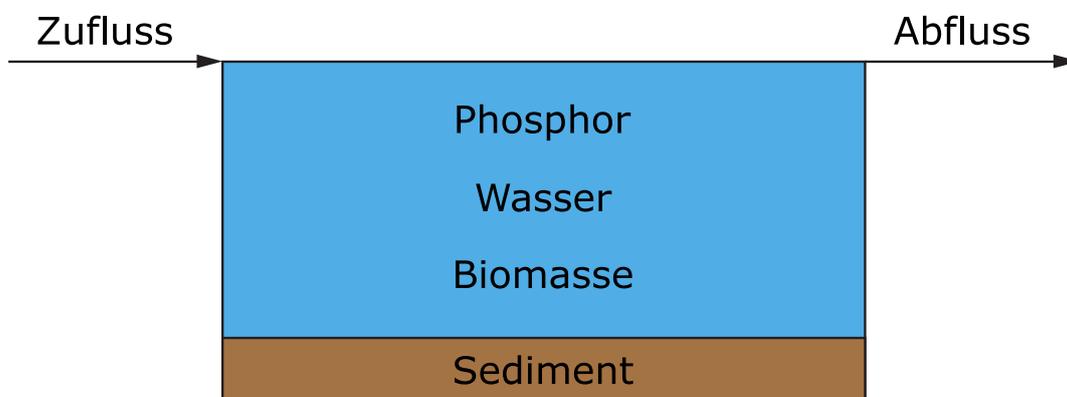


**Bemerkung:** Um Rückkopplungen zu integrieren, müssen die Systemgrenzen erweitert werden.

**Definition 3.1.** Ein *System* ist eine gedankliche Konstruktion, die einen durch festgelegte *Grenzen* definierten Teil der Umwelt abbildet und dabei die *Objekte* und deren *Beziehungen* identifiziert.

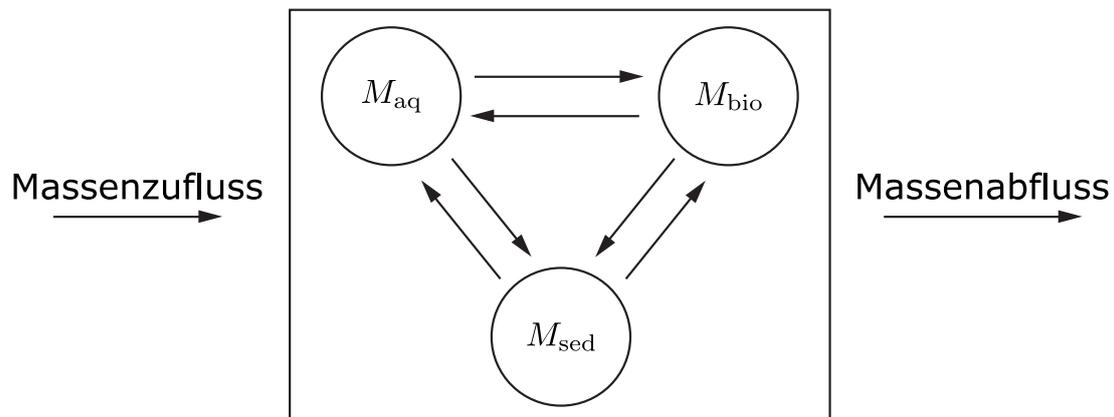
**Definition 3.2.** Ein *mathematisches Modell* ist eine vereinfachte Beschreibung eines komplexen Systems mithilfe mathematischer Formeln und *Systemvariablen* (z.B. Konzentration, Temperatur, Menge). Die Anzahl der Systemvariablen heisst *Dimension* des Modells.

### Beispiel 3.3. (*Phosphatkonzentration in einem See*)



- ▷ Zuerst legen wir die Systemgrenzen fest,
- ▷ dann definieren wir die Systemvariablen,
- ▷ und schliesslich definieren wir die inneren und äusseren Relationen (Empirie).

Wir betrachten die Komponenten des Systems vereinfacht als räumlich vollständig durchmischt (homogen), ein sogenanntes *Boxmodell*. In diesem Beispiel erhalten wir ein Modell mit 3 Systemvariablen.



- ▷ *Massenzufluss*: Masse an Phosphor im Zufluss [ $\text{kg sec}^{-1}$ ],
- ▷ *Massenabfluss*: Masse an Phosphor im Abfluss [ $\text{kg sec}^{-1}$ ],
- ▷  $M_{aq}$ : Masse an Phosphor im Wasser [kg],
- ▷  $M_{bio}$ : Masse an Phosphor in der Biomasse [kg],
- ▷  $M_{sed}$ : Masse an Phosphor im Sediment [kg].

Diese Größen hängen im Allgemeinen von der Zeit  $t$  und den Anfangsbedingungen ab. Statt mit den Massen rechnet man oft mit Konzentrationen. Über die Relationen (Pfeile) sind Modellannahmen zu treffen.

## Beispiele von Modellen

---

$$U = RI,$$

wobei

$U$  : Spannung über einem Widerstand [Volt],

$R$  : Widerstand [Ohm],

$I$  : Stromstärke [Ampère].

Es wurden über die Jahre verschiedene Modelle entwickelt.

- ▷ Auf einfachen Beobachtungen basierend (Phänomenologie):
  - Aristarchos von Samos (3. Jh. v. Chr): *Heliozentrisches Weltbild*,
  - Ptolemäus (2. Jh. v. Chr): *Geozentrisches Weltbild*.
- ▷ Vereinfachung des komplizierten geozentrischen Weltbildes:
  - Nikolaus Kopernikus (Anfang 16. Jh.): Heliozentrisches Weltbild.
- ▷ Messungen:
  - Tycho Brahe (Ende 16. Jh): Präzise Messungen wecken Zweifel am heliozentrischen System.

- ▷ Mathematisch-physikalisches Modell (erklärend) und datenbasiertes mathematisches Modell (beschreibend):
  - Johannes Kepler (Anfang 17. Jh.): *3 Keplersche Gesetze*,
  - Isaac Newton (Ende 17. Jh.): Keplers Gesetze folgen mathematisch aus dem *Gravitationsgesetz*.
  
- ▷ Verfeinerung: *Newtons Mechanik* ist eine Näherung der *relativistischen Mechanik*:
  - Albert Einstein (Anfang 20. Jh.): Periheldrehung des Merkur wird durch die allgemeine Relativitätstheorie erklärt.

### Beispiel 3.4. (*Algenwachstum und Nitratkonzentration*)

Sei  $X(t)$  die Algenkonzentration in einem See zu einem Zeitpunkt  $t$ . Bei konstanter Nitratkonzentration wächst die Algenkonzentration gemäss

$$X'(t) = \lambda X(t),$$

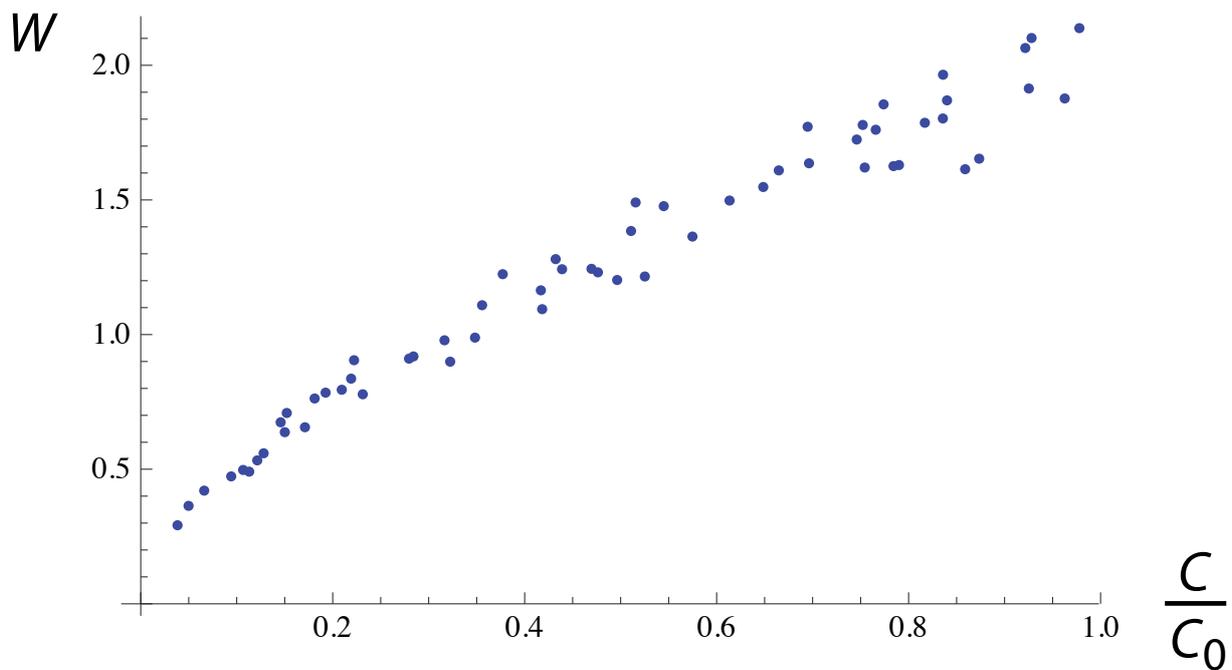
wobei der Wachstumskoeffizient  $\lambda = \lambda(C)$  von der Nitratkonzentration  $C$  abhängt. Das heisst, es gilt

$$\lambda(C) = \frac{X'(t)}{X(t)} = (\ln X(t))' =: W.$$

Über einen gewissen Zeitraum wurden nun gemessen:

- ▷ die Nitratkonzentration  $C$  im See, und
- ▷ das spezifische Wachstum  $W$  der Algenpopulation im See.

Bezogen auf eine Referenzkonzentration  $C_0$  ergibt sich folgendes Diagramm.



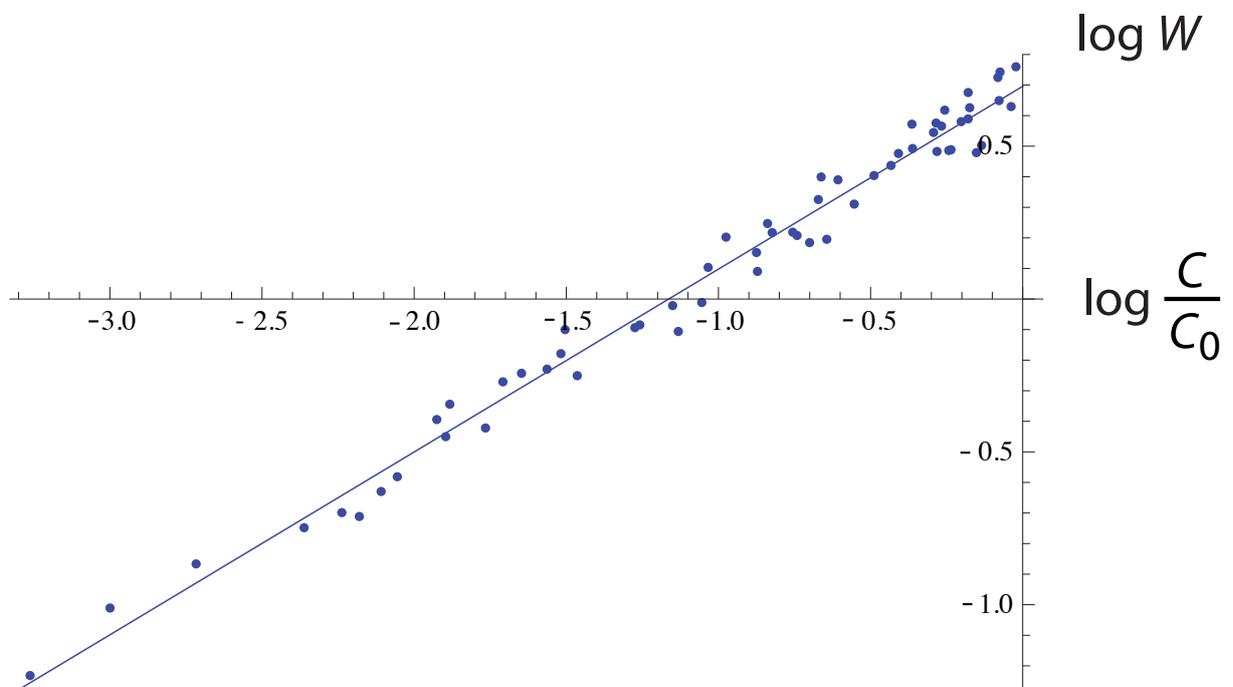
Wir vermuten daher ein Potenzgesetz der Art

$$W = W_0 \left( \frac{C}{C_0} \right)^\alpha, \text{ für } 0 < \alpha \leq 1.$$

Durch Logarithmieren gelangen wir auf

$$\log W = \log W_0 + \alpha \log \frac{C}{C_0}.$$

Die logarithmierten Daten sehen wie folgt aus.



Die *Regressionsgerade* hat Achsenabschnitt  $\log W_0 = 0.69$  und Steigung  $\alpha = 0.59$ .

Wir erhalten also die Modellgleichung für das spezifische Algenwachstum in Abhängigkeit der Nitratkonzentration als

$$W = e^{0.69} \left( \frac{C}{C_0} \right)^{0.59} .$$

### Beispiel 3.5. (Ein See als linearer Durchflussreaktor)

Dieses Beispiel ist typisch für lineare Modelle mit einer Systemvariablen. Betrachten wir die folgenden Parameter,

- ▷  $V =$  Volumen des Sees (konstant),
- ▷  $Q = Q(t) =$  Zufluss = Abfluss (Wassermenge pro Zeiteinheit),
- ▷  $C_{in} = C_{in}(t) =$  Konzentration eines Stoffs im Zufluss,
- ▷  $C = C(t) =$  Konzentration des Stoffs im See,
- ▷  $k =$  Abbaurate des Stoffs im See.

### Massenbilanz.

Änderung der Stoffmenge im See pro Zeit = + Zufuhr des Stoffs  
– Abfuhr des Stoffs  
– Abbau des Stoffs.

### Zwischenschritte.

- ▷ Menge des Stoffs im See =  $V \cdot C =: M$ ,
- ▷ Zufuhr des Stoffs =  $Q \cdot C_{in}$ ,
- ▷ Abfuhr des Stoffs =  $Q \cdot C$ ,
- ▷ Abbau des Stoffs =  $k \cdot M = k \cdot V \cdot C$ .

Also lautet die Systemgleichung

$$\frac{d(VC)}{dt} = QC_{in} - QC - kVC.$$

Da  $V$  konstant ist, liefert Division durch  $V$  also

$$C' = \frac{Q}{V} C_{in} - C \left( \frac{Q}{V} + k \right).$$

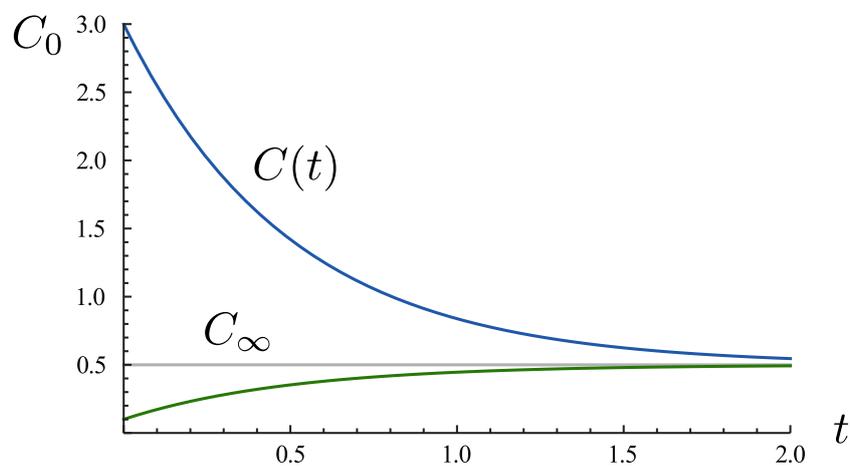
**Diskussion** (für konstante Koeffizienten).

Die *stationäre Lösung*,  $C' \equiv 0$ , erhalten wir durch Auflösen nach  $C$

$$C \equiv \frac{QC_{\text{in}}}{Q + kV} =: C_{\infty}.$$

Wir haben also eine inhomogene lineare ODE mit Lösung

$$C(t) = C_{\infty} + (C_0 - C_{\infty})e^{-t(k+Q/V)}.$$



**Abbildung 3.1:** Zwei Lösungen mit  $C_0 = 3$  in blau und  $C_0 = 0.1$  in grün. 244/408

**Beachten Sie:**  $C_h(t) := C(t) - C_\infty$  löst die homogene ODE  $C'_h = -(\frac{Q}{V} + k)C_h$ , das heisst  $C_h(t) = C_h(0)e^{-t(k+Q/V)}$ .

$C_h$  klingt somit in der *Halbwertszeit*

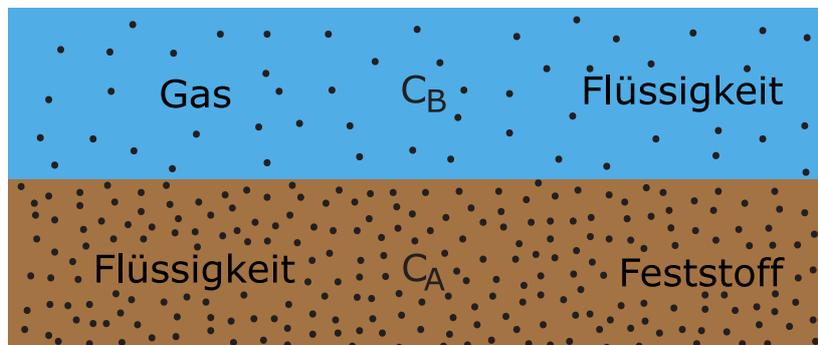
$$T_{\frac{1}{2}} = \frac{\ln 2}{k + Q/V}$$

jeweils um die Hälfte ab.

Statt Halbwertszeit wird oft die *Anpassungszeit* als Referenz genutzt, also die Zeit, um auf  $5\% = \frac{1}{20}$  abzuklingen.

$$T_{\frac{1}{20}} = \frac{\ln 20}{k + Q/V}.$$

## Im Gleichgewicht:



Ein Stoff S sei in einem Zweiphasensystem A und B gelöst. Im Gleichgewicht, bei niedriger Konzentration gilt das Gesetz von Henry:

$$\frac{C_A}{C_B} = K_{A/B} \quad (\text{Henry-Koeffizient}).$$

### Ausserhalb des Gleichgewichts:

Ist das System nicht im Gleichgewicht, ist der Stoffaustausch an der Grenzfläche netto

$$K_{A/B} = v_{A/B}(C_A - C_A^{\text{eq}}),$$

wobei

- ▷  $K_{A/B}$  = Massenfluss pro Fläche und Zeit von A nach B,
- ▷  $v_{A/B}$  = Austauschgeschwindigkeit,
- ▷  $C_A^{\text{eq}} = C_B K_{A/B}$  = Konzentration in A, die mit Konzentration  $C_B$  in Gleichgewicht wäre.

Dieses Beispiel ist typisch für ein mehrdimensionales lineares System.

- ▷  $V_1 =$  Volumen des Sees (konstant)
- ▷  $V_2 =$  Volumen des Sediments (konstant)
- ▷  $A =$  Fläche der Grenzschicht
- ▷  $Q = Q(t) =$  Zufluss = Abfluss (Wassermenge pro Zeiteinheit)
- ▷  $C_{in} = C_{in}(t) =$  Konzentration eines Stoffs im Zufluss
- ▷  $C_1 = C_1(t) =$  Konzentration des Stoffs im See
- ▷  $C_2 = C_2(t) =$  Konzentration des Stoffs im Sediment

Wir stellen die Massenbilanz auf:

$$\begin{aligned}\frac{d(V_1 C_1)}{dt} &= QC_{\text{in}} - QC_1 - v_{1/2}(C_1 - C_1^{\text{eq}})A \\ \frac{d(V_2 C_2)}{dt} &= v_{1/2}(C_1 - C_1^{\text{eq}})A,\end{aligned}$$

wobei  $C_1^{\text{eq}} = C_2 K_{1/2}$ .

Mit  $C := (C_1, C_2)^T$  sowie

$$M = \begin{pmatrix} -\frac{Q+Av_{1/2}}{V_1} & \frac{v_{1/2}K_{1/2}A}{V_1} \\ \frac{v_{1/2}A}{V_2} & -\frac{v_{1/2}K_{1/2}A}{V_2} \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad m = \begin{pmatrix} \frac{QC_{\text{in}}}{V_1} \\ 0 \end{pmatrix}.$$

lässt sich dies so schreiben

$$C' = MC + m.$$

Bei konstanten Koeffizienten ist die stationäre Lösung gegeben durch

$$C_{\infty} = -M^{-1}m$$

und die Lösung für die Anfangsbedingung  $C(0) = C_0$  is gegeben durch

$$C(t) = e^{Mt}(C_0 - C_{\infty}) + C_{\infty}.$$

# Lineare Kompartimentmodelle

---

Wir haben folgendes gelernt: Seien  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  und  $y' = Ay$  ein homogenes DGL-System.

Der Lösungsraum  $\mathcal{L}_A \subset C^1(\mathbb{R}; \mathbb{R}^n)$  ist ein  $n$ -dimensionaler Untervektorraum.

Um  $\mathcal{L}_A$  zu beschreiben, suchen wir eine Basis. Da  $\dim \mathcal{L}_A = n$ , suchen wir  $n$  linear unabhängige Lösungsfunktionen:

- ▷ Sei  $v$  ein Eigenvektor von  $A$  zum Eigenwert  $\lambda$ . Dann ist  $t \mapsto y(t) = e^{\lambda t} v$  eine Lösung des Systems mit  $y(0) = v$ .
- ▷ Angenommen,  $A$  hat  $n$  linear unabhängige Eigenvektoren  $v_1, \dots, v_n$  zu Eigenwerten  $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ . Dann bilden die Funktionen  $t \mapsto e^{\lambda_i t} v_i, i = 1, 2, \dots, n$  eine Basis von  $\mathcal{L}_A$ .

Seien  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  und  $g \in C^1(\mathbb{R}; \mathbb{R}^n)$ .

Wir suchen Lösungen  $y \in C^1(\mathbb{R}; \mathbb{R}^n)$  des *inhomogenen* Systems

$$y' = Ay + g. \quad (I)$$

Das zugehörige *homogene* System mit  $g = 0$  ist

$$y' = Ay. \quad (H)$$

Analog zum eindimensionalen Fall gilt:

*Die allgemeine Lösung von (I) ist die Summe einer partikulären Lösung von (I) und der allgemeinen Lösung von (H).*

Die allgemeine Lösung für (H) ist

$$e^{tA}\tilde{y}, \text{ für ein beliebiges } \tilde{y} \in \mathbb{R}^n.$$

Somit ist die allgemeine Lösung für (I) gegeben durch

$$y_p(t) + e^{tA}\tilde{y}, \text{ wobei } y_p \text{ eine partikuläre Lösung von (I) ist.}$$

Die Lösung des Anfangswertproblems für (H) ist gegeben durch

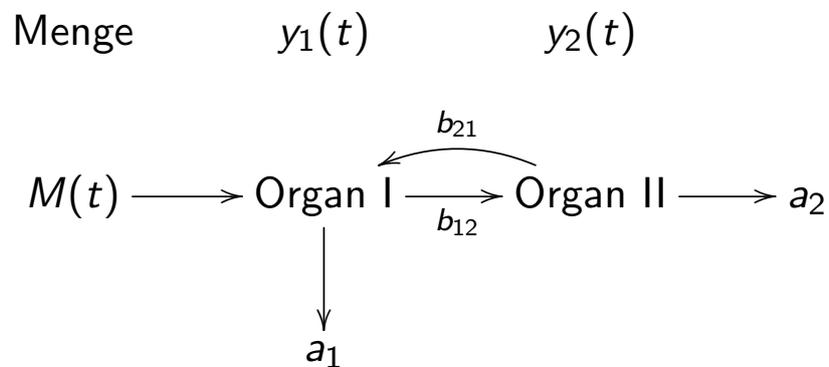
$$e^{tA}y_0 \text{ mit } y_0 = y(0),$$

und somit lautet die Lösung des Anfangswertproblems für (I)

$$y_p(t) + e^{tA}(y_0 - y_p(0)).$$

Ein Beispiel für  $y_p$  wäre der Stationärzustand  $y_\infty$ .

Betrachten Sie die Medikamentenmenge zur Zeit  $t$  in 2 Organen:



Beispiel eines *linearen Kompartiment-(Box)-Modells*.

Beschreibung der Entwicklung durch ein  $(2 \times 2)$ -System:

$$\begin{aligned}
 y_1'(t) &= M(t) - (a_1 + b_{12}) y_1(t) + b_{21} y_2(t) \\
 y_2'(t) &= b_{12} y_1(t) - (b_{21} + a_2) y_2(t)
 \end{aligned}$$

Die Matrixschreibweise des  $(2 \times 2)$ -Systems

$$\begin{aligned} y_1'(t) &= M(t) - (a_1 + b_{12}) y_1(t) + b_{21} y_2(t) \\ y_2'(t) &= b_{12} y_1(t) - (b_{21} + a_2) y_2(t) \end{aligned}$$

ist gegeben durch

$$\underbrace{\begin{pmatrix} y_1'(t) \\ y_2'(t) \end{pmatrix}}_{=y'(t)} = \underbrace{\begin{pmatrix} -(a_1 + b_{12}) & b_{21} \\ b_{12} & -(b_{21} + a_2) \end{pmatrix}}_{=A} \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} y_1(t) \\ y_2(t) \end{pmatrix}}_{=y(t)} + \underbrace{\begin{pmatrix} M(t) \\ 0 \end{pmatrix}}_{=g(t)},$$

und somit

$$y'(t) = Ay(t) + g(t).$$

Sei zum Beispiel

$$A = \begin{pmatrix} -(a_1 + b_{12}) & b_{21} \\ b_{12} & -(b_{21} + a_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{5} & \frac{2}{5} \\ -\frac{3}{5} & \frac{13}{10} \end{pmatrix},$$

und  $g(t) = (0, 0)^T$ , d.h. wir betrachten ein homogenes System.

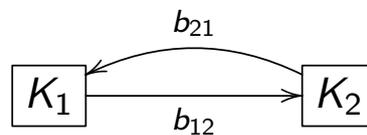
Die Eigenwerte und dazugehörigen Eigenvektoren sind gegeben durch

$\lambda_1 = 1, \lambda_2 = \frac{1}{2}$  und  $v_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}, v_2 = \begin{pmatrix} 4 \\ 3 \end{pmatrix}$  und somit ist

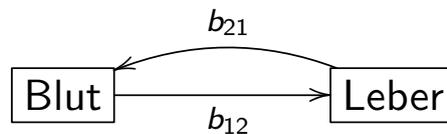
$$y(t) = C_1 e^t \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} + C_2 e^{\frac{1}{2}t} \begin{pmatrix} 4 \\ 3 \end{pmatrix}$$

eine allgemeine Lösung.

Wichtig: Die Eigenvektoren sind hier linear unabhängig!



Zum Beispiel

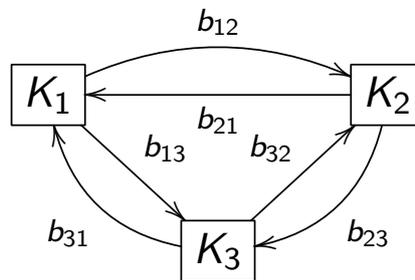


In Kompartiment  $K_i$  haben wir die Menge  $y_i(t)$ .

Die Entwicklung wird beschrieben durch

$$y_1' = -b_{12}y_1 + b_{21}y_2, \quad y_2' = b_{12}y_1 - b_{21}y_2$$

**Übung 3.6.** Schreiben Sie das System in Matrixnotation.



In Kompartiment  $K_i$  haben wir die Menge  $y_i(t)$ .

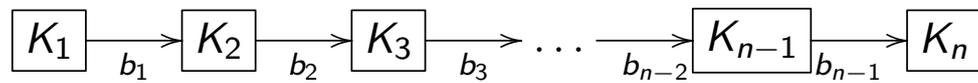
Die Entwicklung wird beschrieben durch

$$y_1' = -(b_{13} + b_{12})y_1 + b_{21}y_2 + b_{31}y_3,$$

$$y_2' = b_{12}y_1 - (b_{21} + b_{23})y_2 + b_{32}y_3$$

$$y_3' = b_{13}y_1 + b_{23}y_2 - (b_{31} + b_{32})y_3.$$

**Übung 3.7.** Schreiben Sie das System in Matrixnotation.

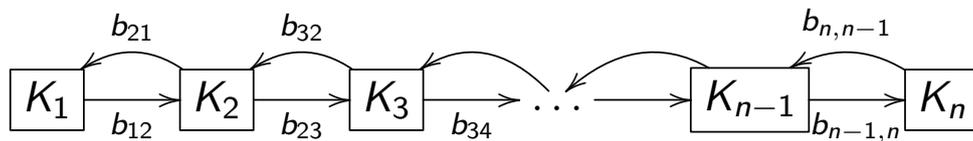


Die Entwicklung wird beschrieben durch

$$y_1' = -b_1 y_1, \quad y_2' = b_1 y_1 - b_2 y_2, \dots, \quad y_n' = b_{n-1} y_{n-1}.$$

In Matrixschreibweise  $y'(t) = Ay(t)$  erhalten wir

$$A = \begin{pmatrix} -b_1 & & & & & \\ b_1 & -b_2 & & & & \\ & \ddots & \ddots & & & \\ & & & b_{n-2} & -b_{n-1} & \\ & & & & b_{n-1} & 0 \end{pmatrix}.$$



Die Entwicklung wird beschrieben durch

$$y_1' = -b_{12}y_1 + b_{21}y_2,$$

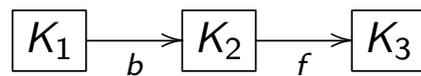
$$y_2' = b_{12}y_1 - (b_{23} + b_{21})y_2 + b_{32}y_3,$$

⋮

$$y_n' = b_{n-1,n} \cdot y_{n-1} - b_{n,n-1} \cdot y_n.$$



Seien  $a, b, c$  positive Konstanten und sei  $f : \mathbb{R}_{\geq 0} \rightarrow \mathbb{R}$  gegeben durch  $x \mapsto \frac{acx}{a+x}$ . Folgendes Modell ist nicht linear,

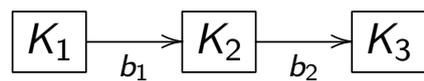


Die Entwicklung wird beschrieben durch das System

$$y_1' = -by_1, \quad y_2' = by_1 - \frac{y_2}{1 + \frac{y_2}{a}}, \quad y_3' = \frac{cy_2}{1 + \frac{y_2}{a}},$$

Der Ausdruck  $\frac{cy_2}{1 + \frac{y_2}{a}}$  ist die sogenannte *Michaelis-Menten-Wachstumsfunktion*.

Betrachten Sie das Modell

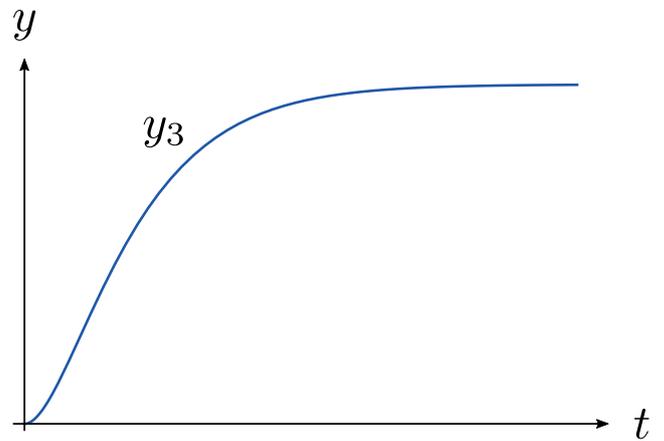
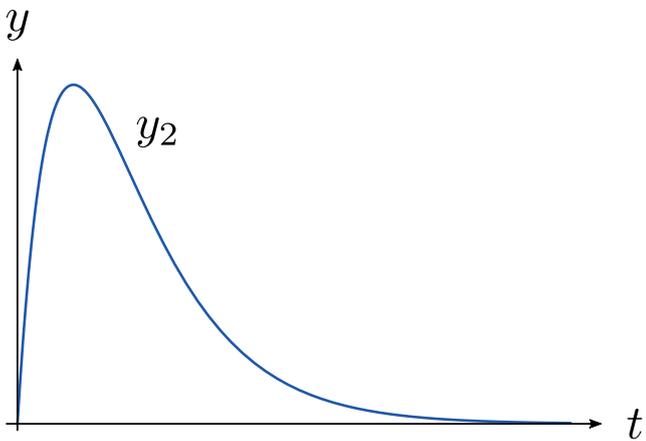
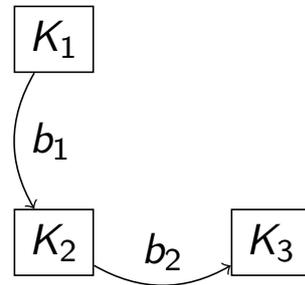
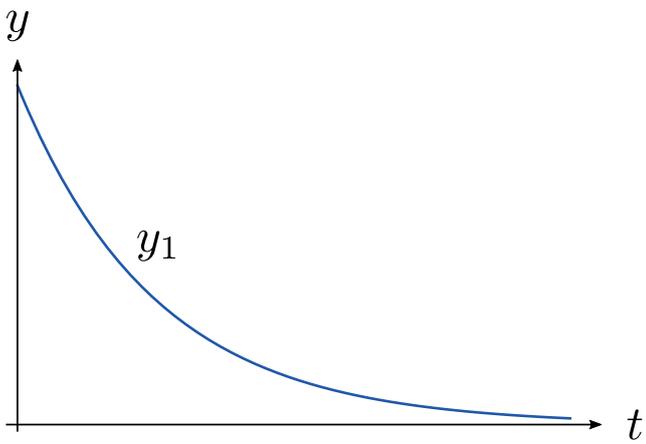


Dann gilt

$$y_1(t) = y_0 e^{-b_1 t},$$

$$y_2(t) = \frac{y_0 b_1}{b_2 - b_1} (e^{-b_1 t} - e^{-b_2 t}) \text{ "Bateman-Funktion" },$$

$$y_3(t) = \frac{y_0}{b_2 - b_1} (b_1 (e^{-b_2 t} - 1) - b_2 (e^{-b_1 t} - 1)).$$



## SIR-Modell

---

In diesem Abschnitt verwenden wir das *SIR-Modell* (susceptible-infected-recovered), um die Ausbreitung einer ansteckenden Krankheit mit Immunitätsbildung zu modellieren. Es wurde 1927 von William Ogilvy Kermack und Anderson Gray McKendrick erstellt, womit die beiden eine Pestepidemie in Bombay modellierten.

Dieses Modell ist recht simpel und soll Ihnen einen Einblick in die mathematische Epidemiologie geben. Des Weiteren vereinfachen wir es noch mehr, indem wir annehmen werden, dass die Population konstant bleibt.

Wir treffen folgende Annahmen:

- ▷ Die Krankheit ist von begrenzter Dauer und jeder Kranke wird wieder gesund.<sup>14</sup>
- ▷ Geheilte sind lebenslang gegen die Krankheit immun.
- ▷ Infizierte sind sofort ansteckend.
- ▷ Die Population ist isoliert, das bedeutet die Gesamtanzahl der Population ist konstant  $N > 0$ .
- ▷ Die entsprechenden Raten der Infektion und Genesung sind konstant.

---

<sup>14</sup>Oft spricht man statt von “recovered” von “removed”, um anzudeuten, dass die Krankheit tödlich verlaufen kann. In beiden Fällen können die Geheilten bzw. Verstorbenen nicht mehr anstecken oder angesteckt werden. Wir wählen also das weniger schlimme Szenario, indem alle gesund werden.

Wir unterteilen die Population der Grösse  $N$  in drei Gruppen:

- ▷  $S(t)$  = Anzahl Ansteckbarer zum Zeitpunkt  $t$  (susceptible)
- ▷  $I(t)$  = Anzahl Infizierter, die anstecken, zum Zeitpunkt  $t$  (infected)
- ▷  $R(t)$  = Anzahl Geheilte zum Zeitpunkt  $t$  (recovered)

Wir haben also

$$N \equiv S(t) + I(t) + R(t).$$

Den Mechanismus der Ansteckung definieren wir wie folgt:

- ▷ Wenn eine kranke und eine ansteckbare Person sich treffen, infiziert sich die letztere mit einer Wahrscheinlich  $p > 0$ .
- ▷ Die Wahrscheinlichkeit eines solchen Treffens im Zeitintervall  $[t, t + \Delta t]$  ist proportional (mit einem Faktor  $q$ ) zu  $S(t)$ ,  $I(t)$  und  $\Delta t$ . Somit erhalten wir

$$\Delta S := S(t + \Delta t) - S(t) = -pqS(t)I(t)\Delta t.$$

Wir teilen beide Seiten durch  $\Delta t$  und erhalten im Grenzwert  $\Delta t \rightarrow 0$  die erste Systemgleichung

$$S'(t) = -pqS(t)I(t). \quad (3.1)$$

Den Mechanismus der Genesung eines Kranken definieren wir wie folgt:

- ▷ Die Krankheit dauert im Durchschnitt  $n \in \mathbb{N}$  Tage.
- ▷ Wir nehmen Gleichverteilung an: Wählt man zufällig einen Kranken, so ist dieser mit Wahrscheinlichkeit  $\frac{1}{n}$  im  $k$ -ten Tag seiner Krankheit,  $k \in \{1, \dots, n\}$ .

Daraus folgt, dass jeden Tag im Durchschnitt  $\frac{1}{n}$  der Kranken wieder gesund werden. In einem Zeitintervall  $[t, t + \Delta t]$  werden also im Durchschnitt

$$\Delta R := R(t + \Delta t) - R(t) = \frac{1}{n} I(t) \Delta t$$

Kranke wieder gesund. Im Grenzwert  $\Delta t \rightarrow 0$  gilt somit,

$$R'(t) = \frac{1}{n} I(t). \quad (3.2)$$

Da wir annehmen, die Gesamtpopulation  $N \equiv N(t) = S(t) + I(t) + R(t)$  sei konstant, erhalten wir

$$0 = N'(t) = S'(t) + I'(t) + R'(t)$$

und somit erhalten wir die dritte Systemgleichung

$$I'(t) = -S'(t) - R'(t) = pqS(t)I(t) - \frac{1}{n}I(t). \quad (3.3)$$

Zusammengefasst erhalten wir also folgendes System von Differentialgleichungen:

$$\begin{aligned}S'(t) &= -pqS(t)I(t) \\I'(t) &= pqS(t)I(t) - \frac{1}{n}I(t) \\R'(t) &= \frac{1}{n}I(t).\end{aligned}\tag{3.4}$$

Obwohl dieses System recht simpel ist, ist es nicht linear, und somit können wir unser “Matrixvorgehen” nicht benutzen. Tatsächlich hat dieses System keine analytische Lösung, daher greifen wir auf numerische Methoden zurück.

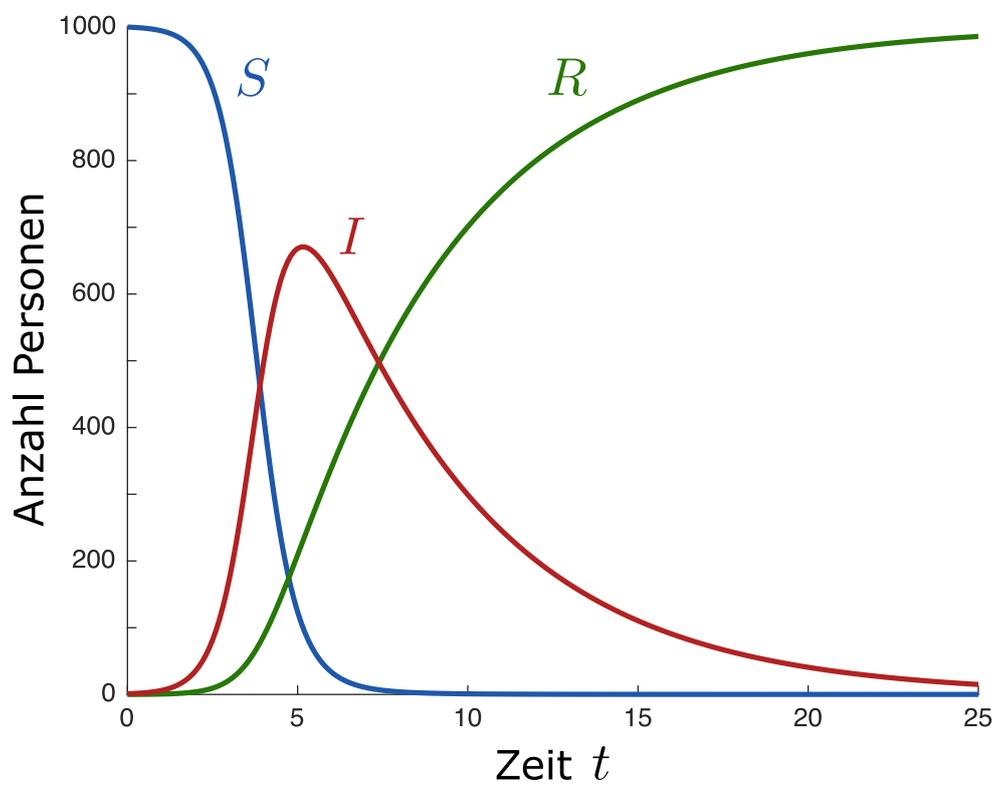
Wie wir später sehen werden, ist eine Parametrisierung allerdings möglich.

**Beispiel 3.8.** Unter  $N = 1000$  Studierenden einer Universität ist eine Person infiziert. Wir nehmen an, die Krankheit dauert im Schnitt  $n = 5$  Tage und die Wahrscheinlichkeit eines “infektiösen Treffens” beträgt  $pq = 0.002$ .

Somit lösen wir das System

$$\begin{aligned} S'(t) &= -0.002 \cdot S(t)I(t) & S(0) &= 999 \\ I'(t) &= 0.002 \cdot S(t)I(t) - 0.2 \cdot I(t) & \text{mit } I(0) &= 1 \\ R'(t) &= 0.2 \cdot I(t) & R(0) &= 0 \end{aligned}$$

In [Abbildung 3.2](#) sehen Sie die Lösungskurven. Es scheint so, als würde sich die ganze Bevölkerung anstecken. Das klingt auch plausibel, da die Population konstant bleibt und sich jeder früher oder später anstecken sollte. Wir werden aber sehen, dass dies nicht der Fall ist.



**Abbildung 3.2:** Typischer Verlauf einer Epidemie anhand des SIR-Modells

Wir erhalten zwar keine explizite Lösung, dennoch können wir einige interessante Aussagen über den Epidemieverlauf herleiten.

- ▷ *Monotonie*: Solange  $I$  und  $S$  strikt positive sind, gilt nach Gleichung (3.1)  $S'(t) < 0$  für alle  $t > 0$  und somit ist  $S$  strikt monoton fallend.
- ▷ *Höhepunkt der Epidemie*: Sei  $t_{\max}$  der Zeitpunkt, zu dem die Anzahl Infizierter maximal ist. Dann gilt  $I'(t_{\max}) = 0$ . Wir können  $t_{\max}$  hieraus nicht explizit berechnen, doch wir erhalten aus Gleichung (3.3) folgende Beziehung,

$$S(t_{\max}) = \frac{1}{npq}.$$

- ▷ *Invariante*: Die Funktion  $R$  taucht weder in [Gleichung \(3.1\)](#) noch in [Gleichung \(3.3\)](#) auf und somit ist [Gleichung \(3.2\)](#) entkoppelt vom System. Insbesondere haben wir  $N \equiv N(t) = S(t) + I(t) + R(t)$ . Hieraus folgt für  $t \geq 0$

$$R(t) = S(0) + I(0) + R(0) - (S(t) + I(t)).$$

- ▷ *Zustandsraum*: Um den Verlauf der Krankheit besser zu verstehen, können wir die Trajektorien im Zustandsraum betrachten. Wir definieren also die parametrisierte Kurve in der “ $(S, I)$ -Ebene” als

$$t \mapsto (S(t), I(t)) \in \mathbb{R}^2.$$

Vergleichen Sie hierzu [Abbildung 3.3](#). Da wir  $S$  und  $I$  nicht explizit kennen, müssen wir einen Trick anwenden.

Wir können die Kurve  $t \mapsto (S(t), I(t))$  im  $\mathbb{R}^2$  als eine Funktion  $S \mapsto I(S) \in \mathbb{R}$  auffassen. Der Trick ist nun, die Ableitung zu betrachten, da wir den Ausdruck  $\frac{dI}{dS}$  aus den Gleichungen (3.1) und (3.3) berechnen können,

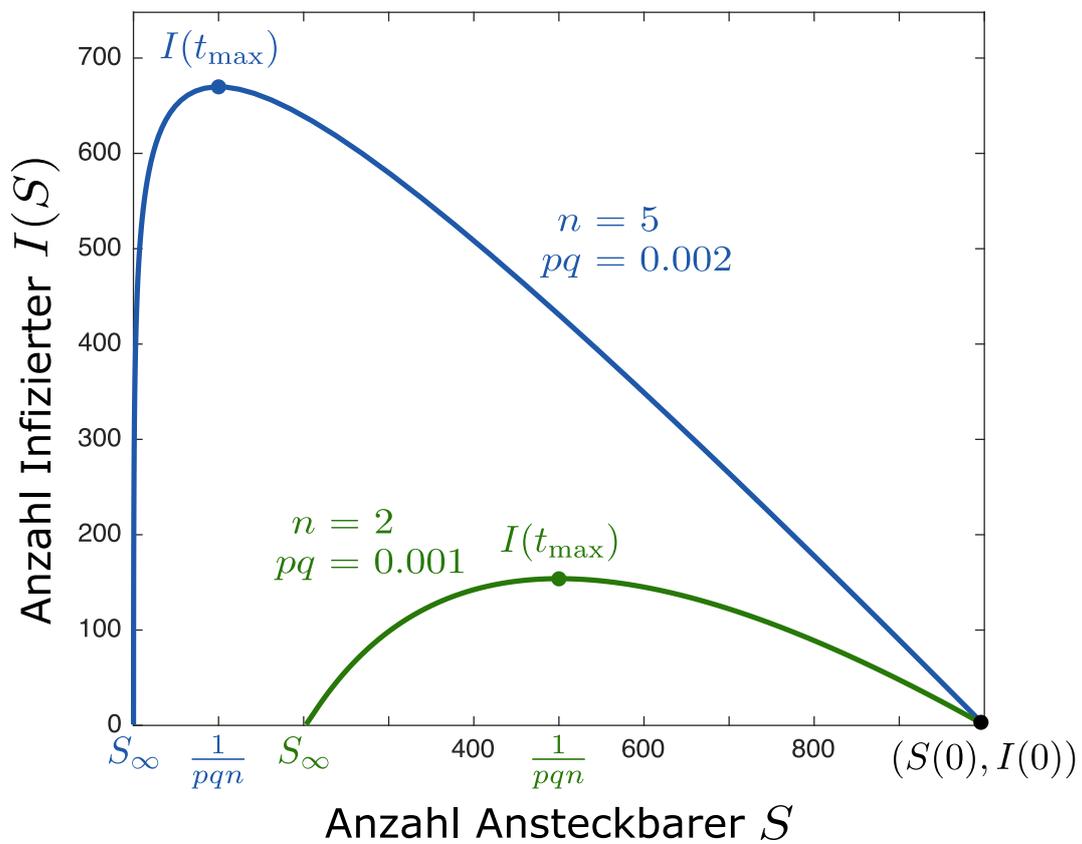
$$\frac{dI}{dS}(S) = \frac{\frac{dI}{dt}}{\frac{dS}{dt}} = \frac{pqSI - \frac{1}{n}I}{-pqSI} = \frac{1}{pqnS} - 1. \quad (3.5)$$

Nach Integration erhalten wir also die Abbildung  $S \mapsto I(S)$  als

$$I(S) = \int \left( \frac{1}{pqnS} - 1 \right) dS = \frac{1}{pqn} \ln(S) - S + C,$$

wobei  $C$  die Integrationskonstante bezeichnet. Diese erhalten wir aus den Anfangsbedingungen  $S(0)$  und  $I(0)$ . Für unser Beispiel oben ergibt sich

$$1 \stackrel{!}{=} I(999) = \frac{1}{0.002 \cdot 5} \ln(999) - 999 + C, \text{ also } C = 309.3245 \dots$$



**Abbildung 3.3:** Zwei Verläufe einer Epidemie in der  $(S, I)$ -Ebene. Blau: erstes Beispiel mit  $n = 5$ ,  $pq = 0.002$ . Grün: milder Verlauf mit  $n = 2$ ,  $pq = 0.001$ .

▷ *Qualitatives Verhalten:* Für  $t = 0$  erhalten wir aus Gleichung (3.5)

$$\frac{dI}{dS}(S(0)) = \frac{1}{pqnS(0)} - 1,$$

woraus wir folgendes Verhalten herleiten können:

- Ist  $S(0) > \frac{1}{pqn}$ , so steigt  $I$  an bis  $S$  den Wert  $\frac{1}{pqn}$  annimmt. An diesem Punkt ist  $I$  maximal und fällt danach monoton gegen 0 ab und  $S$  läuft gegen einen Grenzwert  $S_\infty > 0$ .
- Ist  $S(0) < \frac{1}{pqn}$ , so ist  $S(t) < \frac{1}{pqn}$  für alle  $t$ .  $I$  fällt monoton gegen 0 und hat somit kein inneres Maximum.  $S$  läuft wiederum monoton fallend gegen einen Grenzwert  $S_\infty > 0$ .

Die Krankheit stirbt also aus, bevor sie die ganze Bevölkerung infizieren konnte.

Für die Gesundheitsbehörden ist der kritische Wert  $\frac{1}{pqn}$  von zentraler Bedeutung. Ein Ziel ist es, diesen Wert möglichst gross zu halten und somit eine unkontrollierte Ausbreitung zu verhindern.

- ▷ Man kann meistens die Länge der Krankheit  $n$  nicht direkt beeinflussen. Wenn man allerdings Infizierte schon nach  $n' < n$  Tagen isoliert, hat es den gleichen Effekt. Infizierte können nicht mehr anstecken und gehen somit in die Gruppe der “removed” über.
- ▷ Durch Massnahmen wie Mundschutz, Abstand halten, keine grossen Versammlungen halten, Hände waschen, Kondome benutzen, können die Wahrscheinlichkeiten  $p$  und  $q$  verkleinert werden, und somit wird  $\frac{1}{pqn}$  grösser.
- ▷ Wenn man im Vorfeld die Anzahl der Infizierbaren durch Impfung verkleinert und unter den Wert  $\frac{1}{pqn}$  bringt, dann klingt die Epidemie von alleine ab.

[Abbildung 3.4](#) illustriert den Erfolg solcher Massnahmen. In diesem Beispiel ist  $n = 2$  und  $pq = 0.001$ , dies korrespondiert zu der grünen Kurve in [Abbildung 3.3](#).

Wir sehen zwei wünschenswerte Effekte.

- ▶ Zum einen verläuft die Epidemie deutlich langsamer. Somit wird das Gesundheitswesen nicht so stark überlastet.
- ▶ Zum anderen erreicht die Krankheit nicht die ganze Population.

Vergleichen Sie [Abbildung 3.2](#), [Abbildung 3.3](#) und [Abbildung 3.4](#) miteinander.

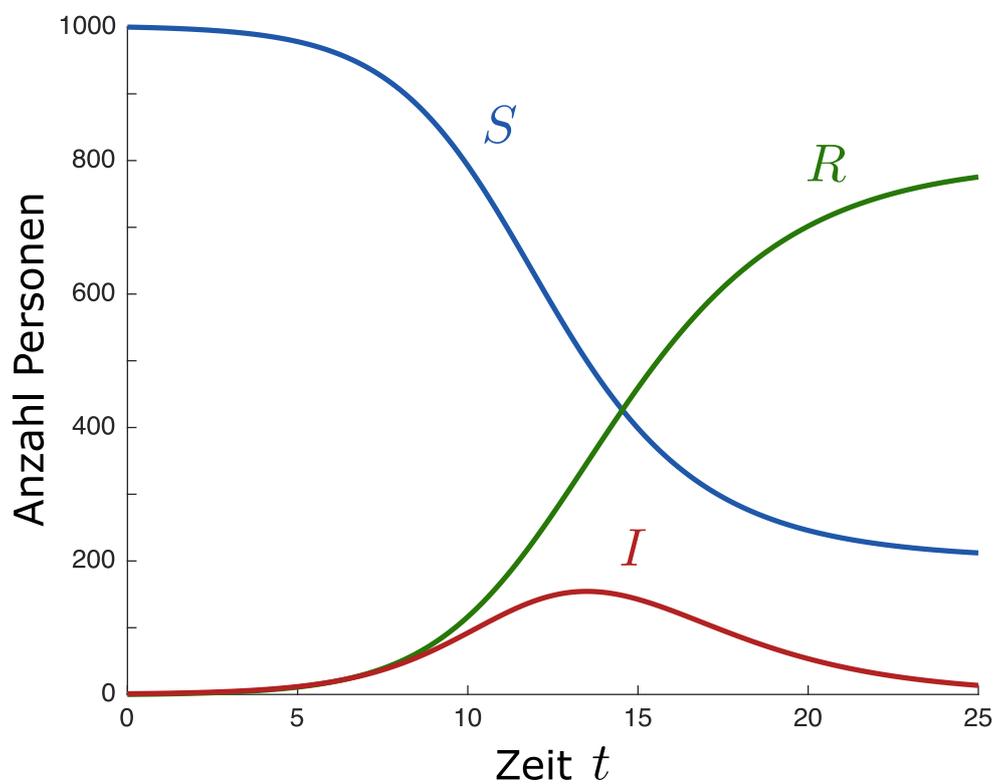


Abbildung 3.4: Ein milder Verlauf einer Epidemie anhand des SIR-Modells

**Übung 3.9.** Schauen Sie das Video von *3Blue1Brown* mit schönen Visualisierungen verschiedener Versionen des SIR-Modells:  
<https://youtu.be/gxAa02rsdIs>.

Vergleichen Sie Grant Sandersons Modelle und Schlussfolgerungen mit unseren.

Damit Sie selber mit diesem Modell experimentieren können, müssen sie es zuerst numerisch lösen können. Es gibt sehr viele Ansätze, wie man an solch ein Problem herangeht.

Die einfachste Methode ist das sogenannte *explizite Euler-Verfahren*. Ausgehend von einem Anfangswert berechnet man dabei iterative Punkte, die die Lösung approximieren.

Genauer: Betrachten Sie ein AWP erster Ordnung der Form

$$y'(t) = f(t, y(t)), \text{ mit } y(t_0) = y_0, \quad (3.6)$$

wobei  $f : [t_0, \infty) \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$  und  $y_0 \in \mathbb{R}^n$ .<sup>15</sup>

---

<sup>15</sup>Wir nehmen hier o.B.d.A. ODEs erster Ordnung, da wir ODEs höherer Ordnung in ein System von ODEs erster Ordnung umschreiben können.

Man diskretisiert nun die Ableitung mit einer Finiten-Differenzen-Methode für eine Schrittweite  $h > 0$ ,

$$y'(t) \approx \frac{y(t+h) - y(t)}{h},$$

formt dann um,

$$y(t+h) \approx y(t) + hy'(t),$$

und setzt schliesslich [Gleichung \(3.6\)](#) ein,

$$y(t+h) \approx y(t) + hf(t, y(t)).$$

Das heisst, ausgehend von dem Funktionswert zum Zeitpunkt  $t$ , können wir damit den Funktionswert zum Zeitpunkt  $t+h$  approximieren. Und diesen können wir bei der nächsten Approximation benutzen, und so weiter.

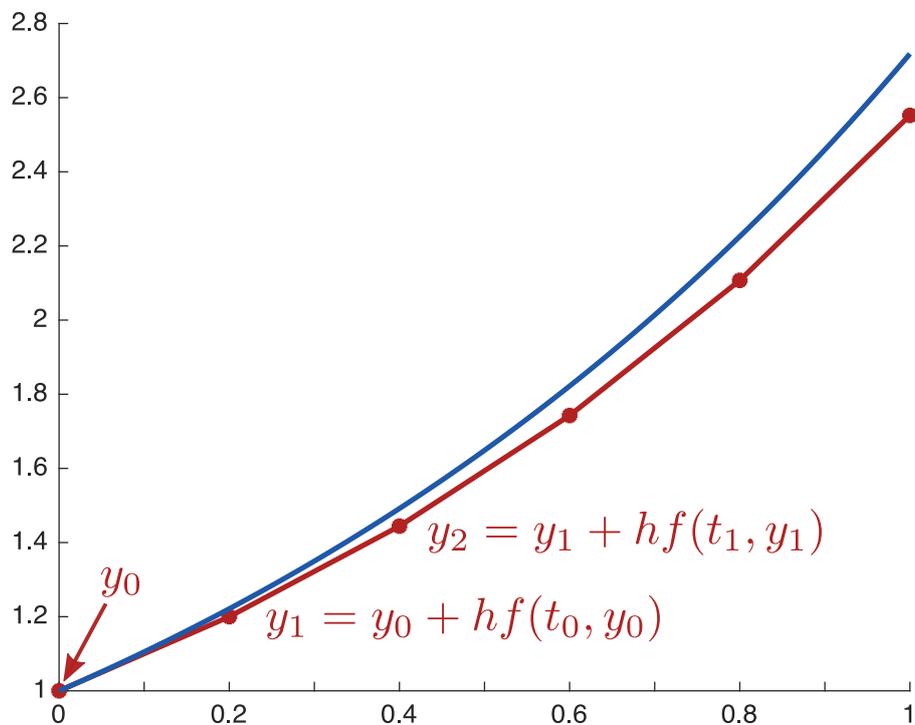
Also legen wir ein Gitter mit Schrittweite  $h$  fest,  
 $t_0, t_1 = t_0 + h, \dots, t_n = t_0 + nh$ , starten an unserem Anfangswert  
 $y(t_0) = y_0$  und laufen dann mit der Steigung  $y'(t_0) = f(t_0, y_0)$  und  
Schrittweite  $h$  zum nächsten Punkt. Das ganze wiederholen wir bis wir bei  
 $t_n$  ankommen.

Hieraus ergibt sich also das rekursive Schema,

$$y_{k+1} = y_k + hf(t_k, y_k), \quad k \in \{0, \dots, n-1\},$$

wobei  $y_k$  die Approximation von  $y(t_k)$  ist.

Wir illustrieren hier das Vorgehen anhand der Exponentialfunktion.



**Abbildung 3.5:** Illustration des expliziten Euler-Verfahrens mit  $h = 0.2$  und  $f(t, y) = \exp(t)$

**Übung 3.10.** Übersetzen Sie den Matlab Code in [Listing 3.1](#), der eine Abbildung ähnlich zu [Abbildung 3.5](#) produziert, in Python und experimentieren Sie ein wenig herum.

- ▷ Was passiert, wenn Sie  $h$  verkleinern?
- ▷ Versuchen Sie eine andere Differentialgleichung zu lösen, z.B.

$$y_1'(t) = 2t \cdot y_1(t) \quad \text{mit } y_1(0) = 1,$$

oder

$$y_2'(t) = 2t \cdot y_2(t) + t^3 \quad \text{mit } y_2(0) = 0.$$

Die Lösungen sind  $y_1(t) = \exp(t^2)$  und  $y_2(t) = \frac{1}{2}(\exp(t^2) - t^2 - 1)$ .

- ▷ Vergleichen Sie die analytischen und numerischen Lösungen für verschiedene Schrittweiten.

```
1      % Loesung von AWP  $y'(t)=f(t,y(t))$ ,  $y(t_0) = y_0$ 
2      % anhand explizitem Euler-Verfahren
3      f = @(t,y) exp(t); % Funktion
4      h = 0.1;           % Schrittweite
5      t = 0:h:1;        % Gitter
6      y = zeros(size(t)); % Init. Loesungsvektor
7      y0 = 1; y(1) = y0; % Anfangswert
8
9      % explizites Euler-Verfahren
10     for k=1:length(t)
11         y(k+1) = y(k) + h*f(t(k), y(k));
12     end
13
14     figure; hold on;
15     plot(t,y(1:end-1), 'r-*'); % Plot Annaeherung
16     plot(0:0.01:1,exp(0:0.01:1), 'b-'); % Plot Loesung
```

**Listing 3.1:** Explizites Euler-Verfahren anhand der Exponentialfunktion

**Übung 3.11.** Lösen Sie nun das SIR-Modell aus [Beispiel 3.8](#) mit Ihrem Code aus [Übung 3.10](#).

- ▷ Definieren Sie zuerst drei Funktionen

$$f_S(t, S(t), I(t), R(t)) = -pq \cdot S(t)I(t),$$

$$f_I(t, S(t), I(t), R(t)) = pq \cdot S(t)I(t) - \frac{1}{n} \cdot I(t),$$

$$f_R(t, S(t), I(t), R(t)) = \frac{1}{n} I(t).$$

- ▷ Wählen Sie ein Gitter  $t$  mit Einträgen  $t[k] = hk$ ,  $k \in \{0, \dots, N\}$  mit einer Schrittweite  $h > 0$ .
- ▷ Initialisieren Sie drei Lösungsarrays  $S, I, R$  und setzen Sie die Anfangsbedingungen ein,  $S[0] = 999$ ,  $I[0] = 1$ ,  $R[0] = 0$ .

- ▷ Lösen Sie dieses Differentialgleichungssystem mit dem expliziten Euler-Verfahren. Programmieren Sie eine for-Schleife analog zu [Listing 3.1](#) und berechnen Sie rekursiv

$$\begin{aligned}S[k + 1] &= S[k] + hf_S(t[k], S[k], I[k], R[k]), \\I[k + 1] &= I[k] + hf_I(t[k], S[k], I[k], R[k]), \\R[k + 1] &= R[k] + hf_R(t[k], S[k], I[k], R[k]).\end{aligned}$$

- ▷ Plotten Sie nun ihre Lösung.

**Bemerkung 3.12.** Wenn Sie die Schrittweite in [Übung 3.11](#) klein genug wählen, z.B. im Bereich  $h = 0.01$ , erhalten Sie schon eine gute Näherung der Lösung.

**Bemerkung 3.13.** Das explizite Euler-Verfahren ist die naheliegendste Idee, ODEs zu lösen, ist dafür aber auch “recht ungenau” und klappt auch nicht immer.

Etwas kompliziertere dafür genauere Verfahren sind die sogenannten *Runge-Kutta-Verfahren*, die wir für die Lösung in [Beispiel 3.8](#) verwendet haben. Genauer haben wir das vierstufige Runge-Kutta-Verfahren angewandt, meistens abgekürzt als *RK4*.

Die Idee ist ähnlich und Sie können Ihren Code schnell anpassen, um dieses Verfahren zu verwenden.

**Übung 3.14.** Schauen Sie online, z.B. auf Wikipedia, welche Änderungen Sie in Ihrem Code vornehmen müssen und lösen Sie das SIR-Modell mit RK4. Vergleichen Sie die Lösung mit der Lösung des expliziten Euler-Verfahrens.