

Fortgeschrittene Mathematische Modellierung

a.o.Univ.Prof. Mag.Dr. Stephen Keeling

<http://math.uni-graz.at/keeling/>

Unterlagen und Literatur:

<http://math.uni-graz.at/keeling/teaching.html>

Inhaltsverzeichnis I

Einführung

- Erstes Erlebnis der Modellierung
- Was ist Modellierung?
- Schritte der Modellierung
- Modelltypen
- Zwecke der Modellierung

Infektionsmodelle

- Kompartimentemodelle
- Kontinuierliches *SIR* Modell
- Gleichgewichte und Stabilität für Kontinuierliches Modell
- Periodische Lösungen
- Grenzyklen
- Zeitabhängige Infektiosität
- Diskretes *SIR* Modell
- Gleichgewichte und Stabilität für Diskretes Modell
- Stochastisches *SIR* Modell
- Gleichgewichte und Stabilität für Stochastisches Modell
- Implementierung des Stochastischen *SIR* Modells
- SIR* Modell mit Spontaner Infektion
- Stochastischer *SIR* Zellular-Automat
- Implementierung eines *SIR* Zellular-Automaten
- Lotka-Volterra Gleichungen für *SIR* mit Bewegung

Wärmetransport

- Einfaches Erdwärmesystem
- Wärmeaufnahme
- Parallele Kollektoren
- Wärmeabgabe
- 0D Ergebnisse
- Mehr-Kompartimente-Modell eines Erdwärmesystems
- 1D Ergebnisse
- Konvektions- und Diffusions-Gleichung
- Haus-Simulation
- Garten-Simulation

Inhaltsverzeichnis II

2D Ergebnisse

Stofftransport

DCE-MRI

Konvektions- und Diffusions-Gleichung

Faltungsmodell

Physiologische Parameter vom Faltungskern

Bestimmung des Faltungskerns

Entfaltung ist schlecht gestellt

Regularisierung der Entfaltung

SWZ Ansatz

SWZ Ergebnisse

Ansatz mit Exponentieller Basis

Ergebnisse mit Exponentieller Basis

Membranmechanik

Federdynamik

Reibungskräfte

Gedämpfte Federschwingungen

Membranstatik

Minimierung der Potentiellen Energie

Membrandynamik

Augendynamik

Cerclage Operation

Konstruktion eines Potentials

Einschränkung der Inkompressibilität

Modell der Bandkraft

Modell der Membranspannung

Lösungsweg

Erhaltungssätze

Euler Gleichungen

Skalar-Erhaltungssätze

Charakteristiken

Nicht Glatte Daten

Burgersche Gleichung

Inhaltsverzeichnis III

- Schocks
- Das Riemannsche Problem
- Nicht Eindeutigkeit der Lösung
- Rankine-Hugoniot und Entropie Bedingungen
- Verkehrsfluss
- Riemannsche Probleme für Verkehrsfluss
- Nächtlicher Verkehrsfluss
- Detonationswellen im Verkehr
- Newton und Bremsenkraft

Stochastische Differentialgleichungen

- Heuristik
- Itô's Formel
- Itô's Formel
- Verteilung einer Brownschen Bewegung
- Definition einer Brownschen Bewegung
- Konstruktion einer Brownschen Bewegung
- Existenz einer Brownschen Bewegung
- Itô Integrale
- Formel von Itô
- Haltzeiten
- Haltzeiten und PDG
- Optimale Haltzeit
- Optionspreistheorie

Erstes Erlebnis

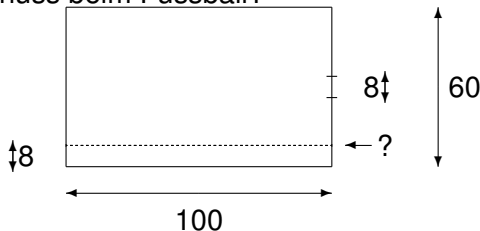
▶ *Supersize Me!*

- ▶ Ein Mann isst nur beim McDonalds
 - ▶ 30 Tage lang, dreimal täglich
 - ▶ jedes Produkt mindestens einmal,
 - ▶ zum “Supersize?” antwortet er immer “Ja”,
 - ▶ weniger als 5000 Schritte täglich,
 - ▶ konsumiert ungefähr 5000 kcal/Tag

Er nimmt zu: 84kg → 95.5kg.

- ▶ Hätte man die Zunahme voraussagen können?
- ▶ Wenn er fortgesetzt hätte, was wäre das Gleichgewicht gewesen?

▶ Bester Schuss beim Fussball?



An welcher Stelle soll geschossen werden?

Lösungsmöglichkeiten

► Supersize Me!

- Massenerhaltung: Änderungsrate = Zufluss - Abfluss

$$\frac{dm}{dt} = z - a$$

- Daumenregel: kcal-Bedarf/Tag $\approx \phi m$, $\phi = 21.6$.

- Wenn $m' = 0$,

$$z = a = \frac{m(\text{kg}) \cdot \phi \left(\frac{\text{kcal}}{\text{kg} \cdot \text{Tag}} \right)}{\kappa \left(\frac{\text{kcal}}{\text{kg}} \right)} \quad \frac{\text{kg}}{\text{Tag}}$$

- Konversionsfaktor $\kappa = ?$

Fett $9 \frac{\text{kcal}}{\text{g}}$, Kohlenhydrate $4 \frac{\text{kcal}}{\text{g}}$, Eiweiss $4 \frac{\text{kcal}}{\text{g}}$

McDonalds Mischung: $7.8 \frac{\text{kcal}}{\text{g}} = 7800 \frac{\text{kcal}}{\text{kg}}$, $\kappa = 7800$.

- Gegeben:

$$\epsilon = 5000, \quad z = \frac{\epsilon \frac{\text{kcal}}{\text{Tag}}}{\kappa \frac{\text{kcal}}{\text{kg}}} \quad \frac{\text{kg}}{\text{Tag}}$$

- Mathematisches Modell:

$$\frac{dm}{dt} = \frac{\epsilon}{\kappa} - \frac{m\phi}{\kappa}, \quad m(0) = m_0 = 84, \quad m(30) = ?$$

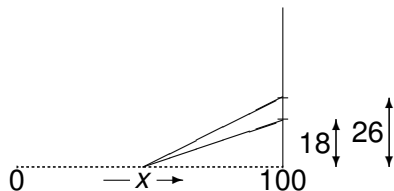
- Lösung:

$$m(t) = \epsilon/\phi + (m_0 - \epsilon/\phi)e^{-\phi t/\kappa}, \quad m(30) \approx 95.7$$

- Gleichgewicht: $m(t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \epsilon/\phi \approx 231.5\text{kg}$!

Lösungsmöglichkeiten

- ▶ Bester Schuss beim Fussball?



- ▶ Zielfunktion ist der Winkel

$$z(x) = \tan^{-1} \left(\frac{26}{100-x} \right) - \tan^{-1} \left(\frac{18}{100-x} \right)$$

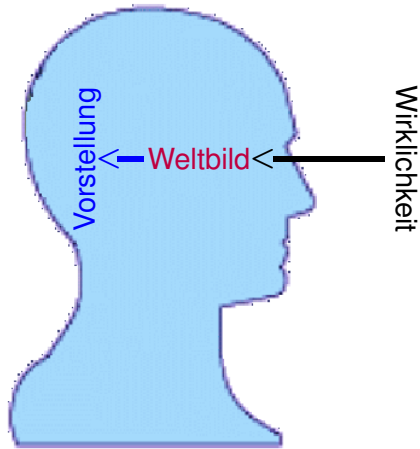
- ▶ Optimalitätsbedingung,

$$\begin{aligned} z'(x) &= \frac{\frac{26}{(100-x)^2}}{1 + \left(\frac{26}{100-x}\right)^2} - \frac{\frac{18}{(100-x)^2}}{1 + \left(\frac{18}{100-x}\right)^2} \\ &= \frac{8(9532 - 200x + x^2)}{(10324 - 200x - x^2)(10676 - 200x - x^2)} \end{aligned}$$

- ▶ Kritische Punkte: $x = 2(50 \pm 3\sqrt{13})$, $100 \pm 18i$, $100 \pm 26i$.
- ▶ Im Intervall $[0, 100]$,

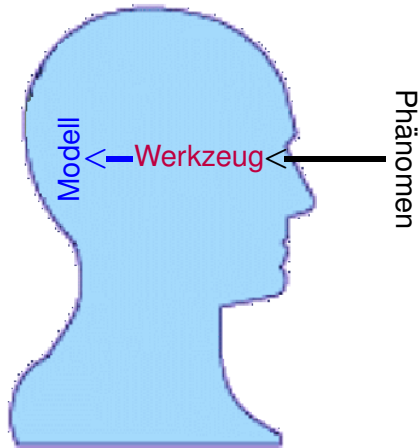
$$x^* = 2(50 - 3\sqrt{13}) \approx 78.4.$$

Was ist Modellierung? Alltäglich...



Vorstellung – Wirklichkeit = ?

Was ist Modellierung? Mathematisch...



Modell – Phänomen = ? Nah genug?

Was ist Modellierung?

- ▶ Erste Antwort: Jeder modelliert täglich.
 - ▶ Ein neugeborenes Kind wird zuerst mit Wahrnehmungen überflutet.
 - ▶ Langsam müssen diese Wahrnehmungen effizienter bearbeitet werden, damit das Kind funktionieren kann.
 - ▶ Die Welt wird vereinfacht: Je nach Annahmen werden die meisten Details weggekehrt, die wichtigsten Sachen betont.
 - ▶ Der Mensch entwickelt ein *Weltbild* – einen Filter – mit dem die Wirklichkeit in eigene Vorstellungen abgebildet wird.
 - ▶ Ob die Abbildung exakt ist, ist nicht wichtig, sondern ob sie für gewisse Zwecke ausreichend genau ist.
- ▶ Mathematische Modellierung:
 - ▶ Ähnlich wird ein Phänomen durch den Filter des eigenen mathematischen Werkzeugs in ein *Modell* abgebildet.
 - ▶ Ob die Abbildung exakt ist, ist nicht wichtig, sondern ob sie für gewisse Zwecke ausreichend genau ist.
- ▶ Praktisches Beispiel: Wie fährt man von A nach B in Graz?
 - ▶ Das genaueste Modell ist die Stadt Graz selbst.
 - ▶ Ein Stadtplan oder eine Skizze reichen für das Ziel.

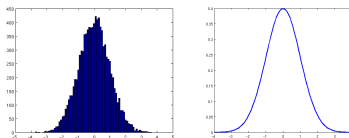
Was ist Modellierung?

- ▶ Denkweise aufzugeben: *Die Gleichungen in Lehrbüchern stellen entdeckte natürliche Gesetze dar.*
- ▶ Unbedingt gültig?

$$E = mc^2 \quad \text{oder} \quad F = ma \quad ?$$

Newtonsche Physik ist mit Einsteinscher Physik aktualisiert worden.

- ▶ Beispiel: Proben $\mathbf{x} = \{x_i\}$ der Aussentemperatur werden gemessen und mit einem Histogramm dargestellt:



Existiert unbedingt eine Zufallsvariable X mit einer stetigen Wahrscheinlichkeitsdichte, die vom Histogramm angenähert wird?

- ▶ Hauptpunkt: Diese Beschreibungen sind nur provisorische *Modelle*, die Gültigkeitsgrenzen haben.

Schritte der Modellierung

1. Definition eines physikalischen Systems

- ▶ Innen, Aussen, Rand, Tausch, Annahmen, z.B.
 - ▶ Heizung in einem Haus wird in $t_0 = 0$ ausgeschaltet.
 - ▶ Ortsunabhängige Innentemperatur ist $T(t)$ und
 - ▶ Konstante Aussentemperatur ist $T_\infty < T(t_0) = T_0$.
 - ▶ Keine Heizquellen, keine Heizsenken.
 - ▶ Wärmetausch am Rand des Hauses.
 - ▶ Zuerst einfach, später komplizierter, je nach Bedarf.
- ▶ Fragestellung, z.B.
Zeitdauer bis die Haustemperatur $100(1 - p)\%$ ihres Wegs zur Aussentemperatur sinkt?

(Weitere Frage: Soll man über einen Urlaub heizen?)

Schritte der Modellierung

2. Symbolische Beschreibung des Systems

- ▶ Prinzip, z.B. Mengenbilanz, Erhaltungssatz,

$$\text{Änderungsrate} = \begin{matrix} \text{innere} \\ \text{Änderungsrate} \end{matrix} = \begin{matrix} \text{hinein über} \\ \text{den Rand} \end{matrix} - \begin{matrix} \text{heraus über} \\ \text{den Rand} \end{matrix} + \begin{matrix} \text{innere} \\ \text{Quellen} \end{matrix} - \begin{matrix} \text{innere} \\ \text{Senken} \end{matrix}$$

Für das Haus besagt das Newtonsche Abkühlungsgesetz:

$$\text{Energieänderung im Haus} \propto \text{Temperaturdifferenz zwischen innen und aussen}$$

- ▶ Mathematische Formulierung. Newtonsches Abkühlungsgesetz beschreibt Diffusion so:

$$E'(t) \propto [T_{\infty} - T(t)]$$

oder mit $E(t) = \rho c V T(t)$, $\alpha = \lambda / \delta$,

$$\rho c V T'(t) = \alpha A [T_{\infty} - T(t)], \quad T(t_0) = T_0$$

ρ = Dichte
 c = spezifische Wärmekapazität
 V = Volumen
 α = Wärmeübergangskoeffizient
 A = Grenzflächeninhalt
 λ = Wärmeleitfähigkeit
 δ = Wanddicke

- ▶ Antwort zur Fragestellung: $t^* = ?$, $T(t^*) - T_{\infty} = \rho [T_0 - T_{\infty}]$.

Schritte der Modellierung

3. Lösung des mathematischen Modells

- ▶ Lösung, analytisch:

$$\rho c V T'(t) = \alpha A [T_\infty - T(t)], \quad T(0) = T_0$$

Analytische Lösung (siehe Mathematica):

$$T(t) = T_\infty + (T_0 - T_\infty) \exp[-\alpha A t / (\rho c V)]$$

- ▶ Lösung, numerisch (wenn analytisch nicht praktisch):

Gitter: t_0, t_1, \dots , oder $t_k = k\Delta t$, $k = 0, 1, \dots$

$$T'(t) \equiv \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{T(t + \Delta t) - T(t)}{\Delta t} \Rightarrow T'(t_k) \approx \frac{T(t_{k+1}) - T(t_k)}{\Delta t}$$

Mit $T_k \approx T(t_k)$,

$$\frac{(T_{k+1} - T_\infty) - (T_k - T_\infty)}{\Delta t} = \frac{T_{k+1} - T_k}{\Delta t} = -\frac{\alpha A}{\rho c V} (T_k - T_\infty)$$

Mit $\tau = \rho c V / (\alpha A)$,

$$T_{k+1} - T_\infty = (1 - \tau^{-1} \Delta t) (T_k - T_\infty), \quad k = 1, 2, \dots$$

Numerische Lösung (siehe Matlab):

$$T_k = T_\infty + (1 - \tau^{-1} \Delta t)^k (T_0 - T_\infty)$$

Schritte der Modellierung

4. Untersuchung des mathematischen Modells

- ▶ Qualitative Untersuchung:

$$\rho c V T'(t) = \alpha A [T_\infty - T(t)], \quad T(0) = T_0$$

Macht die Lösung

$$T(t) = T_\infty + (T_0 - T_\infty) \exp[-\alpha A t / (\rho c V)]$$

überhaupt sinn? Grafik von $e^{-t/\tau}$, $\tau > 0$?

Gleichgewicht?

$$0 = T' = \frac{\alpha A}{\rho c V} [T_\infty - T] \Rightarrow T = T_\infty$$

Stabilität?

$$\forall T_0, \quad \lim_{t \rightarrow \infty} T(t) = T_\infty$$

Schritte der Modellierung

5. Vergleich mit dem physikalischen System

- ▶ Antwort zur Fragestellung:

$$T(t) = T_{\infty} + (T_0 - T_{\infty}) \exp[-\alpha At / (\rho c V)]$$

100(1 - p)% des Wegs zum T_{∞} , $T(t^*) - T_{\infty} = p[T_0 - T_{\infty}]$:

$$p[T_0 - T_{\infty}] = T(t^*) - T_{\infty} = [T_0 - T_{\infty}] \exp[-\alpha At^* / (\rho c V)]$$

Nach t^* auflösen,

$$-\ln(p^{-1}) = \ln(p) = -\frac{\alpha At^*}{\rho c V} \quad \Rightarrow \quad t^* = \frac{\rho c V}{\alpha A} \ln\left(\frac{1}{p}\right)$$

- ▶ Stimmt mit Daten überein? Wenn es Schwingungen in Messdaten gibt, sind diese zufällige Messfehler oder systematische Abweichungen vom Modell?
- ▶ Wenn es übereinstimmt, ist Modell vielleicht voraussagefähig. Sonst sind Verbesserungen notwendig, z.B. Verfeinerungen der Kompartimente, Heizquellen, Heizsenken.

Modelltypen

▶ Strukturelle Modelle

- ▶ Beziehungen zwischen Komponenten werden betrachtet.

- ▶ Beispiel (oben): Temperatur im Haus

$$T(t) = T_{\infty} + (T_0 - T_{\infty}) \exp[-\alpha At / (\rho c V)].$$

- ▶ Beispiel (unten): Fall eines Steins

$$x'' = -g, x(0) = h, x'(0) = 0 \Rightarrow x(t) = -gt^2/2 + h.$$

$$x(\tau) = 0 \Rightarrow \tau = \sqrt{2h/g} \Rightarrow v = -x'(\tau) = \sqrt{2gh}.$$

▶ Empirische Modelle

- ▶ Gemessene Daten $\{(t_n, T_n)\}_{n=1}^N$,

$$\text{empirische Kurve } T(t; a, b, c) = a + be^{ct}.$$

- ▶ Parameterbestimmung durch Minimierung der Funktion

$$E(a, b, c) = \sum_{n=1}^N [T(t_n; a, b, c) - T_n]^2.$$

▶ Modelle durch Dimensionsanalyse

- ▶ Aufprallsgeschwindigkeit v eines fallenden Steins?

Masse m , Höhe h , Fallzeit τ , Beschleunigung g .

- ▶ Dimensionsanalyse: $v = f(h, m, g, \tau)$. (L/Z, L, M, L/Z², Z)

Dimensionsrichtige Möglichkeiten: $v = k\sqrt{gh}$, $v = k'g\tau$,
 $v = k''h/\tau$, wobei k, k', k'' dimensionslos sind.

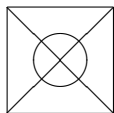
Modelltypen

▶ Deterministisch

- ▶ Beispiele (oben): Temperatur im Haus und Fall eines Steins
- ▶ Beispiel: Thermodynamik mit makroskopischen Eigenschaften, z.B. Druck, Temperatur, Dichte
- ▶ Beispiel: Entdeckung von Schätzen in einer Landschaft
 - ▶ β = Bruchteil der Fläche mit Schätzen.
 - ▶ $E(t)$ = Anzahl der durch zufälliges Wandern entdeckten Schätzen bis zur Zeit t .
 - ▶ Modell: $E' = \beta$, $E(0) = 0 \Rightarrow E(t) = \beta t$.

▶ Stochastisch

- ▶ Beispiel: Statistische Mechanik mit mikroskopischen Eigenschaften, z.B. Positionen und Geschwindigkeiten von Molekülen, Kollisionen, Kräfte
- ▶ Beispiel: Entdeckung von Schätzen in einer Landschaft
 - ▶ $p_n(t)$ = Wahrscheinlichkeit dass n in t schon gefunden
 - ▶ $P(n_t \rightarrow (n+1)_{t+dt}) = \beta dt, \forall n$
 - ▶ $P(n_t \rightarrow n_{t+dt}) = 1 - P(n_t \rightarrow (n+1)_{t+dt}) \cdots = 1 - \beta dt$
 - ▶ $p_n(t+dt) = P(n_t \rightarrow n_{t+dt}) \cdot p_n(t)$ (Bayes)
+ $P((n-1)_t \rightarrow n_{t+dt}) \cdot p_{n-1}(t)$ + vernachlässigbar
 - ▶ $p_n(t+dt) = (1 - \beta dt)p_n(t) + \beta dt p_{n-1}(t)$



Modelltypen

▶ Stochastisch

▶ Beispiel: Entdeckung von Schätzen in einer Landschaft

- ▶ $p_n(t + dt) = (1 - \beta dt)p_n(t) + \beta dt p_{n-1}(t)$
- ▶ $p'_n(t) \leftarrow [p_n(t + dt) - p_n(t)]/dt = -\beta p_n(t) + \beta p_{n-1}(t)$
- ▶ Erwartungswert der gefundenen Schätze in t ist
 $E(t) = \sum_{n=0}^{\infty} n p_n(t) = \sum_{n=1}^{\infty} n p_n(t)$
- ▶ Lösungen $\{p'_n(t)\}_{n=0}^{\infty}$ stetig und Konvergenz der Summen gleichmäßig bedeutet

$$\begin{aligned} E'(t) &= \sum_{n=1}^{\infty} n p'_n(t) = -\beta \sum_{n=1}^{\infty} n p_n(t) + \beta \sum_{n=1}^{\infty} n p_{n-1}(t) \\ &= -\beta E(t) + \beta \sum_{n=1}^{\infty} (n-1) p_{n-1}(t) \Big|_{=E(t)} + \beta \sum_{n=1}^{\infty} p_{n-1}(t) \Big|_{=1} \end{aligned}$$

oder $E'(t) = \beta$, und $E(0) = 0 \Rightarrow E(t) = \beta t$.

- ▶ So entstehen makroskopische Größen durch Erwartungswerte von mikroskopischen stochastischen Größen.

Modelltypen

▶ Konzentrierte Parameter

- ▶ Wird angenommen, dass gewisse Ortsabhängigkeiten vernachlässigt werden können.
- ▶ Beispiel: Die Innentemperatur $T(t)$ im Haus zur Zeit t erfüllt das Newtonsche Abkühlungsgesetz ($\alpha = \lambda/\delta$),

$$\rho c V T'(t) = \alpha A [T_\infty - T(t)], \quad T(0) = T_0$$

- ▶ Solche Modelle werden üblicherweise mit gewöhnlichen Differentialgleichungen beschrieben.

▶ Verteilte Parameter

- ▶ Ortsabhängigkeiten werden nicht vernachlässigt.
- ▶ Beispiel: Die Innentemperatur $T(t, \mathbf{x})$ im Haus zur Zeit t und an der Stelle \mathbf{x} erfüllt die Wärmeleichung,

$$\rho c T_t = \nabla \cdot (\lambda \nabla T), \quad T(t, \text{Wand}) = T_\infty(\text{Wand}), \quad T(0, \mathbf{x}) = T_0(\mathbf{x})$$

wobei die Wärmeleitfähigkeit $\lambda = \lambda(\mathbf{x})$ kleiner in der Mauer und größer in der Luft ist.

$$\text{Temperaturleitfähigkeit} = a = \lambda / (\rho c)$$

- ▶ Solche Modelle werden üblicherweise mit partiellen Differentialgleichungen beschrieben.

Modelltypen

▶ Dynamische Modelle

▶ Zeitlich kontinuierliche Modelle

- ▶ Evolution hängt von Zeit kontinuierlich ab.

- ▶ Beispiel: Logistisches Wachstum,

$$P'(t) = \alpha P(t)[K - P(t)]$$

Lösungen sind einfach S-förmig.

▶ Zeitlich diskrete Modelle

- ▶ Zustand springt diskret zur nächsten Generation.

- ▶ Beispiel: Logistische Evolution,

$$P_{n+1} = \tilde{\alpha} P_n [\tilde{K} - P_n]$$

Lösungen könnten periodisch sogar chaotisch sein!

▶ Statische Modelle

- ▶ Zustand hängt von Zeit nicht ab.

- ▶ Beispiel: Eine Membran mit der Spannung T ist am Rand eingespannt und mit der Last $f(\mathbf{x})$ im Inneren belastet.

Die Poissongleichung ist ein verteiltes Modell für die Verformung $u(\mathbf{x})$,

$$-T\Delta u = f, \quad u(\text{Rand}) = 0$$

Zwecke der Modellierung

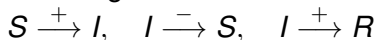
- ▶ Vor allem die motivierende Fragestellung zu beantworten.
 - ▶ Zeitdauer bis die Raumtemperatur $100(1 - p)\%$ ihres Wegs zur Aussentemperatur sinkt?
- ▶ Das modellierte System besser zu verstehen.
 - ▶ $t^* = \ln(1/p)\rho cV/(\alpha A)$.
Effekt der Dämmung? Hausoberfläche?
- ▶ Systemparameter zu schätzen.
 - ▶ Bestimmung von $\rho cV/(\alpha A)$? von α ?
- ▶ Das modellierte System zu steuern oder optimieren.
 - ▶ Oberfläche A minimieren?
- ▶ Optimale Steuerung
 - ▶ Wie viele Boote einer Flotte sollen in Betrieb sein?
- ▶ Optimale Entscheidung
 - ▶ Wie viele Waren sollen gekauft und gelagert werden?
 - ▶ Soll man eine Fahrkarte kaufen?

Kompartimentmodelle

- ▶ Ein *Kompartiment* in einem Modell ist eine homogene Einheit, in der der Zustand der gleichartigen Systemelemente laut Annahmen höchstens von Zeit abhängt.
- ▶ Ein Kompartiment kann räumlich zusammenhängend sein oder nicht. Siehe das *SIR*-Modell unten.
- ▶ Beispiel: Für das Heizungsproblem
 - ▶ ist das Haus ein Kompartiment und die äussere Umgebung ist ein Kompartiment.
 - ▶ Die Temperatur ist konstant in den Kompartimenten.
 - ▶ Die Parameter sind konstant in jedem Kompartiment und am Rand jedes Kompartiments.
- ▶ Beispiel: Für ein farmakokinetisches Problem
 - ▶ sind die Kompartimente verschiedene Volumina im Körper, in denen die Konzentration eines Heilmittels konstant ist.
 - ▶ Die Parameter sind konstant in jedem Kompartiment und am Rand jedes Kompartiments.
- ▶ Ein Kompartimentmodell ist ein Modell konzentrierter Parameter.

Infektionsmodelle

- ▶ Das Ziel dieser Modellierung ist, die Ausbreitung einer Krankheit zu verstehen und möglicherweise steuern.
- ▶ Fragestellungen:
 - ▶ Stirbt die Krankheit aus?
 - ▶ Wird die Krankheit endemisch?
 - ▶ Kommt die Krankheit immer wieder zurück?
 - ▶ Wie kann man die Krankheit steuern?
- ▶ Die Krankheit kann für Lebewesen (von einer Epidemie gefährdet) oder für Firmen (von einer Finanzkrise gefährdet) gemeint sein.
- ▶ Für das sogenannte *SIR*-Modell werden 3 Kompartimente identifiziert:
 - ▶ *S* = *Susceptible* (Anfällige)
 - ▶ *I* = *Infected* (Infizierte)
 - ▶ *R* = *Recovered* (Immune)
- ▶ Angenommene Wirkungen:



SIR Modell

- ▶ Mengenzbilanz:

$$\text{Änderungsrate} = \begin{array}{l} \text{innere} \\ \text{Änderungsrate} \end{array} = \begin{array}{l} \text{Einwanderung} \\ -\text{Auswanderung} \end{array} + \begin{array}{l} \text{Geburt} \\ -\text{Tod} \end{array} \pm \text{Infektion} \pm \text{Heilung}$$

- ▶ Es wird angenommen:

- ▶ Auswanderung wird vernachlässigt, und die Einwandernden sind anfällig, d.h.

$$S' = \beta + \dots, \text{ Einwanderungsrate} = \beta > 0$$

- ▶ In jeder Gruppe ist die Fertilität (Geburtsrate) kleiner als die Mortalität (Sterberate), d.h.

$$S' = \beta - \mu S + \dots, \text{ (Netto) Mortalität} = \mu > 0$$

$$I' = -\mu I + \dots \quad R' = -\mu R + \dots$$

- ▶ Wegen der Wirkung $I \xrightarrow{-} S$ hängt die Abnahme für S durch Ansteckung von I ab. Die einfachste Beziehung ist linear:

$$S' = \beta - (\mu + \lambda I)S, \quad \text{Maß für Ansteckung} = \lambda > 0$$

- ▶ Wegen der Wirkung $S \xrightarrow{+} I$ hängt die Zunahme für I durch Ansteckung von S ab, und diese Zunahme ist gleich eine entsprechende Abnahme für S . Es folgt

$$I' = (\lambda S - \mu)I + \dots$$

Formulierung und Lösung des *SIR* Modells

- ▶ Es wird angenommen:

- ▶ Wegen der Wirkung $I \xrightarrow{+} R$ hängt die Zunahme für R durch Heilung von I ab. Die einfachste Beziehung ist linear:

$$R' = -\mu R + \gamma I, \quad \text{Maß für Heilung} = \gamma > 0$$

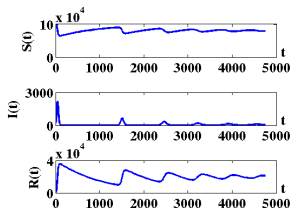
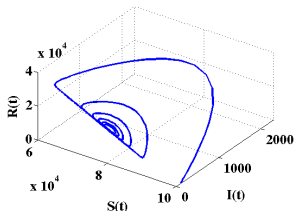
- ▶ Die Zunahme für R durch Heilung ist gleich eine entsprechende Abnahme für I . Schliesslich gilt

$$I' = (\lambda S - \mu - \gamma)I$$

- ▶ Zusammengefasst,

$$S' = \beta - (\mu + \lambda I)S, \quad I' = (\lambda S - \mu - \gamma)I, \quad R' = -\mu R + \gamma I$$

- ▶ Lösung mit $\beta = 100$, $\mu = 0.001$, $\gamma = 0.4$, $\lambda = 5 \cdot 10^{-6}$,



Untersuchung des *SIR* Modells

- ▶ Gleichgewichte:

- ▶ Fall 1 (gesund):

$$S_1^* = \frac{\beta}{\mu}, I_1^* = 0, R_1^* = 0$$

- ▶ Fall 2 (endemisch):

$$S_2^* = \frac{\mu + \gamma}{\lambda}, I_2^* = \frac{\beta}{\mu + \gamma} - \frac{\mu}{\lambda}, R_2^* = \frac{\gamma}{\mu} \left[\frac{\beta}{\mu + \gamma} - \frac{\mu}{\lambda} \right]$$

erst sinnvoll wenn $I_2^* > 0$.

Sind diese Gleichgewichte stabil?

Def: Für $\mathbf{x}' = \mathbf{f}(\mathbf{x})$, $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0$, wobei gilt $\mathbf{f}(\mathbf{x}^*) = 0$, ist das Gleichgewicht \mathbf{x}^*

- ▶ *global asymptotisch stabil* wenn $\forall \mathbf{x}_0$ gilt

$$\mathbf{x}(t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \mathbf{x}^*,$$

- ▶ *lokal asymptotisch stabil* wenn $\exists \delta > 0 \ni$

$$|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*| \leq \delta \Rightarrow \mathbf{x}(t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \mathbf{x}^*,$$

- ▶ *lokal stabil* wenn $\forall \epsilon > 0, \exists \delta > 0 \ni$

$$|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*| \leq \delta \Rightarrow |\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}^*| \leq \epsilon, \forall t \geq 0,$$

- ▶ *instabil* wenn nicht lokal stabil.

Untersuchung des *SIR* Modells

Satz (linearisierte Stabilität): Für $\mathbf{x}' = \mathbf{f}(\mathbf{x})$, $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0$, wobei gilt $\mathbf{f}(\mathbf{x}^*) = 0$, sei $J = \partial \mathbf{f} / \partial \mathbf{x}(\mathbf{x}^*)$ mit Spektrum $\sigma(J)$. Das Gleichgewicht \mathbf{x}^*

- ▶ ist lokal asymptotisch stabil wenn $\max \Re\{\sigma(J)\} < 0$,
- ▶ ist instabil wenn $\max \Re\{\sigma(J)\} > 0$,
- ▶ könnte stabil oder instabil sein wenn $\max \Re\{\sigma(J)\} = 0$.

Anwendung für das *SIR* Modell:

- ▶ Es gibt keine Rückkopplung von R in den S - und I -Gleichungen, und R wird von (S, I) bestimmt.

- ▶ Sei
$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} S \\ I \end{bmatrix}, \quad \mathbf{f}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \beta - \mu S - \lambda SI \\ -(\gamma + \mu)I + \lambda SI \end{bmatrix}$$

- ▶ Es gilt
$$\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}} = \begin{bmatrix} -\mu - \lambda I & -\lambda S \\ \lambda I & -(\gamma + \mu) + \lambda S \end{bmatrix}$$

- ▶ Für $\mathbf{x}_1^* = \langle S_1^*, I_1^* \rangle^T$, ($S_1^* = \beta/\mu$, $I_1^* = 0 = R_1^*$)

$$\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{x}_1^*) = \begin{bmatrix} -\mu & -\lambda\beta/\mu \\ 0 & -(\gamma + \mu) + \lambda\beta/\mu \end{bmatrix}, \quad \left. \frac{\beta}{\mu + \gamma} - \frac{\mu}{\lambda} \right|_{=I_2^*} \stackrel{?}{<} 0$$

Untersuchung des *SIR* Modells

Anwendung für das *SIR* Modell:

- ▶ Wenn $I_2^* < 0$, ist (S_1^*, I_1^*, R_1^*) lokal asymptotisch stabil.
- ▶ Wenn $I_2^* > 0$, ist (S_1^*, I_1^*, R_1^*) instabil.

Hausaufgabe: Untersuche die Stabilität explizit für den Fall der obigen Grafiken. Wie kann man zur Gesundheit steuern?

Allgemeine Ergebnisse für den Fall $I_2^* > 0$:

- ▶ Es existieren zwei Gleichgewichte: gesund und endemisch.
- ▶ Wenn $I(0) > 0$, es gilt $(S, I, R) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} (S_2^*, I_2^*, R_2^*)$ (endemisch).
- ▶ Wenn $I(0) = 0$, es gilt $(S, I, R) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} (S_1^*, I_1^*, R_1^*)$ (gesund).

Allgemeines Ergebnis für den Fall $I_2^* < 0$:

- ▶ Es gilt $(S, I, R) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} (S_1^*, I_1^*, R_1^*)$ (gesund).

Anhand dieser Ergebnisse:

- ▶ Es gibt keine periodische Lösung.

Hausaufgabe: Entwickle eine Variante dieses Modells, für die es periodische Lösungen gibt. (Attraktor? *R*-Rückkopplung?)

Periodische Lösungen

- ▶ Beispiel: Räuber-Beute (y, x) ,

$$x' = (a_1 - b_1 y)x, \quad y' = (-a_2 + b_2 x)y$$

- ▶ Gleichgewicht in $x^* = a_2/b_2$, $y^* = a_1/b_1$.
- ▶ Periodische Lösungen liegen in Niveau-Kurven für

$$F(x, y) = -a_2 \ln x + b_2 x - a_1 \ln y + b_1 y$$

die auch eine Lyapunov Funktion für (x^*, y^*) ist:

Def: Für $\mathbf{x}' = \mathbf{f}(\mathbf{x})$, $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0$, wobei gilt $\mathbf{f}(\mathbf{x}^*) = 0$, ist $F \in C^1(B(\mathbf{x}^*, \epsilon))$ eine *Lyapunov Funktion* wenn:

1. F hat ein einziges Minimum in \mathbf{x}^* ,
2. $\nabla F(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}) \leq 0$, $\forall \mathbf{x} \in B(\mathbf{x}^*, \epsilon)$.

Wenn $<$ (für $\mathbf{x} \neq \mathbf{x}^*$) gilt, ist F eine *strenge Lyapunov Funktion*.

Hausaufgabe: Zeige, F ist eine Lyapunov Funktion für (x^*, y^*) .

Satz: Existiert für $\mathbf{x}' = \mathbf{f}(\mathbf{x})$, $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0$, wobei gilt $\mathbf{f}(\mathbf{x}^*) = 0$, eine Lyapunov Funktion F , dann ist \mathbf{x}^* ein lokal stabiles Gleichgewicht. Wenn F streng ist, ist \mathbf{x}^* lokal asymptotisch stabil.

Grenzzyklen

Def: Für $\mathbf{x}' = \mathbf{f}(\mathbf{x})$, $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0$, ist die Menge M ein *Attraktor*, wenn $\exists \delta > 0$, sodass $\forall \mathbf{x}_0$ mit $\text{dist}(\mathbf{x}_0, M) < \delta$, gilt die Konvergenz $\text{dist}(\mathbf{x}(t), M) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} 0$. Wenn die Konvergenz $\text{dist}(\mathbf{x}(t), M) \xrightarrow{t \rightarrow -\infty} 0$ gilt, ist M ein *Abweiser*.

Def: Für $\mathbf{x}' = \mathbf{f}(\mathbf{x})$, $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0$, ist die Menge G ein *Grenzzyklus*, wenn eine periodische Lösung \mathbf{x}_G in G liegt, und es existiert mindestens eine andere Lösung $\tilde{\mathbf{x}}$, die erfüllt $\text{dist}(\tilde{\mathbf{x}}(t), G) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} 0$ oder $\text{dist}(\tilde{\mathbf{x}}(t), G) \xrightarrow{t \rightarrow -\infty} 0$. G ist ein *stabiler Grenzzyklus* wenn es ein Attraktor ist, und G ist ein *instabiler Grenzzyklus* wenn es ein Abweiser ist.

- ▶ Räuber-Beute Variante mit einem stabilen Grenzzyklus,

$$x' = a_1 x \left(1 - \frac{x}{K}\right) - \frac{b_1 xy}{1 + c_1 x}, \quad y' = a_2 y \left(1 - \frac{y}{b_2 x}\right)$$

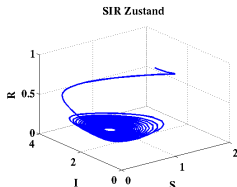
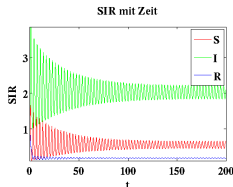
Beute-Kapazität K , Grenze b_1/c_1 für den Räubereffekt, Räuber-Kapazität $b_2 x$.

- ▶ Anpassung für *SIR*?

Periodische SIR Modelle

- ▶ Klassisches Räuber-Beute Modell mit Rückkopplung:

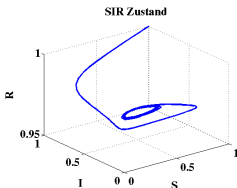
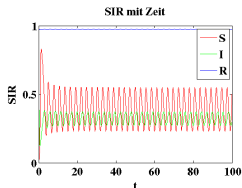
$$\begin{aligned}S' &= S(a_1 - a_2 I) + a_5 R \\I' &= I(a_2 S - a_3) - a_4 I \\R' &= a_4 I - a_5 R - a_6 R\end{aligned}$$



Rückkopplung macht Grenzzyklus!

- ▶ Logistische Variante des Räuber-Beute Modells:

$$\begin{aligned}S' &= a_1 S(1 - S/a_3) + a_7 R \\&\quad - a_4 SI/(1 + a_6 S) \\I' &= a_2 I(1 - I/(a_5 S)) \\&\quad - a_8 I \\R' &= a_8 I + a_1 R(1 - R/a_3) \\&\quad - a_7 R\end{aligned}$$



Besitzt einen Grenzzyklus auch mit Rückkopplung.

Zeitabhängige Infektiosität

- Das modifizierte Modell

$$S'(t) = \beta - \lambda(t)SI - \mu S, \quad I'(t) = \lambda(t)SI - \gamma I - \mu I, \quad R'(t) = \gamma I - \mu R$$

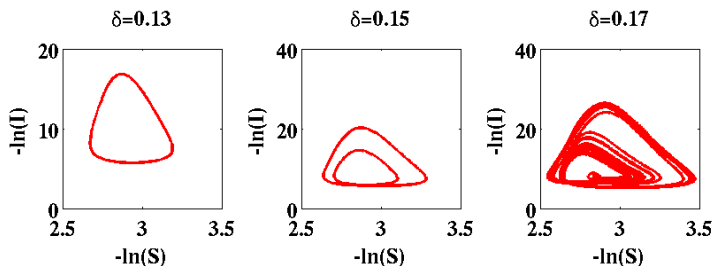
mit λ zeitabhängig für Saisonabhängigkeit,

$$\lambda(t) = (\delta \sin(2\pi t) + 1)\lambda_0, \quad \lambda_0 \in (0, \infty), \quad \delta \in [0, 1]$$

- Keine Rückkopplung von R , Simulationen für das (S, I) -System mit den Parametern:

$$\mu = \beta = 0.04, \quad \lambda_0 = 1800, \quad \gamma = 100$$

- Der Parameter δ wird hoch gedreht, und Periodeverdoppelung (in Grenzzyklen) und Übergang zum Chaos werden aufgewiesen:



Diskretes *SIR* Modell

- ▶ Das diskrete *SIR* Modell

$$\begin{aligned}S^{k+1} &= \beta + (1 - \mu - \lambda I^k)S^k \\I^{k+1} &= (\lambda S^k + 1 - \mu - \gamma)I^k \\R^{k+1} &= (1 - \mu)R^k + \gamma I^k\end{aligned}$$

kann auch als Diskretisierung des Systems der GDG betrachtet werden.

- ▶ Qualitatives Verhalten ähnlich?

- ▶ Gleichgewichte stabil?
- ▶ Periodische Lösungen?

- ▶ Gleichgewichte: $S^{k+1} = S^k$, $I^{k+1} = I^k$, $R^{k+1} = R^k$,

- ▶ Fall 1 (gesund):

$$S_1^* = \frac{\beta}{\mu}, I_1^* = 0, R_1^* = 0$$

- ▶ Fall 2 (endemisch):

$$S_2^* = \frac{\mu + \gamma}{\lambda}, I_2^* = \frac{\beta}{\mu + \gamma} - \frac{\mu}{\lambda}, R_2^* = \frac{\gamma}{\mu} \left[\frac{\beta}{\mu + \gamma} - \frac{\mu}{\lambda} \right]$$

erst sinnvoll wenn $I_2^* > 0$.

widerspiegeln die Bedingungen für das System der GDG.
Stabilität?

Stabilität für Diskrete Dynamische Systeme

Def: Für $\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{f}(\mathbf{x}^k)$, wobei gilt $\mathbf{x}^* = \mathbf{f}(\mathbf{x}^*)$, ist das Gleichgewicht \mathbf{x}^*

- ▶ *global asymptotisch stabil* wenn $\forall \mathbf{x}^0$ gilt

$$\mathbf{x}^k \xrightarrow{k \rightarrow \infty} \mathbf{x}^*,$$

- ▶ *lokal asymptotisch stabil* wenn $\exists \delta > 0 \ni$

$$|\mathbf{x}^0 - \mathbf{x}^*| \leq \delta \Rightarrow \mathbf{x}^k \xrightarrow{k \rightarrow \infty} \mathbf{x}^*,$$

- ▶ *lokal stabil* wenn $\forall \epsilon > 0, \exists \delta > 0 \ni$

$$|\mathbf{x}^0 - \mathbf{x}^*| \leq \delta \Rightarrow |\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*| \leq \epsilon, \forall k \geq 0,$$

- ▶ *instabil* wenn nicht lokal stabil.

Satz (linearisierte Stabilität): Für $\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{f}(\mathbf{x}^k)$, wobei gilt $\mathbf{x}^* = \mathbf{f}(\mathbf{x}^*)$, sei $J = \partial \mathbf{f} / \partial \mathbf{x}(\mathbf{x}^*)$ mit Spektralradius $\rho(J)$. Das Gleichgewicht \mathbf{x}^*

- ▶ ist lokal asymptotisch stabil wenn $\rho(J) < 1$,
- ▶ ist instabil wenn $\rho(J) > 1$,
- ▶ könnte stabil oder instabil sein wenn $\rho(J) = 1$.

Diskretes *SIR* Modell

- ▶ Es gibt keine Rückkopplung von R in den S - und I -Gleichungen, und R wird von (S, I) bestimmt.

- ▶ Sei
$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} S \\ I \end{bmatrix}, \quad \mathbf{f}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \beta + (1 - \mu - \lambda I)S \\ (\lambda S + 1 - \mu - \gamma)I \end{bmatrix}$$

- ▶ Es gilt
$$\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}} = \begin{bmatrix} 1 - \mu - \lambda I & -\lambda S \\ \lambda I & \lambda S + 1 - \gamma - \mu \end{bmatrix}$$

- ▶ Für $\mathbf{x}_1^* = \langle S_1^*, I_1^* \rangle^T$, ($S_1^* = \beta/\mu$, $I_1^* = 0 = R_1^*$)

$$\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{x}_1^*) = \begin{bmatrix} 1 - \mu & -\lambda\beta/\mu \\ 0 & \lambda\beta/\mu + 1 - \mu - \gamma \end{bmatrix}$$

- ▶ Stabilitätsbedingungen: $(I_2^* = \frac{\beta}{\mu + \gamma} - \frac{\mu}{\lambda})$

$$|1 - \mu| < 1 \Leftrightarrow \mu \in (0, 2)$$

$$|\lambda\beta/\mu + 1 - \mu - \gamma| < 1 \Leftrightarrow \lambda(1 + \gamma/\mu)(-I_2^*) \in (0, 2)$$

widerspiegeln die Bedingungen für das System der GDG.

- ▶ Periodische Lösungen? $\mathbf{f}(\mathbf{f}(\mathbf{x}^*)) = \mathbf{x}^* \neq \mathbf{f}(\mathbf{x}^*)$

Hausaufgabe: Das Modell implementieren und untersuchen.

Diskretes S/R Modell

► Mit Mathematica,

```
F[{s_, i_}] = {\[Beta] + (1 - \[Mu] - \[Lambda] i) s,  
              (\[Lambda] s + 1 - \[Mu] - \[Gamma] i) i}  
sol1 = Solve[F[{s, i}] == {s, i}, {s, i}]  
{S1, I1} = {s, i} /. sol1[[1]]  
{S2, I2} = {s, i} /. sol1[[2]]  
sol2 = Solve[{F[F[{s, i}]] == {s, i}, F[{s, i}] \[NotEqual] {s, i}}, {s, i}]  
{S3, I3} = {s, i} /. sol2[[1]]  
{S4, I4} = {s, i} /. sol2[[2]]
```

► Mit $\beta = 1$, $\mu = 3$, $\gamma = 3$, $\lambda = 30$,

$$\begin{aligned} S_1 &= \frac{1}{3}, & I_1 &= 0 \\ S_2 &= \frac{1}{5}, & I_2 &= \frac{1}{15} \\ S_3 &= \frac{1}{15}(4 + \sqrt{2}), & I_3 &= \frac{1}{60}(2 - \sqrt{2}) \\ S_4 &= \frac{1}{15}(4 - \sqrt{2}), & I_4 &= \frac{1}{60}(2 + \sqrt{2}) \end{aligned}$$

gelten

$$\begin{aligned} S_1 &= f(S_1, I_1), & I_1 &= g(S_1, I_1) \\ S_2 &= f(S_2, I_2), & I_2 &= g(S_2, I_2) \\ f(S_3, I_3) &\neq S_3 = F(S_3, I_3), & g(S_3, I_3) &\neq I_3 = G(S_3, I_3) \\ f(S_4, I_4) &\neq S_4 = F(S_4, I_4), & g(S_4, I_4) &\neq I_4 = G(S_4, I_4) \end{aligned}$$

aber die (1- und) 2-periodischen Lösungen sind instabil!

Stochastisches SIR Modell

- ▶ Sei die dynamische Anzahl der Anfälligen, Infizierten bzw. Immunen durch stochastische Prozesse dargestellt:

$$S, I, R : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{N}_0$$

- ▶ Zur Zeit t haben die Zufallsvariablen $S(t)$, $I(t)$ bzw. $R(t)$ die Verteilungen,

$$s_n(t) = P(S(t) = n), \quad i_n(t) = P(I(t) = n), \quad r_n(t) = P(R(t) = n)$$

- ▶ Seien $\bar{S}(t)$, $\bar{I}(t)$ und $\bar{R}(t)$ die Erwartungswerte von $S(t)$, $I(t)$ bzw. $R(t)$ zur Zeit t .
- ▶ Die bedingten Wahrscheinlichkeiten werden für S so modelliert:

$$P(S(t + dt) = n + 1 \mid S(t) = n) = \beta dt$$

$$P(S(t + dt) = n - 1 \mid S(t) = n)$$

$$= \sum_{m=0}^{\infty} P(S(t + dt) = n - 1 \mid S(t) = n, I(t) = m) i_m(t) \\ P(I(t) = m \mid S(t) = n) \rightarrow i_m(t)$$

$$= \sum_{m=0}^{\infty} ndt(\mu + m\lambda) i_m(t) = ndt[\mu + \lambda \bar{I}(t)]$$

Stochastisches SIR Modell

- Die bedingten Wahrscheinlichkeiten für I :

$$P(I(t + dt) = n - 1 \mid I(t) = n) = (\mu + \gamma)ndt$$

$$P(I(t + dt) = n + 1 \mid I(t) = n)$$

$$= \sum_{m=0}^{\infty} P(I(t + dt) = n + 1 \mid I(t) = n, S(t) = m) s_m(t)$$

$P(S(t) = m \mid I(t) = n) \rightarrow s_m(t)$

$$= \sum_{m=0}^{\infty} nm\lambda s_m(t) dt = \lambda n \bar{S}(t) dt$$

- Die bedingten Wahrscheinlichkeiten für R :

$$P(R(t + dt) = n - 1 \mid R(t) = n) = \mu ndt$$

$$P(R(t + dt) = n + 1 \mid R(t) = n)$$

$$= \sum_{m=0}^{\infty} P(R(t + dt) = n + 1 \mid R(t) = n, I(t) = m) i_m(t)$$

$P(I(t) = m \mid R(t) = n) \rightarrow i_m(t)$

$$= \sum_{m=0}^{\infty} \gamma m i_m(t) dt = \gamma \bar{I}(t) dt$$

Stochastisches SIR Modell

- Die Dynamik für $\{s_n(t)\}_{n=0}^{\infty}$ wird so modelliert:

$$\begin{aligned}s_n(t + dt) &= P(S(t + dt) = n \mid S(t) = n - 1)s_{n-1}(t) \\ &+ P(S(t + dt) = n \mid S(t) = n + 1)s_{n+1}(t) \\ &+ P(S(t + dt) = n \mid S(t) = n)s_n(t) \\ &= \beta s_{n-1}(t)dt \\ &+ (n + 1)dt[\mu + \lambda \bar{I}(t)]s_{n+1}(t) \\ \text{oder} &+ \{1 - \beta dt - ndt[\mu + \lambda \bar{I}(t)]\}s_n(t)\end{aligned}$$

$$s'_n(t) = \beta s_{n-1}(t) - \{\beta + n[\mu + \lambda \bar{I}(t)]\}s_n(t) + (n + 1)[\mu + \lambda \bar{I}(t)]s_{n+1}(t)$$

- und ähnlich für $\{i_n(t)\}_{n=0}^{\infty}$,

$$i'_n(t) = (n - 1)\lambda \bar{S}(t)i_{n-1}(t) - [n\lambda \bar{S}(t) + n(\mu + \gamma)]i_n(t) + (n + 1)(\mu + \gamma)i_{n+1}(t)$$

- und für $\{r_n(t)\}_{n=0}^{\infty}$,

$$r'_n(t) = \gamma \bar{I}(t)r_{n-1}(t) - [\gamma \bar{I}(t) + n\mu]r_n(t) + (n + 1)\mu r_{n+1}(t)$$

Hausaufgabe: Leite ein GDG-System für $(\bar{S}, \bar{I}, \bar{R})$ her.

Gleichgewichte fürs Stochastische *SIR* Modell

- ▶ Angenommen gibt es nur $N < \infty$ Plätze im Lebensraum.
- ▶ Für $N = 2$ wird das obige stochastische System:

$$\begin{bmatrix} s_0 \\ s_1 \\ s_2 \end{bmatrix}'(t) = \begin{bmatrix} -\beta & [\mu + \lambda \bar{I}(t)] & 0 \\ \beta & -\{\beta + [\mu + \lambda \bar{I}(t)]\} & 2[\mu + \lambda \bar{I}(t)] \\ 0 & \beta & -2[\mu + \lambda \bar{I}(t)] \end{bmatrix} \begin{bmatrix} s_0 \\ s_1 \\ s_2 \end{bmatrix}(t)$$

$$\begin{bmatrix} i_0 \\ i_1 \\ i_2 \end{bmatrix}'(t) = \begin{bmatrix} 0 & (\mu + \gamma) & 0 \\ 0 & -[\lambda \bar{S}(t) + (\mu + \gamma)] & 2(\mu + \gamma) \\ 0 & \lambda \bar{S}(t) & -2(\mu + \gamma) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} i_0 \\ i_1 \\ i_2 \end{bmatrix}(t)$$

$$\begin{bmatrix} r_0 \\ r_1 \\ r_2 \end{bmatrix}'(t) = \begin{bmatrix} -\gamma \bar{I}(t) & \mu & 0 \\ \gamma \bar{I}(t) & -[\gamma \bar{I}(t) + \mu] & 2\mu \\ 0 & \gamma \bar{I}(t) & -2\mu \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r_0 \\ r_1 \\ r_2 \end{bmatrix}(t)$$

Hausaufgabe: Zeige, das einzige stabile Gleichgewicht ist

$$s_0 = 1 / (1 + \frac{\beta}{\mu} + \frac{\beta^2}{2\mu^2}), \quad s_1 = \frac{\beta}{\mu} s_0, \quad s_2 = \frac{\beta^2}{2\mu^2} s_0, \quad i_0 = 1, \quad r_0 = 1$$

$$\text{mit } (\bar{S}, \bar{I}, \bar{R}) = (\frac{\beta}{\mu}(1 + \frac{\beta}{\mu}) / (1 + \frac{\beta}{\mu} + \frac{\beta^2}{2\mu^2}), 0, 0) \approx (S_1^*, I_1^*, R_1^*).$$

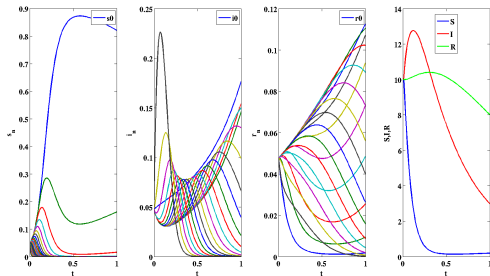
- ▶ Was ist mit (S_2^*, I_2^*, R_2^*) für $N \rightarrow \infty$?

Implementierung des Stochastischen *SIR* Modells

$$N = 20$$

$$\beta = \mu = \lambda = \gamma = 1$$

$$s_n(0) = i_n(0) = r_n(0) = 1/(N+1)$$

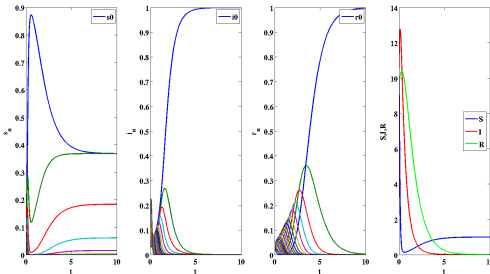


$$t_{\max} = 1 \text{ (oben)}$$

$$t_{\max} = 10 \text{ (unten)}$$

Gleichgewicht:

$$\bar{S}^* = 1, \bar{I}^* = 0, \bar{R}^* = 0.$$



Implementierung des Stochastischen *SIR* Modells

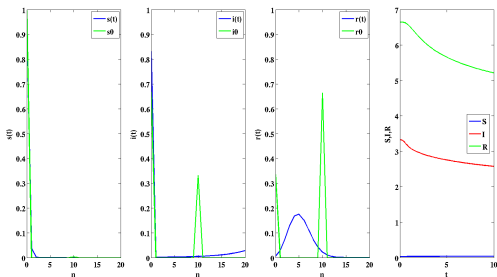
$$\beta = 10, \mu = 1$$

$$\gamma = 2, \lambda = 100$$

$$s_{10}(0) = \frac{S_2^*}{10} = 1 - s_0(0)$$

$$i_{10}(0) = \frac{I_2^*}{10} = 1 - i_0(0)$$

$$r_{10}(0) = \frac{R_2^*}{10} = 1 - r_0(0)$$



$$\bar{S}(0) = S_2^*$$

$$\bar{I}(0) = I_2^*$$

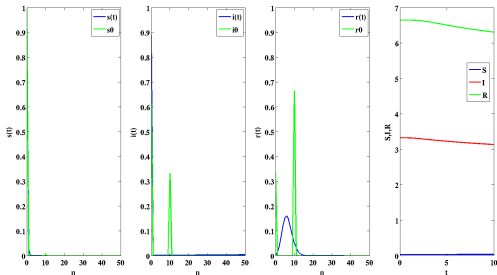
$$\bar{R}(0) = R_2^*$$

$N = 20$ (oben)

$N = 50$ (unten)

$$N \rightarrow \infty \Rightarrow (\bar{S}, \bar{I}, \bar{R})(t)$$

$$\rightarrow (S_2^*, I_2^*, R_2^*)$$



Hausaufgabe: Zeige für $N = \infty$, $i_n(t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \delta_{n0}$ obwohl $\bar{I}(t) = I_2^*$.

SIR Modell mit Spontaner Infektion

- ▶ Neue bedingte Wahrscheinlichkeiten:

$$P(S(t+dt) = n-1 \mid S(t) = n) = ndt[\mu + \lambda \bar{I}(t)] + \epsilon ndt$$

$$P(I(t+dt) = n+1 \mid I(t) = n) = \lambda n \bar{S}(t) dt + \epsilon \bar{S}(t) dt$$

- ▶ Neues System:

$$s'_n(t) = \beta s_{n-1}(t) - \{\beta + n[\mu + \epsilon + \lambda \bar{I}(t)]\} s_n(t) + (n+1)[\mu + \epsilon + \lambda \bar{I}(t)] s_{n+1}(t)$$

$$i'_n(t) = [(n-1)\lambda + \epsilon] \bar{S}(t) i_{n-1}(t) - [(n\lambda + \epsilon) \bar{S}(t) + n(\mu + \gamma)] i_n(t) + (n+1)(\mu + \gamma) i_{n+1}(t)$$

$$r'_n(t) = \gamma \bar{I}(t) r_{n-1}(t) - [\gamma \bar{I}(t) + n\mu] r_n(t) + (n+1)\mu r_{n+1}(t)$$

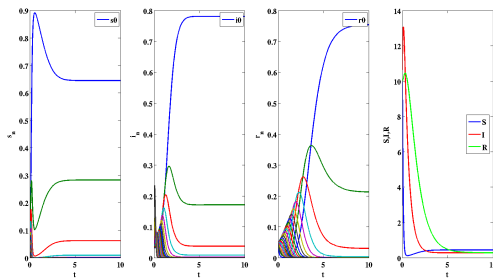
$$s_n(0) = i_n(0) = r_n(0) = 1/(N+1)$$

Neue Gleichgewichte lösen:

$$0 = \beta - (\lambda \bar{I}^* + \mu + \epsilon) \bar{S}^*$$

$$0 = (\lambda \bar{S}^* - \mu - \gamma) \bar{I}^* + \epsilon \bar{S}^*$$

$$0 = -\mu \bar{R}^* + \gamma \bar{I}^*$$



Stochastischer *SIR* Zellular-Automat

- ▶ Sei der Lebensraum in ein Gitter geteilt.
- ▶ Zu einem diskreten Zeitpunkt n befindet sich die Zelle $Z_{i,j}$ in einem der Zustände: anfällig (S), infiziert (I), immun (R) oder leer (E).
- ▶ Der Zustand einer Zelle kann sich ändern, je nach Zuständen in der Umgebung $U_{i,j} = \{Z_{i+p,j+q}\}_{\|(p,q)\|_\infty=1}$.
- ▶ Für den gesamten *SIR* Zellular-Automaten mit $N \times M$ Zellen gibt es 4^{NM} mögliche Zustände und Torus-Randbedingungen.
- ▶ Die Evolution der Zustände wird als *Markov-Kette* oder *Markov-Prozess* modelliert.

	$i-1,j+1$	$i,j+1$	$i+1,j+1$
	$i-1,j$	i,j	$i+1,j$
	$i-1,j-1$	$i,j-1$	$i+1,j-1$

Def: Eine Markov-Kette (linear mit konstanten Übergangswahrscheinlichkeiten) ist ein zeitlich diskretes dynamisches Modell bestehend aus Zuständen $\{S_k\}$ und Wahrscheinlichkeiten $\{p_{k,l}\}$, wobei der Übergang $S_k|_n \rightarrow S_l|_{n+1}$ mit Wahrscheinlichkeit $p_{k,l}$ stattfindet.

Markov-Ketten

- ▶ Beispiel: Angenommen befindet sich das Wetter an einem gegebenen Tag in einem der Zustände: S (Sonne), W (Wolken) oder R (Regen).
- ▶ Abgeschätzte Übergangswahrscheinlichkeiten werden in einer Tabelle zusammengefasst,

	S	W	R
S	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0
W	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$
R	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$

$$P = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \quad (P^n > 0, n > 1)$$

- ▶ $P \in \mathbb{S}$ (stochastische Matrizen): $(\mathbf{e})_i = 1, \forall i \Rightarrow P\mathbf{e} = \mathbf{e}$.
- ▶ $\mathbf{s} \in \mathbb{W}$ (Wahrscheinlichkeitsvektoren): $(\mathbf{s})_i \in [0, 1]$ und $\mathbf{s} \cdot \mathbf{e} = 1$.
- ▶ Mit Ausgangszustand $\mathbf{s}^n \in \mathbb{W}$ ist $\mathbf{s}^{n+1} = P^T \mathbf{s}^n \in \mathbb{W}$ der Übergangszustand.
- ▶ Mit Anfangszustand $\mathbf{s}^0 \in \mathbb{W}$ ist $\mathbf{s}^n = (P^T)^n \mathbf{s}^0 \in \mathbb{W}$ der n te Zustand. Fürs Beispiel $\mathbf{s}^n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \hat{\mathbf{s}} = \langle \frac{2}{5}, \frac{2}{5}, \frac{1}{5} \rangle^T$ (Gleichgewicht).

Satz: Für $P \in \mathbb{S}$ mit $P^n > 0, n > 1, \exists! \hat{\mathbf{s}} \in \mathbb{W}$, wobei $P^T \hat{\mathbf{s}} = \hat{\mathbf{s}}$, und $(P^T)^n \mathbf{e}_i \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \hat{\mathbf{s}}, \forall \mathbf{e}_i$ mit $(\mathbf{e}_i)_j = \delta_{i,j}$.

Übergangswahrscheinlichkeiten fürs S/I/R Modell

- ▶ Vom Ausgangszustand E :

$$P(Z_{i,j}^{n+1} = S \mid Z_{i,j}^n = E) = \beta, \quad P(Z_{i,j}^{n+1} = E \mid Z_{i,j}^n = E) = 1 - \beta$$

$$P(Z_{i,j}^{n+1} = I \mid Z_{i,j}^n = E) = 0 = P(Z_{i,j}^{n+1} = R \mid Z_{i,j}^n = E)$$

wobei $\beta \in (0, 1)$,

- ▶ Vom Ausgangszustand S :

$$P(Z_{i,j}^{n+1} = E \mid Z_{i,j}^n = S) = \mu, \quad P(Z_{i,j}^{n+1} = R \mid Z_{i,j}^n = S) = 0$$

$$P(Z_{i,j}^{n+1} = S \mid Z_{i,j}^n = S) = 1 - \mu - \lambda \bar{I}_{i,j}$$

$$P(Z_{i,j}^{n+1} = I \mid Z_{i,j}^n = S) = \lambda \bar{I}_{i,j}, \quad \bar{I}_{i,j} = \text{Mittelwert}_{U_{i,j}}(Z_{p,q} = I)$$

wobei $\mu, \lambda, \mu + \lambda \in (0, 1)$.

- ▶ Vom Ausgangszustand I :

$$P(Z_{i,j}^{n+1} = S \mid Z_{i,j}^n = I) = 0, \quad P(Z_{i,j}^{n+1} = I \mid Z_{i,j}^n = I) = 1 - \mu - \gamma$$

$$P(Z_{i,j}^{n+1} = R \mid Z_{i,j}^n = I) = \gamma, \quad P(Z_{i,j}^{n+1} = E \mid Z_{i,j}^n = I) = \mu$$

wobei $\mu, \gamma, \mu + \gamma \in (0, 1)$.

- ▶ Vom Ausgangszustand R :

$$P(Z_{i,j}^{n+1} = E \mid Z_{i,j}^n = R) = \mu, \quad P(Z_{i,j}^{n+1} = R \mid Z_{i,j}^n = R) = 1 - \mu$$

$$P(Z_{i,j}^{n+1} = S \mid Z_{i,j}^n = R) = 0 = P(Z_{i,j}^{n+1} = I \mid Z_{i,j}^n = R)$$

Übergangswahrscheinlichkeiten fürs *SIR* Modell

Hausaufgabe: Für $N = 2$, $M = 1$ und bestimmte β , γ , λ , μ , schreibe die Übergangswahrscheinlichkeiten des Zellular-Automaten als stochastische Matrix und finde das Gleichgewicht.

Monte-Carlo Simulation:

- ▶ Initialisiere mit einem zufälligen Zustand für jede Zelle.
- ▶ Für jeden Zeitschritt generiere Zufallszahl z für jede Zelle.
- ▶ Mit Ausgangszustand E , wird der Übergangszustand
 $S, z \in [0, \beta), \quad E, z \in [\beta, 1]$.
- ▶ Mit Ausgangszustand S , wird der Übergangszustand
 $E, z \in [0, \mu), \quad I, z \in [\mu, \mu + \lambda\bar{I}), \quad S, z \in [\mu + \lambda\bar{I}, 1]$.
- ▶ Mit Ausgangszustand I , wird der Übergangszustand
 $E, z \in [0, \mu), \quad R, z \in [\mu, \mu + \gamma), \quad I, z \in [\mu + \gamma, 1]$.
- ▶ Mit Ausgangszustand R , wird der Übergangszustand
 $E, z \in [0, \mu), \quad R, z \in [\mu, 1]$.
- ▶ Im Lauf der Generationen beobachten, ob die gesamte Anzahl von S, I, R, E ein Gleichgewicht erreicht, oder...?

Implementierung eines *SIR* Zellular-Automaten

- ▶ Der Zustand des Gitters kann mit Feldern C und Ib so gespeichert werden:

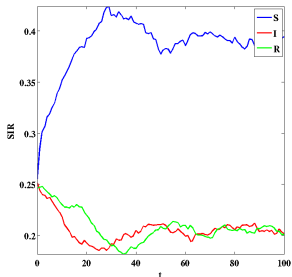
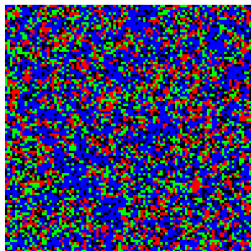
$$C(i, j) = \begin{cases} 0, & Z_{i,j} = E & Ib = -\text{double}(C==2); \\ 1, & Z_{i,j} = S & \text{for } i=-1:1; \text{ for } j=-1:1; \\ 2, & Z_{i,j} = I & Ib = Ib + \text{circshift}(C==2, [i, j]); \\ 3, & Z_{i,j} = R & \text{end; end; } Ib=Ib/8; \end{cases}$$

wobei $Ib(i, j) = \text{Mittelwert}_{U_{i,j}}(Z_{p,q} = I)$

- ▶ Übergänge können mit diesem Feld C so implementiert werden:

```
Z = rand(N, M);  
C = 1* ((C==0) & (Z < beta)) ...  
+ 2* ((C==1) & (Z >= mu) & (Z < mu + lambda*Ib)) ...  
+ 1* ((C==1) & (Z >= mu + lambda*Ib)) ...  
+ 3* ((C==2) & (Z >= mu) & (Z < mu + gamma)) ...  
+ 2* ((C==2) & (Z >= gamma + mu)) ...  
+ 3* ((C==3) & (Z >= mu));
```

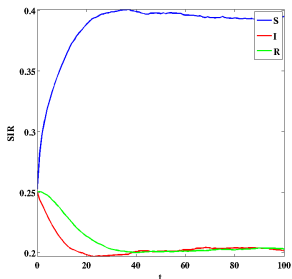
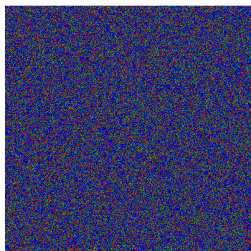
Implementierung eines *SIR* Zellular-Automaten



$$\beta = 0.4, \mu = 0.1$$
$$\lambda = 0.7, \gamma = 0.1$$

$N = M = 100$
(oben)

$N = M = 1000$
(unten)



Am Anfang:

$$C = \text{randi}(4, N, M) - 1;$$

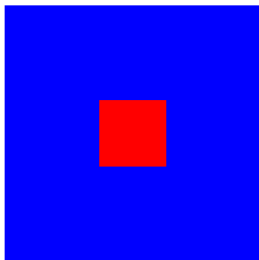
$\bar{S}(t), \bar{I}(t), \bar{R}(t)$ glatter
wenn N, M größer.

Gleichgewicht ende-
misch?

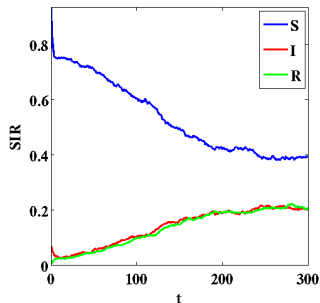
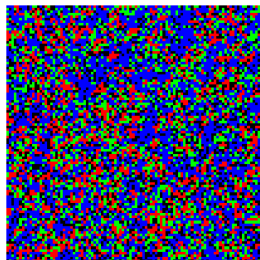
Implementierung eines *SIR* Zellular-Automaten

- ▶ Hier sind die Parameter gleich wie oben,
 $\beta = 0.4$, $\mu = 0.1$, $\lambda = 0.7$, $\gamma = 0.1$, $N = M = 100$
aber am Anfang gibt es nur Infizierte in einem
Quadrat und nur Anfällige außerhalb.

C(0)



C(t)



- ▶ Es entsteht aber das gleiche Gleichgewicht.
- ▶ Das gleiche Ergebnis ergibt sich für größere N , M ,
aber es dauert länger, bis das Gleichgewicht entsteht.

Lotka-Volterra Gleichungen für *SIR* mit Bewegung

- ▶ Sei der Lebensraum in ein $N \times M$ Gitter mit Torus-Randbedingungen geteilt.

- ▶ Zur Zeit t wird die Anzahl der Anfälligen, Infizierten bzw. Immunen in der Zelle $Z_{i,j}$ durch $S_{i,j}(t)$, $I_{i,j}(t)$, $R_{i,j}(t)$ bezeichnet.

	$i-1, j+1$	$i, j+1$	$i+1, j+1$
	$i-1, j$	i, j	$i+1, j$
	$i-1, j-1$	$i, j-1$	$i+1, j-1$

- ▶ Wenn es keine Infizierten gibt, und die Anfälligen sich zwischen $Z_{i,j}$ und $Z_{i+1,j}$ bewegen können, wird diese Bewegung (analog zum Newtonschen Abkühlungsgesetz) so modelliert:

$$S'_{i,j} = \hat{\sigma}_{i+\frac{1}{2},j} (S_{i+1,j} - S_{i,j}) - \mu S_{i,j}$$

wobei $\hat{\sigma}_{i+\frac{1}{2},j}$ ein Übergangskoeffizient an der Grenzlinie zwischen den Zellen darstellt.

- ▶ Wenn die Anfälligen in $Z_{i,j}$ sich zu den Nachbarzellen $U_{i,j} = \{Z_{i+p,j+q}\}_{\|(p,q)\|_\infty=1}$ bewegen können,

$$S'_{i,j} = \sum_{\|(p,q)\|_\infty=1} \hat{\sigma}_{i+\frac{p}{2},j+\frac{q}{2}} (S_{i+p,j+q} - S_{i,j}) - \mu S_{i,j}$$

Lotka-Volterra Gleichungen für *SIR* mit Bewegung

- ▶ Analog können die Bewegung der Infizierten und Immunen mit Übergangskoeffizienten \hat{l} und $\hat{\rho}$ modelliert werden.
- ▶ Das *SIR* Modell mit dieser Bewegung lautet,

$$\left\{ \begin{array}{l} S'_{i,j} = \sum_{\|(\rho, q)\|_{\infty}=1} \hat{\sigma}_{i+\frac{\rho}{2}, j+\frac{q}{2}} (S_{i+\rho, j+q} - S_{i,j}) + \beta - (\mu + \lambda I_{i,j}) S_{i,j} \\ I'_{i,j} = \sum_{\|(\rho, q)\|_{\infty}=1} \hat{l}_{i+\frac{\rho}{2}, j+\frac{q}{2}} (I_{i+\rho, j+q} - I_{i,j}) + (\lambda S_{i,j} - \mu - \gamma) I_{i,j} \\ R'_{i,j} = \sum_{\|(\rho, q)\|_{\infty}=1} \hat{\rho}_{i+\frac{\rho}{2}, j+\frac{q}{2}} (R_{i+\rho, j+q} - R_{i,j}) + \gamma I - \mu R \end{array} \right.$$

wobei $1 \leq i \leq N$ und $1 \leq j \leq M$.

- ▶ Die Grenzlinien $i = \frac{1}{2}$ und $j = \frac{1}{2}$ werden durch die Torus-Randbedingungen mit den Grenzlinien $i = N + \frac{1}{2}$ und $j = M + \frac{1}{2}$ identifiziert.
- ▶ Die Zellenwerte in $Z_{i,0}$ und $Z_{0,j}$ werden auch durch die Torus-Randbedingungen mit den Zellenwerten in $Z_{i,M}$ bzw. $Z_{N,j}$ identifiziert. Ähnlich werden die Zellen $Z_{i,M+1}$ und $Z_{N+1,j}$ mit den Zellen $Z_{i,1}$ bzw. $Z_{1,j}$ identifiziert.

Lotka-Volterra Gleichungen für *SIR* mit Bewegung

Hausaufgabe: Für $N = 2$, $M = 1$ und $\hat{\sigma}, \hat{\iota}, \hat{\rho}$ ortsunabhängig zeige für $I_2^* = \frac{\beta}{\mu + \gamma} - \frac{\mu}{\lambda} < 0$ dass das Gleichgewicht $(S_{i,j}, I_{i,j}, R_{i,j}) = (S_1^*, I_1^*, R_1^*) = (\beta/\mu, 0, 0)$ lokal asymptotisch stabil ist.

Verteiltes Modell

- ▶ Nun sei die *Dichte* der Anfälligen, Infizierten und Immunen durch $s = s(t, \mathbf{x})$, $i = i(t, \mathbf{x})$ bzw. $r = r(t, \mathbf{x})$ bezeichnet.
- ▶ Mit dem Fickschen Gesetz kann der Fluss \mathbf{F}_s der Anfälligen über eine Grenzlinie durch $\mathbf{F}_s = -\sigma \nabla s$ modelliert werden, wobei σ ein Diffusionskoeffizient ist.
- ▶ Mit einem Erhaltungssatz (und $\mu = \lambda = 0$),

$$S'_{i,j} = \partial_t \int_{Z_{i,j}} s = - \int_{\partial Z_{i,j}} \mathbf{F}_s \cdot \hat{\mathbf{n}} = \int_{\partial Z_{i,j}} \sigma \frac{\partial s}{\partial n}$$

und

$$\int_{\partial Z_{i,j}} \sigma \frac{\partial s}{\partial n} \approx \sum_{\|(p,q)\|_\infty=1} \delta \cdot \hat{\sigma}_{i+\frac{p}{2}, j+\frac{q}{2}} \frac{S_{i+p, j+q} - S_{i,j}}{\delta}$$

wobei

$$\hat{\sigma}_{i+\frac{p}{2}, j+\frac{q}{2}} = \frac{1}{\delta} \int_{\bar{Z}_{i,j} \cap \bar{Z}_{i+p, j+q}} \sigma$$

$\delta =$ Wanddicke

Lotka-Volterra Gleichungen für *SIR* mit Bewegung

- ▶ Mit dem Gauß Satz,

$$0 = \partial_t \int_{Z_{i,j}} s - \int_{\partial Z_{i,j}} \sigma \nabla s \cdot \hat{\mathbf{n}} = \int_{Z_{i,j}} [\partial_t s - \nabla \cdot (\sigma \nabla s)]$$

- ▶ Für $Z_{i,j}$ beliebig klein muss punktweise gelten,

$$\partial_t s = \nabla \cdot (\sigma \nabla s) \quad (\text{für } \mu = \lambda = 0)$$

- ▶ Ähnlich mit dem Fickschen Gesetz können die Flüsse \mathbf{F}_i und \mathbf{F}_r der Infizierten und Immunen über eine Grenzlinie durch $\mathbf{F}_i = -\iota \nabla i$ und $\mathbf{F}_r = -\rho \nabla r$ modelliert werden, wobei ι und ρ Diffusionskoeffizienten sind.

- ▶ Das *SIR* Modell mit Diffusion ist durch das Lotka-Volterra Gleichungssystem gegeben: $t > 0$, $\mathbf{x} \in \Omega = (0, 1)^2$

$$\begin{cases} \partial_t s &= \nabla \cdot (\sigma \nabla s) + \beta - (\mu + \lambda i)s, & s(0, \mathbf{x}) &= s_0(\mathbf{x}) \\ \partial_t i &= \nabla \cdot (\iota \nabla i) + (\lambda s - \mu - \gamma)i, & i(0, \mathbf{x}) &= i_0(\mathbf{x}) \\ \partial_t r &= \nabla \cdot (\rho \nabla r) + \gamma i - \mu r, & r(0, \mathbf{x}) &= r_0(\mathbf{x}) \end{cases}$$

mit periodischen Randbedingung

$$s(t, 0, y) = s(t, 1, y), \quad s(t, x, 0) = s(t, x, 1), \quad \text{etc.}$$

Lotka-Volterra Gleichungen für *SIR* mit Bewegung

- ▶ Klassisches Räuber-Beute Modell mit Rückkopplung:

$$\begin{cases} \partial_t s &= \nabla \cdot (\sigma \nabla s) + s(a_1 - a_2 i) + a_5 r, & s(0, \mathbf{x}) &= s_0(\mathbf{x}) \\ \partial_t i &= \nabla \cdot (\iota \nabla i) + i(a_2 s - a_3) - a_4 i, & i(0, \mathbf{x}) &= i_0(\mathbf{x}) \\ \partial_t r &= \nabla \cdot (\rho \nabla r) + a_4 i - a_5 r - a_6 r, & r(0, \mathbf{x}) &= r_0(\mathbf{x}) \end{cases}$$

- ▶ Logistische Variante des Räuber-Beute Modells:

$$\begin{cases} \partial_t s &= \nabla \cdot (\sigma \nabla s) + a_1 s(1 - s/a_3) \\ &\quad + a_7 r - a_4 s i / (1 + a_6 s), & s(0, \mathbf{x}) &= s_0(\mathbf{x}) \\ \partial_t i &= \nabla \cdot (\iota \nabla i) - a_8 i \\ &\quad + a_2 i(1 - i/(a_5 s)), & i(0, \mathbf{x}) &= i_0(\mathbf{x}) \\ \partial_t r &= \nabla \cdot (\rho \nabla r) + a_8 i \\ &\quad + a_1 r(1 - r/a_3) - a_7 r, & r(0, \mathbf{x}) &= r_0(\mathbf{x}) \end{cases}$$

- ▶ Beide mit periodischen Randbedingung

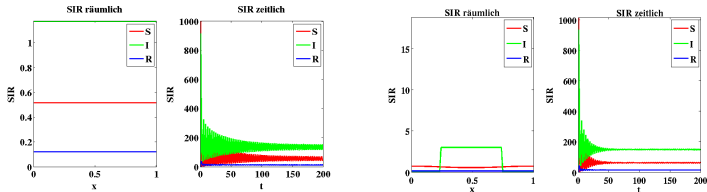
$$s(t, 0, y) = s(t, 1, y), \quad s(t, x, 0) = s(t, x, 1), \quad \text{etc.}$$

- ▶ Quarantäne wird durch $\iota = 0$ am Rand eines Gebiets implementiert.

Lotka-Volterra Gleichungen für *SIR* mit Bewegung

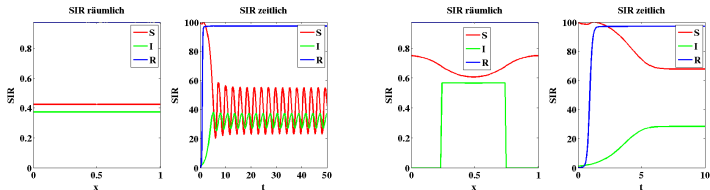
Linkes Paar ohne Quarantäne, rechtes Paar mit Quarantäne.
Die Infizierten beginnen immer in einem Punkt in der Mitte.

- ▶ Klassisches Räuber-Beute Modell mit Rückkopplung:



Rückkopplung macht Grenzzyklus! Quarantäne stabilisierend.

- ▶ Logistische Variante des Räuber-Beute Modells:

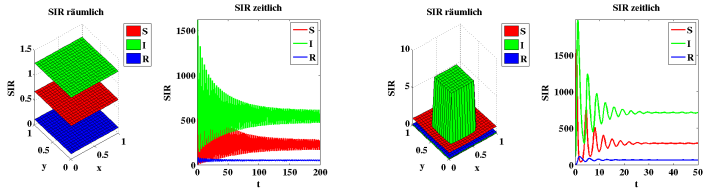


Grenzzyklus auch mit Rückkopplung. Quarantäne stabilisierend.

Lotka-Volterra Gleichungen für *SIR* mit Bewegung

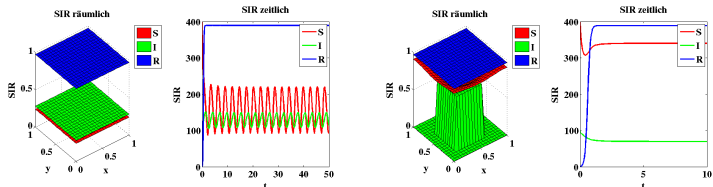
Linkes Paar ohne Quarantäne, rechtes Paar mit Quarantäne.
Die Infizierten beginnen immer in einem Punkt in der Mitte.

- ▶ Klassisches Räuber-Beute Modell mit Rückkopplung:



Rückkopplung macht Grenzzyklus! Quarantäne stabilisierend.

- ▶ Logistische Variante des Räuber-Beute Modells:



Grenzzyklus auch mit Rückkopplung. Quarantäne stabilisierend.

Wärmetransport

- ▶ Das Ziel dieser Modellierung ist, die Installation eines Erdwärmesystems und einer angeschlossenen Fussbodenheizung zu verstehen und möglicherweise steuern.
- ▶ Fragestellungen:
 - ▶ Wie sollen Flächenkollektoren in der Erde verlegt werden?
 - ▶ Wie sollen Leitungen für die Fussbodenheizung verlegt werden?
 - ▶ Wie kann man Wärmetausch zwischen den Kollektoren oder zwischen den Leitungen vermeiden, damit Wärmeaufnahme und Wärmeabgabe möglichst effizient sind?
 - ▶ Wie kann man die Temperaturverteilung im Garten und im Haus möglichst gleichmäßig halten?
- ▶ Wie vorher, wird das Prinzip der Energieerhaltung in Bezug auf jedes Kompartiment verwendet,

$$\text{innere Änderungsrate} = \text{hinein über den Rand} - \text{heraus über den Rand} + \text{innere Quellen} - \text{innere Senken}$$

Einfaches Modell für ein Erdwärmesystem

Zuerst die Wärmeaufnahme:

- ▶ Das einfachste Modell der Flächenkollektoren in der Erde:
 - ▶ 1 Kompartiment für das Kollektorensystem.
 - ▶ 1 Kompartiment für das Erdesystem.
- ▶ Für jedes Kompartiment,
 - ▶ Kollektorensystem, Energie und Temperatur:
$$E_K = \rho_K c_K V_K T_K$$
 - ▶ Erdesystem, Energie und Temperatur: $E_E = \rho_E c_E V_E T_E$
- ▶ Für reine Diffusion über die Grenzfläche:
 - ▶ $E'_K = \alpha_K^E S_K^E (T_E - T_K)$
 - ▶ $E'_E = \alpha_K^E S_K^E (T_K - T_E)$

ρ = Dichte
 c = spezifische Wärmekapazität
 V = Volumen
 α = Wärmeübergangskoeffizient
 S = Grenzflächeninhalt
- ▶ Die Flussrate durch das Kollektorensystem: F_K
- ▶ Der Zufluss für das Kollektorensystem hat Temperatur T_P ,
 - ▶ die in der Wärmepumpe eingestellt ist, und
 - ▶ hängt von der Abflusstemperatur des Kollektorensystems ab.
 - ▶ Die Abflusstemperatur des Kollektorensystems ist T_K . Warum?
 - ▶ In einem *normalen* Temperaturbereich ($0^\circ\text{C} - 10^\circ\text{C}$), gilt
 $T_P = T_K - \Delta T$, $\Delta T \approx 2^\circ\text{C}$, aber $\Delta T \rightarrow 0$ für $T_K < 0$.

Wärmeaufnahme

- ▶ Energieerhaltung: $T_P < T_K(0) = T_E(0) = T_0$

$$\begin{cases} \rho_K c_K V_K T'_K = \alpha_K^E S_K^E (T_E - T_K) + F_K (\rho_P c_P T_P - \rho_K c_K T_K) \\ \rho_E c_E V_E T'_E = \alpha_K^E S_K^E (T_K - T_E) \quad (\rho_P c_P = \rho_K c_K) \end{cases}$$

- ▶ Fragestellung: Soll die Flussrate F höher oder niedriger eingestellt werden?
- ▶ Intuitiv: Eiskaltes Wasser strömt über die Hand.
 - ▶ Es ist länger auszuhalten, wenn die Flussrate niedriger ist,
 - ▶ d.h. Energietransport E' ist weniger, wenn F kleiner ist.
 - ▶ Für das Erdwärmesystem soll Energietransport höher sein.
- ▶ Im obigen System der GDG ist der Energietransport ins Haus,

$$-(E_K + E_E)' = \rho_K c_K F_K (T_K - T_P)$$

- ▶ Wenn $\Delta T = T_K - T_P$ fixiert ist, ist die gewonnene Energie pro Zeiteinheit umso höher, je größer F_K ist.
- ▶ $T_K - T_P$ im obigen System soll mit einer Funktion $\phi(T_K)$ ersetzt werden, die von der Wärmepumpe abhängt, z.B.

$$\phi(t) \approx 2, t \approx 5, \text{ aber } \phi(t) \rightarrow 0 \text{ für } t < 0.$$

Eine Möglichkeit wäre, ϕ ist eine logistische Funktion.

Wärmeaufnahme

- ▶ Der Energietransport ins Haus wird

$$-(E_K + E_E)' = \rho_K c_K F_K \phi(T_K)$$

und die Wirkung einer größeren Flussrate F_K nimmt ab, wenn $\phi(T_K)$ klein wird.

Hausaufgabe: Sei $t^*(F_K)$ die Laufzeit der Pumpe, die notwendig ist, um eine gezielte Energie E^* ins Haus zu bringen:

$$E^* = \rho_K c_K F_K \int_0^{t^*(F_K)} \phi(T_K(t; F_K)) dt \quad \text{mit} \quad \phi(T) = 2 \min\{\max\{T/T_0, 0\}, 1\}$$

Zeige $T_K \in [0, T_0]$ und daher $\phi(T_K) = 2T_K/T_0$. Zeige $t^{*\prime}(F_K) < 0$.

- ▶ Folglich ist es theoretisch vorteilhaft, dass F_K möglichst groß ist.
- ▶ Wenn die Flussrate immer größer wird, gibt es trotzdem Kosten für eine große Flussrate, besonders wenn sehr kalte Flüssigkeit visköser wird. Daher gibt es praktisch eine optimale Flussrate.
- ▶ Die Flussrate kann passiv durch parallele Leitungen erhöht werden.

Parallele Kollektoren

- ▶ Wenn eine Druckdifferenz ΔP von der Wärmepumpe erzeugt wird, folgt aus dem Ohmschen Gesetz dass

$$\Delta P = W_K \cdot F_K$$

gilt, wobei W_K der Widerstand des Kollektorensystems ist.

- ▶ Für eine einzige Leitung mit Radius R und Länge L ist der Widerstand durch das Poiseuille'sche Gesetz gegeben,

$$W = 8\nu L / (\pi R^4)$$

wobei ν die Viskosität der Flüssigkeit ist.

- ▶ (Wenn die Strömung turbulent ist, ist der Widerstand noch höher, aber er hängt von L immer noch linear ab.)
- ▶ Üblicherweise ist eine gegebene Fläche verfügbar für das Kollektorensystem, und daher wird angenommen dass die gesamte Länge aller Leitungen fixiert ist.
- ▶ Wenn n gleich lange Leitungen parallel verlegt werden, folgt wieder aus dem Ohmschen Gesetz dass

$$\Delta P = W_n F_n = w_i f_i, \quad i = 1, \dots, n$$

gilt, wobei w_i and f_i der Widerstand bzw. Flussrate der i ten Leitung sind, W_n und F_n für das gesamte Leitungssystem.

Parallele Kollektoren

- ▶ Der Widerstand hängt linear von der Leitungslänge ab, und daher gilt

$$W_1 = nw_i, \quad i = 1, \dots, n.$$

- ▶ Laut dem Kirchhoff'schen Gesetz gilt

$$F_n = f_1 + \dots + f_n$$

- ▶ Laut dem Ohmschen Gesetz

$$\frac{\Delta P}{W_n} = F_n = f_1 + \dots + f_n = \frac{\Delta P}{w_1} + \dots + \frac{\Delta P}{w_n}$$

und zusammen mit $W_1 = nw_i, i = 1, \dots, n$, folgt

$$\frac{1}{W_n} = \frac{1}{w_1} + \dots + \frac{1}{w_n} = \frac{n}{W_1/n}$$

oder

$$W_n = \frac{W_1}{n^2}, \quad F_n = \frac{\Delta P}{W_n} = n^2 \frac{\Delta P}{W_1} = n^2 F_1$$

- ▶ Daher für fixiertes ΔP steigt die Flussrate quadratisch mit der Anzahl n der gleich langen parallelen Leitungen.
- ▶ Wie viele Leitungen können praktisch parallel verlegt werden?

Einfaches Modell für ein Erdwärmesystem

Nun die Wärmeabgabe:

- ▶ Das einfachste Modell der Fussbodenheizung:
 - ▶ 1 Kompartiment für das Austeilersystem.
 - ▶ 1 Kompartiment für das Haussystem.

- ▶ Für das Austeiler- bzw. Haus-Kompartiment,

$$E_A = \rho_A c_A V_A T_A, \quad E_H = \rho_H c_H V_H T_H$$

- ▶ Für reine Diffusion über die Grenzfläche:

$$E'_A = \alpha_A^H S_A^H (T_H - T_A), \quad E'_H = \alpha_A^H S_A^H (T_A - T_H)$$

- ▶ Die Flussrate durch das Austeilersystem: F_A
- ▶ Der Zufluss für das Austeilersystem hat die Temperatur T_S eines Wärmespeichers, der von der Wärmepumpe versorgt wird.

- ▶ Energieerhaltung: $T_S > T_A(0) = T_H(0) = T_0$

$$\begin{cases} \rho_H c_H V_H T'_H = \alpha_A^H S_A^H (T_A - T_H) \\ \rho_A c_A V_A T'_A = \alpha_A^H S_A^H (T_H - T_A) + F_A (\rho_S c_S T_S - \rho_A c_A T_A) \end{cases}$$

- ▶ Wie mit der Wärmeaufnahme ist der Energietransport für Wärmeabgabe höher, wenn die Flussrate F_A größer ist.

Wärmeabgabe

- ▶ Die Temperatur T_S des Wärmespeichers bleibt aber nicht konstant. Deswegen wird ein Kompartiment für den Wärmespeicher eingeführt: $E_S = \rho_S c_S V_S T_S$.
- ▶ Das Kollektorensystem und das Austeilersystem werden nun durch die Einführung des neuen Kompartiments gekoppelt: $E'_H + E'_A + E'_S + E'_K + E'_E = 0$. (ohne Q und α_H^L)
- ▶ Auch mit Lufttemperatur T_L und Sonnenstrahlung Q gelten

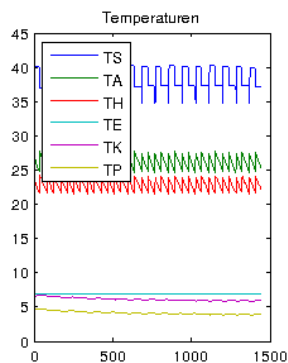
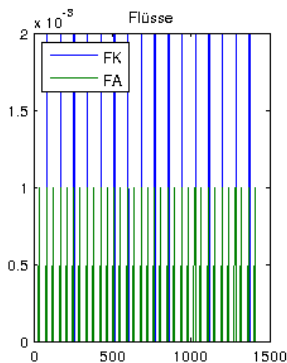
$$\rho_H c_H V_H T'_H = \alpha_H^L S_H^L (T_L - T_H), \quad \rho_E c_E V_E T'_E = Q$$
 ohne Heizung. $T_S > T_A(0) = T_H(0) > T_K(0) = T_E(0) > T_L$
- ▶ Das Modell mit diesen Kopplungen ist: $T_P = T_K - \phi(T_K)$

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho_H c_H V_H T'_H = \alpha_A^H S_A^H (T_A - T_H) + \alpha_H^L S_H^L (T_L - T_H) \\ \rho_A c_A V_A T'_A = \alpha_A^H S_A^H (T_H - T_A) + F_A (\rho_S c_S T_S - \rho_A c_A T_A) \\ \rho_S c_S V_S T'_S = F_A (\rho_A c_A T_A - \rho_S c_S T_S) \\ \rho_K c_K V_K T'_K = \alpha_K^E S_K^E (T_E - T_K) + F_K (\rho_P c_P T_P - \rho_K c_K T_K) \\ \rho_E c_E V_E T'_E = \alpha_K^E S_K^E (T_K - T_E) + Q \end{array} \right.$$

Hausaufgabe: Entwickle $F_K(t)$ und $F_A(t)$ damit $T_H \in [T_{\min}, T_{\max}]$.

Einfaches Modell für ein Erdwärmesystem

- ▶ Eine Simulation mit $T_H \in [22\text{C}, 23\text{C}]$ und $T_S \in [35\text{C}, 40\text{C}]$:



- ▶ Siehe Matlab-Code. Größen durch realistische Geometrie.
 - ▶ Schlauchdurchmesser: 1cm Fußbodenheizung, 3cm Erdekollektoren. Flächen: 5.8m² Haus, 70.7m² Erde.
 - ▶ Abstände in spiralförmiger Verlegung: 20cm Fussbodenheizung, 60cm Erdekollektoren.

Mehr-Kompartimente-Modell eines Erdwärmesystems

- ▶ Die Temperatur in jedem Kompartiment des einfachen Modells hängt klar vom Raum ab.
- ▶ Die Temperaturen im Kollektorensystem und im Erdesystem sind niedriger beim Zufluss und höher beim Abfluss.
 - ▶ Sei das Kollektorensystem in Kompartimente $\{K_i\}_{i=1}^M$ geteilt.
 - ▶ Sei das Erdesystem in Kompartimente $\{E_i\}_{i=1}^M$ geteilt.
 - ▶ Die Parameter ρ_K , c_K und V_K sind gleich für alle K_i .
 - ▶ Die Parameter ρ_E , c_E und V_E sind gleich für alle E_i .
 - ▶ Die Parameter α_K^E und S_K^E sind gleich für alle K_i und E_i .
 - ▶ Seien T_{K_i} und T_{E_i} die Temperaturen in K_i bzw. E_i .
- ▶ Die Temperatur im Austeilersystem und im Haussystem ist niedriger beim Abfluss und höher beim Zufluss.
 - ▶ Sei das Austeilersystem in Kompartimente $\{A_i\}_{i=1}^N$ geteilt.
 - ▶ Sei das Haussystem in Kompartimente $\{H_i\}_{i=1}^N$ geteilt.
 - ▶ Die Parameter ρ_A , c_A und V_A sind gleich für alle A_i .
 - ▶ Die Parameter ρ_H , c_H , V_H , α_H^L und S_H^L sind gleich für alle H_i .
 - ▶ Die Parameter α_A^H und S_A^H sind gleich für alle A_i und H_i .
 - ▶ Seien T_{A_i} und T_{H_i} die Temperaturen in A_i bzw. H_i .

Mehr-Kompartimente-Modell eines Erdwärmesystems

- ▶ Nun gibt es auch Diffusion zwischen gleichartigen Kompartimenten. Neue Wärmeübergangskoeffizienten und Grenflächeninhalte sind ortsunabhängig:
 - ▶ Zwischen Erdekompartmenten: α_E und S_E .
 - ▶ Zwischen Kollektorkompartmenten: α_K und S_K .
 - ▶ Zwischen Austeilerkompartmenten: α_A und S_A .
 - ▶ Zwischen Hauskompartmenten: α_H und S_H .

- ▶ Für Erdekompimente,

$$\rho_E c_E V_E T'_{E_i} = \alpha_K^E S_K^E (T_{K_i} - T_{E_i}) + \alpha_E S_E (T_{E_{i+1}} - 2T_{E_i} + T_{E_{i-1}}) + Q$$

wobei $T_{E_{M+1}} = T_{E_1}$ und $T_{E_0} = T_{E_M}$.

- ▶ Für Kollektorkompimente mit $1 < i < M$,

$$\rho_K c_K V_K T'_{K_i} = \alpha_K^E S_K^E (T_{E_i} - T_{K_i}) + \alpha_K S_K (T_{K_{i+1}} - 2T_{K_i} + T_{K_{i-1}}) + \rho_K c_K F_K (T_{K_{i-1}} - T_{K_i})$$

und $i = 1, M$,

$$\rho_K c_K V_K T'_{K_1} = \alpha_K^E S_K^E (T_{E_1} - T_{K_1}) + \alpha_K S_K (T_{K_2} - T_{K_1}) + \rho_K c_K F_K (T_P - T_{K_1})$$

$$\rho_K c_K V_K T'_{K_M} = \alpha_K^E S_K^E (T_{E_M} - T_{K_M}) + \alpha_K S_K (T_{K_{M-1}} - T_{K_M}) + \rho_K c_K F_K (T_{K_{M-1}} - T_{K_M})$$

Mehr-Kompartimente-Modell eines Erdwärmesystems

- Für den Speicher, $T_P = T_{K_M} - \phi(T_{K_M})$

$$\rho_S c_S V_S T'_S = \rho_K c_K F_K (T_{K_M} - T_P) + \rho_A c_A F_A (T_{A_N} - T_S)$$

- Für Austeilerkompartimente mit $1 < i < N$,

$$\rho_A c_A V_A T'_{A_i} = \alpha_A^H S_A^H (T_{H_i} - T_{A_i}) + \alpha_A S_A (T_{A_{i+1}} - 2T_{A_i} + T_{A_{i-1}}) + \rho_A c_A F_A (T_{A_{i-1}} - T_{A_i})$$

und $i = 1, N$,

$$\rho_A c_A V_A T'_{A_1} = \alpha_A^H S_A^H (T_{H_1} - T_{A_1}) + \alpha_A S_A (T_{A_2} - T_{A_1}) + \rho_A c_A F_A (T_S - T_{A_1})$$

$$\rho_A c_A V_A T'_{A_N} = \alpha_A^H S_A^H (T_{H_N} - T_{A_N}) + \alpha_A S_A (T_{A_{N-1}} - T_{A_N}) + \rho_A c_A F_A (T_{A_{N-1}} - T_{A_N})$$

- Für Hauskompartimente,

$$\rho_H c_H V_H T'_{H_i} = \alpha_A^H S_A^H (T_{A_i} - T_{H_i}) + \alpha_H S_H (T_{H_{i+1}} - 2T_{H_i} + T_{H_{i-1}}) + \alpha_H^L S_H^L (T_L - T_{H_i})$$

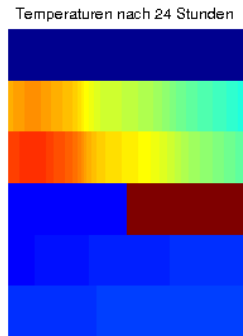
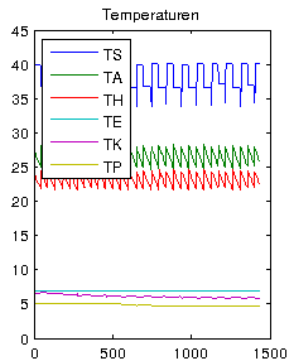
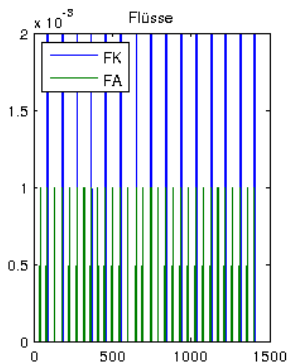
wobei $T_{H_{N+1}} = T_{H_1}$ und $T_{H_0} = T_{H_N}$.

Hausaufgabe: Zeige für $\alpha_L = 0$ und $Q = 0$, dass die Gesamtenergie in diesem Modell erhalten bleibt.

Hausaufgabe: Entwickle $F_K(t)$ und $F_A(t)$ damit $T_H \in [T_{\min}, T_{\max}]$.

Mehr-Kompartimente-Modell eines Erdwärmesystems

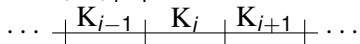
- ▶ Eine Simulation mit $T_H \in [22\text{C}, 23\text{C}]$ und $T_S \in [35\text{C}, 40\text{C}]$:



- ▶ Siehe Matlab-Code.
 - ▶ Größen durch realistische Geometrie wie vorher.
 - ▶ Die ersten 2 Grafiken sind gleich wie vorher.
 - ▶ Bemerke die Temperaturverteilungen, Zufluss zu Abfluss: höher zu niedriger im Haus, umgekehrt in der Erde.

Erdwärmesystem mit Konvektion und Diffusion

- Man stellt sich z.B. $\{K_i\}_{i=1}^M$ als 1D Kette vor:



- Mit dem Fourierschen Gesetz kann der diffusive Wärmefluss \mathbf{q} durch $\mathbf{q} = -\lambda \nabla T$ modelliert werden, wobei λ die Wärmeleitfähigkeit ist.
- Mit einem Erhaltungssatz (und $F_K = 0$, $\alpha_K^E = 0$)

$$\frac{1}{V_{K_i}} \int_{K_i} E' = \int_{K_i} \rho c T' = - \int_{\partial K_i} \mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{n}} = \int_{\partial K_i} \lambda \frac{\partial T}{\partial n}$$

und

$$\int_{\partial K_i} \lambda \frac{\partial T}{\partial n} \approx \sum_{|p|=1} \lambda_{i+\frac{p}{2}} \mathbf{S}_{i+\frac{p}{2}} \frac{T_{K_{i+p}} - T_{K_i}}{\delta}$$

wobei $\delta =$ Wanddicke (oder Abstand zwischen Zentren) und

$$\int_{\bar{K}_i \cap \bar{K}_{i+p}} \lambda \approx \lambda_{i+\frac{p}{2}} \mathbf{S}_{i+\frac{p}{2}} = \delta \alpha_{i+\frac{p}{2}} \mathbf{S}_{i+\frac{p}{2}}$$

- Der Wärmeübergangskoeffizient ist $\alpha = \lambda/\delta$, der sich von der Wärmeleitfähigkeit λ und einer Zellenbreite δ für die Simulationen leichter nachschlagen lässt.

Erdwärmesystem mit Konvektion und Diffusion

- ▶ Zusammengefasst,

$$\begin{aligned}\rho_{K_i} c_{K_i} V_{K_i} T'_{K_i} &\approx \int_{K_i} \rho c T' = \int_{\partial K_i} \lambda \frac{\partial T}{\partial n} \\ &\approx \alpha_{i+\frac{1}{2}} S_{i+\frac{1}{2}} [T_{K_{i+1}} - T_{K_i}] + \alpha_{i-\frac{1}{2}} S_{i-\frac{1}{2}} [T_{K_{i-1}} - T_{K_i}]\end{aligned}$$

- ▶ Wenn die Parameter konstant sind,

$$\rho_K c_K V_K T'_{K_i} = \alpha_K S_K [T_{K_{i+1}} - 2T_{K_i} + T_{K_{i-1}}]$$

wie vorher gesehen.

- ▶ Nun stellt man sich $\{K_i\}_{i=1}^M$ und $\{E_i\}_{i=1}^M$ zusammen vor:

$$\begin{array}{ccccccc} \dots & | & K_{i-1} & | & K_i & | & K_{i+1} & | & \dots \\ & & \text{---} & & \text{---} & & \text{---} & & \\ \dots & | & E_{i-1} & | & E_i & | & E_{i+1} & | & \dots \end{array}$$

- ▶ Mit einem Erhaltungssatz (und $F_K = 0$)

$$\frac{1}{V_{K_i}} \int_{K_i} E' = \int_{K_i} \rho c T' = - \int_{\partial K_i} \mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{n}} = \int_{\partial K_i} \lambda \frac{\partial T}{\partial n}$$

und

$$\int_{\partial K_i} \lambda \frac{\partial T}{\partial n} \approx \sum_{|\rho|=1} \alpha_K S_K [T_{K_{i+\rho}} - T_{K_i}] + \alpha_K^E S_K^E [T_{E_i} - T_{K_i}]$$

Erdwärmesystem mit Konvektion und Diffusion

- ▶ Zusammengefasst,

$$\begin{aligned}\rho_K c_K V_K T'_{K_i} &\approx \int_{K_i} \rho c T' = \int_{\partial K_i} \lambda \frac{\partial T}{\partial n} \\ &\approx \alpha_K S_K [T_{K_{i+1}} - 2T_{K_i} + T_{K_{i-1}}] + \alpha_K^E S_K^E [T_{E_i} - T_{K_i}]\end{aligned}$$

wie vorher gesehen.

- ▶ Der rein konvektive Wärmefluss kann durch $\mathbf{q} = \mathbf{v}E = \mathbf{v}\rho cT$ modelliert werden, wobei \mathbf{v} die Geschwindigkeit ist.

- ▶ Mit einem Erhaltungssatz (und $\alpha_k = 0$, $\alpha_K^E = 0$)

$$\frac{1}{V_{K_i}} \int_{K_i} E' = \int_{K_i} \rho c T' = - \int_{\partial K_i} \mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{n}} = - \int_{\partial K_i} \rho c T \mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}}$$

und

$$- \int_{\partial K_i} \rho c T \mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}} \approx (F \rho c T)_{K_i^{\text{ein}}} - (F \rho c T)_{K_i^{\text{aus}}}$$

wobei

$$F_{K_i^{\text{[ein|aus]}}} = \int_{\partial K_i \cap \{\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}} < |> 0\}} |\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}}|$$

Erdwärmesystem mit Konvektion und Diffusion

- ▶ Mit $T_{K[\text{ein}|\text{aus}]} = T_{K_{[i-1]j}}$ und konstanten Parametern,

$$\begin{aligned}\rho_K c_K V_K T'_{K_i} &\approx \int_{K_i} \rho c T' = \int_{\partial K_i} \left[\lambda \frac{\partial T}{\partial n} - \rho c T \mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}} \right] \\ &\approx \alpha_K S_K [T_{K_{i+1}} - 2T_{K_i} + T_{K_{i-1}}] + \alpha_K^E S_K^E [T_{E_i} - T_{K_i}] \\ &\quad + \rho_K c_K F_K [T_{K_{i-1}} - T_{K_i}]\end{aligned}$$

wie vorher gesehen.

- ▶ Mit dem Gauß Satz,

$$0 = \partial_t \int_{K_i} \rho c T - \int_{\partial K_i} [\lambda \nabla T - \rho c T \mathbf{v}] \cdot \hat{\mathbf{n}} = \int_{K_i} [\rho c \partial_t T - \nabla \cdot (\lambda \nabla T - \rho c T \mathbf{v})]$$

- ▶ Das Ergebnis folgt aus,

$$\rho c \partial_t T + \nabla \cdot (\rho c T \mathbf{v}) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T), \quad K; \quad \partial_n T = 0, \quad \partial K^{\text{aus}}; \quad T = T^{\text{ein}}, \quad \partial K^{\text{ein}}$$

wobei $\partial K^{[\text{ein}|\text{aus}]} = \{\mathbf{x} \in \partial K : \mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}} [< | \geq] 0\}$.

- ▶ Analog schreibt man diese PDG auch für das Erdesystem, aber in der Erde gilt $\mathbf{v} = 0$, da es keine Konvektion gibt.
- ▶ Die gleichen Überlegungen führen zu dieser PDG für die parallelen Systeme des Austeilers und des Hauses.

Erdwärmesystem mit Konvektion und Diffusion

- ▶ DG System mit Randbedingungen, $T_P = T_{K^{\text{aus}}} - \phi(T_{K^{\text{aus}}})$

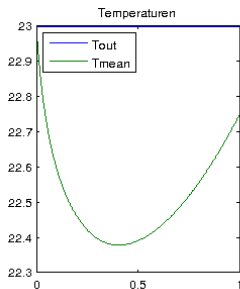
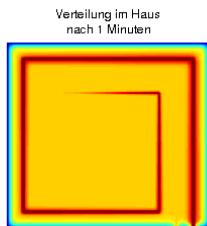
$$\rho c \partial_t T + \nabla \cdot (\rho c T \mathbf{v}) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T), \quad \text{in } E, K, A, H$$

$$\rho_S c_S V_S T'_S = \rho_K c_K F_K (T_{K^{\text{aus}}} - T_P) + \rho_A c_A F_A (T_{A^{\text{aus}}} - T_S)$$

$$T|_{\partial E} = T_E^\infty, \quad T|_{\partial K^{\text{ein}}} = T_P, \quad \partial_n T|_{\partial K^{\text{aus}}} = 0, \quad T|_{\partial A^{\text{ein}}} = T_S, \quad \partial_n T|_{\partial A^{\text{aus}}} = 0,$$

wobei ρ , c , \mathbf{v} und λ vom Ort abhängen, aber diese Parameter sind konstant in E , K , ∂K , A , ∂A , H und ∂H .

- ▶ 2D Haus Simulation mit $T_S = 35\text{C}$ und $F_A = 10^{-3}\text{m}^3/\text{Min}$:



Schlauchdurchmesser
1cm, Abstände 20cm,
Fläche 5.8m².

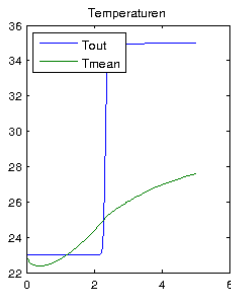
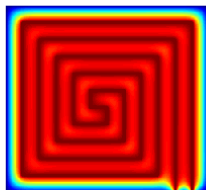
Kühler neben der
Wand, wärmer neben
dem Schlauch.

Anfänglich fällt T_{mean}
wegen $T_L = 0$.

Erdwärmesystem mit Konvektion und Diffusion

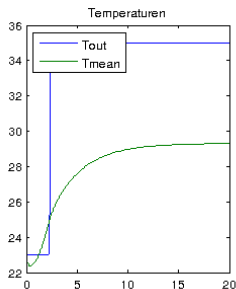
- ▶ 2D Haus Simulation mit $T_S = 35\text{C}$ und $F_A = 10^{-3}\text{m}^3/\text{Min}$:

Verteilung im Haus
nach 5 Minuten



T_{out} steigt plötzlich nach einem Durchlauf und langsamer nachher.

Verteilung im Haus
nach 20 Minuten



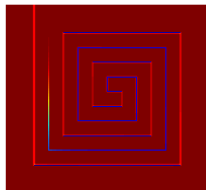
Nach 15 Stunden hat das Haus dieses Gleichgewicht erreicht.

2D Charakter des Modells wird unten untersucht.

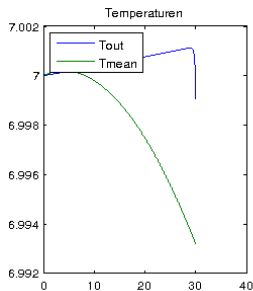
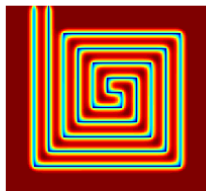
Erdwärmesystem mit Konvektion und Diffusion

- ▶ 2D Garten Simulation mit $T_P = 5\text{C}$ und $F_K = 2 \cdot 10^{-3}\text{m}^3/\text{Min}$:

Verteilung in der Erde
nach 30 Minuten

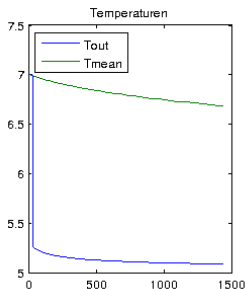


Verteilung in der Erde
nach 1 Tagen



Schlauchdurchmesser
3cm, Abstände 60cm,
Fläche 70.7m^2 .

T_{out} fällt plötzlich nach
einem Durchlauf (30
Min) und langsamer
nachher.

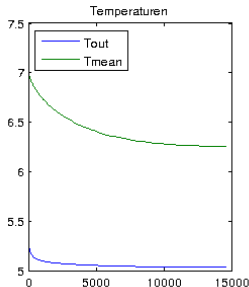


T_{mean} fällt immer lang-
samer, $T|_{\partial E} = 7\text{C}$.

Am Ende eines Tages
ist das Gleichgewicht
immer noch nicht er-
reicht worden.

Erdwärmesystem mit Konvektion und Diffusion

- ▶ 2D Garten Simulation mit $T_P = 5\text{C}$ und $F_K = 2 \cdot 10^{-3}\text{m}^3/\text{Min}$:



Dieses Gleichgewicht wird nach 10 Tagen erreicht.

Mit ununterbrochenem Fluss wird $T_{out} - T_P$ ziemlich klein.

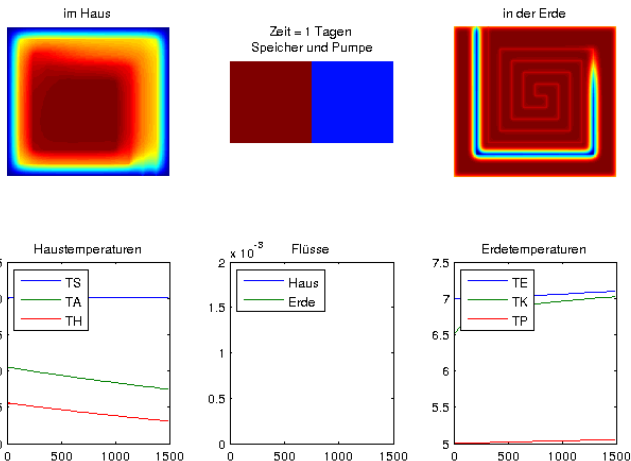
- ▶ Siehe die Matlab-Codes.
- ▶ Die 0D und 1D Simulationen basieren auf diese Geometrien.

Hausaufgabe: Zwischen den 0D/1D und diesen 2D Simulationen gibt es einen Unterschied in der Zeitskala, die für die nächste Simulation des gesamten Systems auffälliger ist. Warum?

Hausaufgabe: Wie kann weitere Diffusion eingeführt werden, um den unrealistischen 2D Charakter der Ergebnisse zu vermeiden?

Erdwärmesystem mit Konvektion und Diffusion

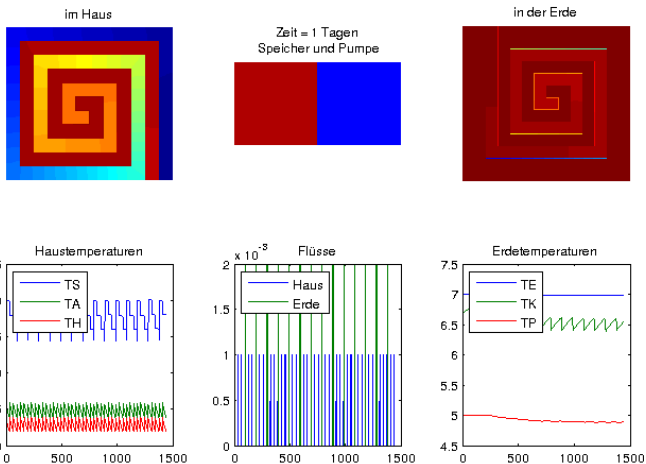
- ▶ 2D Simulation des gesamten Erdwärmesystems mit obigen Bedingungen. Die Zeitskala ist nicht richtig!



- ▶ Unterscheidet sich von den 0D/1D Ergebnissen. Warum?

Erdwärmesystem mit Konvektion und Diffusion

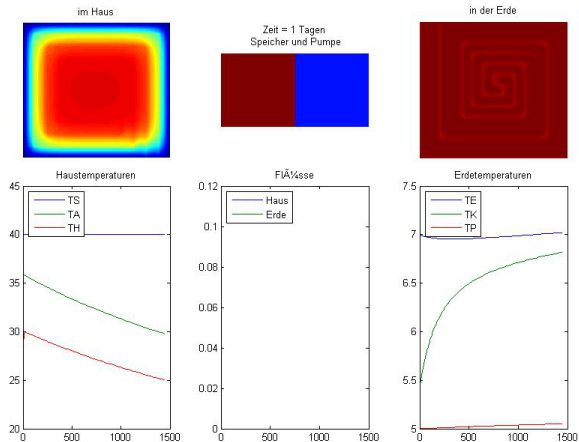
- ▶ Nun mit gewaltig erhöhter intra-Kompartiment Diffusion, gibt es halb so viele Heizzyklen, wie bei den 0D/1D Simulationen.



- ▶ Warum? Siehe die nächsten 3D Ergebnisse.

Erdwärmesystem mit Konvektion und Diffusion

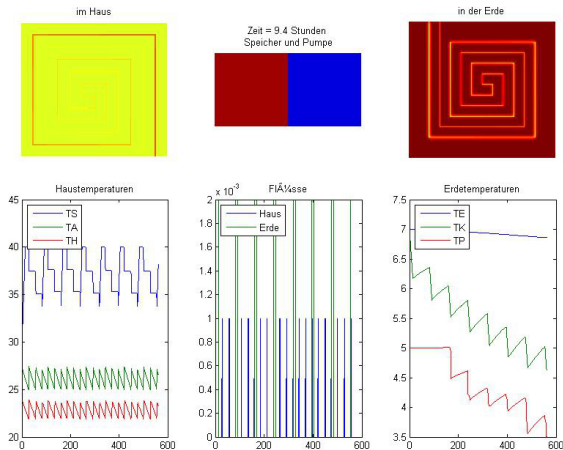
- ▶ 3D Ergebnisse mit Wärmeverlust über die Außenwände:



- ▶ Wie in der 2D Simulation hat sich die Fußbodenheizung nur einmal eingeschaltet. (Das Haus besitzt 3 Levels)

Erdwärmesystem mit Konvektion und Diffusion

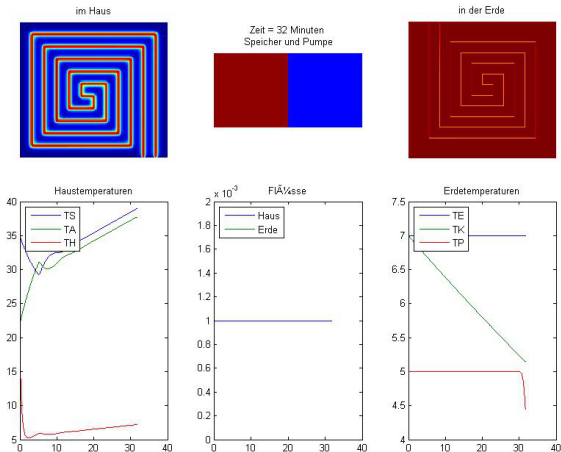
- ▶ 3D Ergebnisse mit erhöhter intra-Kompartiment Diffusion:



- ▶ Im Vergleich zur 2D Simulation sehen wir kein Labyrinthmuster. Diffusion in der Luft findet über den ganzen Raum hinweg statt.

Erdwärmesystem mit Konvektion und Diffusion

- ▶ 3D Ergebnisse mit zusätzlichem Wärmeverlust über das Dach:

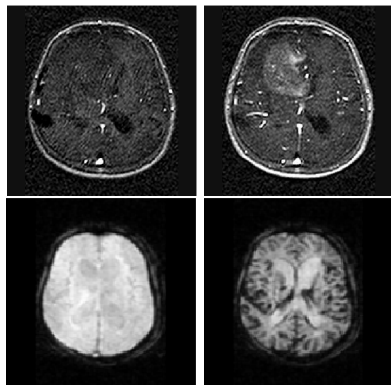


- ▶ Zuviel Wärme geht verloren.

Hausaufgabe: Untersuche die Rolle des Schlauchabstands für die Garten- und Haus-Simulationen.

Stofftransport

- ▶ Für DCE-MRI wird Kontrastmittel eingeführt, um Kontrast dynamisch zu erhöhen.



- ▶ Analog zur Energieerhaltung im letzten Kapitel kann Massenerhaltung hier verwendet werden, um die Verteilung des Kontrastmittels zu modellieren.
- ▶ Ziel: Transportparameter zu bestimmen.

DCE-MRI

- ▶ Sei $C(\mathbf{x}, t)$ die Konzentration des Kontrastmittels im Gewebepunkt $\mathbf{x} \in \Omega$ (Körper) und zur Zeit $t > 0$.
- ▶ Der konvektive Fluss \mathbf{F}_k des Kontrastmittels kann mit $\mathbf{F}_k = \mathbf{v}C$ modelliert werden, wobei \mathbf{v} die Geschwindigkeit ist.
- ▶ Mit dem Fickschen Gesetz kann der diffusive Fluss \mathbf{F}_d mit $\mathbf{F}_d = -D\nabla C$ modelliert werden, wobei D die Diffusivität ist.
- ▶ Angenommen hängt die Diffusivität von \mathbf{v} ab,

$$D(\mathbf{v}) = d\hat{\mathbf{v}}\hat{\mathbf{v}}^T + \rho[I - \hat{\mathbf{v}}\hat{\mathbf{v}}^T], \quad \hat{\mathbf{v}} = \mathbf{v}/\|\mathbf{v}\|_{\ell_2}.$$

Hier wirkt d entlang \mathbf{v} und ρ senkrecht auf \mathbf{v} .

- ▶ Durch Massenerhaltung, $\forall V \subseteq \Omega$

$$\partial_t \int_V C = - \int_{\partial V} (\mathbf{F}_d + \mathbf{F}_k) \cdot \hat{\mathbf{n}} = \underbrace{\int_{\partial V} D(\mathbf{v}) \nabla C \cdot \hat{\mathbf{n}}}_{\text{Diffusion}} - \underbrace{\int_{\partial V} C \mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}}}_{\text{Konvektion}}$$

ergibt sich für C eine Gleichung der Konvektion und Diffusion,

$$\partial_t C + \nabla \cdot [\mathbf{v}C] = \nabla \cdot [D(\mathbf{v})\nabla C], \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad t > 0$$

DCE-MRI

- ▶ Sei $V \subseteq \Omega$ ein Teilgebiet in dem gilt,

$$\begin{cases} \partial_t C = -\nabla \cdot [\mathbf{v}C] + \nabla \cdot [D(\mathbf{v})\nabla C] \\ \quad \quad \quad + (C - C_{\text{AIF}})\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}}\delta_{\partial V^{\text{ein}}}, & \mathbf{x} \in V, \quad t > 0 \\ 0 = D(\mathbf{v})\nabla C \cdot \hat{\mathbf{n}}, & \mathbf{x} \in \partial V, \quad t > 0 \\ C = C_0, & \mathbf{x} \in V, \quad t = 0 \end{cases}$$

wobei

- ▶ $C_{\text{AIF}} = C_{\text{AIF}}(t)$ ist die *arterial input function*
- ▶ $\partial V^{\text{ein}} = \{\mathbf{x} \in \partial V : \mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}} < 0\}$, $\partial V^{\text{aus}} = \{\mathbf{x} \in \partial V : \mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}} > 0\}$
- ▶ Die Dirac delta-Funktion $\delta_{\partial V^{\text{ein}}}$ erfüllt

$$\int_V C \delta_{\partial V^{\text{ein}}} = \int_{\partial V^{\text{ein}}} C, \quad \forall C \text{ glatt genug}$$

- ▶ Auf ∂V gibt es keinen diffusiven Fluss!
- ▶ Sei der Differentialoperator A formell so definiert:

$$AC = -\nabla \cdot [\mathbf{v}C] + \nabla \cdot [D(\mathbf{v})\nabla C] + C\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}}\delta_{\partial V^{\text{ein}}}$$

$$\text{Dom}(A) = \{C \text{ glatt genug} : D(\mathbf{v})\nabla C \cdot \hat{\mathbf{n}} = 0 \text{ auf } \partial V\}$$

Faltungsmodell

- ▶ Durch Integration der PDG ergibt sich mit dem Gauß Satz

$$\int_V \partial_t \mathbf{C} + \int_{\partial V_{\text{aus}}} \mathbf{C} \mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}} + \int_{\partial V_{\text{ein}}} \mathbf{C}_{\text{AIF}} \mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}} = \int_{\partial V} D(\mathbf{v}) \nabla \mathbf{C} \cdot \hat{\mathbf{n}} = 0.$$

wobei $C|_{\partial V_{\text{aus}}} = C_{\text{VOF}}$ die *venous output function* ist.

- ▶ Die formelle Lösungsformel für C ist

$$C(t) = e^{At} C(0) + \int_0^t e^{A(t-s)} \delta_{\partial V_{\text{ein}}} |\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}}| C_{\text{AIF}}(s) ds$$

- ▶ Wenn $C_0 = 0$ gilt, folgt die Faltungsgleichung

$$C_T(t) = \int_0^t K(t-s) C_{\text{AIF}}(s) ds$$

wobei die *tissue concentration function* bzw. der Faltungskern gegeben sind durch

$$C_T(t) = \frac{1}{|V|} \int_V C(t), \quad K(t) = \frac{1}{|V|} \int_V e^{At} \delta_{\partial V_{\text{ein}}} |\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}}|$$

- ▶ C_{AIF} und C_T werden durch Bildgebung gemessen und K soll bestimmt werden.

Physiologische Parameter vom Faltungskern

- ▶ Anhand des Faltungskerns lassen sich physiologische Parameter folgendermaßen herleiten.
- ▶ Durch Integration der PDG räumlich und zeitlich ergibt sich mit dem Gauß Satz,

$$|V|C_T(t) = \int_V C = \int_{\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}} < 0} |\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}}| \int_0^t C_{AIF}(s) ds - \int_{\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}} > 0} |\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}}| \int_0^t C_{VOF}(s) ds$$

- ▶ Mit der Faltungsgleichung folgt $C_T(t) = K(t)$ mit $C_{AIF}(t) = \delta(t)$, wobei die Dirac delta-Funktion erfüllt

$$\int_{t_0 - \epsilon}^{t_0 + \epsilon} \delta(t - t_0) dt = 1, \quad \forall \epsilon > 0$$

- ▶ Mit $C_{AIF}(t) = \delta(t)$ und $C_{VOF}(t) \xrightarrow{t \rightarrow 0} 0$ ergibt sich oben durch $t \rightarrow 0$,

$$K(0) = \frac{1}{|V|} \int_{\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}} < 0} |\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}}| = \mathcal{F}_T$$

d.h. $K(0)$ ist die volumetrische Flussrate pro Gewebevolumentereinheit (Perfusion).

Physiologische Parameter vom Faltungskern

- ▶ Die Funktion $R(t) = K(t)/K(0)$ ist die *residue function*, und sie stellt den Bruchteil des impulsiv eingeführten Kontrastmittels dar, der aus V noch nicht durchgeschwemmt worden ist.
- ▶ Angenommen sammelt sich kein Kontrastmittel in V ,

$$\text{Fluss}^{\text{ein}} = \int_{\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}} < 0} |\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}}| = \int_{\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}} > 0} |\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}}| = \text{Fluss}^{\text{aus}}$$

- ▶ Mit der Faltungsgleichung und der Formel für $K(0)$ folgt

$$\int_{\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}} < 0} |\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}}| \int_0^t R(t-s) C_{\text{AIF}}(s) ds = \int_{\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}} < 0} |\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}}| \int_0^t C_{\text{AIF}}(s) ds - \int_{\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}} > 0} |\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}}| \int_0^t C_{\text{VOF}}(s) ds$$

oder nach d/dt ,

$$C_{\text{AIF}}(t) + \int_0^t R'(t-s) C_{\text{AIF}}(s) ds = C_{\text{AIF}}(t) - C_{\text{VOF}}(t)$$

- ▶ Mit $R(t) = \int_t^\infty h(s) ds$ folgt

$$C_{\text{VOF}}(t) = \int_0^t h(t-s) C_{\text{AIF}}(s) ds$$

Physiologische Parameter vom Faltungskern

- ▶ Die Funktion $h(t)$ wird als Wahrscheinlichkeitsdichte der Transitzeit eines Kontrastmittelteilchens interpretiert.
- ▶ Dann ist der Mittelwert der Transitzeit gegeben durch

$$\mathcal{T}_T = \int_0^{\infty} th(t)dt = \int_0^{\infty} R(t)dt = \int_0^{\infty} K(t)/K(0)dt$$

- ▶ Mit $C_{AIF}(t) = \delta(t)$, $C_{VOF}(t) = h(t)$ und $C_T(t) = K(t)$ in der Integration der PDG folgt

$$|V|K(t) = \int_{\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}} < 0} |\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}}| \left[1 - \int_0^t h(s)ds \right] = |V|\mathcal{F}_T R(t)$$

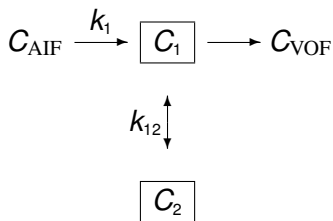
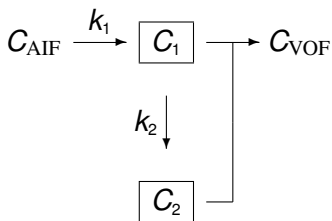
oder

$$\int_0^{\infty} K(t)dt = \mathcal{F}_T \int_0^{\infty} R(t)dt = \mathcal{F}_T \mathcal{T}_T = \mathcal{V}_T$$

d.h. $\int_0^{\infty} K(t)dt$ ist der effektive volumetrische Bruchteil vom V , in dem Kontrastmittel verteilt ist.

Bestimmung des Faltungskerns

- ▶ Diskrete Beispiele.
 - ▶ Angenommen besteht V aus 2 wohl gemischten Kompartimenten.
 - ▶ Im linken Beispiel gibt es reine Konvektion zwischen den Kompartimenten.
 - ▶ Im rechten Beispiel gibt es Diffusion zwischen den Kompartimenten.



- ▶ Der Transport in diesen Beispielen werden so modelliert:

$$\begin{cases} V_1 C_1' + k_1(C_1 - C_{AIF}) = 0 \\ V_2 C_2' + k_2(C_2 - C_1) = 0 \end{cases} \quad \begin{cases} V_1 C_1' + k_1(C_1 - C_{AIF}) = k_{12}(C_2 - C_1) \\ V_2 C_2' = k_{12}(C_1 - C_2) \end{cases}$$

Entfaltung ist schlecht gestellt

- ▶ Angenommen läuft Kontrastmittel durch $n + 1$ gleichartige wohl gemischte Kompartimente (jeder Mittelwert der Transitzeit = $1/\nu$), nachdem es impulsiv eingespritzt wird und bevor es in V ankommt.
- ▶ Modell der C_{AIF} für V ist

$$C_{\text{AIF}}(t) = \delta(t) * [\nu e^{-\nu t}]_1 * \cdots * [\nu e^{-\nu t}]_{n+1} = \nu \frac{(\nu t)^n}{n!} e^{-\nu t}$$

- ▶ Sei $C_{\text{T}} = K_{\text{e}} * C_{\text{AIF}}$, wobei K_{e} ein exakter Faltungskern ist.
- ▶ Angenommen wird $C_{\text{T}}(t) + N_{\epsilon}(t)$ statt $C_{\text{T}}(t)$ gemessen, wobei $N_{\epsilon}(t)$ Messrauschen darstellt. Dieser Messfehler erzeugt einen Fehler $E_{\epsilon}(t)$ im Faltungskern, der erfüllt:

$$C_{\text{T}}(t) + N_{\epsilon}(t) = \int_0^t C_{\text{AIF}}(t-s)[K_{\text{e}}(s) + E_{\epsilon}(s)]ds$$

Satz: Es existiert $N_{\epsilon} = \mathcal{O}(\epsilon)$, mit dem gilt $E_{\epsilon} = \mathcal{O}(\epsilon^{-n})$.

Hausaufgabe: Konstruiere ein einfaches Beispiel $(N_{\epsilon}, C_{\text{AIF}}, E_{\epsilon})$

mit $N_{\epsilon} \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} 0$ und $E_{\epsilon} \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} \infty$.

Bestimmung des Faltungskerns

- ▶ Wegen der nicht stetigen Abhängigkeit der Daten, muss die Bestimmung des Kerns regularisiert werden.
- ▶ Ein bekannter Ansatz zur Bestimmung des Faltungskerns basiert auf eine Singulärwertzerlegung der Systemmatrix, die durch Diskretisierung der Faltung entsteht.
- ▶ Sei die Faltung durch die Trapezregel diskretisiert:

$$\begin{aligned}C_T(t_i) &= \int_0^{t_i} C_{\text{AIF}}(t_i - s)K(s)ds \\ &\approx \sum_{j=1}^{i-1} [C_{\text{AIF}}(t_i - t_j)K(t_j) + C_{\text{AIF}}(t_i - t_{j+1})K(t_{j+1})](t_{j+1} - t_j)/2\end{aligned}$$

$i = 1, \dots, n$, mit $t_1 = 0$ und $t_n = T$, oder

$$\mathbf{C}_T = \mathbf{A}\mathbf{K}, \quad \mathbf{C}_T = \{C_T(t_i)\}_{i=1}^n, \quad \mathbf{K} = \{K(t_j)\}_{j=1}^n$$

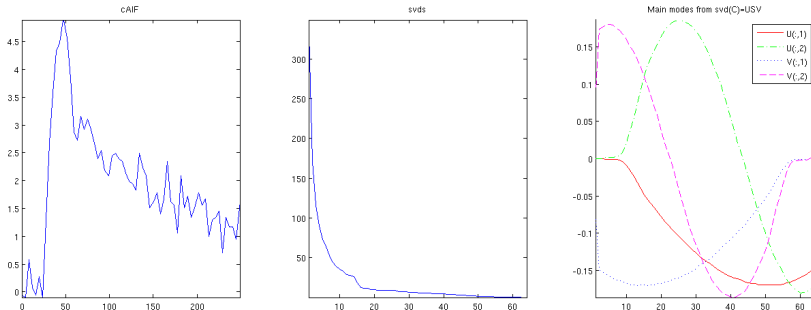
$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 \\ C_{\text{AIF}}(t_2-t_1)(t_2-t_1) & C_{\text{AIF}}(t_2-t_2)(t_2-t_1) & \ddots & \vdots \\ C_{\text{AIF}}(t_3-t_1)(t_2-t_1) & C_{\text{AIF}}(t_3-t_2)(t_3-t_1) & C_{\text{AIF}}(t_3-t_3)(t_3-t_2) & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ C_{\text{AIF}}(t_n-t_1)(t_2-t_1) & C_{\text{AIF}}(t_n-t_2)(t_3-t_1) \cdots C_{\text{AIF}}(t_n-t_{j-1})(t_{j+1}-t_{j-1}) \cdots C_{\text{AIF}}(t_n-t_n)(t_n-t_{n-1}) & \dots & 0 \end{bmatrix}$$

Bestimmung des Faltungskerns durch SWZ

- ▶ Mit der Singulärwertzerlegung der Systemmatrix,

$$A = U\Sigma V$$

bekommt man typischerweise folgende Ergebnisse.



- ▶ Die Singulärwerte $\{\sigma_i\}_{i=1}^n = \text{diag}(\Sigma)$ werden abgebrochen, d.h. mit $\sigma^* = \frac{1}{10} \max\{\sigma_i\}_{i=1}^n$ sei

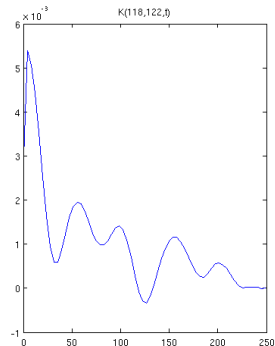
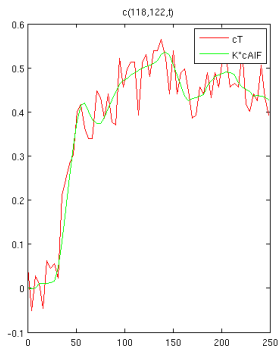
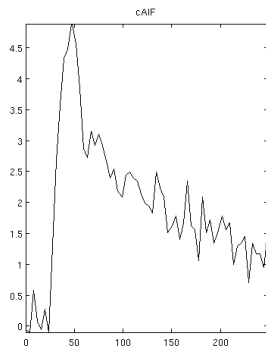
$$\tilde{\Sigma}^\dagger = \text{diag}\{(\sigma_i > \sigma^*) / (\sigma_i + (\sigma_i \leq \sigma^*))\}_{i=1}^n$$

- ▶ Die regularisierte Lösung ist

$$K = V^T \tilde{\Sigma}^\dagger U^T C_T$$

Bestimmung des Faltungskerns durch SWZ

- ▶ Typische gemessene und abgeschätzte Zeitverläufe sehen so aus:



- ▶ Trotz Regularisierung hat die abgeschätzte **Kernfunktion** viele Schwingungen.
- ▶ Trotz Schwingungen ist die abgeschätzte **Gewebekonzentration** eine Glättung der gemessenen **Gewebekonzentration**.

Bestimmung des Faltungskerns durch SWZ

- ▶ Trotz obiger Nachteile in den abgeschätzten Zeitverläufen sehen die abgeschätzten physiologischen Parameter räumlich so aus:

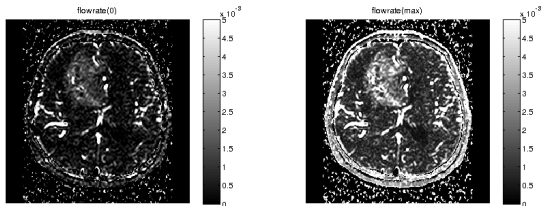
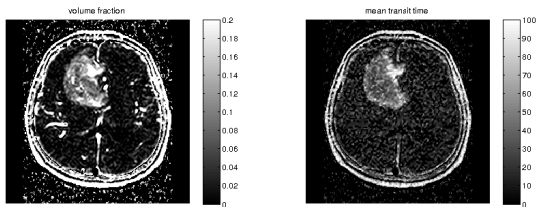
$$\mathcal{V}_T = \sum_{i=1}^{n-1} [K_i + K_{i+1}] \times \frac{1}{2}(t_i - t_{i-1})$$

$$\mathcal{T}_T = \mathcal{V}_T / \mathcal{F}_T$$

$$\mathcal{F}_T = K_1$$

oder

$$\mathcal{F}_T = \max\{K_i\}_{i=1}^n$$



Bestimmung des Faltungskerns durch EXP

- ▶ Bevorzugten Ansatz: Faltungskern wird durch eine exponentielle Basis approximiert:

$$K(t; \mathbf{k}) = \sum_{m=1}^M k_m \exp[-\lambda_m t]$$

wobei $\mathbf{k} = \langle k_1, \dots, k_M \rangle$ und $\boldsymbol{\lambda} = \langle \lambda_1, \dots, \lambda_M \rangle$.

- ▶ Die Zeitskalen $\{1/\lambda_m\}$ sind *harmonisch* verteilt:

$$\lambda_m = m/T, \quad m = 1, \dots, M$$

Satz (Müntz): Wenn $\lambda_m > 0$, $\lambda_m \xrightarrow{m \rightarrow \infty} +\infty$ und $\sum_{m=1}^{\infty} 1/\lambda_m = +\infty$ gelten, ist $\{e^{-\lambda_m t}\}_{m=1}^{\infty}$ dicht in $L^p[0, \infty)$, $1 \leq p < \infty$.

Satz: Der Faltungskern ist monoton fallend wenn

$$D_{M-1}^{-T} \cdots D_1^{-T} \Lambda \mathbf{k} \geq 0$$

wobei $\Lambda = \text{diag}\{\lambda_m\}$ und mit $q_i^j = 1/(\lambda_i - \lambda_j)$

$$D_m = \text{tridiag} \left\{ \left[\begin{array}{cccccccc} -q_{m+1}^1 & -q_{m+2}^2 & \cdots & -q_M^{M-m} & 0 & \cdots & 0 & - \\ +q_{m+1}^1 & +q_{m+2}^2 & \cdots & +q_M^{M-m} & 1 & \cdots & 1 & 1 \\ - & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right] \right\}$$

Bestimmung des Faltungskerns durch EXP

- Für Bedingung der Monotonie wird K so umgeschrieben,

$$K(t) = \int_0^{\infty} e^{-\lambda t} d\mu(\lambda), \quad \mu'(\lambda) = \sum_{m=1}^M k_m \delta(\lambda - \lambda_m)$$

- Die *übermäßig einschränkende* Bedingung

$$-K'(t) = \int_0^{\infty} \lambda e^{-\lambda t} \underbrace{d\mu(\lambda)}_{\geq 0} \geq 0, \quad \mu'(\lambda) = \sum_{m=1}^M \underbrace{k_m}_{\geq 0} \delta(\lambda - \lambda_m) \geq 0$$

führt zur Eigenschaft *vollständig monoton*

$$(-1)^n K^{(n)}(t) = \int_0^{\infty} \lambda^n e^{-\lambda t} d\mu(\lambda) \geq 0$$

- Die implementierte Bedingung wird so hergeleitet:

$$-K'(t) = t^n \underbrace{\int_0^{\infty} d\ell_n \exp(-\ell_n t) \int_0^{\ell_n} d\ell_{n-1} \int_0^{\ell_{n-1}} d\ell_{n-2} \cdots \int_0^{\ell_1} \ell_0 d\mu(\ell_0)}_{\geq 0} \geq 0$$

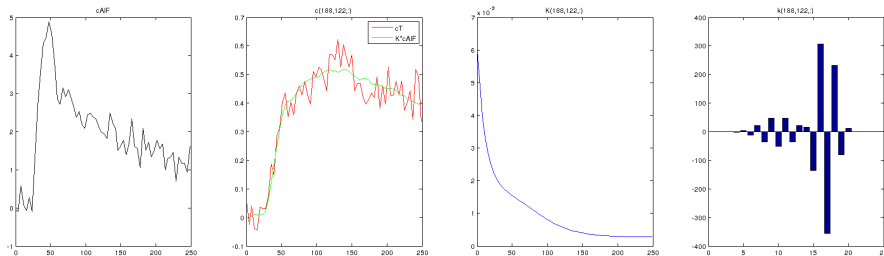
- Diskret: $D_{M-1}^{-T} \cdots D_1^{-T} \wedge \mathbf{k} \geq 0 \Rightarrow$

$$-K'(t) = \mathbf{k}^T [\wedge D_1^{-1} \cdots D_{M-1}^{-1}] [D_{M-1} \cdots D_1] \exp(-\lambda t) \geq 0.$$

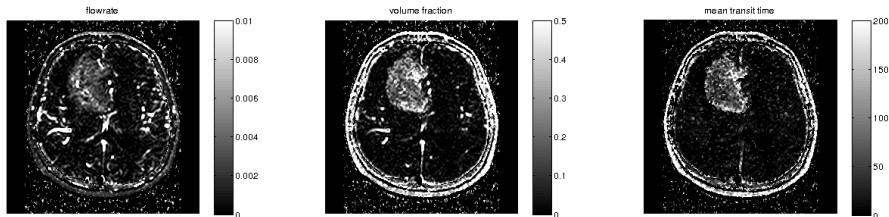
- Unter dieser *Bedingung* soll $\|\mathbf{C}_T - A\mathbf{K}(\mathbf{t}, \mathbf{k})\|_{\ell_2}^2$ minimiert werden, wobei $K(\mathbf{t}, \mathbf{k}) = \{K(t_j, \mathbf{k})\}_{j=1}^n$. (\mathbf{C}_T, A wie vorher.)

Bestimmung des Faltungskerns durch EXP

- ▶ Mit der exponentiellen Basis sehen Zeitverläufe so aus:



- ▶ **Bemerke:** $K * C_{AIF}$ ist eine Glättung von C_T , K ist monoton fallend und das Spectrum k ist wohl verteilt.
- ▶ Die Parameter \mathcal{F}_T , \mathcal{V}_T und \mathcal{T}_T sehen so aus:



Gedämpfte Schwingungen

- ▶ Das einfachste Beispiel ist das Masse-Feder-System:
- ▶ Sei m die Masse und u ihre abwärtsgerichtete Auslenkung vom Ruhestand.
- ▶ Es gibt innere elastische Kraft der Feder f^{elas} , die gegen Auslenkungen vom Ruhestand wirkt. Mit

$$f^{\text{elas}} = -ku, \quad k > 0$$

wird diese durch eine lineare Abhängigkeit von u modelliert, wobei k die *Federkonstante* ist.

- ▶ Sei f eine äußere abwärtsgerichtete Kraft auf die Masse.
- ▶ Laut dem Newtonschen Gesetz kann die Bewegung durch

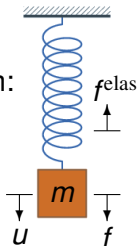
$$mu'' = -ku + f$$

modelliert werden, wobei u'' die Beschleunigung und $-ku + f$ die Summe der wirkenden Kräfte darstellen.

- ▶ Die Kräfte können auch bezüglich der Ableitung $-P'(u)$ des folgenden zu minimierenden Potentials dargestellt werden,

$$P(u) = ku^2/2 - fu$$

wobei $ku^2/2$ die elastische Energie der Feder und fu die gegenwirkende Arbeit der äußeren Kraft darstellen.



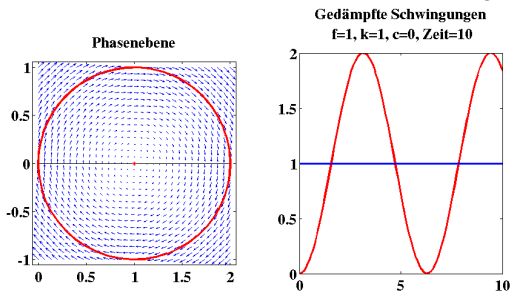
Harmonische Schwingungen

- Die GDG $mu'' = -P'(u)$ kann in erste Ordnung so umgeschrieben werden,

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & m \end{bmatrix} \underset{=:M}{=} \begin{bmatrix} u \\ u' \end{bmatrix}' = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -k & 0 \end{bmatrix} \underset{=:K}{=} \begin{bmatrix} u \\ u' \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ f \end{bmatrix}$$

Die Systemmatrix $A = M^{-1}K$ erfüllt $\sigma(A) = \{\pm i\sqrt{k/m}\}$.

- Eine Simulation mit $m = 1$, $k = 1$ und $f = 1$ zeigt:



- Die Bahn des Zustands im Phasenraum ist ein Kreis.
- Die Masse weist *harmonische Schwingungen* um den Ruhestand $u^* = f/k = 1$ auf.

Reibungskräfte

- ▶ Solche Bewegung ist nicht realistisch, weil es Reibungen gibt, die die Masse zum Ruhezustand bringen.
- ▶ Je schneller die Bewegung, desto höher die Reibung, d.h. eine Reibungskraft f^{reib} wirkt gegen u' .
- ▶ Diese wird durch eine lineare Abhängigkeit von u' modelliert,

$$f^{\text{reib}} = -cu', \quad c > 0$$

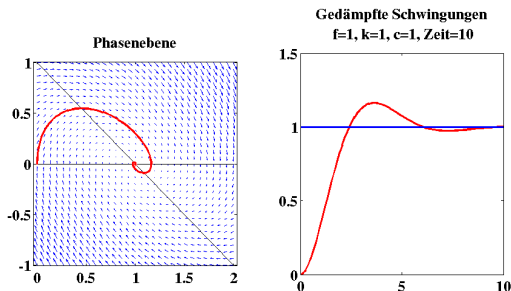
- ▶ Die GDG $mu'' = -ku + f - cu'$ kann in erste Ordnung so umgeschrieben werden,

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & m \end{bmatrix} \underset{=:M}{=} \begin{bmatrix} u \\ u' \end{bmatrix}' = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -k & -c \end{bmatrix} \underset{=:K}{=} \begin{bmatrix} u \\ u' \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ f \end{bmatrix}$$

- ▶ Da die Eigenwerte der Systemmatrix $A = M^{-1}K$ erfüllen,
 $\lambda(m\lambda + c) + k = 0, \quad \lambda \in \{(-c \pm \sqrt{c^2 - 4k})/(2m)\}$
gilt $\max \Re\{\sigma(A)\} < 0$, und das Gleichgewicht $u^* = f/k$ ($u' = 0$) ist lokal asymptotisch stabil.
- ▶ Wenn $c^2 < 4k$ gilt, gibt es gedämpfte Schwingungen.
Wenn $c^2 > 4k$ gilt, kommt der Zustand monoton zum Ruhezustand.

Gedämpfte Federschwingungen

- ▶ Eine Simulation mit $m = 1$, $k = 1$, $f = 1$ und $c = 1$ zeigt:



- ▶ Die Bahn des Zustands im Phasenraum ist eine Spirale.
- ▶ Auf den Geraden im Phasenraum ist entweder u oder u' Null,

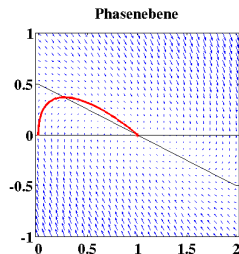
$$\begin{aligned} u' = 0 &\Leftrightarrow 0 = \begin{bmatrix} u \\ u' \end{bmatrix}' = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -k/m & -c/m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ u' \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ f/m \end{bmatrix} \\ u' = (f - ku)/c &\Leftrightarrow 0 = \end{aligned}$$

d.h. der Richtungsfeldvektor in einem Punkt dieser Geraden ist entweder waagerecht oder senkrecht.

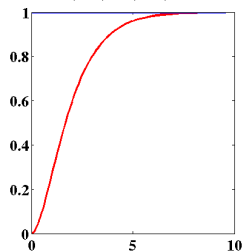
- ▶ Die Masse weist *gedämpfte Schwingungen* um den Ruhezustand $u^* = f/k = 1$ auf. Zustand ist *untergedämpft*.

Gedämpfte Federschwingungen

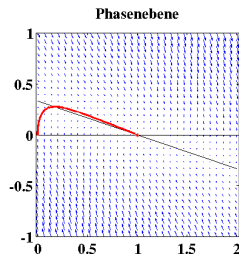
- ▶ Mit $m = 1$, $k = 1$, $f = 1$ und $c = 2$, d.h. $\sigma(A) = \{-c/(2m)\}$ ist der Zustand kritisch gedämpft:



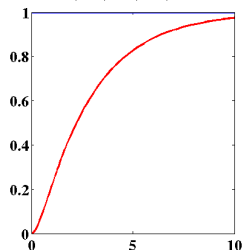
Gedämpfte Schwingungen
 $m=1, f=1, k=1, c=2, \text{Zeit}=9.6$



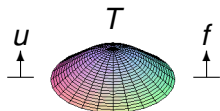
- ▶ Mit $m = 1$, $k = 1$, $f = 1$ und $c = 3$, d.h. $\sigma(A) = \{(-c \pm \sqrt{c^2 - 4k})/(2m)\} \subset \mathbb{R}$ ist der Zustand übergedämpft:



Gedämpfte Schwingungen
 $m=1, f=1, k=1, c=3, \text{Zeit}=10$



Membranschwingungen



- ▶ Nun werden Auslenkungen einer Membran untersucht. Seien an der Stelle $\mathbf{x} \in \Omega$:
 - ▶ $u(\mathbf{x})$ die aufwärtsgerichtete Auslenkung der Membran,
 - ▶ $f(\mathbf{x})$ die aufwärtsgerichtete äußere Kraft und
 - ▶ $T(\mathbf{x})$ die Spannung der Membran.
- ▶ Um den Zustand der Membran zu modellieren, wird zuerst ein zu minimierendes Potential definiert.
 - ▶ Sei ein kleines Membranstück S vom Gleichgewicht zum \tilde{S} durch Änderungen des Flächeninhalts dS und des Volumens dV gestört, wobei dV zwischen S und \tilde{S} liegt.
 - ▶ Diese Störungen erhöhen die potentielle Energie \mathcal{F} nach $d\mathcal{F} = TdS - fdV$, und die zusätzliche Energie ist dann für Arbeit verfügbar, um die Membran zurück zum Gleichgewicht zu bringen. Dafür werden geleistet:
 - ▶ Arbeit $-fdV$ von der Kraft pro Flächeneinheit $-f$ nach der Störung dV und
 - ▶ Arbeit TdS von der Kraft pro Längeneinheit T nach der Störung dS .

Potentielle Energie

- ▶ Sei u^* die Auslenkung im Gleichgewicht. Wegen $d\mathcal{F} = TdS - fdV$ erfüllen die variationellen Ableitungen

$$\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta u}(u^*; v) = T \frac{\delta S}{\delta u}(u^*; v) - f \frac{\delta V}{\delta u}(u^*; v)$$

- ▶ Mit $S(u^*) = \int \sqrt{1 + |\nabla u^*|^2} d\mathbf{x}$ gilt

$$\frac{\delta S}{\delta u}(u; v) = \frac{\nabla u \cdot \nabla v}{\sqrt{1 + |\nabla u|^2}} d\mathbf{x}$$

- ▶ Mit $V(u^*) = \int u^* d\mathbf{x}$ gilt

$$\frac{\delta V}{\delta u}(u^*; v) = \int v d\mathbf{x}$$

- ▶ Die potentielle Energie erfüllt

$$\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta u}(u^*; v) = \int \left[T \frac{\nabla u^* \cdot \nabla v}{\sqrt{1 + |\nabla u^*|^2}} - fv \right] d\mathbf{x}$$

- ▶ Wenn über das ganze Membrangebiet Ω integriert wird, erfüllt das gesuchte zu minimierende Potential

$$\frac{\delta J}{\delta u}(u^*; v) = \int_{\Omega} \left[T \frac{\nabla u^* \cdot \nabla v}{\sqrt{1 + |\nabla u^*|^2}} - fv \right]$$

Potentielle Energie

- ▶ Sei das Potential gegeben durch

$$J(u) = \int_{\Omega} T \sqrt{1 + |\nabla u|^2} - \int_{\Omega} f u$$

d.h. eine Summe der elastischen Energie der Membran und der gegenwirkenden Arbeit der äußeren Kraft.

- ▶ Die variationelle Ableitung ist gegeben durch

$$\begin{aligned} \frac{\delta J}{\delta u}(u; v) &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{d}{d\epsilon} J(u + \epsilon v) \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{d}{d\epsilon} \int_{\Omega} T [1 + |\nabla(u + \epsilon v)|^2]^{\frac{1}{2}} - \int_{\Omega} f(u + \epsilon v) \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\Omega} \frac{1}{2} T [1 + |\nabla(u + \epsilon v)|^2]^{-\frac{1}{2}} 2 \nabla(u + \epsilon v) \cdot \nabla v - \int_{\Omega} f v \\ &= \int_{\Omega} T [1 + |\nabla u|^2]^{-\frac{1}{2}} \nabla u \cdot \nabla v - \int_{\Omega} f v \end{aligned}$$

die mit dem Ziel übereinstimmt.

- ▶ Die Auslenkung u^* im Gleichgewicht erfüllt

$$\frac{\delta J}{\delta u}(u^*; v) = 0, \quad \forall v \text{ glatt genug.}$$

Potentielle Energie

- ▶ Um u^* zu charakterisieren, muss diese Ableitung durch partielle Integration umgeformt werden,

$$0 \stackrel{!}{=} \frac{\delta J}{\delta u}(u; v) = - \int_{\Omega} v \nabla \cdot \left[\frac{T \nabla u}{\sqrt{1 + |\nabla u|^2}} \right] + \int_{\partial \Omega} v \hat{n} \cdot \left[\frac{T \nabla u}{\sqrt{1 + |\nabla u|^2}} \right] - \int_{\Omega} f v$$

- ▶ Wenn v_{ϵ} mit den Eigenschaften

$$\hat{\mathbf{x}} \in \Omega^{\circ}, \quad v_{\epsilon} = 0 \text{ in } \Omega \setminus B(\hat{\mathbf{x}}, \epsilon), \quad v_{\epsilon}(\hat{\mathbf{x}}) \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} \infty, \quad \int_{\Omega} v_{\epsilon} = 1$$

ausgewählt wird, ergibt sich

$$0 = \underbrace{\int_{\Omega} v_{\epsilon}}_{=1} \left\{ \nabla \cdot \left[\frac{T \nabla u}{\sqrt{1 + |\nabla u|^2}} \right] + f \right\} \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} \left\{ \nabla \cdot \left[\frac{T \nabla u}{\sqrt{1 + |\nabla u|^2}} \right] + f \right\}(\hat{\mathbf{x}})$$

- ▶ Wenn v_{ϵ} mit den Eigenschaften

$$\check{\mathbf{x}} \in \partial \Omega, \quad v_{\epsilon} = 0 \text{ in } \bar{\Omega} \setminus B(\check{\mathbf{x}}, \epsilon), \quad v_{\epsilon}(\check{\mathbf{x}}) \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} \infty, \quad \int_{\partial \Omega} v_{\epsilon} = 1$$

ausgewählt wird, ergibt sich

$$0 = \underbrace{\int_{\partial \Omega} v_{\epsilon} \hat{n} \cdot}_{=1} \left[\frac{T \nabla u}{\sqrt{1 + |\nabla u|^2}} \right] \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} \left[\frac{T \partial u / \partial n}{\sqrt{1 + |\nabla u|^2}} \right](\check{\mathbf{x}})$$

Potentielle Energie

- ▶ Da $\hat{\mathbf{x}}$ und $\check{\mathbf{x}}$ beliebig sind, wird u^* durch das Randwertproblem charakterisiert,

$$-\nabla \cdot \left[\frac{T \nabla u}{\sqrt{1 + |\nabla u|^2}} \right] = f \text{ in } \Omega, \quad \frac{T \partial u / \partial n}{\sqrt{1 + |\nabla u|^2}} = 0 \text{ auf } \partial \Omega$$

Hausaufgabe: Für kleines κ gilt

$$\sqrt{1 + \kappa^2} - 1 = \frac{(1 + \kappa^2) - 1}{\sqrt{1 + \kappa^2} + 1} \approx \frac{1}{2} \kappa^2$$

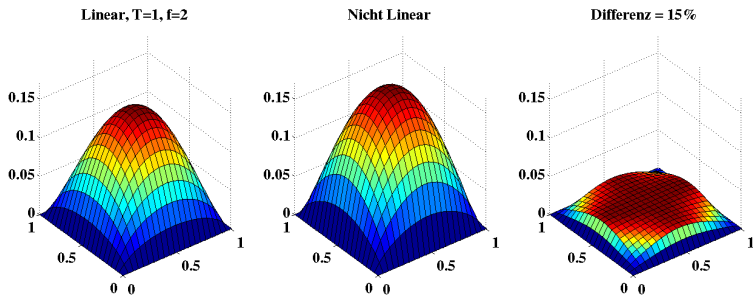
und deswegen für kleine Auslenkungen kann $\sqrt{1 + |\nabla u|^2}$ in J mit $\frac{1}{2} |\nabla u|^2$ approximiert werden. Zeige für das approximierte Potential, das minimierende Auslenkung erfüllt:

$$-\nabla \cdot [T \nabla u] = f \text{ in } \Omega, \quad T \partial u / \partial n = 0 \text{ auf } \partial \Omega$$

- ▶ Falls die Membran am Rand befestigt ist, wird die *Neumann* Randbedingung $\partial u / \partial n = 0$ mit der *Dirichlet* Randbedingung $u = 0$ ersetzt.
- ▶ Für die Herleitung des Dirichlet Randwertproblems darf v keine Störung am Rand machen, und deswegen gilt $v = 0$ auf $\partial \Omega$.

Untersuchung der Approximation

- ▶ Für $T = 1$ und $f = 2$ und Dirichlet Randbedingungen werden Lösungen des linearen (Poisson-) und nicht linearen (Minimalflächen-) Problems verglichen:



- ▶ Zur Lösung des Minimalflächen-Problems wird eine *Picard* Iteration verwendet, ($f \gg T \Rightarrow$ keine Lösung! Warum?)

$$-\nabla \cdot \left[\frac{T \nabla u_{k+1}}{\sqrt{1 + |\nabla u_k|^2}} \right] = f \text{ in } \Omega, \quad \frac{T \partial u_{k+1} / \partial n}{\sqrt{1 + |\nabla u_k|^2}} = 0 \text{ auf } \partial \Omega, \quad k = 0, 1, \dots$$

wobei $u_0 = 0$ und u_1 löst das Poisson-Problem.

Membrandynamik

- ▶ Die Ableitung des Potentials ist eine Kraft.
- ▶ Mit dem Newtonschen Gesetz ($ma = F$) kann die Membrandynamik so modelliert werden,

$$\int_{\Omega} \rho u_{tt} v = - \frac{\delta J}{\delta u}(u; v), \quad \forall v \text{ glatt genug}$$

wobei ρ die Masse pro Flächeneinheit ist.

- ▶ Durch strategische Auswahl an v unter Dirichlet Randbedingungen zusammen mit Anfangsbedingungen ergibt sich das Wellengleichungsproblem,

$$\begin{cases} \rho u_{tt} = \nabla \cdot \left[\frac{T \nabla u}{\sqrt{1 + |\nabla u|^2}} \right] + f, & \Omega \times (0, \infty) \\ u = 0, & \partial\Omega \times (0, \infty) \\ u = u_0, & \Omega \times \{0\} \\ u_t = u_1, & \Omega \times \{0\} \end{cases}$$

- ▶ Diese PDG ist analog zur GDG $mu'' = -P'(u)$ für das nicht gedämpfte Masse-Feder-System.

Membrandynamik

- ▶ Analog zum gedämpften Masse-Feder-System kann eine Reibungskraft f^{reib} für die Membran so eingeführt werden,

$$f^{\text{reib}} = -cu_t$$

die gegen die Geschwindigkeit u_t wirkt.

- ▶ Mit solcher Dämpfung wird die PDG

$$\rho u_{tt} + cu_t = \nabla \cdot \left[\frac{T \nabla u}{\sqrt{1 + |\nabla u|^2}} \right] + f$$

und sie kann in erste Ordnung so umgeschrieben werden,

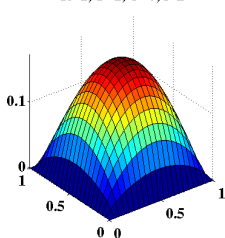
$$\begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & \rho \end{bmatrix} =: M \begin{bmatrix} u \\ u_t \end{bmatrix}_t = \begin{bmatrix} 0 & I \\ \nabla \cdot \frac{T}{\sqrt{1+|\nabla u|^2}} \nabla & -c \end{bmatrix} =: K(u) \begin{bmatrix} u \\ u_t \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ f \end{bmatrix}$$

- ▶ Das Gleichgewicht u^* soll das statische Minimalflächenproblem lösen. $f \gg T \Rightarrow$ keine Lösung!
- ▶ Erfüllt die Systemmatrix $A = M^{-1}K(u^*)$ die Bedingungen $\Re(\sigma(A)) < 0?$ $\Im(\sigma(A)) = \emptyset?$
- ▶ Zur Lösung des Minimalflächenproblems kann diese Evolution mit der Picard-Iteration verglichen werden.

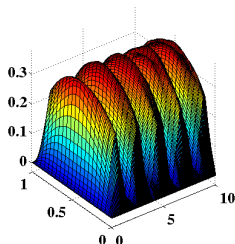
Membrandynamik

- ▶ Bei $C = 0$ gibt es keine Dämpfung.

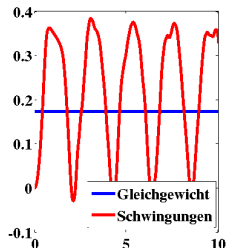
Membran Gleichgewicht
 $R=1, T=1, C=0, f=2$



Mittleres Profil der Membran Schwingungen

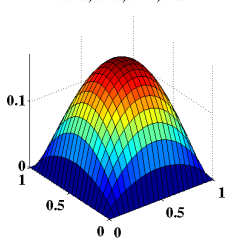


Höhe im Mittelpunkt

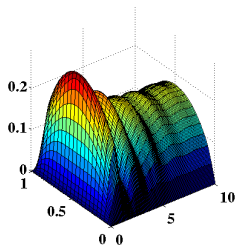


- ▶ Bei $C = 1$ ist die Membran untergedämpft.

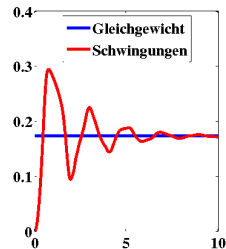
Membran Gleichgewicht
 $R=1, T=1, C=1, f=2$



Mittleres Profil der Membran Schwingungen



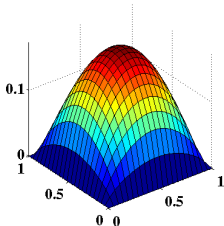
Höhe im Mittelpunkt



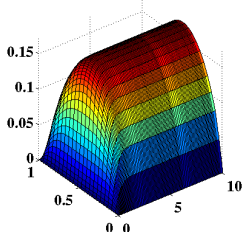
Membrandynamik

- ▶ Membran *effektiv* kritisch gedämpft bei $C = 6.5$, aber $\emptyset \neq \mathfrak{S}\sigma(A)$.

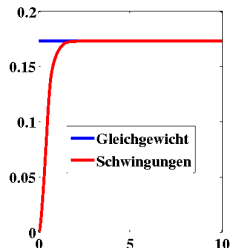
Membran Gleichgewicht
 $R=1, T=1, C=6.5, f=2$



Mittleres Profil der Membran Schwingungen

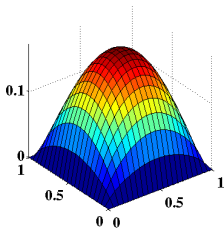


Höhe im Mittelpunkt

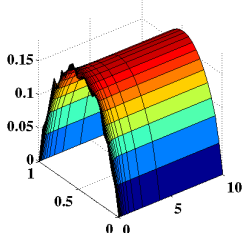


- ▶ $\sigma(A) \subset (-\infty, 0]$ bei $C = 120$, aber lokale Schwingungen nach zufälliger Störung des Gleichgewichts.

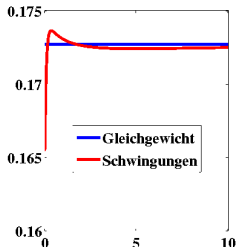
Membran Gleichgewicht
 $R=1, T=1, C=1.2e+02, f=2$



Mittleres Profil der Membran Schwingungen

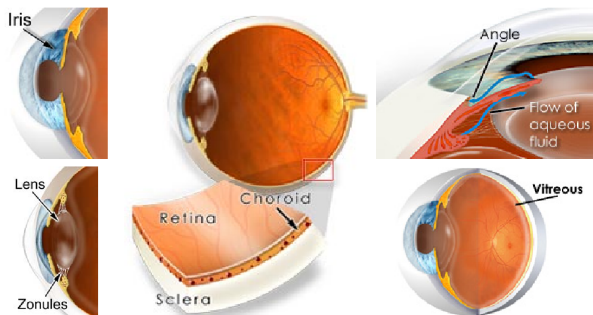


Höhe im Mittelpunkt



Anwendung: Augendynamik

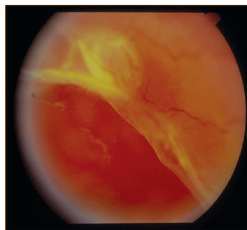
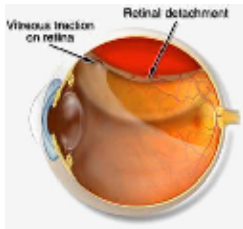
► Anatomie des Auges:



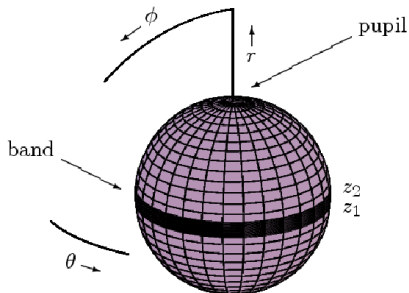
- Lederhaut (sclera): Das weiße schützende des Auges
- Aderhaut (choroid): Blutgefäße, Ernährung
- Netzhaut (retina): Fotorezeptoren
- Selbstregelung des Flusses: konstanter Druck

Cerclage Operation

- ▶ Erkrankter Zustand: Netzhautriss und Netzhautablösung

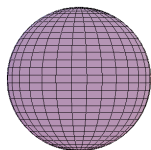


- ▶ Chirurgische Lösung: Wende eine *Cerclage* (Gummiband) an, um das Auge zusammenzudrücken.



Vor, Während und Nach der Operation

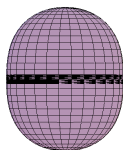
- ▶ Zustände der Operation: prä-, intra- und post-operativ:



ungefähr eine Kugel

$$\text{Volumen} = V_1$$

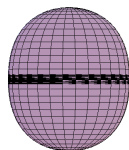
$$\text{Druck} = p_1$$



deformiert vom Band

$$\text{Volumen} = V_1$$

$$\text{Druck} > p_1$$



weniger deformiert

$$\text{Volumen} < V_1$$

$$\text{Druck} \approx p_1$$

- ▶ Ziel: Diese Zustände voraussagen, um die Operationsplanung zu erleichtern.
- ▶ Augapfelrand wird als *Membran* modelliert:
 - ▶ Dicke vernachlässigbar, (nicht lineare) elastische Effekte.
 - ▶ Intraoperativ: eingeschränkte Minimierung potentieller Energie unter konstantem Volumen.
 - ▶ Postoperativ: das gleiche unter einem konstanten Volumen, das mit ursprünglichem Druck zusammenpasst.

Potentielle Energie

- ▶ Sei ein kleines Membranstück \mathcal{S} (d.h. vom Augapfelrand) vom Gleichgewicht zum $\tilde{\mathcal{S}}$ durch Änderungen des Flächeninhalts $d\mathcal{S}$ und des Volumens dV gestört, wobei dV zwischen \mathcal{S} und $\tilde{\mathcal{S}}$ liegt.
- ▶ Diese Störungen erhöhen die potentielle Energie \mathcal{F} nach
$$d\mathcal{F}(u, p) = T(u)d\mathcal{S} - F(u, p)dV$$

wobei

u = Abstand vom Augapfelzentrum

p = innerer Druck des Augapfels

$T(u)$ = Spannung der Membran

$F(u, p)$ = Kraft vom inneren Druck und vom Gummiband

- ▶ Die zusätzliche Energie ist dann für Arbeit verfügbar, um die Membran zurück zum Gleichgewicht zu bringen. Dafür werden geleistet:
 - ▶ Arbeit $-F(u, p)dV$ von der Kraft pro Flächeneinheit $-F(u, p)$ nach der Störung dV und
 - ▶ Arbeit $T(u)d\mathcal{S}$ von der Kraft pro Längeneinheit $T(u)$ nach der Störung $d\mathcal{S}$.

Potentielle Energie

- ▶ Sei u^* die Auslenkung im Gleichgewicht bei einem zur Zeit fixierten inneren Druck p . Wegen $d\mathcal{F}(u, p) = T(u)dS - F(u, p)dV$ erfüllen die variationellen Ableitungen

$$\frac{\delta\mathcal{F}}{\delta u}(u^*, p; v) = T(u^*)\frac{\delta S}{\delta u}(u^*; v) - F(u^*, p)\frac{\delta V}{\delta u}(u^*; v)$$

- ▶ Wegen Symmetrie gilt $u^* = u^*(\phi)$. Mit

$$X(\phi, \theta; u) = \langle u(\phi) \cos(\theta) \sin(\phi), u(\phi) \sin(\theta) \sin(\phi), u(\phi) \cos(\phi) \rangle^T$$

gelten

$$S(u) = |X_\phi(\phi, \theta; u) \times X_\theta(\phi, \theta; u)| d\phi d\theta = u \sin(\phi) \sqrt{u^2 + u_\phi^2} d\phi d\theta$$

und

$$\frac{\delta S}{du}(u^*; v) = \frac{u_\phi^2 v + 2u^2 v + uu_\phi v_\phi}{\sqrt{u^{*2} + u_\phi^{*2}}} \sin(\phi) d\phi d\theta$$

- ▶ Durch die Summe der Terme $T(u^*)\delta S(u^*; v)/\delta u$ über alle Membranstücke \mathcal{S} ergibt sich die Ableitung der potentiellen Energie allein wegen Membran-innerer Kräfte:

$$\frac{\delta J_i}{\delta u}(u^*; v) = 2\pi \int_0^\pi T(u^*) \frac{u_\phi^{*2} v + 2u^{*2} v + uu_\phi v_\phi}{\sqrt{u^{*2} + u_\phi^{*2}}} \sin(\phi) d\phi$$

Potentielle Energie

- ▶ Mit

$$V(u) = \sin(\phi) d\phi d\theta \int_0^u r^2 dr$$

gilt

$$\frac{dV}{du}(u^*; v) = v u^{*2} \sin(\phi) d\phi d\theta$$

- ▶ Sei $\hat{\mathbf{e}}_R = \langle \cos(\theta), \sin(\theta), 0 \rangle$ der Radialeinheitsvektor in Zylinderkoordinaten.
- ▶ Sei $f(R, z)\hat{\mathbf{e}}_R$ die radial nach innen gerichtete Kraft pro Flächeneinheit des Gummibandes in Zylinderkoordinaten (R, z) auf der Oberfläche des Augapfels.
- ▶ Die Summe der nach aussen gerichteten Kräfte pro Flächeneinheit in einem Augapfelrandpunkt ist

$$F(u, p) = p - f(u \cos(\phi), u \cos(\phi)) \hat{\mathbf{e}}_R \cdot \hat{\mathbf{n}}$$

wobei der nach aussen gerichtete normale Einheitsvektor gegeben ist durch

$$\hat{\mathbf{n}} = \frac{\mathbf{X}_\phi(\phi, \theta; u) \times \mathbf{X}_\theta(\phi, \theta; u)}{|\mathbf{X}_\phi(\phi, \theta; u) \times \mathbf{X}_\theta(\phi, \theta; u)|} = \frac{1}{\sqrt{u^2 + u_\phi^2}} \times$$

$$\langle -\cos(\phi)(u \cos(\phi))_\phi, -\sin(\phi)(u \cos(\phi))_\phi, -\cos(\phi)(u \sin(\phi))_\phi \rangle$$

Potentielle Energie

- ▶ Durch die Summe der Terme $F(u^*, p)\delta V(u^*; v)/\delta u$ über alle Membranstücke \mathcal{S} ergibt sich die Ableitung der potentiellen Energie allein wegen Membran-externer Kräfte:

$$\frac{\delta J_e}{\delta u}(u^*; v) = -2\pi \int_0^\pi \left\{ f(u^* \cos(\phi), u^* \sin(\phi)) \frac{(u^* \cos(\phi))_\phi}{\sqrt{u^{*2} + u_\phi^{*2}}} + p \right\} v u^{*2} \sin(\phi) d\phi$$

- ▶ Für die Einschränkung eines konstanten Volumens sei r_1 der Radius des nicht deformierten Augapfels. Mit einer Deformation muss gelten

$$J_c(u^*) = V(u^*) - V(r_1) = \frac{2\pi}{3} \int_0^\pi u^{*3} \sin(\phi) d\phi - \frac{4\pi r_1^3}{3} = 0$$

- ▶ Um die potentielle Energie $J_i + J_e$ unter der Einschränkung $J_c = 0$ zu minimieren, wird ein stationärer Punkt des Lagrange Funktionals gesucht:

$$L(u) = \frac{1}{2\pi} [J_i(u) + J_e(u) - \lambda J_c(u)]$$

wobei λ ein Lagrange Multiplikator ist.

Modell der Bandkraft

- ▶ Wenn ein Band mit Querschnittsflächeninhalt A von einem Ruhestand mit Länge \hat{L} zu einer Länge $\hat{L} + \Delta L$ gezogen wird, kann die zurückziehende Kraft F des Bandes mit dem Hookschen Gesetz

$$F = AE\Delta L / \hat{L}$$

modelliert werden, wobei E der Youngsche Modul ist.

- ▶ Sei der Querschnittsflächeninhalt durch $A = \omega \cdot \delta$ gegeben, wobei $\omega = z_2 - z_1$ die Breite und δ die Dicke sind.
- ▶ Wenn das Band kreisförmig ist, wird die Querschnittsspannung gegeben durch

$$T = F/\omega = E\delta(R - \hat{R})/\hat{R}$$

wobei $\hat{L} = 2\pi\hat{R}$ und $\hat{L} + \Delta L = 2\pi R$.

- ▶ Mit dem Laplace Gesetz für einen Zylinder

$$\Delta p = T(\kappa_1 + \kappa_2) \Rightarrow R\Delta p = T$$

ist die radial einwärtsgerichtete (d.h. Richtung $-\hat{\mathbf{e}}_R$) Kraft des Bandes durch T/R gegeben, d.h.

$$f(R, z) = E \cdot \delta \cdot (1/R - 1/\hat{R}), \quad z_1 \leq z \leq z_2$$

wobei \hat{R} der Ruheradius des Bandes ist.

Modell der Membranspannung

- ▶ Für die Spannung wird angenommen, dass $T(u)$ eine Konstante ist, die von der Funktion u abhängt.
- ▶ Wenn das Augapfel kugelförmig mit Radius r_1 ist, gilt das Laplace Gesetz,

$$\Delta p = T(\kappa_1 + \kappa_2) \Rightarrow 2T_1 = p_1 r_1$$

wobei $p_1 = \Delta p = p_i - p_a > 0$ die Druckdifferenz zwischen innen und außen ist.

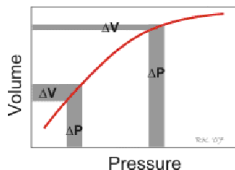
- ▶ Die Beziehung zwischen Druck und Radius (oder Volumen) eines nachgiebigen Gewebes ist typischerweise logarithmisch,

$$\ln\left(\frac{p_0}{p_1}\right) = \sigma(V_0 - V_1) = \frac{4\pi\sigma}{3}(r_0^3 - r_1^3)$$

wobei (p_0, r_0) eine Abweichung vom Zustand (p_1, r_1) des Augapfels ist. Dies ist das *Friedenwald Gesetz* und σ ist die *Okularsteifigkeit*.

- ▶ Die zur Abweichung (p_0, r_0) passende Spannung ist

$$T_0 = \frac{1}{2}r_0 p_0 = \frac{1}{2}r_0 p_1 \exp\left[\frac{4\pi\sigma}{3}(r_0^3 - r_1^3)\right]$$



Compliance curve for a biological tissue such as an artery. At low pressures and volumes, compliance $\Delta V/\Delta P$ is much greater than at high pressures and volumes.

Modell der Membranspannung

- Für eine Abweichung von einer Kugelform wird die Spannung mit einer Hookschen Ergänzung des Laplaceschen Gesetzes modelliert:

$$T(u) = T_0(u) + E_m \cdot \delta_m \cdot [S(u) - S_0(u)]/S_0(u)$$

wobei

$V(u)$ = Volumen des Augapfels mit Geometrie u ,

$$\text{d.h. } V(u) = \frac{2\pi}{3} \int_0^\pi u^3 \sin(\phi) d\phi$$

$S(u)$ = Flächeninhalt des Augapfels mit Geometrie u ,

$$\text{d.h. } S(u) = 2\pi \int_0^\pi u(u^2 + u_\phi^2)^{\frac{1}{2}} \sin(\phi) d\phi$$

$r_0(u)$ = Radius des kugelförmigen Augapfels mit Volumen $V(u)$

$p_0(u)$ = Druck des kugelförmigen Augapfels mit Volumen $V(u)$,
d.h. $p_0(u) = p_1 \exp[\frac{4\pi\sigma}{3}(r_0(u)^3 - r_1^3)]$

$T_0(u)$ = Spannung des kugelförmigen Augapfels mit Volumen $V(u)$, d.h. $T_0(u) = \frac{1}{2}r_0(u)p_0(u)$

$S_0(u)$ = Flächeninhalt des kugelförmigen Augapfels mit Radius $r_0(u)$

E_m = Youngscher Modul der Membran

δ_m = Dicke der Lederhaut+Aderhaut

Stationarität für die Lagrange Funktion

- Die Stationaritätsbedingungen für die Lagrange Funktion

$L(u, \lambda) = \frac{1}{2\pi} [J_i(u) + J_e(u) - \lambda J_c(u)]$ sind:

$$- \left\{ T(u) \frac{uu_\phi}{\sqrt{u^2 + u_\phi^2}} \sin \phi \right\}_\phi + T(u) \frac{2u^2 + u_\phi^2}{\sqrt{u^2 + u_\phi^2}} \sin \phi$$

$$= \left\{ f(u \sin \phi, u \cos \phi) \frac{(u \cos \phi)_\phi}{\sqrt{u^2 + u_\phi^2}} + (p_1 + \lambda) \right\} u^2 \sin \phi, \quad 0 < \phi < \pi,$$

$$u_\phi = 0, \quad \phi = 0, \pi, \quad \int_0^\pi u^3 \sin \phi d\phi = 2r_1^3$$

- Mit dem präoperativen Zustand (r_1, p_1) (nach Friedenwald) und der obigen Lösung (u, λ) sei $p = p_1 + \lambda$.
- Der *Cerclage-Operator* für den intraoperativen Zustand sei:

$$C(r_1) = (u, p) \quad \text{mit} \quad C(r_1)[u] = u, \quad C(r_1)[p] = p$$

Lösungsweg

- ▶ Das intraoperative Problem:
Anhand des präoperativen Zustands (r_1, p_1) (nach Friedenwald), berechne $\mathcal{C}(r_1) = (u, p)$ wobei
 - ▶ u = intraoperative Geometrie
 - ▶ p = intraoperativer Druck
- ▶ Das postoperative Problem:
Anhand eines Zieldrucks $p_t \approx p_1$,
 - ▶ finde (r_0, p_0) (nach Friedenwald)
 - ▶ für ein Band-freies kugelförmiges Augapfel
 - ▶ mit reduziertem Volumen $V_0 = 4\pi r_0^3/3$wobei $\mathcal{C}(r_0) = (u, p_t)$ gilt.
- ▶ Lösungsansatz für das postoperative Problem ist ein Bisektionsverfahren, wobei Folgendes iterativ verwendet wird.
- ▶ Lösungsansatz für das intraoperative Problem: Eine Approximierte Newton Iteration

$$\begin{bmatrix} A(u) & K(u) \\ K^*(u) & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v \\ \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} F(u, p) \\ G(u) \end{bmatrix} \quad \begin{array}{l} u = u + \alpha v \\ p = p + \alpha \lambda \end{array}$$

wobei

Lösungsweg

$$A(u)v = - \left\{ \frac{T(u)u \sin \phi}{\sqrt{u^2 + u_\phi^2}} v_\phi \right\}_\phi + \frac{T(u)u \sin \phi}{\sqrt{u^2 + u_\phi^2}} v \approx - \frac{\delta F}{\delta u}(u; v)$$

$$K(u)\lambda = -\lambda u^2 \sin \phi \approx -\frac{\delta F}{\delta p}(p; \lambda), \quad K^*(u)v = - \int_0^\pi v u^2 \sin \phi d\phi \approx -\frac{\delta G}{\delta u}(u; v)$$

$$F(u, p) = -A(u)u - T(u) \sin \phi \sqrt{u^2 + u_\phi^2} + \left[f(u \sin \phi, u \cos \phi) \frac{(u \cos \phi)_\phi}{\sqrt{u^2 + u_\phi^2}} + p \right] u^2 \sin \phi$$

$$G(u) = \int_0^\pi u^3 \sin \phi d\phi - 2r_1^3$$

Satz: $\exists!$ Lösung (v, λ) , wobei v eine gewisse Glattheit hat.

► Lösungsmethoden: Zellenzentrierte finite Differenzen:

$$\begin{bmatrix} A_h(\mathbf{u}) & K_h(\mathbf{u}) \\ K_h^T(\mathbf{u}) & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{v} \\ \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} F_h(\mathbf{u}, p) \\ G_h(\mathbf{u}) \end{bmatrix} \quad \begin{array}{l} \mathbf{u} = \mathbf{u} + \alpha \mathbf{v} \\ p = p + \alpha \lambda \end{array}$$

Algorithmus

Zur Berechnung des postoperativen Zustandes:

- ▶ Gegeben sind der Bandradius \hat{R} im Ruhestand und der Zieldruck $p_t \approx p_1$, wobei p_1 der präoperative Druck ist.
- ▶ Setze $r_a = \hat{R}$ und berechne p_a nach Friedenwald. Keine Bandkraft $\Rightarrow \mathcal{C}(r_a) = (u = r_a, p = p_a)$.
- ▶ Setze $p_b = p_t$ und berechne r_b nach Friedenwald. Dann start mit $(u = r_b, p = p_b)$ und iteriere, um $\mathcal{C}(r_b)$ zu berechnen.
- ▶ Da $\mathcal{C}(r_a)[p] < p_t < \mathcal{C}(r_b)[p]$ gilt, starte das Bisektionsverfahren mit dem Intervall $[r_a, r_b]$, um $\mathcal{C}(r_0)[p] = p_t$ zu lösen.
- ▶ Die gesuchte postoperative Geometrie u wird durch $\mathcal{C}(r_0)[u]$ gegeben.

Materialeigenschaften

- ▶ Vom Fürstenfeld Prüfbericht:

Gemessene Cerclage Parameter	
Youngscher Modul E_b	24453 mmHg
Dicke δ_b	0.75 mm
Breite ω_b	2 mm
Ruheradius \hat{R}	10.35 mm

- ▶ Die Cerclage wurde markiert, entspannt und direkt gemessen, um \hat{R} zu bestimmen.
- ▶ Für die Folgenden wurden Lederhaut- und Aderhaut-Eigenschaften aus der Literatur summiert:

Gemessene Augapfel Parameter	
Youngscher Modul E_m	21753 mmHg
Dicke δ_m	1 mm
Okularsteifigkeit σ	1/80

- ▶ Durch direkte Wasser-Injektion wurde eine (p, V) -Kurve erstellt, und dann wurde σ durch Regression bestimmt.

Experimentelle Prozeduren

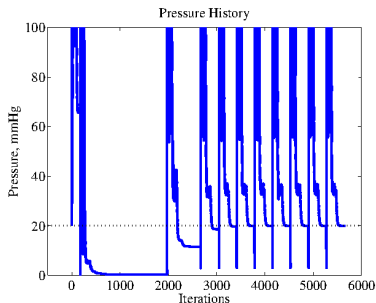
- ▶ Augapfel- und Cerclage-Zustände wurden direkt gemessen.
- ▶ Inelastische Fäden wurden verwendet, um die Radii zu messen.
- ▶ Das Band wurde um den Äquator des Augapfels umgewickelt, gezogen, verknüpft und markiert.

		measured	computed
preoperative:	p_1 , mmHg	23.00	
	r_1 , mm	12.25	
intraoperative:	$C(r_1)[p]$, mmHg	76.00	67.88
	$\min C(r_1)[u]$, mm	11.94	10.94
postoperative:	$C(r_0)[p]$, mmHg	20.00	20.00
	$\min C(r_0)[u]$, mm	11.22	10.43

- ▶ Drücke wurden direkt gemessen.
- ▶ Flüssigkeit wurde extrahiert, um den Druck zu reduzieren:
 $p_t = 20 \neq 23 = p_1$.

Simulationsergebnisse

- ▶ Postoperativer Zieldruck ist $p_t = 20$.
- ▶ Es gilt $p_a \approx 0$ for $r_a = \hat{R}$.
- ▶ Start mit dem präoperativen Druck $p_b = p_1 = 20$ und entsprechenden Radius r_b .



- ▶ Setze das Bisektionsverfahren fort, um $r_0 \in [r_a, r_b]$ zu finden, so dass $\mathcal{C}(r_0)[p] = p_t \in [p_a, p_b]$ gilt.

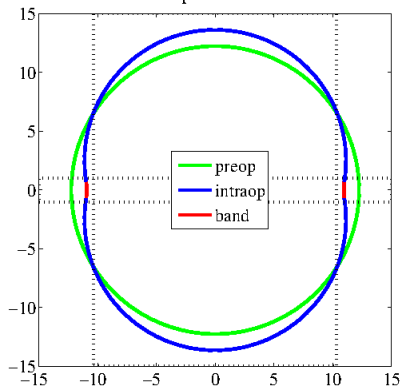
Simulationsergebnisse

Eingabe-Parameter:

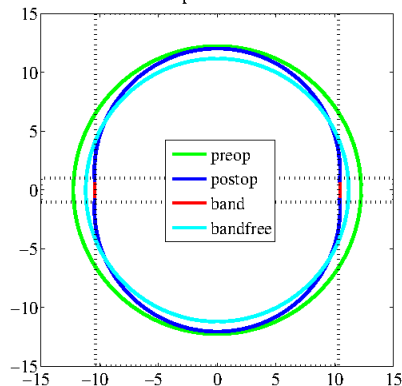
r_1	12.25 mm	E_b	24453 mmHg	E_m	21753 mmHg	σ	1/80
ρ_1	23 mmHg	δ_b	0.75 mm	δ_m	1 mm	α	0.5
ρ_t	20 mmHg	$-z_1, z_2$	1 mm	\hat{R}	10.35 mm	N	101

Grafische Darstellung:

Intraoperative State



Postoperative State



Simulationsergebnisse

präoperativ		intraoperativ	
p_1	23.00 mmHg	$C(r_1)[p]$	67.88 mmHg
r_1	12.25 mm	$\min C(r_1)[u]$	10.94 mm
		$\max C(r_1)[u]$	13.64 mm
T_1	141.0 mm·mmHg	$T(u)$	377.8 mm·mmHg
postoperativ, Bandfrei		postoperativ	
p_0	3e-09 mmHg	$C(r_0)[p]$	20.00 mmHg
r_0	11.20 mm	$\min C(r_0)[u]$	10.43 mm
		$\max C(r_0)[u]$	12.05 mm
T_0	2e-08 mm·mmHg	$T(u)$	104.6 mm·mmHg

- ▶ Ergebnisse sind für Kliniker ziemlich zufriedenstellend.
- ▶ Das Modell hat das Verständnis des Augapfel-Band-Systems angereichert.
- ▶ Eine breitere viereckige Cerclage ist vor einer engen kreisförmigen bevorzugt. Der enge entspannt sich, der breite bleibt steif.

Erhaltungssätze

- ▶ Zur Vereinfachung werden Erhaltungssätze in 2D Raumzeit formuliert, d.h. $(x, t) \in (-\infty, \infty) \times [0, \infty)$, z.B.
 - ▶ Ein Gas in einem Rohr,
 - ▶ Verkehr entlang einer Straße.
- ▶ Sei $\rho(x, t)$ die Massendichte, sodass gilt
Masse in $[x_1, x_2]$ zur Zeit t ist $\int_{x_1}^{x_2} \rho(x, t) dx$
- ▶ Sei $v(x, t)$ die Geschwindigkeit, sodass gilt
Massenfluss in $(x, t) = \rho(x, t)v(x, t)$
- ▶ Die grundlegendste Formulierung der Massenerhaltung ist,
$$\int_{x_1}^{x_2} \rho(x, t_2) dx - \int_{x_1}^{x_2} \rho(x, t_1) dx +$$
$$\int_{t_1}^{t_2} \rho(x_2, t)v(x_2, t) dt - \int_{t_1}^{t_2} \rho(x_1, t)v(x_1, t) dt = 0$$
$$\forall x_1, x_2 \in (-\infty, \infty), \forall t_1, t_2 \in [0, \infty)$$

d.h. die Masse in $[x_1, x_2]$ am Ende (t_2) minus am Anfang (t_1) plus die Massenfluss über $[t_1, t_2]$ rechts (x_2) minus links (x_1) ist Null. Diese ist die *schwache* Formulierung.
- ▶ Wenn ρ und v ausreichend glatt sind, können obige Differenzen bezüglich entsprechender Ableitungen dargestellt werden:

Euler Gleichungen

- ▶ Mit $\rho(x, t_2) - \rho(x, t_1) = \int_{t_1}^{t_2} \rho_t dt$
und $\rho(x_2, t)v(x_2, t) - \rho(x_1, t)v(x_1, t) = \int_{x_1}^{x_2} (\rho v)_x dx$
folgt

$$\int_{t_1}^{t_2} \int_{x_1}^{x_2} [\rho_t + (\rho v)_x] dx dt = 0$$

Da x_1, x_2 und t_1, t_2 beliebig sind, ergibt sich die Differentialform des Erhaltungssatzes,

Massenerhaltung: $\rho_t + (\rho v)_x = 0$

- ▶ Ähnlich werden zusätzliche Erhaltungssätze hergeleitet

Impulserhaltung: $(\rho v)_t + (\rho v^2 + p)_x = 0$

Energieerhaltung $E_t + (v(E + p))_x = 0$

für die drei Euler Gleichungen der Gasdynamik, wobei der Druck durch die Zustandsgleichung $p = (\gamma - 1)(E - \frac{1}{2}\rho v^2)$ ($\gamma = c_p/c_v = 1.4$) bestimmt wird.

- ▶ Zur Vereinfachung wird nur Massenerhaltung untersucht.
- ▶ Wenn v *a priori* bezüglich ρ durch $\rho v = f(\rho)$ gegeben ist, folgt der Skalar-Erhaltungssatz,

$$\rho_t + f(\rho)_x = 0$$

Skalar-Erhaltungssätze

- ▶ Wenn v eine Konstante a ist, ergibt sich die lineare Konvektionsgleichung

$$\rho_t + a\rho_x = 0$$

- ▶ Wenn ausreichend glatte Anfangsbedingungen gegeben sind durch $\rho(x, 0) = \rho_0(x)$, folgt die Lösung

$$\rho(x, t) = \rho_0(x - at)$$

d.h. $\rho_t(x, t) + a\rho_x(x, t) = \rho'_0(x - at)(-a) + a\rho'_0(x - at) = 0$.

- ▶ Da diese Lösung die schwache Formulierung der Massenerhaltung immer erfüllt, ist sie eine *schwache* Lösung wenn ρ_0 nicht glatt ist.
- ▶ Mit dieser Lösung wird das Profil ρ_0 im Lauf der Zeit unverändert flussabwärts verschoben.
- ▶ Realistischer ist die Gleichung $\rho_t + a\rho_x = d\rho_{xx}$ mit Diffusion $d\rho_{xx}$ wie vorher im Skriptum gesehen.
- ▶ Da eine Lösung des Skalar-Erhaltungssatzes typischerweise nicht eindeutig ist, wird mit

$$\rho_t + f(\rho)_x = \epsilon\rho_{xx}$$

die realistischste durch den Limes $\epsilon \rightarrow 0$ bestimmt.

Charakteristiken

- ▶ Die Lösung $u(x, t) = u_0(x - at)$ der linearen Konvektionsgleichung

$$u_t + au_x = 0, \quad u(x, 0) = u_0(x)$$

bleibt konstant auf der Gerade

$$x - at = x_0$$

Diese sind *Charakteristiken* für die PDG.

- ▶ Wenn die Geschwindigkeit $a(x)$ ortsabhängig ist, lässt sich die PDG $u_t + (au)_x = 0$ so umschreiben

$$(\partial_t + a(x)\partial_x)u(x, t) = -a'(x)u(x, t)$$

Entlang der *charakteristischen Kurve* $x(t)$ bestimmt durch

$$x'(t) = a(x(t)), \quad x(0) = x_0$$

erfüllt u eine GDG

$$D_t u(x(t), t) = -a'(x(t))u(x(t), t), \quad u(x(0), 0) = u_0(x_0)$$

- ▶ Die Lösung u ist nicht immer eine Konstante auf der charakteristischen Kurve, aber die Lösungswerte auf zwei verschiedenen charakteristischen Kurven werden unabhängig von einander bestimmt.

Nicht Glatte Daten

Hausaufgabe: Zeige, die Funktion $u(x, t) = u_0(x - at)$ erfüllt die schwache Formulierung der Konvektionsgleichung

$$u_t + au_x = 0, \quad u(x, 0) = u_0(x).$$

- ▶ Die Lösung der Wärmeleitungsgleichung

$$v_t^\epsilon = \epsilon v_{xx}^\epsilon, \quad v^\epsilon(x, 0) = u_0(x)$$

ist gegeben durch

$$v^\epsilon(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\epsilon t}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{(x-y)^2}{4\epsilon t}} u_0(y) dy$$

und ist daher sehr glatt für $t > 0$.

Hausaufgabe: Zeige, die regularisierte Gleichung

$$u_t^\epsilon + au_x^\epsilon = \epsilon u_{xx}^\epsilon, \quad u^\epsilon(x, 0) = u_0(x)$$

wird mit $u^\epsilon(x, t) = v^\epsilon(x - at, t)$ gelöst.

Def: Die Funktion $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} u^\epsilon$ heißt für die Konvektionsgleichung die *Lösung der verschwindenden Viskosität*.

Hausaufgabe: Zeige, die Lösung der verschwindenden Viskosität stimmt hier mit $u_0(x - at)$ überein.

Burgersche Gleichung

- ▶ Für typische Beispiele der Skalar-Erhaltungssätze

$$u_t + f(u)_x = 0$$

ist das Krümmungsverhalten von f global konsequent, d.h. entweder $f''(u) > 0$ oder $f''(u) < 0$.

- ▶ Wenn ρ und p in der Impulserhaltung der Euler Gleichungen konstant sind, ist die Vereinfachung vergleichbar mit der nicht viskösen Burgerschen Gleichung,

$$u_t + (u^2/2)_x = u_t + uu_x = 0$$

- ▶ Die visköse Burgersche Gleichung ist

$$u_t + uu_x = \epsilon u_{xx}$$

- ▶ Die Charakteristiken erfüllen

$$x'(t) = u(x(t), t), \quad x(0) = x_0$$

und die Lösung der (nicht viskösen) Burgerschen Gleichung ist konstant entlang einer Charakteristik,

$$D_t u(x(t), t) = u_t(x(t), t) + u_x(x(t), t)x'(t) = u_t + uu_x = 0$$

- ▶ Wenn die Anfangswerte $u(x, 0) = u_0(x)$ ausreichend glatt sind, kann diese Methode verwendet werden, um u für t klein genug zu bestimmen. Sonst entstehen *Schocks*.

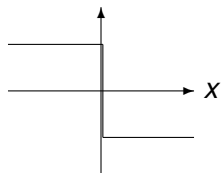
Schocks

- ▶ Für die Burgersche Gleichung, gibt es am Anfang:

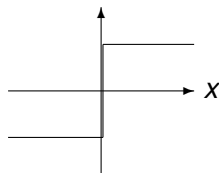
$$u_t + u(x, 0)u_x = 0$$

- ▶ Mit z.B. Anfangswerten,

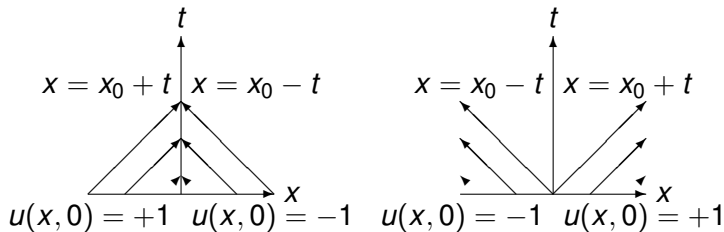
$$u(x, 0) = -\operatorname{sgn}(x)$$



$$u(x, 0) = \operatorname{sgn}(x)$$

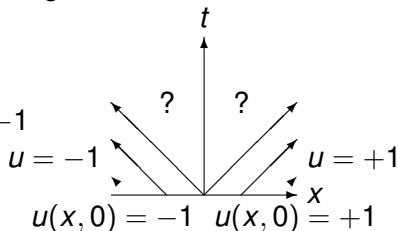
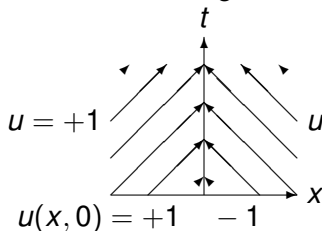


ergeben sich folgende charakteristische Kurven:

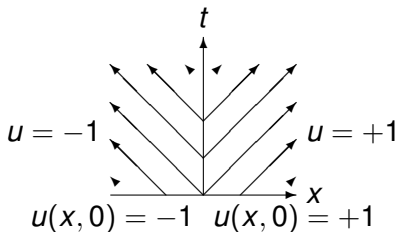


Schocks

- ▶ Da u in diesem einfachen Problem gebietsweise konstant bleibt, bleiben die charakteristischen Kurven Geraden bis zu einer Unstetigkeit der Lösung:



- ▶ Die linke ist die Lösung der verschwindenden Viskosität.
- ▶ Im zweiten Fall, nimm eine einfache Lösung:
- ▶ Diese ist aber nicht die Lösung der verschwindenden Viskosität.

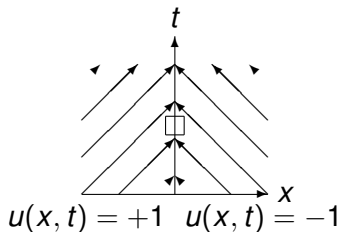


Schocks

- ▶ In beiden Fällen, gibt es Unstetigkeiten an $x = 0$, $t \geq 0$. Um diese Lösungen zu überprüfen, wird die schwache Form untersucht:
- ▶ Für beliebige x_1, x_2 , beliebige t_1, t_2 :

$$\int_{x_1}^{x_2} [u(x, t_2) - u(x, t_1)] dx + \frac{1}{2} \int_{t_1}^{t_2} [u^2(x_2, t) - u^2(x_1, t)] dt = 0$$

- ▶ Probe für den 1. Fall mit der Testzelle $[-\varepsilon, +\varepsilon] \times [t_1, t_2]$:



$$\int_{-\varepsilon}^0 [u(x, t_2)_{=+1} - u(x, t_1)_{=+1}] dx +$$

$$\int_0^{+\varepsilon} [u(x, t_2)_{=-1} - u(x, t_1)_{=-1}] dx +$$

$$\frac{1}{2} \int_{t_1}^{t_2} [u^2(+\varepsilon, t)_{=(-1)^2} - u^2(-\varepsilon, t)_{=(+1)^2}] dt = 0$$

- ▶ Andere Testzellen sind noch einfacher.

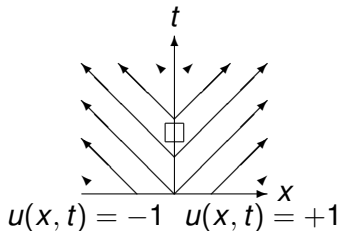
Schocks

- ▶ Probe für den 2. Fall mit der Testzelle $[-\varepsilon, +\varepsilon] \times [t_1, t_2]$

$$\int_{-\varepsilon}^0 [u(x, t_2)_{=-1} - u(x, t_1)_{=-1}] dx +$$

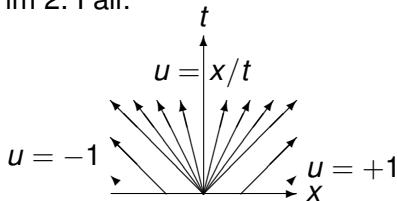
$$\int_0^{\varepsilon} [u(x, t_2)_{=+1} - u(x, t_1)_{=+1}] dx +$$

$$\frac{1}{2} \int_{t_1}^{t_2} [u^2(+\varepsilon, t)_{=(+1)^2} - u^2(-\varepsilon, t)_{=(-1)^2}] dt = 0$$



- ▶ Andere Testzellen sind noch einfacher.
- ▶ Folgende Lösung ist natürlicher im 2. Fall:

$$u(x, t) = \begin{cases} -1, & x \leq -t \\ x/t, & -t \leq x \leq t \\ +1, & t \leq x \end{cases}$$



Diese ist die Lösung der verschwindenden Viskosität.

Das Riemannsche Problem

- ▶ Das Riemannsche Problem für einen Erhaltungssatz ist ein Anfangswertproblem, wobei die Anfangswerte stückweise konstant mit einer einzigen Unstetigkeit sind.

- ▶ Betrachte $u_t + uu_x = 0$ mit Anfangswerten

$$u_0(x) = \begin{cases} u_l, & x < 0 \\ u_r, & x > 0 \end{cases}$$

- ▶ Für den Fall $u_l > u_r$ gibt es eine eindeutige schwache Lösung $u(x, t) = u_0(x - st)$, wobei

$$s = (u_l + u_r)/2$$

die *Schock-Geschwindigkeit* ist.

Hausaufgabe: Zeige, diese ist eine schwache Lösung der Burgerschen Gleichung.

Hausaufgabe: Zeige, $u_t + uu_x = \epsilon u_{xx}$, $u(x, 0) = u_0(x)$, hat eine Lösung $u^\epsilon(x, t) = w(x - st)$, wobei $s = (u_l + u_r)/2$ und

$$w(x) = u_r + \frac{1}{2}(u_l - u_r) \left[1 - \tanh\left(\frac{(u_l - u_r)x}{4\epsilon}\right) \right] \begin{cases} \rightarrow u_l, & x \rightarrow -\infty \\ \rightarrow u_r, & x \rightarrow +\infty \end{cases}$$

und w erfüllt eine herzuleitende GDG. Zeige, $u^\epsilon(x, t) \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} u_0(x - st)$.

Nicht Eindeutigkeit der Lösung

- ▶ Für den Fall $u_l < u_r$ gibt es unendlich viele schwache Lösungen.

Hausaufgabe: Zeige, alle sind schwache Lösungen:

$$u(x, t) = \begin{cases} u_l, & x < s_m t \\ u_m, & s_m t \leq x \leq u_m t \\ x/t, & u_m t \leq x \leq u_r t \\ u_r, & x > u_r t \end{cases} \quad \forall u_m : \\ u_l \leq u_m \leq u_r \\ s_m = (u_l + u_m)/2$$

- ▶ Eine andere schwache Lösung ist wieder $u(x, t) = u_0(x - st)$.
 - ▶ Die Schock-Geschwindigkeit ist $s = (u_l + u_r)/2$.
 - ▶ Hier strahlen Charakteristiken aus dem Schock.
 - ▶ Diese ist nicht die Lösung der verschwindenden Viskosität.
- ▶ Die Lösung der verschwindenden Viskosität ist gegeben durch die *Verdünnungswelle*

$$u(x, t) = \begin{cases} u_l, & x < u_l t \\ x/t, & u_l t \leq x \leq u_r t \\ u_r, & x > u_r t \end{cases}$$

Rankine-Hugoniot und Entropie Bedingungen

- ▶ Die Schock-Lösung $u(x, t) = u_0(x - st)$ ist eine schwache Lösung des Riemannsches Problems nur wenn $s = \frac{1}{2}(u_l + u_r)$.
- ▶ Die richtige Geschwindigkeit s wird so bestimmt:

- ▶ Für fixiertes t und unbestimmtes s sei $M \gg |st|$. Es gelten $u(-M, t) = u_l$ und $u(+M, t) = u_r$ für $u(x, t) = u_0(x - st)$.
- ▶ Mit $t_1 = t$ und $t_2 = t + dt$ in der schwachen Form der Burgerschen Gleichung, ergibt sich durch den Limes $dt \rightarrow 0$,

$$\frac{d}{dt} \int_{-M}^{+M} u(x, t) dx = f(u_l) - f(u_r) = \frac{1}{2}(u_l + u_r)(u_l - u_r)$$

- ▶ Die Lösung $u(x, t) = u_0(x - st)$ erfüllt

$$\int_{-M}^{+M} u(x, t) dx = \int_{-M}^{st} u(x, t) dx + \int_{st}^{+M} u(x, t) dx = (M + st)u_l + (M - st)u_r$$

und daher

$$\frac{d}{dt} \int_{-M}^{+M} u(x, t) dx = s(u_l - u_r) \Rightarrow s = \frac{1}{2}(u_l + u_r)$$

- ▶ Im allgemeinen gilt die *Rankine-Hugoniot* Sprung-Bedingung,

$$f(u_l) - f(u_r) = s(u_l - u_r)$$

- ▶ Die Lösung der verschwindenden Viskosität ist leichter erkennbar durch die *Entropie* Bedingungen

$$f'(u_l) > s > f'(u_r) \quad \text{oder} \quad \frac{f(u) - f(u_l)}{u - u_l} \geq s \geq \frac{f(u) - f(u_r)}{u - u_r}, \forall u \in [u_r, u_l]$$

dass Charakteristiken in einen Schock laufen, nicht heraus.

Verkehrsfluss

- ▶ Sei $\rho(x, t)$ die Dichte und $u(x, t)$ die Geschwindigkeit der Fahrzeuge an der Stelle x einer Straße und zur Zeit t .
- ▶ Es gilt $0 \leq \rho \leq \rho_{\max}$, wobei die Fahrzeuge Stoßstange an Stoßstange bei dem Wert ρ_{\max} stehen.
- ▶ Da die Fahrzeuge erhalten bleiben, ergibt sich der Erhaltungssatz

$$\rho_t + (\rho u)_x = 0$$

oder die schwache Form, je nach Glattheit der Variablen.

- ▶ Es ist natürlich anzunehmen, dass u von ρ abhängt. Hier wird modelliert,

$$u(\rho) = u_{\max}(1 - \rho/\rho_{\max})$$

wobei u_{\max} die Geschwindigkeitsgrenze ist.

- ▶ Mit dieser Geschwindigkeit wird der Erhaltungssatz

$$\rho_t + f(\rho)_x = 0$$

mit dem Fluss

$$f(\rho) = \rho u(\rho) = \rho u_{\max}(1 - \rho/\rho_{\max})$$

der konkav statt konvex ist,

$$f''(\rho) = -2u_{\max}/\rho_{\max} < 0.$$

Verkehrsfluss

- ▶ Wegen der Gleichungsform $\rho_t + f'(\rho)\rho_x = 0$ sind die Charakteristiken gegeben durch

$$x'(t) = f'(\rho(x(t), t)), \quad f'(\rho) = u_{\max}(1 - 2\rho/\rho_{\max})$$

und Trajektorien durch

$$x'(t) = u(\rho(x(t), t)), \quad u(\rho) = u_{\max}(1 - \rho/\rho_{\max})$$

- ▶ Für das Riemannsches Problem

$$\rho_t + f(\rho)_x = 0, \quad \rho(x, 0) = \rho_0(x) = \begin{cases} \rho_l, & x < 0 \\ \rho_r, & x > 0 \end{cases}$$

ist die Schock-Geschwindigkeit

$$s = \frac{f(\rho_l) - f(\rho_r)}{\rho_l - \rho_r} = u_{\max}(1 - (\rho_l + \rho_r)/\rho_{\max})$$

mit unbestimmtem Vorzeichen trotz $u(\rho) > 0$.

- ▶ Wegen des konkaven Flusses folgt aus der Entropie Bedingung,

$$f'(\rho_l) > s > f'(\rho_r) \Rightarrow \rho_l < \rho_r$$

anders als für Burger mit konvexem Fluss.

- ▶ Für $0 \leq \rho_l < \rho_r \leq \rho_{\max}$ ist die Lösung $\rho(x, t) = \rho_0(x - st)$ ein reisender Schock.

Stau Wird Erreicht

- ▶ Beispiel: Für das Riemannsches Problem mit $2\rho_l = \rho_r = \rho_{\max}$ gibt es die Schock-Geschwindigkeit

$$s = u_{\max} \left(1 - (\rho_l + \rho_r) / \rho_{\max} \right) = -\frac{1}{2} u_{\max}$$

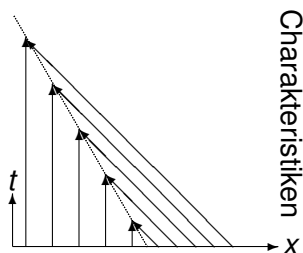
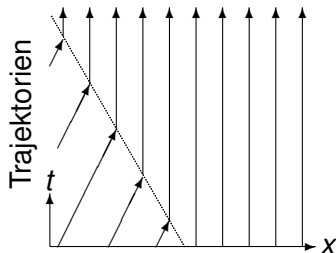
die Fahrzeugtrajektorien

$$x = x_0 + u(\rho_0(x_0))t = \begin{cases} x_0 + \frac{1}{2} u_{\max} t, & x_0 < 0 \\ x_0, & x_0 > 0 \end{cases}$$

und die Charakteristiken

$$x(t) = x_0 + f'(\rho_0(x_0))t = \begin{cases} x_0, & x_0 < 0 \\ x_0 - u_{\max} t, & x_0 > 0 \end{cases}$$

- ▶ Diese sehen grafisch so aus. Stau wird plötzlich erreicht.



Starten von einer Ampel

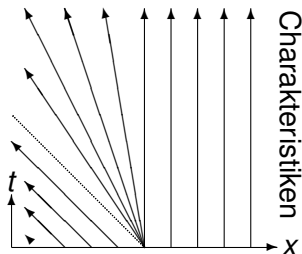
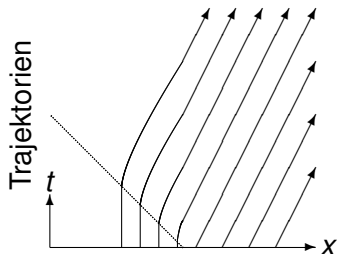
- ▶ Beispiel: Für das Riemannsches Problem mit $2\rho_r = \rho_l = \rho_{\max}$ hat die Entropie Lösung keinen Schock sondern eine Verdünnungswelle mit den Fahrzeugtrajektorien

$$x = x_0 + u(\rho_0(x_0))t = \begin{cases} x_0, & x_0 < 0, t \text{ klein} \\ x_0 + \frac{1}{2}u_{\max}t, & x_0 > 0 \end{cases}$$

und den Charakteristiken

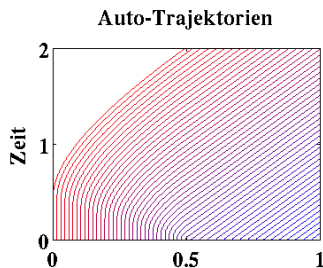
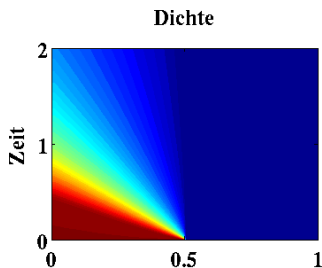
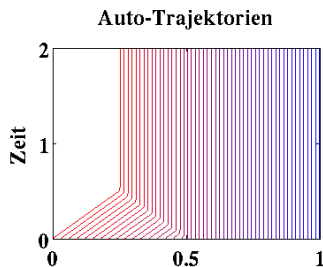
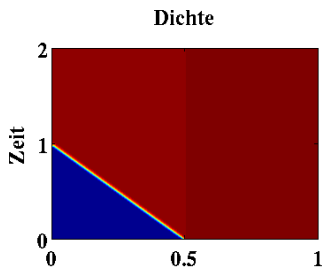
$$x(t) = x_0 + f'(\rho_0(x_0))t = \begin{cases} x_0 - u_{\max}t, & x_0 < 0 \\ x_0, & x_0 > 0 \end{cases}$$

- ▶ Diese sehen grafisch so aus. Beschleunigung nach Verdünnung.



Riemannsche Probleme

- Die Dichte zusammen mit den Trajektorien für die letzten 2 Beispiele:



Schallgeschwindigkeit

Hausaufgabe: Verkehr startet von einer Ampel mit offener Straße da vorne.

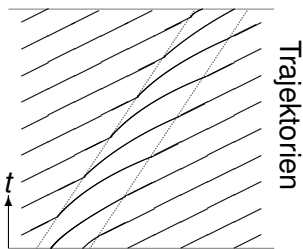
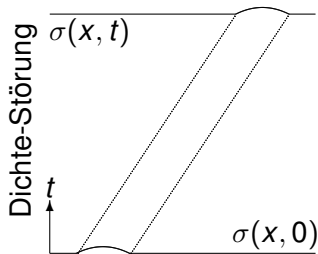
- ▶ Löse das Riemannsches Problem mit $\rho_l = \rho_{\max}$ und $\rho_r = 0$.
- ▶ Skizziere die Trajektorien und die Charakteristiken.
- ▶ Skizziere $\rho(x, t)$ und $u(x, t)$ für eine fixierte Zeit $t > 0$.
- ▶ Bestimme die Fahrzeugsgeschwindigkeit $v(t)$ entlang einer Trajektorie.

Störungsanalyse:

- ▶ Sei die Anfangsdaten fast konstant: $\rho_0(x) = \hat{\rho} + \epsilon\sigma_0(x)$.
- ▶ Nimm an, es gelten
$$\rho(x, t) = \hat{\rho} + \epsilon\sigma(x, t), \quad \rho(x, 0) = \rho_0(x), \quad \sigma(x, 0) = \sigma_0(x)$$
und es folgt
$$\rho_t = \epsilon\sigma_t, \quad \rho_x = \epsilon\sigma_x, \quad f'(\rho) = f'(\hat{\rho}) + \epsilon\sigma f''(\hat{\rho}) + \mathcal{O}(\epsilon^2)$$
- ▶ Mit $(\rho_t + f'(\rho)\rho_x)/\epsilon = 0$ folgt
$$\sigma_t + f'(\hat{\rho})\sigma_x = -\epsilon\sigma\sigma_x f''(\hat{\rho}) + \mathcal{O}(\epsilon)$$
- ▶ Für $0 < \epsilon \ll 1$ gilt annäherungsweise die lineare PDG
$$\sigma_t + f'(\hat{\rho})\sigma_x = 0$$

Schallgeschwindigkeit

- ▶ Eine Dichtestörung fährt mit Geschwindigkeit $f'(\hat{\rho})$, wobei
$$f'(\hat{\rho}) > 0 \text{ wenn } \hat{\rho} < \frac{1}{2}\rho_{\max}.$$
- ▶ Die Dichtestörung fährt *rückwärts* durch die Autokolonne.



- ▶ Die *Schallgeschwindigkeit*

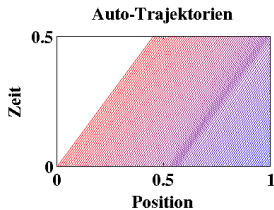
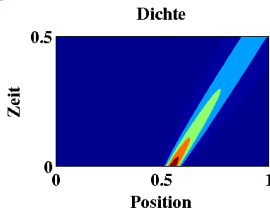
$$c = f'(\hat{\rho}) - u(\hat{\rho}) = -u_{\max}\hat{\rho}/\rho_{\max},$$

ist die auf den Verkehrsfluss bezogene Geschwindigkeit.

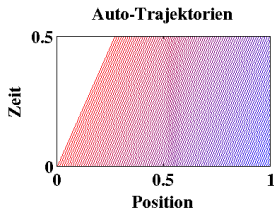
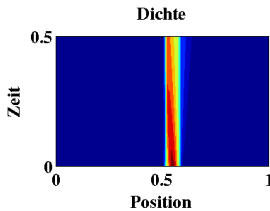
- ▶ Die Dichte $\hat{\rho} = \frac{1}{2}\rho_{\max}$ ist der *Schallgrenzpunkt*, in dem gilt
$$c = -u(\hat{\rho}).$$

Schallgeschwindigkeit

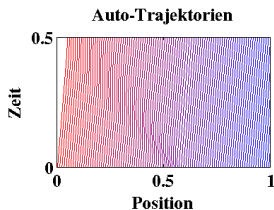
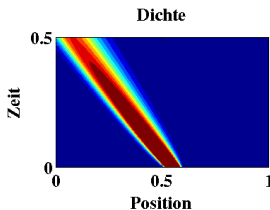
- ▶ Überschall-Geschwindigkeit
 $0 > c \approx 0$



- ▶ Schall-Geschwindigkeit
 $c \approx -u_{\max}/2$



- ▶ und Unterschall-Geschwindigkeit
 $c \approx -u_{\max}$

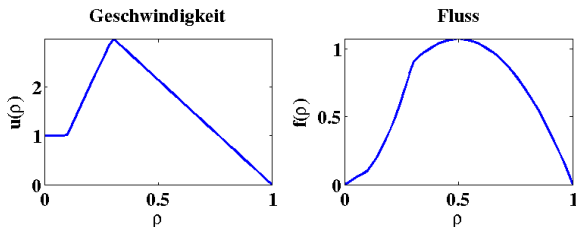


Nächtlicher Verkehrsfluss

- ▶ Für den Skalar-Erhaltungssatz $\rho_t + f(\rho)_x = 0$ seien

$$u(\rho) = \begin{cases} U_0 & \rho < \rho_a \\ c\rho & \rho_a \leq \rho \leq \rho_b \\ U_1(\rho_{\max} - \rho) & \rho > \rho_b \end{cases} \quad f(\rho) = \rho u(\rho)$$

wie grafisch dargestellt:



Hier gelten $U_0 = 1$, $\rho_a = \frac{1}{10}$, $\rho_b = \frac{3}{10}$, $c = 10$, $U_1 = \frac{30}{7}$, $\rho_{\max} = 1$.

- ▶ In der Nacht fährt man mit Geschwindigkeit
 - ▶ U_0 wenn allein, aber schneller mit
 - ▶ $c\rho$, um die vordere Beleuchtung zu nutzen, und
 - ▶ schließlich mit $U_1(\rho_{\max} - \rho)$ wenn die Dichte höher ist.

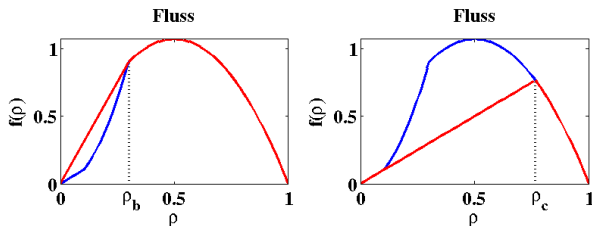
Nächtlicher Verkehrsfluss

- Wird mit einer Auto-folgenden Formulierung gelöst, wobei $x_k(t)$ die Position des k ten Fahrzeugs darstellt, und durch

$$x'_k = u(\rho_k(t)), \quad \rho_k(t) = 1/[x_{k+1}(t) - x_k(t)]$$

wird der k te Fahrer nur vom vorderen Auto beeinflusst.

- Die Lösung des Riemannschen Problems mit $\rho_l = 1$, $\rho_r = 0$ wird mit der rechten Grafik dargestellt.



- Wenn die alternative Formel verwendet wird,

$$\rho_k(t) = \frac{1}{2} \left\{ 1/[x_{k+1}(t) - x_k(t)] + 1/[x_k(t) - x_{k-1}(t)] \right\}$$

bekommt man die Lösung der verschwindenden Viskosität, die aber *nicht* realistisch ist!

- Die Lösung des Riemannschen Problems mit $\rho_l = 1$, $\rho_r = 0$ wird mit der linken Grafik dargestellt.

Nächtlicher Verkehrsfluss

► Entropie Lösung:

$$0 = \rho_r < \rho_b < \frac{1}{2}$$

$$< \rho_l = 1$$

$$\frac{f(\rho) - f(\rho_b)}{\rho - \rho_b} \geq s (= 3)$$

$$\geq \frac{f(\rho) - f(\rho_r)}{\rho - \rho_r}$$

$$\forall \rho \in [\rho_r, \rho_b]$$

Gilt nur mit $\rho_N =$

$$(1 - \epsilon) / (x_N - x_{N-1})!$$

► Realistische

Lösung:

$$0 = \rho_r < \frac{1}{2} < \rho_c$$

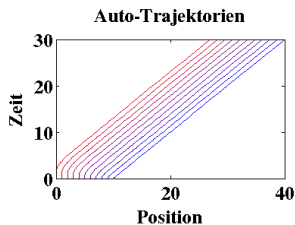
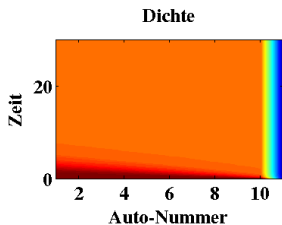
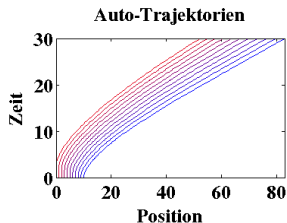
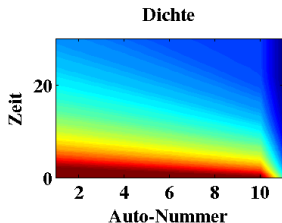
$$< \rho_l = 1$$

Die ersten Fahrer
schnell bei

$$u(\rho_r) = U_0.$$

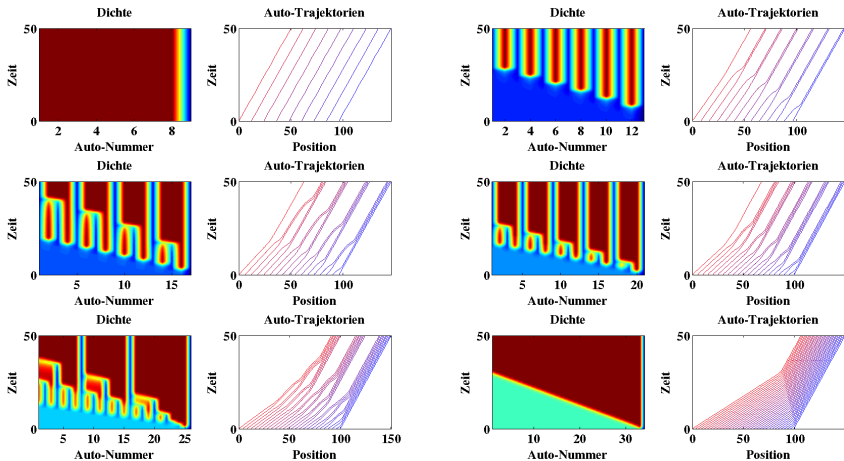
Neue Bedingung:

$$(1 =) s \leq f'(\rho_r) = u(\rho_r).$$



Instabilität und Anhäufung

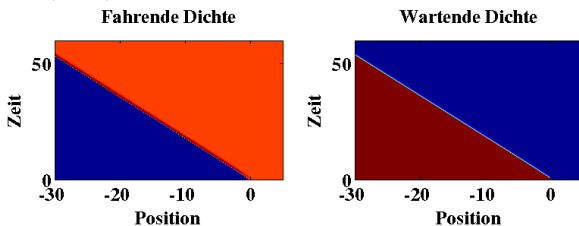
- ▶ Ergebnisse für $\rho_0(x) = \frac{1}{12}, \frac{1}{8}, \frac{1}{6}, \frac{1}{5}, \frac{1}{4}$ und $\frac{1}{3}$.



- ▶ Für $\rho_0 \leq \rho_a = \frac{1}{10}$ (konstante $u = U_0$) oder für $\rho_0(x) \geq \rho_b = \frac{1}{3}$ (normaler Schock) ist $f(\rho)$ konkav.
- ▶ Sonst entstehen Haufen, da eine konstante Geschwindigkeit instabil ist.

Detonationswellen im Verkehr

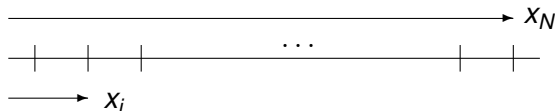
- ▶ Sei $\rho(x, t)$ die übliche Dichte der fahrenden Autos.
- ▶ Nun sei $\omega(x, t)$ die Dichte der stehenden Autos, die auf einen Platz in der Autokolonne warten.
- ▶ Das Modell der Interaktion zwischen diesen ist
$$\omega_t = -\alpha(\rho)\omega, \quad \rho_t + f(\rho)_x = \alpha(\rho)\omega, \quad \alpha(\rho) = \hat{\alpha}(\rho > \rho_i)$$
- ▶ Ein Auto fährt erst ein, wenn die fahrende Dichte die Schwelle $\rho > \rho_i$ erreicht.



- ▶ Hier gilt $\rho_l < \rho_i < \rho_r$. Ein reisender Stau-Schock erhöht ρ über ρ_i . Nach der Schockwelle gilt $\rho_{\text{peak}} > \rho_r$ in einer engen Zone.
- ▶ Nachher gibt es eine Reaktionszone mit $\rho_{\text{peak}} > \rho > \rho_r$, in der alle verfügbaren Autos auf die Spur kommen.

Newton und Bremskraft

- ▶ Auto Positionen $x_i(t)$, Geschwindigkeiten $x'_i(t)$.



- ▶ Der i te Fahrer bremst stärker wenn

- ▶ $x_{i+1}(t) - x_i(t)$ kleiner. (Abstand vor mir)
- ▶ $x'_i(t) - x'_{i+1}(t)$ größer. (Entschleunigung vor mir)
- ▶ Zusammen,

$$\text{Bremsenkraft} = A \frac{x'_i - x'_{i+1}}{x_{i+1} - x_i}$$

- ▶ Newtonsches Gesetz $ma = F$, Reaktionszeit τ ,

$$-Mx''_i(t + \tau) = A \frac{x'_i(t) - x'_{i+1}(t)}{x_{i+1}(t) - x_i(t)} = -A \frac{d}{dt} \ln[x_{i+1}(t) - x_i(t)]$$

Mit $\lambda = A/M$,

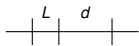
x_N gegeben

$$x'_i(t + \tau) = \lambda \ln[x_{i+1}(t) - x_i(t)] + \alpha_i, \quad i = 1, \dots, N-1$$

Geschwindigkeitsmodell

- Das Auto-folgende Modell: x_N gegeben,
$$x'_i(t + \tau) = \lambda \ln[x_{i+1}(t) - x_i(t)] + \alpha_i, \quad i = 1, \dots, N-1$$

- Idealisierter Zustand:



- Alle Autos haben die gleiche Länge L , den gleichen Abstand d und die gleiche Geschwindigkeit u .
- Die Verkehrsdichte $\rho = 1/(d + L) = 1/[x_{i+1} - x_i]$ ist räumlich konstant und maximiert den Verkehrsfluss $f(\rho) = \rho \cdot u(\rho)$.

DG $\Rightarrow \alpha_i = u - \lambda \ln(1/\rho) =: \alpha$. Stabilität dieser Zustand?

- Modell der Geschwindigkeit: $u = u(\rho)$, $u'(\rho) \leq 0$,

$$u(\rho) = \begin{cases} u_{\max}, & 0 \leq \rho \leq \rho_c & (u_{\max} \text{ für } \rho \text{ klein}) \\ ?, & \rho_c \leq \rho \leq \rho_{\max} \\ 0, & \rho = \rho_{\max} & (\rho_{\max} \approx 1/L) \end{cases}$$

wobei u_{\max} = Geschwindigkeitsgrenze, ρ_c = kritische Dichte.

$$\text{DG} \Rightarrow u(\rho) = \lambda \ln(d + L) + \alpha = \lambda \ln(1/\rho) + \alpha$$

$$\rho = \rho_{\max} \Rightarrow u(\rho) = 0 \Rightarrow \alpha^* = \lambda^* \ln(\rho_{\max}). \text{ Mit der DG,}$$

$$u(\rho) = \lambda \ln(1/\rho) + \lambda \ln(\rho_{\max}) = \lambda \ln(\rho_{\max}/\rho)$$

$$\rho = \rho_c \Rightarrow u(\rho) = u_{\max} \Rightarrow \lambda^* = u_{\max} / \ln(\rho_{\max}/\rho_c). \text{ Mit der DG,}$$

$$u(\rho) = u_{\max} \ln(\rho_{\max}/\rho) / \ln(\rho_{\max}/\rho_c), \quad \rho_c \leq \rho \leq \rho_{\max}$$

Stabilität für Verkehr Dynamik

- ▶ Verkehrsfluss $f(\rho) = \rho u(\rho)$ wird maximiert in

$$\rho^* = \rho_{\max}/e.$$

Die entsprechende Geschwindigkeit ist:

$$u^* = u(\rho^*) = u_{\max}/\ln(\rho_{\max}/\rho_c)$$

- ▶ Der idealisierte Zustand ist explizit:

$$\xi_i(t) = u^*t + (i-1)/\rho^*, \quad i = 1, \dots, N$$

- ▶ Sei $\{x_i\}_{i=1}^{N-1}$ eine störende Lösung des Systems, $x_N(t) = \xi_N(t)$,

$$x_i''(t + \tau) = \lambda \frac{d}{dt} \ln[x_{i+1}(t) - x_i(t)], \quad i = 1, \dots, N-1$$

wobei $\lambda = u^*$ und die Differenzen $\phi_i(t) = x_i(t) - \xi_i(t)$ erfüllen $|\phi_i([0, \tau])|, |\phi_i'(\tau)| = \mathcal{O}(\epsilon)$ und $\phi_N = 0$,

$$\begin{aligned}\phi_i'(t + \tau) &= x_i'(t + \tau) - \xi_i'(t + \tau) = u^* \ln[x_{i+1}(t) - x_i(t)] + \alpha_i - u^* \\ &= u^* \ln[(\phi_{i+1}(t) + \xi_{i+1}(t)) - (\phi_i(t) + \xi_i(t))] + \alpha_i - u^* \\ &= u^* \ln[1/\rho^* + \phi_{i+1}(t) - \phi_i(t)] + \alpha_i - u^*\end{aligned}$$

Es folgt ($t = 0$), $\mathcal{O}(\epsilon) = u^* \ln[1/\rho^* + \mathcal{O}(\epsilon)] + \alpha_i - u^*$
 $= u^* \ln[(\mathcal{O}(\epsilon) + 1)/\rho^*] + \alpha_i - u^* = \mathcal{O}(\epsilon) + \alpha_i - u^* \ln(e\rho^*)$

Stabilität für Verkehr Dynamik

- ▶ Daher $\alpha_i - u^* \ln(e\rho^*) = \mathcal{O}(\epsilon)$, und die Nullstellen erfüllen

$$\phi_i^* = \sum_{j=i}^{N-1} (1/\rho^* - e^{1-\alpha_j/u^*}) = \mathcal{O}(\epsilon), \quad i = 1, \dots, N$$

Gilt $\phi_i(t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \phi_i^*$? Für $\tau > 0$, kein Werkzeug.

- ▶ Nimm an, $\tau = 0$, $N = 2$.

$$\begin{aligned} \phi_1'(t) &= f(\phi_1(t)), & f(\phi) &= u^* \ln[1/\rho^* - \phi] + \alpha_1 - u^* \\ f'(\phi) &= -u^*/(1/\rho^* - \phi), & f'(\phi_1^*) &= -u^* e^{\alpha_1/u^* - 1} < 0 \end{aligned}$$

Daher für ϵ klein genug gilt $\phi_1(t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \phi_1^*$ und

$$x_1(t) - \xi_1(t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \mathcal{O}(\epsilon)$$

d.h. die Lösung $\xi_1(t) = u^* t$ ist stabil.

Hausaufgabe: ($\tau = 0$, $N = 3$) Zeige für das System, $\phi_3(t) = 0$,

$$\phi_2'(t) = u^* \ln[1/\rho^* - \phi_2(t)] + \alpha_2 - u^*$$

$$\phi_1'(t) = u^* \ln[1/\rho^* + \phi_2(t) - \phi_1(t)] + \alpha_1 - u^*$$

mit $|\phi_i([0, \tau])|, |\phi_i'(\tau)| = \mathcal{O}(\epsilon)$ und ϵ klein genug, es gelten

$$\phi_i(t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \phi_i^* = \sum_{j=i}^2 (1/\rho^* - e^{1-\alpha_j/u^*}) = \mathcal{O}(\epsilon), \quad i \leq 3$$

und daher ist die Lösung $\xi_i(t) = u^* t + (i-1)/\rho^*$, $i \leq 3$ stabil.

Stabilität für Verkehr Dynamik

- Für $\tau > 0$ wird die Diskretisierung analysiert:

$$\Delta t = 1/M, \quad t = n/M, \quad \tau = \sigma/M$$

$$\Xi_i(n) = \xi_i(n/M) = u^* n/M + (i-1)/\rho^*$$

$$X_i(n) \approx x_i(n/M), \quad \Phi_i(n) = X_i(n) - \Xi_i(n) \approx \phi_i(n/M)$$

- Die Diskretisierung der x -Gleichung ist $X_N(n) = \Xi_N(n)$,

$$M^2 \Delta_n^2 X_i(n) = u^* M \Delta_n \ln[X_{i+1}(n-\sigma) - X_i(n-\sigma)]$$

wobei

$$i = 1, \dots, N-1$$

$$\Delta_n X(n) = X(n+1) - X(n).$$

Analog zur Integration $\exists \{\alpha_i\}_{i=1}^{N-1}$ s.d.

$$M \Delta_n X_i(n) = u^* \ln[X_{i+1}(n-\sigma) - X_i(n-\sigma)] + \alpha_i$$

$$i = 1, \dots, N-1$$

- Die Differenzen $\Phi_i(n) = X_i(n) - \Xi_i(n)$ erfüllen

$$|\Phi_i(\{n\}_{n=0}^{\sigma})|, |M \Delta_n \Phi_i(\sigma)| = \mathcal{O}(\epsilon)$$

(oder $|\Phi_i(\{n\}_{n=0}^{\sigma+1})| = \mathcal{O}(\epsilon)$) und

$$\Phi_N = 0,$$

$$M \Delta_n \Phi_i(n) = M \Delta_n X_i(n) - M \Delta_n \Xi_i(n)$$

$$= u^* \ln[X_{i+1}(n-\sigma) - X_i(n-\sigma)] + \alpha_i - u^*$$

$$= u^* \ln[1/\rho^* + \Phi_{i+1}(n-\sigma) - \Phi_i(n-\sigma)] + \alpha_i - u^*$$

$$i = 1, \dots, N-1$$

Stabilität für Verkehr Dynamik

- ▶ Es folgt ($n = \sigma$),

$$\begin{aligned} \mathcal{O}(\epsilon) &= u^* \ln[1/\rho^* + \mathcal{O}(\epsilon)] + \alpha_i - u^* \\ &= u^* \ln[(\mathcal{O}(\epsilon) + 1)/\rho^*] + \alpha_i - u^* = \mathcal{O}(\epsilon) + \alpha_i - u^* \ln(e\rho^*) \end{aligned}$$

Daher $\alpha_i - u^* \ln(e\rho^*) = \mathcal{O}(\epsilon)$ und $1/\rho^* - e^{1-\alpha_i/u^*} = \mathcal{O}(\epsilon)$.

- ▶ Nimm $N = 2, \sigma = 1$,

$$\Phi_1(n+1) = \Phi_1(n) + \frac{u^*}{M} \ln[1/\rho^* - \Phi_1(n-1)] + \frac{\alpha_1 - u^*}{M}$$

Die Differenzengleichung beinhaltet Zustände $\{\Phi_1(n-1), \Phi_1(n), \Phi_1(n+1)\}$. Fixpunkt-Iteration?

- ▶ Mit $\Psi(n+1) =$

$$\begin{bmatrix} \Phi_1(n) \\ \Phi_1(n+1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Phi_1(n) \\ \Phi_1(n) + \frac{u^*}{M} \ln[1/\rho^* - \Phi_1(n-1)] + \frac{\alpha_1 - u^*}{M} \end{bmatrix}$$

gibt es die Fixpunkt-Iteration $\Psi_{n+1} = F(\Psi_n)$, wobei

$$\Psi = \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{bmatrix}, \quad F(\Psi) = \begin{bmatrix} \psi_2 \\ \psi_2 + \frac{u^*}{M} \ln[1/\rho^* - \psi_1] + \frac{\alpha_1 - u^*}{M} \end{bmatrix}$$

und in dem Fixpunkt $\Psi^* = (1/\rho^* - e^{1-\alpha_1/u^*}) \langle 1, 1 \rangle^T (= \mathcal{O}(\epsilon))$

$$\frac{\partial F}{\partial \Psi} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ \frac{-u^*/M}{1/\rho^* - \psi_1} & 1 \end{bmatrix} \xrightarrow{\Psi = \Psi^*} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -\theta & 1 \end{bmatrix}, \quad \theta = \frac{u^*}{M} e^{\alpha_1/u^* - 1}$$

Stabilität für Verkehr Dynamik

- Das Spektrum $\sigma(J)$ mit $J = \partial F / \partial \Psi(\Psi^*)$ ist:

$$\sigma(J) = \{\lambda_{1,2}\} = \left\{ \frac{1}{2} [1 \pm \sqrt{1 - 4\theta}] \right\}$$

Für $0 < \theta \leq \frac{1}{4}$ gelten

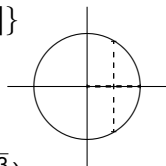
$$\lambda_1, \lambda_2 \in (0, 1)$$

Für $\frac{1}{4} \leq \theta < 1$ gelten

$$(\lambda_1 - \frac{1}{2})/i, (\lambda_2 - \frac{1}{2})/i \in (-\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2})$$

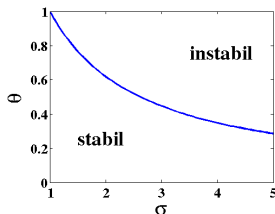
Für $\theta \in (0, 1)$ und ϵ klein genug gelten $\Psi_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \Psi^* = \mathcal{O}(\epsilon)$
und

$$X_2(n) - \Xi_2(n) = \Phi_2(n) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \mathcal{O}(\epsilon)$$



Hausaufgabe: Leite eine Stabilitätsbedingung für den Fall $N = 2$ und $\sigma = 2$ explizit her.

- Mit θ oben, $N = 2$ und $\sigma \in \mathbb{N}$ gilt $\det[-\lambda I + J] = (-1)^\sigma [\lambda^\sigma (1 - \lambda) - \theta]$.
Lösung der Gleichung $\lambda^\sigma (1 - \lambda) = \theta$
mit $\lambda = e^{it}$ ist
 $(\sigma + \frac{1}{2})t = \pm \frac{\pi}{2}, \quad \theta = 2 \sin\left(\frac{\pi}{2(2\sigma+1)}\right)$



Simulationen

- ▶ Idealisierter Zustand:

$$\rho_{\max} = 1$$

$$\rho_c = \frac{1}{10}$$

$$u_{\max} = 1$$

- ▶ Reaktionszeit

$$\tau = 0$$

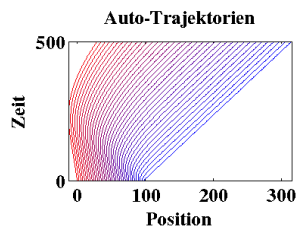
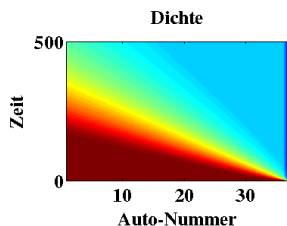
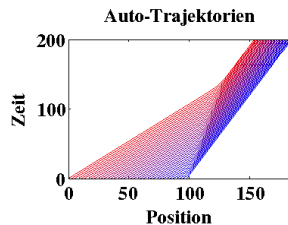
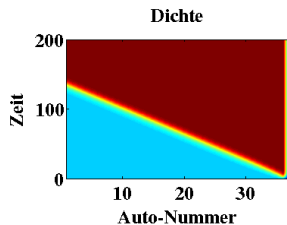
- ▶ Störungen:

Mit $\alpha = \alpha^* + \frac{1}{2}$

entsteht ein Entschleunigungsschock.

Mit $\alpha = \alpha^* - \frac{1}{2}$

entsteht eine Verdünnungswelle.



Simulationen

- ▶ Idealisierter Zustand:

$$\rho_{\max} = 1$$

$$\rho_c = \frac{1}{10}$$

$$u_{\max} = 1$$

- ▶ Reaktionszeit

$$\tau = 0$$

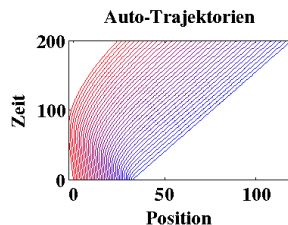
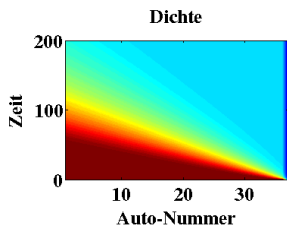
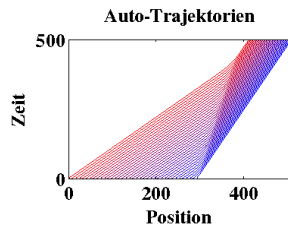
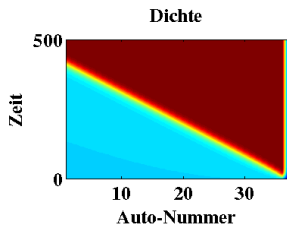
- ▶ Störungen:

Mit $x_i(0) = 3\xi_i(0)$

entsteht ein Entschleunigungsschock.

Mit $x_i(0) = \xi_i(0)/3$

entsteht eine Verdünnungswelle.



Simulationen

- ▶ Idealisierter Zustand:

$$\rho_{\max} = 1$$

$$\rho_c = \frac{1}{10}$$

$$u_{\max} = 1$$

- ▶ Zufällige Störungen

$$x_i(0) = \xi_i(0) + \frac{\nu}{5\rho^*}$$

$$\alpha = \alpha^* + \frac{\nu\lambda^*}{5}$$

$$(\nu \sim N(0, 1))$$

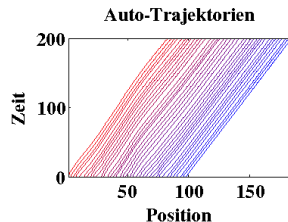
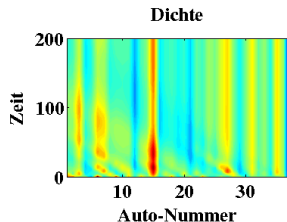
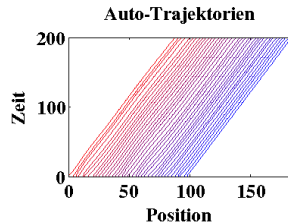
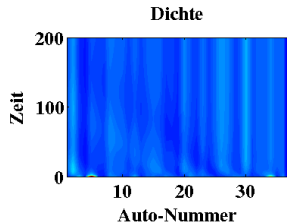
- ▶ Reaktionszeiten

$$\tau = 0$$

bzw.

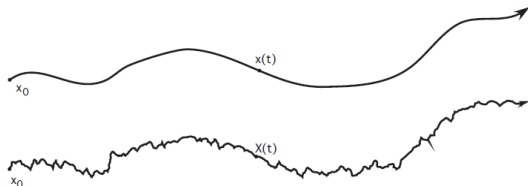
$$\tau = 2$$

- ▶ Bei noch höherer Reaktionszeit finden Kollisionen statt.



Stochastische Differentialgleichungen

- ▶ Für ein deterministisches Modell, $\mathbf{b} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ glatt,
$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{b}(\mathbf{x}(t)), \quad t > 0, \quad \mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0$$
könnte die Lösung $\mathbf{x} : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}^n$ die glatte Trajektorie haben,



obwohl die nicht glatte Trajektorie experimentiell gemessen wird.

- ▶ Ein neues Modell mit zufälligen Effekten, $\mathbf{B} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$,
$$\dot{\mathbf{X}}(t) = \mathbf{b}(\mathbf{X}(t)) + \mathbf{B}(\mathbf{X}(t))\xi(t), \quad t > 0, \quad \mathbf{X}(0) = \mathbf{x}_0$$
wobei $\mathbf{X} : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}^n$ ein stochastischer Prozess ist und
$$\xi : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}^m$$
weißes Rauschen darstellt.
- ▶ Wie definiert man weißes Rauschen und eine Lösung?

Heuristik

- ▶ Ein *Wiener Prozess* oder *Brownsche Bewegung* $\mathbf{W} : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}^m$ wird mit den Eigenschaften konstruiert:

$$E[\mathbf{W}(t)] = \mathbf{0}, \quad E[\mathbf{W}^2(t)] = t, \quad \forall t \geq 0.$$

- ▶ Weißes Rauschen $\xi : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}^m$ wird so definiert,

$$\dot{\mathbf{W}}(t) = \xi(t), \quad t \geq 0$$

mit Mittelwerten

$$E[\xi(t)] = \mathbf{0}, \quad \forall t \geq 0$$

und Autokorrelationsfunktion $r_\xi(t, s) = E[\xi(t)^\top \xi(s)]$

$$r_\xi(t, s) = c_\xi(t - s) = \delta_0(t - s)$$

die eine *flache* Spektraldichte hat,

$$f(\lambda) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\lambda t} c_\xi(t) dt = \frac{1}{2\pi}$$

d.h. alle Frequenzen tragen gleich bei.

- ▶ $\mathbf{X} : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}^n$ erfüllt die *stochastische Differentialgleichung*

$$d\mathbf{X}(t) = \mathbf{b}(\mathbf{X}(t))dt + \mathbf{B}(\mathbf{X}(t))d\mathbf{W}(t), \quad \mathbf{X}(0) = \mathbf{x}_0$$

wenn

(Definition der Integrale?)

$$\mathbf{X}(t) = \mathbf{x}_0 + \int_0^t \mathbf{b}(\mathbf{X}(s))ds + \int_0^t \mathbf{B}(\mathbf{X}(s))d\mathbf{W}(s)$$

Itô's Formel

- ▶ Zur Vereinfachung nimm an, $n = 1$ und $X(t)$ löst
$$dX(t) = b(X(t))dt + B(X(t))dW(t)$$
- ▶ Welche SDG erfüllt $Y(t) = u(X(t), t)$, wenn $u : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ glatt ist? Erste Antwort ist falsch, d.h.
$$dY(t) \neq u_t(X(t), t)dt + u_x(X(t), t)dX(t)$$
$$= (u_t(X(t), t) + b(X(t))dt + u_x(X(t), t)B(X(t))dW(t)$$
- ▶ Mit der Eigenschaft $E[W^2(t)] = t, \forall t \geq 0$, oder $dW(t)^2 = dt$,

$$\begin{aligned}dY(t) &= u_t dt + u_x dX(t) + \frac{1}{2} u_{xx} dX^2(t) + \dots \\ &= u_t dt + u_x (b dt + B dW(t)) \\ &\quad + \frac{1}{2} u_{xx} (b dt + B dW(t))^2 + \dots \\ &= (u_t + u_x b + \frac{1}{2} u_{xx} B^2) dt \\ &\quad + u_x B dW(t) + \mathcal{O}(dt^{3/2})\end{aligned}$$

ergibt sich das System der SDG

$$\begin{aligned}dX(t) &= b(X(t))dt + B(X(t))dW(t) \\ dY(t) &= [u_t(X(t), t) + u_x(X(t), t)b(X(t)) + \frac{1}{2} u_{xx}(X(t), t)B^2(X(t))]dt \\ &\quad + u_x(X(t), t)B(X(t))dW(t)\end{aligned}$$

Itô's Formel

- ▶ Beispiel: um die SDG zu lösen,

$$dY(t) = Y(t)dW(t), \quad Y(0) = 1$$

verwendet man die Formel,

$$dY(t) = [u_t + u_x b + \frac{1}{2} u_{xx} B^2] dt + u_x B dW(t)$$

und man sucht $u(x, t)$, wobei mit $(b = 0, B = 1)$

$$X(t) = W(t), \quad \text{d.h.} \quad dX(t) = dW(t), \quad X(0) = 0$$

und $y_0 = u(x_0, 0) = u(0, 0) = 1$,

$$u_x(X, t) = u(X, t) = Y, \quad u_t(X, t) + \frac{1}{2} u_{xx}(X, t) = 0.$$

Mit $u_{xx} = u_x = u$ folgt $u_t = -\frac{1}{2}u$ oder $u(X, t) = f(X)e^{-t/2}$

$$\text{wobei } f(0) = u(0, 0) = 1.$$

Mit $f'(X) = u_x e^{t/2} = u e^{t/2} = f(X)$ folgt $f(X) = e^X$. Die Lösung ist

$$Y(t) = u(X(t), t) = \exp[W(t) - t/2]$$

- ▶ Beispiel: Sei $P(t)$ der (zufällige) Preis einer Aktie zur Zeit $t \geq 0$. Ein Modell für den Preis ist die SDG,

$$dP(t) = \mu P(t) dt + \sigma P(t) dW(t), \quad P(0) = p_0$$

wobei μ die Drift und σ die Volatilität sind. Ähnlich ist die Lösung

$$P(t) = p_0 \exp[\sigma W(t) + (\mu - \sigma^2/2)t]$$

Verteilung einer Brownschen Bewegung

- ▶ Betrachte ein langes dünnes Rohr, das mit klarem Wasser befüllt ist. Zur Zeit $t = 0$ wird eine Einheit Tinte an der Stelle $x = 0$ injiziert.
- ▶ Sei $f(x, t)$ die Tintendichte an der Stelle $x \in \mathbb{R}$ und zur Zeit $t \geq 0$. Anfänglich gilt $f(x, 0) = \delta_0$.
- ▶ Sei $\rho(\tau, y)$ die Wahrscheinlichkeitsdichte, dass ein Tintenteilchen sich von x nach $x + y$ in (kleiner) Zeit τ bewegt. Dann

$$\begin{aligned}f(x, t + \tau) &= \int_{-\infty}^{+\infty} f(x - y, t) \rho(\tau, y) dy \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left[f(x, t) + f_x(x, t)y + \frac{1}{2} f_{xx}(x, t)y^2 + \dots \right] \rho(\tau, y) dy\end{aligned}$$

- ▶ Da ρ eine Wahrscheinlichkeitsdichte ist, folgt $\int_{-\infty}^{+\infty} \rho dy = 1$.
- ▶ Durch Symmetrie $\rho(\tau, -y) = \rho(\tau, y)$ folgt $\int_{-\infty}^{+\infty} y \rho dy = 0$.
- ▶ Es wird angenommen, $\int_{-\infty}^{+\infty} y^2 \rho dy = D\tau$ für $D > 0$.
- ▶ Mit $\tau \rightarrow 0$ folgt $f_t = \frac{1}{2} D f_{xx}$, und die Lösung ist

$$f(x, t) = \exp[-x^2/(2Dt)]/\sqrt{2\pi Dt}$$

Verteilung einer Brownschen Bewegung

- ▶ Durch Zufallsbewegung: Ein Teilchen bewegt sich diskret durch ein Raumzeit-Gitter $\{(m\Delta x, n\Delta t) : m, n \in \mathbb{Z}\}$.
- ▶ Von der aktuellen Position bewegt sich das Teilchen Δx nach links oder nach rechts jeweils mit der Wahrscheinlichkeit $1/2$.
- ▶ Sei $p(m, n)$ die Wahrscheinlichkeit dass das Teilchen sich in der Position $m\Delta x$ zur Zeit $n\Delta t$ befindet, und $p(m, 0) = \delta_{m,0}$.
- ▶ Es gelten

$$p(m, n+1) = \frac{1}{2}p(m-1, n) + \frac{1}{2}p(m+1, n)$$

und daher

$$p(m, n+1) - p(m, n) = \frac{1}{2}[p(m+1, n) - 2p(m, n) + p(m-1, n)]$$

- ▶ Sei $D = \Delta x^2 / \Delta t$. Mit $\Delta x, \Delta t \rightarrow 0$, $m\Delta x \rightarrow x$, $n\Delta t \rightarrow t$, $p(m, n) \rightarrow f(x, t)$, folgt aus

$$\frac{p(m, n+1) - p(m, n)}{\Delta t} = \frac{D}{2} \frac{p(m+1, n) - 2p(m, n) + p(m-1, n)}{\Delta x^2}$$

wie vorher dass $f_t = \frac{1}{2}Df_{xx}$ und

$$f(x, t) = \exp[-x^2/(2Dt)]/\sqrt{2\pi Dt}$$

Verteilung einer Brownschen Bewegung

- ▶ Basierend auf den Zentralgrenzwertsatz: Mit dem obigen Gitter sei wie vorher die Wahrscheinlichkeit $1/2$, dass das Teilchen Δx sich nach links oder nach rechts bewegt.
- ▶ Sei $X(t)$ die Position des Teilchens zur Zeit $t = n\Delta t$, $n \in \mathbb{Z}$.
- ▶ Seien $\{X_i\}$ unabhängig und gleich verteilt mit

$$P(X_i = 0) = 1/2 = P(X_i = 1) \quad \text{und} \quad V(X_i) = 1/4.$$

- ▶ Die Anzahl der Teilchenzüge nach rechts zwischen Zeiten $t = 0$ und $t = n\Delta t$ lässt sich darstellen durch $S_n = \sum_{i=1}^n X_i$.
- ▶ Es gilt

$$X(t) = S_n \Delta x - \Delta x (n - S_n) = (2S_n - n) \Delta x$$

und mit $D = \Delta x^2 / \Delta t$

$$V(X(t)) = 4\Delta x^2 V(S_n) = 4n\Delta x^2 V(X_1) = n\Delta x^2 = tD$$

und daher

$$X(t) = \frac{S_n - n/2}{\sqrt{n/4}} \sqrt{n} \Delta x = \frac{S_n - n/2}{\sqrt{n/4}} \sqrt{tD}$$

- ▶ Mit dem Zentralgrenzwertsatz,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P(a \leq X \leq b) = \lim_{n \rightarrow \infty} P\left(\frac{a}{\sqrt{tD}} \leq \frac{S_n - n/2}{\sqrt{n/4}} \leq \frac{b}{\sqrt{tD}}\right) \sim N(0, tD)$$

Definition einer Brownschen Bewegung

Def: Ein 1D stochastischer Prozess W ist eine *Brownsche Bewegung* oder ein *Wiener Prozess* wenn

- ▶ $W(0) = 0$ fast sicher,
- ▶ $W(t) - W(s) \sim N(0, t - s), \forall t \geq s \geq 0$, und
- ▶ \forall Zeiten $0 < t_1 < \dots < t_n$ sind die Zufallsvariablen $W(t_1), W(t_2) - W(t_1), \dots, W(t_n) - W(t_{n-1})$ unabhängig.

Insbesondere gelten

$$W(t) \sim N(0, t), \quad E[W(t)] = 0, \quad E[W^2(t)] = t, \quad \forall t \geq 0.$$

Satz: Sei W ein 1D Wiener Prozess. Sei

$$g(x, t|y) = \exp[-(x - y)^2 / (2t)] / \sqrt{2\pi t}.$$

Dann $\forall n \in \mathbb{N}, \forall$ Zeiten $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_n$ gilt

$$P(a_1 \leq W(t_1) \leq b_1, \dots, a_n \leq W(t_n) \leq b_n) = \int_{a_1}^{b_1} \dots \int_{a_n}^{b_n} g(x_1, t_1|0)g(x_2, t_2 - t_1|x_1) \dots g(x_n, t_n - t_{n-1}|x_{n-1}) dx_n \dots dx_1$$

Bemerkung: Es gibt natürliche Gegenstücke für einen nD Wiener Prozess.

Konstruktion einer Brownschen Bewegung

- ▶ Es gilt

$$E[W(t)W(s)] = E[(W(s) - W(t) - W(s))W(s)] = \min\{t, s\}$$

- ▶ Es folgt

$$\phi_h(s, t) = E \left[\frac{W(t+h) - W(t)}{h} \frac{W(s+h) - W(s)}{h} \right] = \frac{1}{h^2} \times \\ \min\{t+h, s+h\} - \min\{t+h, s\} - \min\{t, s+h\} + \min\{t, s\}$$



- ▶ Mit $\phi_h(s, t) \rightarrow \delta_0(s - t)$ und formell $\xi(t) = \dot{W}(t)$ ergeben sich heuristisch die erwünschten Formeln

$$E[\xi(t)] = 0, \quad E[\xi(t)\xi(s)] = \delta_0(s - t)$$

Def: Die *Autokorrelationsfunktion* von einem stochastischen Prozess X ist

$$r_X(t, s) = E[X(t)X(s)]$$

Wenn $r_X(t, s) = c_X(t - s)$ und $E[X(t)] = E[X(s)], \forall t, s \geq 0$, ist X *stationär im weiteren Sinn*.

Konstruktion einer Brownschen Bewegung

Def: Für einen stochastischen Prozess X , der stationär im weiteren Sinn ist, d.h. $r_X(t, s) = c_X(t - s)$, sei die *Spektraldichte* von X gegeben durch

$$f_X(\lambda) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\lambda t} c_X(t) dt, \quad \lambda \in \mathbb{R}$$

- ▶ Das erwünschte weiße Rauschen $\xi(t) = \dot{W}(t)$ soll stationär im weiteren Sinn sein, d.h. $r_\xi(t, s) = \delta_0(t - s)$, und

$$f_\xi(\lambda) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\lambda t} \delta_0(t) dt = \frac{1}{2\pi}, \quad \forall \lambda \in \mathbb{R}$$

d.h. alle Frequenzen tragen gleich bei.

- ▶ Konstruktion des weißen Rauschen $\xi(t) = \dot{W}(t)$ durch zufällige Fourierreihen: Sei $\{\psi_n\}_{n=0}^\infty$ eine vollständige orthonormale Basis für $L^2(0, 1)$. Seien $\{A_n\}_{n=0}^\infty$ unabhängig mit $A_n \sim N(0, 1)$. Dann setze

$$\xi(t) = \sum_{n=0}^\infty A_n \psi_n(t), \quad A_n = \int_0^1 \xi(t) \psi_n(t) dt$$

und die Brownsche Bewegung ist gegeben durch

$$W(t) = \int_0^t \xi(s) ds = \sum_{n=0}^\infty A_n \int_0^t \psi_n(s) ds$$

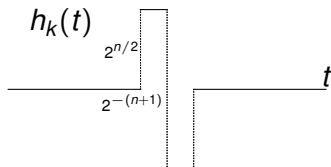
Konstruktion einer Brownschen Bewegung

- ▶ Eine vorteilhafte Basis ist gegeben durch die *Haar Funktionen*:

$$h_0(t) = 1, \quad h_1(t) = \chi_{[0,1/2]}(t) - \chi_{[1/2,1]}(t)$$

und für $2^n \leq k < 2^{n+1}$, $n \in \mathbb{N}$,

$$h_k(t) = \begin{cases} 2^{n/2}, & (k - 2^n) \leq 2^n t \leq (k + 2^n + 1/2) \\ -2^{n/2}, & (k + 2^n + 1/2) \leq 2^n t \leq (k + 2^n + 1) \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$



- ▶ Die *Schauder Funktionen* sind gegeben durch

$$s_k(t) = \int_0^t h_k(s) ds$$

Existenz einer Brownschen Bewegung

Satz: Sei $\{A_k\}_{k=0}^{\infty}$ eine Folge von unabhängigen Zufallsvariablen auf einem Wahrscheinlichkeitsraum (Ω, \mathcal{U}, P) mit $A_k \sim N(0, 1)$. Dann hat

$$W(t, \omega) = \sum_{k=0}^{\infty} A_k(\omega) s_k(t), \quad t \in [0, 1]$$

die Eigenschaften:

- ▶ Die Summe konvergiert gleichmäßig für fast jedes ω .
- ▶ W ist eine Brownsche Bewegung.
- ▶ Für fast jedes ω ist der Probenpfad $t \mapsto W(t, \omega)$ stetig in t ,
- ▶ und zwar Hölder stetig mit Exponent $0 < \gamma < 1/2$.
- ▶ Für $1/2 < \gamma \leq 1$ und für fast jedes ω ist der Probenpfad $t \mapsto W(t, \omega)$ nirgendwo Hölder stetig in t mit Exponent γ ,
- ▶ und zwar nirgendwo differenzierbar in t .

Bemerkung: Es gibt natürliche Gegenstücke für einen nD Wiener Prozess.

Itô Integrale

- Die Lösung der SDG

$$d\mathbf{X}(t) = \mathbf{b}(\mathbf{X}(t), t) + \mathbf{B}(\mathbf{X}(t), t)d\mathbf{W}(t), \quad \mathbf{X}(0) = \mathbf{X}_0$$
wird gegeben durch

$$\mathbf{X}(t) = \mathbf{X}_0 + \int_0^t \mathbf{b}(\mathbf{X}(s), s)ds + \int_0^t \mathbf{B}(\mathbf{X}(s), s)d\mathbf{W}(s)$$

Da der Probenpfad $t \mapsto W(t, \omega)$ unendliche Variation hat, müssen die Integrale mit Vorsicht definiert werden.

- Für $g \in C^1([0, 1])$ mit $g(0) = g(1) = 0$ (deterministisch) sei

$$\int_0^1 g(t)dW(t) = - \int_0^1 g'(t)W(t)dt$$

Diese Zufallsvariable hat die Eigenschaften

$$E[\int_0^1 g(t)dW(t)] = 0, \quad E[(\int_0^1 g(t)dW(t))^2] = \int_0^1 g^2(t)dt$$

- Für $g \in L^2(0, 1)$ sei $\{g_n\}_{n=0}^\infty \subset C_0^1([0, 1])$ eine Folge mit $E[(\int_0^1 g_m(t)dW(t) - \int_0^1 g_n(t)dW(t))^2] = \int_0^1 |g_m(t) - g_n(t)|^2 dt \rightarrow 0$ und $\int_0^1 |g(t) - g_n(t)|^2 dt \rightarrow 0$ und nimm

$$\int_0^1 g(t)dW(t) = \lim_{n \rightarrow \infty} \int_0^1 g_n(t)dW(t)$$

Itô Integrale

- ▶ Für stochastische Integrale mit zufälligen Integranden wird $\int_0^T W(t)dW(t)$ durch Riemannsche Summen untersucht.
- ▶ Für die Verteilung $V_m = \{0 = t_0 < t_1 < \dots < t_m = T\}$ von $[0, T]$ sei $|V_m| = \max_{0 \leq k \leq m-1} |t_{k+1} - t_k|$. Für $\lambda \in [0, 1]$ und $\tau_k(\lambda) = (1 - \lambda)t_k + \lambda t_{k+1}$ sei

$$R(V_m, \lambda) = \sum_{k=0}^{m-1} W(\tau_k(\lambda)) [W(t_{k+1}) - W(t_k)]$$

Satz: Für $|V_m| \rightarrow 0$ und $\lambda \in [0, 1]$ fixiert gilt

$$\mathbb{E} \left[\left(R(V_m, \lambda) - \frac{1}{2} W(T)^2 - (\lambda - \frac{1}{2}) T \right)^2 \right] \rightarrow 0$$

- ▶ d.h. der Grenzwert hängt von λ ab!
- ▶ Nicht vorgreifend wird $\lambda = 0$ ausgewählt, um das *stochastische Integral von Itô* zu bekommen:

$$\int_0^T W(t)dW(t) = \frac{1}{2} W(T)^2 - \frac{1}{2} T$$

Itô Integrale

Def: Für einen Wahrscheinlichkeitsraum (Ω, \mathcal{U}, P) , eine Zufallsvariable X und die Borel Mengen \mathcal{B} sei

$$\mathcal{U}(X) = \{X^{-1}(B) : B \in \mathcal{B}\}.$$

Def: $\mathcal{W}(t) = \mathcal{U}(W(s) : 0 \leq s \leq t)$ ist die *Geschichte* der Brownschen Bewegung W bis zur Zeit t .

Def: $\mathcal{W}^+(t) = \mathcal{U}(W(s) - W(t) : 0 \leq t \leq s)$ ist die *Zukunft* der Brownschen Bewegung W nach der Zeit t .

Def: $\{\mathcal{F}(t)\}_{t \geq 0} \subseteq \mathcal{U}$ ist *nicht vorgreifend* bezüglich $\{W(t)\}_{t \geq 0}$ wenn (a) $\mathcal{F}(s) \subseteq \mathcal{F}(t)$, $\forall t \geq s \geq 0$, (b) $\mathcal{W}(t) \subseteq \mathcal{F}(t)$, $\forall t \geq 0$ und (c) $\mathcal{F}(t)$ ist von $\mathcal{W}^+(t)$ unabhängig $\forall t \geq 0$. $\{\mathcal{F}(t)\}_{t \geq 0}$ heißt eine *Filtration*.

Def: Ein stochastischer Prozess $\{G(t)\}_{t \geq 0}$ ist *nicht vorgreifend* bezüglich $\{\mathcal{F}(t)\}_{t \geq 0}$ wenn $\mathcal{U}(G(t)) \subseteq \mathcal{F}(t)$, $\forall t \geq 0$.

Itô Integrale

Def: Der Raum $\mathbb{L}^p(0, T)$, $p \geq 1$, besteht aus nicht vorgreifenden stochastischen Prozessen G mit der Eigenschaft

$$E \left[\int_0^T |G(t)|^p dt \right] < \infty$$

Def: $G \in \mathbb{L}^2(0, T)$ ist ein Treppenprozess wenn $\exists V_m = \{0 = t_0 < t_1 < \dots < t_m = T\}$ und $\{G_k\}_{k=0}^m$ mit $\mathcal{U}(G_k) \subseteq \mathcal{F}(t_k)$ wobei

$$G(t) = G_k, \quad t_k \leq t < t_{k+1}, \quad k = 0, \dots, m-1.$$

Def: Für einen Treppenprozess $G \in \mathbb{L}^2(0, T)$ ist

$$\int_0^T G(t) dW(t) = \sum_{k=0}^{m-1} G_k [W(t_{k+1}) - W(t_k)]$$

das *Itô stochastische Integral* von G auf $(0, T)$.

Satz: Das Integral hat die Eigenschaften

$$\int_0^T (aG + bH) dW = a \int_0^T G dW + b \int_0^T H dW \text{ und} \\ E[\int_0^T G dW] = 0, \quad E[\int_0^T G dW \int_0^T H dW] = E[\int_0^T GH dt].$$

Formel von Itô

Satz: Für $G \in \mathbb{L}^2(0, T)$ gibt es beschränkte Treppenprozesse $\{G^n\}_{n \geq 0} \subset \mathbb{L}^2(0, T)$ wobei

$$\mathbb{E} \left[\int_0^T |G(t) - G^n(t)|^2 dt \right] \rightarrow 0$$

Def: Mit $G \in \mathbb{L}^2(0, T)$ approximiert durch eine Folge $\{G^n\}_{n \geq 0} \subset \mathbb{L}^2(0, T)$ von beschränkten Treppenprozessen wie oben, d.h.

$$\mathbb{E} \left[\left(\int_0^T (G^n(t) - G^m(t)) dW(t) \right)^2 \right] = \mathbb{E} \left[\int_0^T [G^n(t) - G^m(t)]^2 dt \right] \rightarrow 0$$

sei das *Itô stochastische Integral* von G auf $(0, T)$ gegeben durch

$$\int_0^T G(t) dW(t) = \lim_{n \rightarrow \infty} \int_0^T G^n(t) dW(t)$$

Satz: Gegeben sei $\{X(t)\}_{t \geq 0}$ mit $dX(t) = F(t)dt + G(t)dW(t)$, $F \in \mathbb{L}^1(0, T)$ und $G \in \mathbb{L}^2(0, T)$. Angenommen ist

$u : \mathbb{R} \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$ mit u, u_t, u_x, u_{xx} stetig. Dann erfüllt

$Y(t) = u(X(t), t)$ die *Formel von Itô* $(\partial u = \partial u(X(t), t))$

$$\begin{aligned} dY(t) &= u_t dt + u_x dX(t) + \frac{1}{2} u_{xx} G^2(t) dt \\ &= [u_t + u_x F(t) + \frac{1}{2} u_{xx} G^2(t)] dt + u_x G(t) dW(t) \end{aligned}$$

Formel von Itô

Satz: Gegeben sei $\{X^i(t)\}_{t \geq 0}$ mit $dX^i(t) = F^i(t)dt + G^i(t)dW(t)$, $F^i \in \mathbb{L}^1(0, T)$ und $G^i \in \mathbb{L}^2(0, T)$, $i = 1, \dots, n$. Angenommen ist $u : \mathbb{R}^n \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$ mit $u, u_t, u_{x_i}, u_{x_i x_j}$ stetig, $1 \leq i, j \leq n$. Dann erfüllt $Y(t) = u(X^1(t), \dots, X^n(t), t)$ die *verallgemeinerte Formel von Itô* $(\partial u = \partial u(X(t), t))$

$$dY(t) = u_t dt + \sum_{i=1}^n u_{x_i} dX^i(t) + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n u_{x_i x_j} G^i(t) G^j(t) dt$$

- ▶ Beispiel, die Itô Produkt Regel: Für $F^i \in \mathbb{L}^1(0, T)$ und $G^i \in \mathbb{L}^2(0, T)$, $dX_i(t) = F_i(t)dt + G_i(t)dW(t)$, $i = 1, 2$, gilt $d(X_1(t)X_2(t)) = X_2(t)dX_1(t) + X_1(t)dX_2(t) + G_1(t)G_2(t)dt$
- ▶ Beispiel, die Itô partielle Integration:

$$\int_s^r X_2(t) dX_1(t) = X_1(r)X_2(r) - X_1(s)X_2(s) - \int_s^r X_1(t) dX_2(t) - \int_s^r G_1(t)G_2(t) dt$$

Haltzeiten

Def: Gegeben seien ein Wahrscheinlichkeitsraum (Ω, \mathcal{U}, P) und eine Filtration $\{\mathcal{F}(t)\}_{t \geq 0}$. Eine Zufallsvariable $\tau : \Omega \rightarrow [0, \infty]$ heißt eine *Haltzeit* bezüglich der Filtration wenn

$$\{\omega \in \Omega : \tau(\omega) \leq t\} \in \mathcal{F}(t), \quad \forall t \geq 0.$$

Satz: Sei $\mathbf{X} : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}^n$ die Lösung der SDG

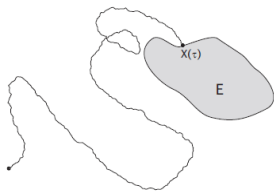
$$d\mathbf{X}(t) = \mathbf{b}(\mathbf{X}(t), t)dt + \mathbf{B}(\mathbf{X}(t), t)d\mathbf{W}(t), \quad \mathbf{X}(0) = \mathbf{X}_0$$

Sei $E \subseteq \mathbb{R}^n$ mit $E \neq \emptyset$ und E oder $\mathbb{R}^n \setminus E$ offen. Dann ist

$$\tau = \inf\{t \geq 0 : \mathbf{X}(t) \in E\}$$

eine Haltzeit.

Das Beispiel motiviert den Begriff *Haltzeit*, obwohl der stochastische Prozess weiter laufen kann.



Bemerkung: $\sigma = \sup\{t \geq 0 : \mathbf{X}(t) \in E\}$ ist keine Haltzeit, weil $\{\omega \in \Omega : \sigma(\omega) \leq t\}$ von der Zukunft abhängt.

Haltzeiten

Def: Seien $G \in \mathbb{L}^2(0, T)$ und τ eine Haltzeit mit $0 \leq \tau \leq T$.

Dann sei

$$\int_0^\tau G(t) dW(t) = \int_0^\tau \chi_{\{t \leq \tau\}}(t) G(t) dW(t)$$

Diese Zufallsvariable hat die Eigenschaften

$$\mathbb{E} \left[\int_0^\tau G(t) dW(t) \right] = 0, \quad \mathbb{E} \left[\left(\int_0^\tau G(t) dW(t) \right)^2 \right] = \mathbb{E} \left[\int_0^\tau G^2(t) dt \right]$$

- ▶ Wenn $\mathbf{X} : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}^n$ erfüllt

$$d\mathbf{X}(t) = \mathbf{b}(\mathbf{X}(t), t) + \mathbf{B}(\mathbf{X}(t), t) d\mathbf{W}(t), \quad \mathbf{X}(0) = \mathbf{X}_0$$

$$\text{wobei } \mathbf{X} = \{X^i\}_{i=1}^n, \quad \mathbf{b} = \{b^i\}_{i=1}^n, \quad \mathbf{B} = \{B^{ik}\}_{i,k=1}^{n,m}$$

und $u \in \mathcal{C}^2(\mathbb{R}^{n+1}, \mathbb{R})$, es gilt $(\partial u = \partial u(\mathbf{X}(t), t))$

$$du(\mathbf{X}(t), t) = u_t dt + \sum_{i=1}^n u_{x_i} dX^i(t) + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n u_{x_i x_j} \sum_{k=1}^m B^{ik} B^{jk} dt$$

oder

$$u(\mathbf{X}(t), t) - u(\mathbf{X}_0, 0) = \int_0^t (u_t + Lu) ds + \int_0^t Du \cdot \mathbf{B} d\mathbf{W}(s)$$

$$Lu = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n a^{ij} u_{x_i x_j} + \sum_{i=1}^n b^i u_{x_i}, \quad a^{ij} = \sum_{k=1}^m B^{ik} B^{jk}, \quad Du \cdot \mathbf{B} d\mathbf{W} = \sum_{i,k=1}^{n,m} u_{x_i} B^{ik} dW^k$$

Haltzeiten und PDG

- ▶ Diese Formel gilt für $t \in [0, T]$. Wenn τ eine Haltzeit ist mit $0 \leq \tau \leq T$, lässt sich die Formel in τ auswerten, und es ergibt sich

$$E[u(\mathbf{X}(\tau), \tau)] = E[u(\mathbf{X}_0, 0)] + E \left[\int_0^\tau (u_t + Lu) ds \right]$$

L heißt der Generator. So gibt es eine wichtige Verbindung zwischen SDGen und (deterministischen) PDGen.

- ▶ Für den wichtigsten Fall $\mathbf{X} = \mathbf{W}$ ist der Generator

$$Lu = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n u_{x_i x_i} = \frac{1}{2} \Delta u$$

Satz: Sei $U \subset \mathbb{R}^n$ beschränkt und offen mit ∂U glatt. Sei u die glatte Lösung der PDG,

$$-\frac{1}{2} \Delta u = 1 \text{ in } U, \quad u = 0 \text{ auf } \partial U$$

Für $x \in U$ seien $\mathbf{X}(t) = \mathbf{W}(t) + x$ und $\tau_x = \inf\{t \geq 0 : \mathbf{X}(t) \in \partial U\}$. Es gilt $u(x) = E[\tau_x]$, $\forall x \in U$.

Folgt mit $u_t = 0$, $E[u(\mathbf{X}_0)] = u(x)$, $\min\{\tau_x, n\} \xrightarrow{|u| < \infty} \tau_x$

Haltzeiten und PDG

Satz: Sei $U \subset \mathbb{R}^n$ beschränkt und offen mit ∂U glatt. Sei $g : \partial U \rightarrow \mathbb{R}$ stetig. Sei $u \in C^2(U) \cap C(\bar{U})$ die Lösung der PDG,

$$\Delta u = 0 \text{ in } U, \quad u = g \text{ auf } \partial U \quad \text{d.h. } u \text{ harmonisch}$$

Für $x \in U$ seien $\mathbf{X}(t) = \mathbf{W}(t) + x$ und $\tau_x = \inf\{t \geq 0 : \mathbf{X}(t) \in \partial U\}$.
Es gilt $u(x) = E[g(\mathbf{X}(\tau_x))]$, $\forall x \in U$.

Folgt mit $u_t = \Delta u = 0$, $E[u(\mathbf{X}_0)] = u(x)$, $u(\mathbf{X}(\tau_x)) = g(\mathbf{X}(\tau_x))$

- ▶ Da Brownsche Bewegung isotropisch ist, ergibt sich die Mittelwert-Formel aus dem letzten Satz,

$$u(x) = \int_{\Omega \rightarrow \partial B(x,r)} \underbrace{g(\mathbf{X}(\omega, \tau_x(\omega)))}_{y \in \partial B(x,r)} \underbrace{dP(\omega)}_{dS(y)/|\partial B(x,r)|} = \frac{1}{|\partial B(x,r)|} \int_{\partial B(x,r)} u(y) dS(y)$$

Satz: Sei $U \subset \mathbb{R}^n$ beschränkt und offen mit ∂U glatt. Sei $u \in C^2(U) \cap C(\bar{U})$ die Lösung der PDG,

$$\Delta u = 0 \text{ in } U, \quad u = 1 \text{ auf } \Gamma_1, \quad u = 0 \text{ auf } \Gamma_2, \quad \partial U = \Gamma_1 \cup \Gamma_2$$

Für $x \in U$ ist $u(x)$ die Wahrscheinlichkeit dass $\mathbf{X}(t) = \mathbf{W}(t) + x$ den Randteil Γ_1 vor Γ_2 trifft.

Folgt mit $g = \chi_{\Gamma_1}$ (Glättung, im letzten Satz) und

Haltzeiten und PDG

$$u(x) = \int_{\Omega} g(\mathbf{X}(\omega, \tau_x(\omega))) dP(\omega) = \int_{\Omega} \{\omega : \mathbf{X}(\omega, \tau_x(\omega)) \in \Gamma_1\} dP(\omega)$$

Satz: Sei $U \subset \mathbb{R}^n$ beschränkt und offen mit ∂U glatt. Seien $c, f : U \rightarrow \mathbb{R}$ stetig mit $c \geq 0$. Sei u die glatte Lösung der PDG,

$$-\frac{1}{2}\Delta u + cu = f \text{ in } U, \quad u = 0 \text{ auf } \partial U$$

Für $x \in U$ seien $\mathbf{X}(t) = \mathbf{W}(t) + x$ und $\tau_x = \inf\{t \geq 0 : \mathbf{X}(t) \in \partial U\}$.
Es gilt die *Feynman-Kac Formel*,

$$u(x) = \mathbb{E} \left[\int_0^{\tau_x} f(\mathbf{X}(t)) \exp \left(- \int_0^t c(\mathbf{X}(s)) ds \right) dt \right]$$

Folgt mit

$$\begin{aligned} Z(t) &= - \int_0^t c(\mathbf{X}(s)) ds, & dZ(t) &= -c(\mathbf{X}(t)) dt \\ Y(t) &= v(Z(t)), v(z) = e^z, & dY(t) &= v_z dZ = -c(\mathbf{X}(t)) Y(t) dt \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} d[u(\mathbf{X}(t)) Y(t)] &= \left[\frac{1}{2} \Delta u(\mathbf{X}(t)) dt + Du(\mathbf{X}(t)) \cdot d\mathbf{W}(t) \right] Y(t) \\ &+ u(\mathbf{X}(t)) dY(t) \end{aligned}$$

Haltzeiten und PDG

$$\begin{aligned} E[\underbrace{u(\mathbf{X}(\tau_X))}_{=0} Y(\tau_X)] - E[\underbrace{u(\mathbf{X}(0))}_{=u(x)}] &= \\ E[\underbrace{\int_0^{\tau_X} \left[\frac{1}{2} \Delta u(\mathbf{X}(t)) dt - c(\mathbf{X}(t)) u(\mathbf{X}(t)) \right]}_{=-f(\mathbf{X}(t))} \underbrace{Y(t) dt}_{\exp[-\int_0^t c(\mathbf{X}(s)) ds]}] & \end{aligned}$$

Interpretation: Nimm nun an, ein Brownsches Teilchen kann auf dem Pfad verschwinden oder absorbiert werden. Sei $c(\mathbf{X}(t))h + o(h)$ die Wahrscheinlichkeit dass ein Teilchen in $[t, t + h]$ verschwindet. Für eine Verteilung $\{t_k = kh\}_{k=0}^m$ des Intervalls $[0, t]$ mit $h = t/m$ wird durch $\prod_{k=1}^m (1 - c(\mathbf{X}(t_k))h)$ die Wahrscheinlichkeit approximiert, dass ein Teilchen bis zur Zeit t überlebt. Mit $h \rightarrow 0$ konvergiert dies nach $\exp[-\int_0^t c(\mathbf{X}(s)) ds]$. Also $u(x) =$ Durchschnitt von $f \circ \mathbf{X}$ über Probenpfade der bis zum Rand ∂U überlebenden Teilchen.

Bemerkung: Es gibt natürliche Gegenstücke der obigen Ergebnisse für allgemeinere Generatoren.

Optimale Haltzeit

- ▶ Sei $U \subset \mathbb{R}^n$ beschränkt und offen mit ∂U glatt. Für $x \in U$ sei $\mathbf{X} : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}^n$ eine Lösung der SDG

$$d\mathbf{X}(t) = \mathbf{b}(\mathbf{X}(t), t) + \mathbf{B}(\mathbf{X}(t), t)d\mathbf{W}(t), \quad \mathbf{X}(0) = x$$

mit $\tau_x = \inf\{t \geq 0 : \mathbf{X}(t) \in \partial U\}$.

- ▶ Für θ eine Haltzeit bezüglich der Filtration $\{\mathcal{F}(t)\}_{t \geq 0}$ sei

$$J_x(\theta) = \mathbb{E} \left[g(\mathbf{X}(\min\{\tau_x, \theta\})) + \int_0^{\min\{\tau_x, \theta\}} f(\mathbf{X}(s)) ds \right]$$

die erwarteten Kosten des Haltens zur Zeit $\min\{\tau_x, \theta\}$.

- ▶ Man sucht $\theta^* = \operatorname{argmin}_{\theta} J_x(\theta)$ oder $u(x) = \inf_{\theta} J_x(\theta)$.
- ▶ $u(x)$ ist die *Wertfunktion*: die minimalen Kosten, wenn der Prozess an der Stelle x startet. Mit $u(x)$ kann man θ^* konstruieren.
- ▶ Auf der Suche nach Optimalitätsbedingungen, bemerke

$$u(x) \leq J_x(\theta = 0) = g(x), \quad \forall x \in U$$

und

$$u(x) = J_x(\theta \geq \tau_x = 0) = g(x), \quad \forall x \in \partial U$$

Optimale Haltzeit

- ▶ Sei $x \in U$ und $\delta > 0$ klein. Wenn man das System bis zur Zeit δ nicht hält, bewegt es sich zur Stelle $\mathbf{X}(\delta)$, und die beste Minimierung der Kosten nachher ist $u(\mathbf{X}(\delta))$.
- ▶ Obwohl $\theta^* \in [0, \delta]$, z.B. $u(x) = g(x)$, noch gelten könnte, wenn $\tau_x > \delta$ gilt, sind die Kosten mindestens die rechte Seite,

$$u(x) \leq \mathbb{E} \left[u(\mathbf{X}(\delta)) + \int_0^\delta f(\mathbf{X}(s)) ds \right]$$

wobei die Ungleichung aus der Definition von u folgt.

- ▶ Laut der Itô Formel,

$$\mathbb{E}[u(\mathbf{X}(\delta))] = u(x) + \mathbb{E} \left[\int_0^\delta Lu(\mathbf{X}(s)) ds \right]$$

und daher

$$0 \leq \mathbb{E} \left[\int_0^\delta f(\mathbf{X}(s)) + Lu(\mathbf{X}(s)) ds \right]$$

Mit $\delta \rightarrow 0$,

$$0 \leq f(x) + Lu(x)$$

- ▶ Wenn $u(x) < g(x)$ gilt, soll $\theta^* > \delta$ und daher Gleichheit oben gelten,

$$0 = f(x) + Lu(x).$$

- ▶ Optimalitätsbedingungen:

$$\min\{f + Lu, g - u\} = 0 \text{ in } U, \quad u = g \text{ auf } \partial U.$$

Optimale Haltzeit

- ▶ Approximation der Lösung der Optimalitätsbedingung,
$$-Lu^\epsilon + \beta_\epsilon(u^\epsilon - g) = f \text{ in } U, \quad u^\epsilon = g \text{ auf } \partial U$$
wobei $\beta_\epsilon : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ eine glatte, konvexe, nicht fallende Funktion ist mit

$$\begin{cases} \beta_\epsilon(s) = 0, & s \leq 0 \\ \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \beta_\epsilon(s) = \infty, & s > 0 \end{cases}$$

Satz: Unter vernünftigen Bedingungen gilt

$$u^\epsilon \rightarrow u, \quad \epsilon \rightarrow 0.$$

- ▶ Sei die geschlossene Menge

$$S = \{x \in U : u(x) = g(x)\}$$

die *Haltmenge*. Für $x \in \bar{U}$ sei

$$\theta^* = \inf\{t \geq 0 : \mathbf{X}(t) \in S\}$$

Satz: Unter vernünftigen Bedingungen gilt

$$u(x) = J_x(\theta^*) = \inf_{\theta} J_x(\theta).$$

Optionspreistheorie

- ▶ Sei $S(t)$ der (stochastische) Preis einer Aktie (Stock) zur Zeit t , die sich nach der SDG entwickelt,

$$dS(t) = \mu S(t)dt + \sigma S(t)dW(t), \quad S(0) = s_0$$

wobei μ die *Drift* und σ die Volatilität sind. Der Anfangspreis s_0 ist bekannt.

- ▶ Ein sogenanntes *Derivat* wird aus $S(t)$ abgeleitet, d.h. seine Auszahlung hängt von $S(t)$ ab.
- ▶ Bei einer *Europäischen Kaufoption* (Call Option) hat man das Recht, einen Anteil (Share) der Aktie bei einem bestimmten *Basispreis* p (Strike Price) zu einer bestimmten *Ablaufzeit* T (Strike or Expiration Time) zu kaufen.
- ▶ Eine Finanzfirma soll bestimmen, was würde diese Kaufoption bei einer Gewinnschwelle kosten?
- ▶ Zur Vereinfachung wird angenommen, die Zinsrate ist eine Konstante $r > 0$, d.h. Geld G_0 zur Zeit $t = 0$ wächst zum Geld $G_T = G_0 e^{rT}$ bis zur Zeit $t = T$. Gleichfalls hat Geld G_T zur Zeit $t = T$ nur den Wert $G_T e^{-rT}$ zur Zeit $t = 0$.

Optionspreistheorie

- ▶ Man vermutet zuerst, der Preis der Kaufoption soll sein:

$$e^{-rT} \mathbb{E}[(S(T) - p)^+]$$

wobei $x^+ = \max\{x, 0\}$, d.h. wenn $S(T) < p$ gilt, ist die Option wertlos, und sonst hat das Geld $G_T = E[S(T) - p]$ zur Zeit $t = T$ den Wert $G_T e^{-rT}$ zur Zeit $t = 0$.

- ▶ Diese erste Antwort ist aber falsch, weil es andere Marktkräfte gibt, wobei Preisunterschiede ausgenutzt werden können, d.h. wegen *Arbitrage*.
- ▶ Der Preis der Kaufoption soll fixiert werden, damit es keine Gelegenheiten zur Arbitrage gibt.
- ▶ Um das Risiko der Arbitrage auszuschließen, muss eine Art von *Absicherung (Hedging)* eingeführt: Man dupliziert die Kaufoption mit einem Portfolio, das aus Besitz einer risikofreien Schuldverschreibung (Bond) und aus der Aktie der Kaufoption besteht.
- ▶ Sei $u(s, t)$ der Gewinnschwellenpreis der Kaufoption zur Zeit t , gegeben dass $S(t) = s$. Man sucht $u(s_0, 0)$.

Optionspreistheorie

- ▶ Randbedingungen für u sind

$$u(s, T) = (s - p)^+, \quad s \geq 0, \quad u(0, t) = 0, \quad 0 \leq t \leq T$$

- ▶ Für den stochastischen Prozess

$$C(t) = u(S(t), t), \quad 0 \leq t \leq T$$

folgt mit der Itô Formel und der SDG $\partial u = \partial u(S(t), t)$

$$\begin{aligned} dC(t) &= u_t dt + u_s dS(t) + \frac{1}{2} u_{ss} dS^2(t) \\ &= [u_t + \mu u_s S(t) + \frac{1}{2} \sigma^2 u_{ss} S^2(t)] dt + \sigma u_s S dW(t) \end{aligned}$$

- ▶ Um C zu duplizieren, werden Prozesse ϕ und ψ gesucht, wobei

$$C(t) = \phi(t)S(t) + \psi(t)B(t), \quad 0 \leq t \leq T$$

und $B(t) = e^{rt}$ ist eine risikofreie Schuldverschreibung.

- ▶ Wenn $S(T) > p$ gelten sollte, nimmt der Käufer die Kaufoption wahr, aber das Duplikatmodell liefert Profite für die Firma, um die möglichen Verluste abzudecken.
- ▶ Wichtig ist aber auch, dass die Firma für diese Absicherung nur am Anfang investieren muss. Damit das Duplikat *selbst finanzierend* ist, soll gelten

$$dC(t) = \phi(t)dS(t) + \psi(t)dB(t), \quad 0 \leq t \leq T$$

Optionspreistheorie

- ▶ Zusammengefasst muss gelten, $\partial u = \partial u(S(t), t)$
$$[u_t + \mu u_s S(t) + \frac{1}{2} \sigma^2 u_{ss} S^2(t)] dt + \sigma u_s S(t) dW(t)$$
$$= \phi(t) [\mu S(t) dt + \sigma S(t) dW(t)] + \psi(t) r B(t) dt$$

- ▶ Es ergibt sich $[u_t + \frac{1}{2} \sigma^2 u_{ss} S^2(t)] dt = r \psi B dt$ mit
$$\phi(t) = u_s(S(t), t), \quad 0 \leq t \leq T$$

oder mit $\psi B = C - \phi S = u - u_s S$ folgt $\partial u = \partial u(S(t), t)$
$$[u_t + r u_s S(t) + \frac{1}{2} \sigma^2 u_{ss} S^2(t) - r u] dt = 0$$

- ▶ Mit den obigen Randbedingungen löst man die *Black-Scholes-Merton PDG*,

$$u_t + r s u_s + \frac{1}{2} \sigma^2 s^2 u_{ss} - r u = 0, \quad s > 0, \quad 0 \leq t \leq T$$

und $u(s_0, 0)$ ist der gesuchte Preis der Kaufoption.

- ▶ Mit der Itô Formel folgt aus $C(t) = \phi(t) S(t) + \psi(t) B(t)$,
$$dC(t) = \phi(t) dS(t) + \psi(t) dB(t) + S(t) d\phi(t) + B(t) d\psi(t) + d\phi(t) dS(t)$$

Also muss gelten

$$S(t) d\phi(t) + B(t) d\psi(t) + d\phi(t) dS(t) = 0$$

Dies folgt mit ϕ oben, mit der PDG und mit

$$\psi(t) = B^{-1}(t) [C(t) - \phi(t) S(t)] = e^{-rt} [u(S(t), t) - u_s(S(t), t) S(t)]$$